粉体物理における理論的アプローチ

京都大学大学院人間・環境学研究科　　早川尚男 [1]

1　はじめに

いのちなき砂のかなしさよ
さらさらと
握れば指のあひだより落つ
(石川啄木「一握の砂」より)

啄木の歌を詠むまでもなく砂には儚きイメージがつきまとう。一方で安部公房の「砂の女」を読む迄もなく砂は制御しにくく何時の間にか人間を呑み込んでいく。

砂の研究が雅なものであるのは先駆者の一人に寺田寅彦がいた事からも想像できよう。しかしながら制御の重要性故に砂の研究は雅を忘れて不粋な工学的なものとなってしまった。

物理学が雅な側面を持つのは耽美的物理学[2] が存在することからも明らかであろう。10 年程前から物理学の立場から砂-あるいはより一般的に粉体- の研究が盛んになってきたのはより研究者の遊び心をくすぐる存在であることを認識したからであろう。

本講演ではここ 10 年程の粉体研究の成果と問題点をまとめて更にごく最近の動向を紹介しようというものである。講演内容として以下の内容を含む. 但し本講演録の大部分は物性夏の学校のテキストとして出版済であり物性研究誌にも印刷される。また最後の節は新たに書き加えたが内容は著しく不完全である.

- 歴史的回顧と粉体の特徴
- 粉体の静力学の理論
- 粉体の動力学
  - 遅い濃厚な流れ
  - 速い希薄な流れ
  - 気体分子運動論に基づく流体力学の導出

当初はここ 10 年程の流行を支えた一つの鍵である粒子シミュレーション法の概略を紹介し、モデルから再現できる粉体の様々なパターンや不思議な振舞を紹介する予定であったが、既にいろいろな解説があり、著者も相当数書いているので省略することにする。[1, 2] また非弾性衝突そのものについての研究も紹介する予定だったが中途半端なので省略する。[3]

[1] E-mail: hisao@yuragi.jinkan.kyoto-u.ac.jp

[2] 例えば南部陽一郎氏は素粒子論研究者の研究スタイルを Dirac mode, Einstein mode, Yukawa mode に分類した (Prog. Theor. Phys. Suppl. **85**, 104 (1985)). Dirac はその研究の中で数学的な美しさのもを追求したという意味で耽美的な物理学者と言えるであろう.

また本講義ノートではページ数の制限もあるので細かな計算等は一切省略しよう。細かな計算その他は別の機会に紹介することとする。同時に実験等の紹介も極力抑えて、主として数理面に焦点をあてる。

静力学のパートでは特に砂山の理論解析の概略を紹介する。古典的理論では砂山の静力学は波動方程式と同様に双曲型の偏微分方程式で記述され従来応力の伝播は直線的に伝わるとされてきたが、砂山表面はともかく内部での安定な構造と直観的に矛盾することが指摘されてきた。この点について粒子充填のランダムネスのために応力線が分裂して、楕円型の数理構造を回復することを指摘した最近の研究を中心に紹介する。

一方、動力学パートでは遅い流れと速い流れに分けて解説する。前者では構成方程式が通常の流体と異なることを紹介し、そこから予言される粉体流の特徴を紹介する。一方速い流れでは気体分子運動論から流体力学を導出するというアプローチが可能になる。その場合何が普通の気体、流体と違ってどこが難しいかを紹介する。例えば粉体流を流体力学によって記述する際、粒子の回転の自由度が独立変数になる極性流体力学が有効であると期待される. この極性流体力学の考え方が比較的希薄な状態が保たれている斜面上の流れで定量的に有効であることを紹介する。

2 歴史的回顧と粉体の特徴

粉体の科学的研究は Faraday に始まる. 寺田寅彦やその弟子筋の研究者が粉体を研究したが継続的なものとはならなかった. また物理の散歩道の最初の話題が通勤電車の中の人の流れという典型的な粉体を扱ったことはよく知られているが, あくまで遊びの対象でしかなく真面目な研究対象ではあり得なかった. 一方で物理以外の分野では粉体は応用上重要な研究対象であり続けた. 土壌やコンクリートを扱う土木工学, 農学は言うまでもなく化学薬品の輸送や反応を扱う化学工学, 粒子輸送を扱う必要のある機械工学の分野では粉体は中心的なテーマであり続けたし薬の合成等を考える薬学, 惑星のリング形成等で非弾性衝突を扱う天文学 [4], 土石流を扱う地学等でも意識の有無に関わらず粉体は考える必要のある問題であり続けた.

粉体研究の問題は余りにも実用と直結しており, 多くの現象論が存在するがどれも信頼に足るものではなく, 包括的な一般論が構築できそうもないという事にある. しかしながら十数年程前からようやく物理学者がこの難問に正面から取り組み始めた. アメリカでは自己組織化と呼ばれる新しい概念のメタファーとしてとして用いられたのが粉体を考える契機となったが, その様な実質を伴わないアドバルーンで括られるより遥かに多彩な現象があり, 物理の研究対象としての可能性があることを人々が認識するのに時間はかからなかった. 時を同じくしてヨーロッパでは de Gennes[3] , Edwards[4] といった大御所が粉体に取り組み始めた. こうした流れから粉体をソフトマターの一種として捉えることも可能になるが新しい概念が必要とされている分発展のポテンシャルがある.

粉体粒子は巨視的なサイズを持った粒子である．熱的な揺らぎが重心運動に影響を及ばさない程度の大きさの粒子を指す. 構成要素として粉体粒子が散逸性を持つにはある程度の粒子の大きさが必要である．即ち，運動の自由度の幾何かが熱として散逸される必要がある．逆に言えば日常スケールの粒子の運動現象は必ず散逸を伴っている．また粒子 1 個では粉体の特徴は見えて来ない. 従ってここでは「巨視的な数から成る散逸粒子の集団」を粉体と呼ぶ事にする．

粉体物理は粒子の巨視的集団の物性を論じるのであるから当然統計力学の対象となる．しかし

[3] Pierre-Gilles de Gennes, 1932-, 1991 年ノーベル物理学賞, 超伝導、液晶、高分子物理の各分野で顕著な業績を挙げた理論家. 各分野で優れた教科書を残している.

[4] Sam F. Edwards, くりこみ理論でノーベル賞を取った Schwinger の弟子. 電子系の研究からランダム系や高分子物理のパイオニアとなる. スピングラスの提唱者としても知られる. 1995 ボルツマン賞.

ながら粉体には以下のような特徴があるので，通常の熱統計力学的議論は意味をなさなくなる．

- 粉体粒子は大きいために，熱的ゆらぎは無視できる．
- 粉体粒子間の相互作用は，直接接し合っているときにのみ，主として斥力的な力が働く．また，粉体粒子同士の衝突は，散逸的であり，衝突により運動エネルギーを失う．

これらの特徴のために粉体では，平衡状態の様に系全体に一様な示量変数（エネルギーなど）での記述は難しくなっている．例えば定常状態を得るには外的な力が必要であり, 実現した非平衡定常状態そのものが興味深い研究対象となっている．また粉体が流れる状態一つを取っても流動特性は Newton 流体と異なるのは勿論のこと，高分子等とも随分と違ったものとなっている．例えば砂山斜面の流れでは表層部分だけが流動しており数層下のバルクの領域では固化しているかのように動きが殆んどない．このように粉体は固体と液体が常に共存したような流動特性を示しており単純な流動状態の特徴づけはできない．

粉体を記述するのにはどうするか．現在迄, 粉体のマクロ的挙動を統一的に記述する方法は確定していない．実際の処, 長い研究の歴史の中で様々な連続体モデルが記述されて来たが, これらの理論はいずれも適用限界があり有効性に乏しい．一方，粒子モデルを用いて直接シミュレーションの結果と実験を比較しようとする動きも盛んであった．粒子のダイナミックスとしては離散要素法という手法が標準的に用いられており, 粉体の挙動を曲がりなりにも予測することは可能になったことが流行の 1 原因となった．これは物理の工学化という最近の潮流と軌を一にするものである．現象を理解せず制御しようという立場がこれほど鮮明に出た研究対象も物理の分野では珍しい．そのため安易なシミュレーションや実験の流行を生み，他分野の研究者から反感を招くことも少なくない．またモデル化の困難さや粒子数の限界からやはり連続体理論を望む声が再び大きくなっている．

3 静力学

粒子個々のサイズよりずっと大きなスケールで粉体の静力学を議論する際に連続体力学を用いるのが自然である．静力学においては元来動力学モデルとして提出された離散要素法等の粒子シミュレーションは接触力のモデル化に問題があるために満足のいく結果を出すことができないという問題もあって, 連続体力学による解析が必要となっている．ここでは簡単のために 2 次元系に限定して話を展開しよう．

2 次元の静力学を支配する方程式は

$$\nabla \cdot \sigma = \mathbf{F}_{ex}, \quad \sigma = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{zx} & \sigma_{zz} \end{pmatrix}, \tag{1}$$

である．ここで σ はストレステンソルであり, 応力の集中する shear band を除き対称テンソルと考えて良い．即ち $\sigma_{xz} = \sigma_{zx}$ である．また $\mathbf{F}_{ex}$ は $\rho g \hat{z}$ と考えておいてよい．但し ρ, g, $\hat{z}$ はそれぞれ密度, 重力加速度, 鉛直下向きの単位ベクトルである．

(1) 式を見れば分かる通り独立変数 3 に対して方程式は 2 つしかない．従って何らかの構成方程式を導入する必要がある．一方で静止状態そのものが形成過程の履歴に依存するのでこの問題は簡単ではない．よく使われる構成方程式は σ_{xx} と σ_{zz} が比例関係にあるものや, 至る処で破壊寸前の状態にあるという剛塑性モデルである.[5] スペースの関係で説明を省略するがこれらのモデルはいずれも双曲型の偏微分方程式になる．この場合砂の一点に力を加えたときに応力主軸の向きに直線的に力が伝わって行く．砂のランダムネスを考慮しても応答関数はダブルピークとなり, そ

のピーク間隔は深さの単調関数で増加する筈である. 一方, 通常の弾性体は変形に対して安定であり楕円型の偏微分方程式になる. 一点に刺激を与えたときの応答は境界の効果が無視できれば深さ h, 水平距離 x で

$$G_e(x) = \frac{2}{\pi h}\frac{1}{[1+(x/h)^2]^2} \tag{2}$$

となることが知られている [6].

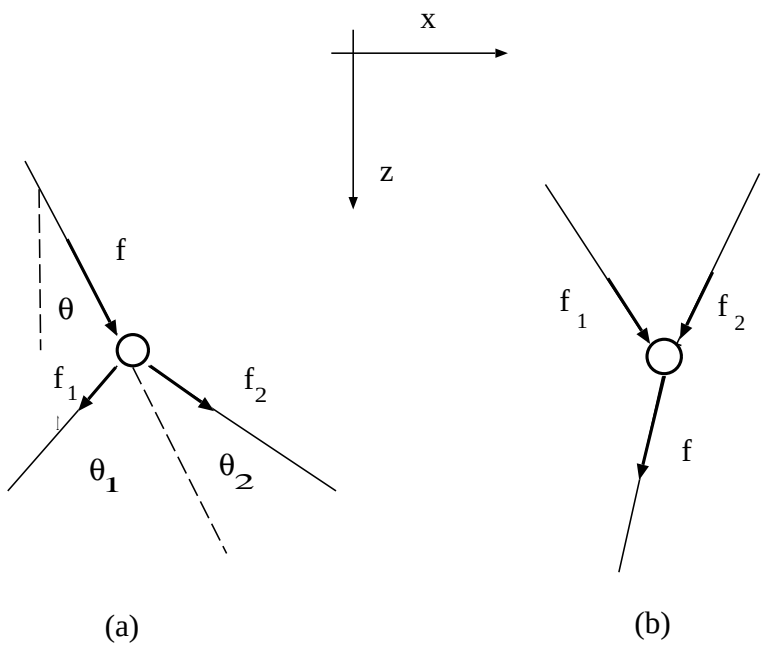

図 1: 不純物による force chain の散乱のモデル. (a) 分裂プロセスと (b) 合流プロセス.

ではどちらが正しいかということであるが, 最近の研究によると短距離の応答では双曲型であり, ある程度長距離の応答は楕円型になるという事が実験的にも理論的にも固まりつつある. ここではフランスのグループのモデルを極く簡単に紹介しよう [6, 7, 8]. モデルは図 1 に示す様に応力鎖が不純物に散乱されるときに分裂し, 不純物で 2 つの鎖が衝突するときは合流するというものである. このモデルでは応力鎖は力の大きさ f と方向を表す単位ベクトル $\mathbf{n}$ で特徴づけられ, 各不純物で力のバランス $f\mathbf{n} = f_1\mathbf{n}_1 + f_2\mathbf{n}_2$ が成立する. これだけのルールを与えて空間に固定した不純物 (散乱体) をばらまきシミュレーションを行なうと実験で観測されるような植物の根に似た応力鎖を再現できる. また応答関数は図 2 の概念図に示した通り浅い領域では双曲型のダブルピークの応答になるがある程度深くなるとピークは消えて楕円型の応答になることが示された.[7] またこの楕円型の応答は絶対値をスケールすると (2) 式で表現できる事が分かった. また実験でも同様に深い領域では絶対値をスケールすると (2) 式が有効であることが知られるようになった. [6]

このモデル解析が現象の本質を掴んでいることはほぼ間違いない. では理論的にこの現象を理解するにはどうしたらいいのであろうか. その点についても同じグループが興味深い解析をしている. 彼らは位置 $\mathbf{r}$ での応力鎖の確率分布関数 $P(f, \mathbf{n}, \mathbf{r})$ に対して以下の様な発展方程式が有効であるとしている:

$$P(f, \mathbf{n}, \mathbf{r}+\mathbf{n}dr) = (1-\frac{dr}{\lambda})P(f, \mathbf{n}, \mathbf{r}) + 2\frac{dr}{\lambda}\int d\mathbf{n}' \int df' P(f', \mathbf{n}', \mathbf{r})\Psi(\mathbf{n}', \mathbf{n})\delta\left(f - \frac{f'}{2\cos\theta}\right) \tag{3}$$

ここで λ は応力鎖の平均自由行程であり, $\Psi(\mathbf{n}', \mathbf{n})$ は $\mathbf{n}'$ から $\mathbf{n}$ への散乱断面積, θ は散乱角である.

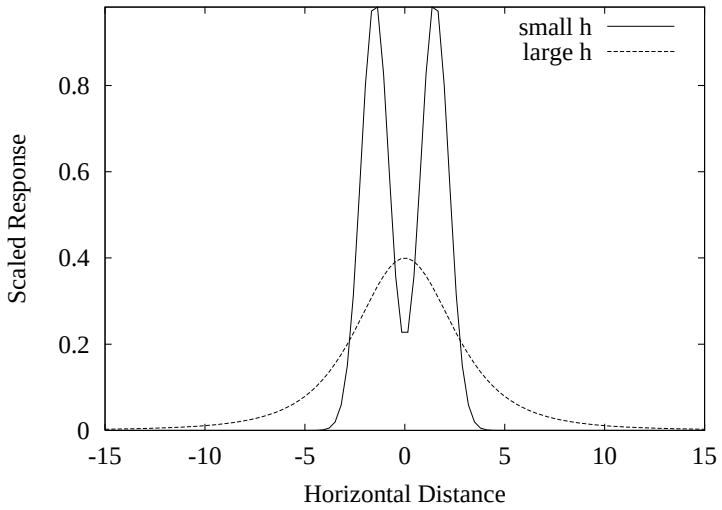

図 2: 応力鎖の散乱のモデルによって得られる応答関数の概念図. 深さ h が浅い場合には双曲型の特徴として 2 山のピークがある応答があるが、深くなるにつれて不純物にランダムに散乱され 1 山の楕円型の応答に変化する.

彼らはこの方程式から局所的な力 $F(\mathbf{n},\mathbf{r}) = \int df\, fP(f,\mathbf{n},\mathbf{r})$ の方程式を導きストレステンソルが

$$\sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{r}) = aD \int d\Omega n_\alpha n_\beta F(\mathbf{n},\mathbf{r}) \tag{4}$$

(D 次元, a 不純物粒子の大きさ, $\int d\Omega$ は立体角での積分) が

$$J_\alpha(\mathbf{r}) = a \int d\Omega n_\alpha F(\mathbf{n},\mathbf{r}) \tag{5}$$

を歪み場と見做した弾性論のストレステンソルの様に書けることを示した. 但し Possion 比は通常の弾性論で許される範囲を逸脱した非常に大きな値を持ち、完全に弾性論にマップできた訳ではない.[7]

最近の同じグループの研究では方程式に非線形性を導入することで更に大きなスケールで見たときは一旦回復した楕円型の応答が双曲型に回帰するという極めて面白い実験結果を再現することに成功している.[8]

ここで紹介した理論はここ数年の間に急速に発展してきたものであり, まだ不完全な部分もあると思われる. しかし実験グループに属する理論家が作った理論だけに実験の事をよく考慮し, 応力鎖を直接理論的に表現し, 更に実験結果の多くを再現できる理論となっている. それだけでなく従来の混乱した理解を解決し得る物理的内容を含んでいるという意味でも注目に値する.

4 遅い流れ

静止状態のまま粉体を傾けるといずれ流れ出す. この様な流れは容易に想像がつく様に水が流れるのとかなり様子が異なる. 実際, 遅い粉体の流れは Bagnold の実験によって接線応力が速度勾配の 2 乗に比例するということが指摘された.[5] その後いろいろな実験でいろいろなことが言われたが最近の注意深い実験 [9] やシミュレーション [10] はやはりこの法則の成立を支持しており, 同時にこの法則を仮定することで説明できる現象も多々ある. ここではそのあたりの事情を説明してみよう.[11, 12]

[5] 普通の流体では接線応力が速度勾配に比例する.

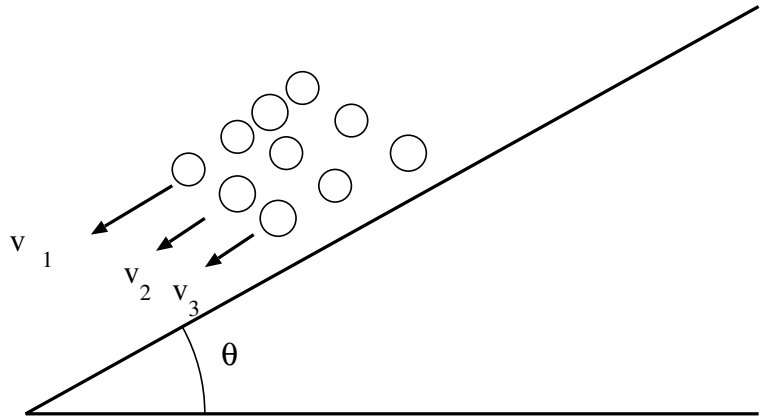

図 3: 斜面上の流れの概念図. 斜面に鉛直方向にしか位置依存性がないときは 1 層目と 2 層目の相対速度は $v_1 - v_2$ となっていることに注意. 従って本文中にあるような展開が使える.

この遅い流れでは粒子が常に接触しながら流れている. 従って高校で習う Coulomb 摩擦の条件 (摩擦係数 μ) を常に充たしながら流れていると考えて良い. よって重力下 (重力加速度 g) での定常的な斜面上 (角度 θ) の流れではポテンシャルエネルギーの開放がエネルギー散逸とバランスする必要がある. 従って個々の粒子が斜面に鉛直に z だけ移動すると

$$\epsilon \frac{1}{2} v_r^2 - gz(\sin\theta - \mu\cos\theta) = 0 \tag{6}$$

というバランスの式がある. ここで v_r は相対速度であり, ϵ は衝突回数と一回の衝突で失う散逸率の積である. この式は平均にはいいかもしれないがこういう粒子が多数分布して速度が z 方向に空間的に変化しているときに v_r は $(dv(z)/dz)d$ で置き換えられるであろう. d は粒子間隔であるが粒径と同程度である. そういう近似が可能になれば

$$\alpha \frac{1}{2} \left(\frac{dv(z)}{dz} \right)^2 = gz(\sin\theta - \mu\cos\theta) \tag{7}$$

となる. (そのまま計算すると $\alpha = \epsilon d^2$ だが, 一般にこういう粗い議論では他の寄与が多数入る). ここで表層流が深さ h_0 で速度 0 となるとすると (7) は直ちに解けて

$$v(z) = \frac{2}{3} \left[1 - \left(\frac{z}{h_0} \right)^{3/2} \right] \sqrt{\frac{g h_0^3}{\alpha} (\sin\theta - \mu\cos\theta)} \tag{8}$$

となる. この式は実験やシミュレーションの結果と良く一致している.

更に遅い流れの領域では速度勾配が非常に小さいのでずり速度は無視できる. 回転自由度のある場合はその遠心力効果を考えて

$$\rho g(\sin\theta - \mu\cos\theta) = F_B \tag{9}$$

とした式が有効である. 但し F_B は遠心力として働く体積力である. 最近の理論では上記の考え方に基づき垂直断面方向に回転する, 或は水平方向に回転するドラム中の粉体粒子の表面形状を説明するのに成功している. [11]

最近の遅い流れのきれいな実験 [13] を解釈したいのであれば F_B が深さの指数関数になるという事になる. 密度分布が表面付近で指数関数的に変化するのはよく知られており [14], 理論解釈も可能である [15]. 空孔の密度に比例して粒子が動きやすいと考えられるので実験結果を説明する

こと自体はそれほど難しくない. むしろそれがユニークな説明になっているかどうかが重要であろう.

また更に最近の理論 [12] では空孔に応じて粒子がホッピングするという描像を上の (8) 式迄の議論と組み合わせて斜面上でどこまで粒子を安定に積み上げられるかという事を議論し実験結果を驚く程再現している. この理論は導出過程にかなり問題がありそうではあるが発展のポテンシャルがあると考えられる.

5 2 次元の斜面流と極性流体力学

前節で紹介した斜面上の粒子の流れはどちらかといえば遅い流れで粒子が常に接触しながら流れる状況にあった. しかし粒子がはねるように動く場合には比較的希薄な状態で流れる. こうした問題も雪崩や土石流などを考えれば分かる通り応用上でも重要な問題である。本節では粒子の回転を考慮した極性流体力学を気体分子運動論に基づき導出し、斜面流に応用した解析を紹介してみよう. [16, 17]

粉体流を定点観測すれば必然的に場の方程式に従う。場の方程式は連続の式に従う。例えば質量の連続の式であれば

$$\frac{D}{Dt}\rho = \nabla\cdot(\rho\mathbf{u}) \tag{10}$$

であるし運動量の連続の式は

$$\rho\frac{D}{Dt}\mathbf{u} = \nabla\cdot\sigma \tag{11}$$

である。ここで ρ, $\mathbf{u}$, σ はそれぞれ質量密度、速度、ストレステンソルであり, $D/Dt = \partial/\partial t + \mathbf{u}\cdot\nabla$ は Lagrange 微分である. 粉体の様に大きさの無視できない粒子を構造流体として扱うとその特徴は角運動量の連続の式を独立に扱わなければならない点に現れる。角運動量の連続の方程式は

$$nI\frac{D}{Dt}\boldsymbol{\omega} = \nabla\cdot C + \boldsymbol{\sigma}^{(a)} \tag{12}$$

の様になる。但し n は数密度、I は粒子の慣性モーメント, $\boldsymbol{\omega}$ は回転場、C はカップルストレス, $\boldsymbol{\sigma}^{(a)}$ はストレステンソルの反対称部分をベクトル化したものである。[6] 連続の式としては、この他エネルギーの連続の式も存在するがここでは省略する。局所的に等温と見なされる系ではエネルギー方程式は重要ではない。このような極性流体力学はむしろ粉体よりも血液流、磁性流体, MHD, 液晶流等で積極的に用いられている。[18]

ここで問題になるのはストレステンソルとカップルストレステンソルの構成方程式である。複雑であると汎用性に問題があるので最も簡単なものを採用してみる。ここでは流れている状態を考えているので静止状態では存在する筈の接線応力を無視し、圧力 p のみで特徴づけられるとする。そうすると Newton 流体の自然な拡張として

$$\begin{aligned}\sigma_{ij} &= (-p+\lambda\partial_k u_k)\delta_{ij} + \eta(\partial_i u_j + \partial_j u_i)\\ &\quad +\eta_r\left[(\partial_i u_j - \partial_j u_i) - 2\epsilon_{ijk}\omega_k\right],\end{aligned} \tag{13}$$

と

$$\begin{aligned}C_{ij} &= \eta_c\partial_k\omega_k\delta_{ij} + \frac{\eta_B+\eta_A}{2}(\partial_i\omega_j + \partial_j\omega_i)\\ &\quad +\frac{\eta_B-\eta_A}{2}(\partial_i\omega_j - \partial_j\omega_i),\end{aligned} \tag{14}$$

[6] Levi-Civita 記号を使って $\boldsymbol{\sigma}^{(a)}$ の i 成分を書けば $\sigma_i^{(a)} = \epsilon_{ijk}\sigma_{jk}$ である。

というものを採用する。ここで $\partial_i u_j = \partial u_j/\partial x_i$ という記号を導入し ϵ_{ijk} は Levi-Civita 記号である。このような構成方程式を採用すると残る問題は輸送係数 $\eta,\ \eta_r,\ \lambda,\ \eta_A,\ \eta_B,\ \eta_c$ の決定に帰着する。

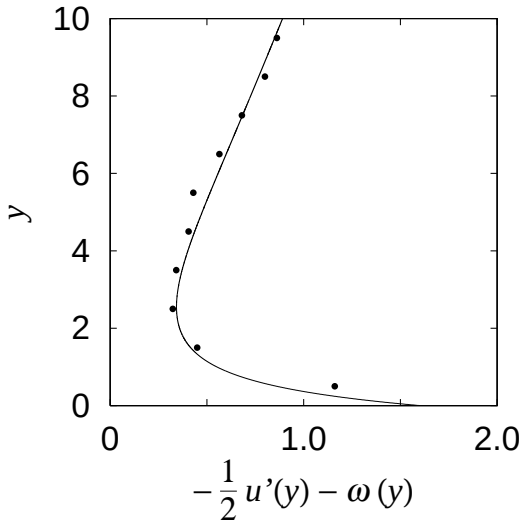

図 4: 進行方向に並進対称な 2 次元系での粒子の回転と流体の回転のずれ $\frac{1}{2}\nabla \times \boldsymbol{v} - \boldsymbol{\omega}$ の z 成分のプロット. 実線とデータは文献 [22] のシミュレーションの結果.

この様な構成方程式を導入した利点は気体分子運動論で培われた膨大な蓄積を利用できる点にある [4, 19]。散逸がなければ低密度極限では Boltzmann 方程式の解析に帰着するので信頼のできる文献を参考にして輸送係数を導出できる。[20] ある程度密度の高い気体に対しても Enskog 方程式を用いた解析が有効である。[20] 散逸のある場合は気体分子運動論の枠組はそのままでは使えなくなるが、衝突ルールのみに散逸の効果を考慮することである程度の見積りは可能になる。[21] 例えば初等的な解析から進行方向に並進対称な 2 次元系[7] では η,η_r, η_B, λ のみで特徴づけられる事や, $\eta \sim \sqrt{mT}/d$, $\eta_r \sim n^2 d^3\sqrt{mT}$, $\eta_B \sim d\sqrt{mT}$ と見積もられる事などが分かる. [16, 17] 但しここで m, d はそれぞれ粒子の質量と粒径であり, T は粉体温度、即ち運動エネルギーの揺らぎである。

ここでは詳細は記さないが比較的希薄な粒子の流れが実現した斜面流において状態方程式が理想気体のそれに帰着できるとした場合に速度場や回転場の進行方向に垂直な方向 (図 3 中の y) 依存性を解析してみた。[8] その結果、極性流体モデルから解析的に求めた回転場と流体の回転と回転場のずれを図にプロットしたがその結果は見事にシミュレーションの結果 [22] を再現している。もっとも速度場については少なくともかなり希薄な粒子流に関しては回転の効果は殆んど効かないことが分かった。[16]

この結果をどう捉えるかは人に依るであろう。筆者はこの結果は少なくとも極性流体モデルや気体分子運動論に基づく理論は粉体流の解析に関して有望かつ有効であり、この方向で解析を進める価値はあると考える。しかしながら弱いずりによる展開という今の枠組では粒子流の特徴で

[7] そのような系では $\boldsymbol{u} = (u(y), 0, 0),\ \boldsymbol{\omega} = (0, 0, \omega(y))$ となる。
[8] 密度不安定性が生じる前はほぼ進行方向 x に並進対称である。

ある非 Newton 性を議論できない。前節の様な現象論的な考え方を用いたり, 更に複雑な構成方程式を導入するとより複雑な流れを再現することができる.[23] しかしそうすると現象に応じて構成方程式を変更するといういたちごっこは終わらない。当然理論家としては愚直な道筋に従ってでも粒子が固まって流れる場合も同時に理解できる方法がある方がいい.

今後問題になってくるのは境界層の問題であろう。粉体の流れは境界とは無関係ではあり得ないのは今までの説明で分かって貰えたと思われる. 極性流体を考える上でも文献 [16] で指摘された様に境界近傍で粒子回転が励起され流体の回転と有意にずれている. 粉体では通常の流体力学では境界条件に繰り込まれているスケールの粒子運動が観測されているので境界層をきっちり解析する必要が生じてくる。この問題に関しても気体分子運動論の蓄積は無駄ではない。[24, 25] また粒子シミュレーションとは異なり Enskog 方程式の直接数値計算も最近は盛んに行なわれており、その定量的有効性はもとより計算効率の上でもその有効性は注目されている。[26] このような事情を考慮すると愚直なアプローチに拘泥するのも悪くはないのではないかという風に思っている。

6 気体分子運動論による流体力学の導出と問題点

本節では希薄非弾性粒子系で流体力学を導出する際に何が問題であるかを簡単にまとめてみよう. 内容は著しく不完全である.

6.1 動機

統計力学において気体力学が最も基本的であり重要な役割を果たしたことは論に待たないであろう. ここで粉体気体をより緻密に議論することは粉体の数理的側面を知る上で重要になってくる. また引力相互作用がないために固化していない相は全て気相とみることも可能なのでその意味でも気体分子運動論が重要になる.

さて散逸のない分子気体において重要なのは H 定理の存在とその緩和先である Maxwell-Boltzmann 分布であった. H 定理は単なる安定性の枠を越えて平衡分布に絶対的に緩和するという非常に強い制約を与えている. このような性質は非弾性粒子系ではどうなるのであろうか.

散逸を導入したことで分布関数に大きな変化が見られることは明らかである. 例えば速度の大きな (高エネルギーの) 粒子の従う分布は散逸の影響で大きく影響を受ける筈である. 特にべき分布のテールを持つようなことがあればその特異性故に高次のモーメントが発散し、統計的性質も平衡のそれとは根本的に異なる筈である. 実際粉体系でも Taguchi and Takayasu[27], Ichiki and Hayakawa[28] , Brey *et al.*[29] などが巾のテールを報告している. しかし Brey 等はモデルに不備があるとしてこの巾は人工的として後になって自ら自己の結果を否定し、多くの実験、シミュレーション、理論は指数関数的なテールを方向している [30] のでおそらく Taguchi and Takayasu[27] の結果は数値的な誤差のもたらしたものであろう. 唯一我々の結果は流体が介在しているという意味で単純な粉体系とは異なり巾分布の実在性に希望を持たしている.

ところがごく最近になって非弾性 Maxwell model という一種の可解モデルが巾のテールを持つことが示された.[31, 32, 33, 34, 35] このことはいくつかの意味で興味深い. 例えば巾分布を持つ統計力学、そして流体力学はどのようなものになるか. あるいは後述のようにいろいろ不整合がある粉体気体の理論解析が整合したものになるのではという期待も抱かせる. その結果粉体気体のもつ性質のみならず非弾性系の定常状態の統計力学が明らかになる可能性がある.

subsectionModel

ここではハードコア系の非弾性 Boltzmann 方程式を紹介し、ついでその問題点をまとめて、最後に非弾性 Maxwell model を紹介しよう.

滑らかな球に対する Inelastic Boltzmann equation は

$$\partial_t f + \mathbf{c}\cdot\nabla f = d^2 \int d\mathbf{c}_1 \int_{\mathbf{g}\cdot\mathbf{n}<0} d\mathbf{n}|\mathbf{g}\cdot\mathbf{n}| \left(\frac{f^*{}_1 f^*}{e^2} - f_1 f \right) \tag{15}$$

で与えられる. ここで

$$\mathbf{g} = \mathbf{c} - \mathbf{c}_1, \quad \mathbf{n} \text{ unit normal from 1} \tag{16}$$

は衝突の際の相対速度であり、非弾性粒子は衝突ルール

$$(\mathbf{g}'\cdot\mathbf{n}) = -e(\mathbf{g}\cdot\mathbf{n}) \tag{17}$$

に従うとしよう. 簡単のためはねかえり係数 e は定数として接線方向の衝突でエネルギーロスはないものとする.

このモデルの理論解析はその複雑さ故にあまり進んでいない. Boltzmann 方程式でも複雑なのにさらに非弾性を導入したらその困難さは想像がつく. その中で Jenkins and Richman[36] が系統的な解析として知られていたが, その論理的不整合性が Sela and Goldhrisch[37] によって指摘されるようになった. その一方で Sela and Goldhirsch[37] の解析は e を 1 のまわりで展開すると同時に空間揺らぎの効果も同時に摂動論的に扱ったので系統的ではあるが過度に複雑で弾性極限近傍しか議論できないので実用に耐えない. その中で一番実際的でそこそこ論理的なのは Brey $et\ al.$[38] であり、その結果もシミュレーションと合ってもっともらしい. しかし一様状態の基準解が摂動論的にしか求まらないので場合によって Maxwell 分布を用い、場合によっては摂動解を用いているのがその場しのぎの印象を与えると同時に空間揺らぎを摂動で扱った場合に摂動解を基準解にして計算すると 2 重の意味で摂動を行っており計算の意味が不明確になる、といった欠点が見られる. これらは衝突積分中の相対速度 $\mathbf{g}\cdot\mathbf{n}$ の効果がある故の複雑さに起因すると言えよう.

そこでモデルを

$$\partial_t f + \mathbf{c}\cdot\nabla f = \chi d^2 \sqrt{\frac{T_0}{m}} \int d\mathbf{c}_1 \int d\mathbf{n} \left(\frac{f^*{}_1 f^*}{e} - f_1 f \right) \tag{18}$$

に置き換えてみよう. $e = 1$ の場合にはこのモデルは衝突粒子が相対距離 r に対して r^{-4} の斥力相互作用をするモデルになっており Maxwell が導入したことで知られている由緒正しいモデルである. 非弾性バージョンのこのモデルは比較的最近に導入された.[31]

7 一様冷却状態のスケーリング解と巾のテール

既に述べたように (18) 式のモデルは巾のテールを持つ. [32, 34] このことを簡単にデモンストレーションしてみよう. そのために 1 次元のモデルを考える. f の速度空間の Fourier 変換が

$$\hat{f}(k,t) = \phi(v_0(t)k), \quad v_0(t) \text{ thermal velocity} \tag{19}$$

となると仮定しよう. $\phi(x)$ は

$$-\gamma k \frac{d\phi}{dk} + \phi = \phi(pk)\phi((1-p)k) \tag{20}$$

に従うので $k = 0$ 近傍で

$$\phi(k) = 1 - \frac{k^2}{2} + A|k|^a + \cdots \tag{21}$$

となる. その結果指数が

$$a = \frac{1 - p^a - (1-p)^a}{p(1-p)} \Rightarrow a = 3, \tag{22}$$

となり偶巾で展開できない. このことは速度空間で c^{-4} に従うことを意味する. ここでの結果は高次元でも本質的に同等である. 違いは case. Differences appear in

- a を決めるために数値計算が必要になること.
- a が e に依存すること.
- a が $e \to 1$ で発散すること.

等である.

高次元の場合を陽に書くと v^2 のフーリエ変換 $(q = k^2/4)$ を

$$\tilde{f}(q,t) = \Phi(e_0(t)q), \quad e_0(t) = {v_0}^2(t) \tag{23}$$

とすると $\Phi(x)$ は

$$\Phi(x) = \sum_{n=0}^{[a]} \frac{\mu_n}{n!} - Ax^a \tag{24}$$

と展開できる. ここでモーメント μ_n は

$$\mu_n =< c^{2n} > /(d/2)_n : \quad (d/2)_n = \frac{\Gamma(d/2+n)}{\Gamma(d/2)}. \tag{25}$$

であり有限であれば解析的に計算できる. 但し $n < [a]$ のときは有限だが $n > a$ ではモーメントは発散する.

7.1 流体中粒子の定常状態

流体中で粒子は流体からの抵抗力を受ける. その場合 Boltzmann equation は

$$\partial_t f + (\mathbf{c} \cdot \nabla) f = L_{FP} f + J(f,f) \tag{26}$$

に変更される. ここで $Q(f,f)$ は Bolztmann's collisional integral であり $L_{FP} f$ は

$$L_{FP} f = \gamma \nabla_{\mathbf{v}} \cdot [(\mathbf{v} - \mathbf{u}) f + T_B/m \nabla_v f]. \tag{27}$$

である. 言うまでもないが第 1 項は流体との相対速度に比例する drag であり第 2 項は Brown 運動の効果である. ここで $T_B = 0$ とするといわゆる Gaussian thermostat の系となり、その定常状態は一様冷却状態のスケーリング解と等価であることが知られている.[39]

$T_B \ll T$ としよう. 1 次元の場合の結果は図に示すように指数 a が変化する.

このように流体中で巾分布をとるという Ichiki and Hayakawa[28] の解析は根拠のあるものだった訳である.

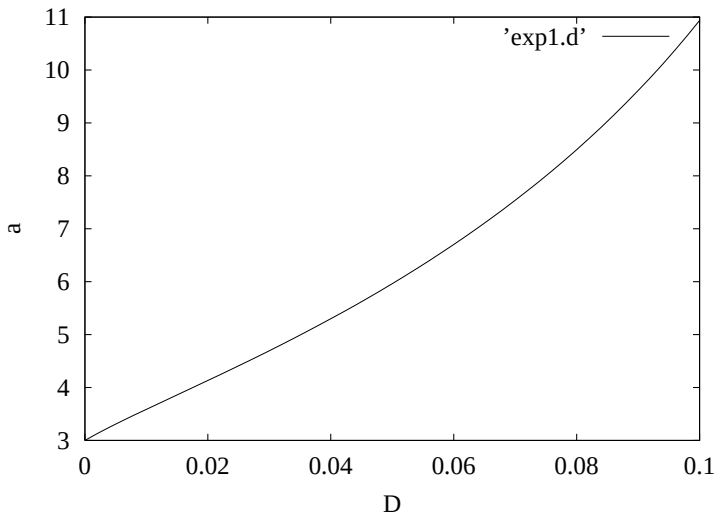

図 5: The exponent of a for 1D granular particles in fluids as a function of $D = T_m/m$.

7.2 Hydrodynamics of inelastic Maxwell model

さていよいよ Chapman-Enskog (CE) 法に基づき流体力学方程式を導出してみよう. 詳細は原論文 [40] に譲るとして概略を掴んで貰えればいい. 方法論自体は Brey *et al.*[38] にパラレルであるが前節で見たように一様解がはっきり分かっているだけにより系統的な計算が可能になる.

ここで可解条件 (拘束条件) は

$$\int d\mathbf{c} \begin{pmatrix} 1 \\ m\mathbf{c} \\ \frac{1}{2}mc^2 \end{pmatrix} J(f,f) = \begin{pmatrix} 0 \\ \mathbf{0} \\ -(1-e^2)\omega[f,f] \end{pmatrix} \tag{28}$$

である. 但し

$$\omega(f,f) = \frac{\pi\chi\sqrt{mT_0}\sigma^2}{6} \int d\mathbf{v}_1 \int d\mathbf{v}_2 |\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2|^2 f(\mathbf{v}_1) f(\mathbf{v}_2) \tag{29}$$

である.

粉体流体は一般に質量保存

$$D_t n + n\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \tag{30}$$

運動量保存

$$D_t u_i + (mn)^{-1} \nabla_j P_{ij} = 0. \tag{31}$$

に従う. またエネルギーも同様に流体変数とみて

$$D_t T + \frac{2}{3n}(P_{ij}\nabla_j u_i + \nabla \cdot \mathbf{q}) + T\zeta = 0. \tag{32}$$

も導出できる. ここで $\zeta[f] = (1-e^2)\frac{2}{3nT}\omega[f,f]$ でありストレステンソルは

$$P_{ij} = nT\delta_{ij} + m\int d\mathbf{c}(v_i v_j - \frac{1}{3}\delta_{ij}) f \tag{33}$$

である. また $\mathbf{v}$ は速度揺らぎであり

$$\mathbf{q} = \left(\frac{m}{2}v^2 - \frac{5}{2}T\right)\mathbf{v} \tag{34}$$

は熱流である.

Maxwell model の Chapman-Enskog method は通常の場合とあまり変わらない. 分布関数を空間微分で展開する.

$$f = f^{(0)} + \epsilon f^{(1)} + \epsilon^2 f^{(2)} + \cdots \tag{35}$$

ここで $f^{(0)}$ は一様解である.

一次摂動から一般に

$$P_{ij}{}^{(1)} = -\eta(\nabla_i u_j + \nabla_j u_i - \frac{2}{3}\delta_{ij}\nabla\cdot\mathbf{u}) \tag{36}$$

および

$$\mathbf{q}^{(1)} = -\kappa\nabla T - \mu\nabla n. \tag{37}$$

となり、輸送係数 η, μ and κ が導入できる. これらの輸送係数は CE 法で計算できる. その結果のみを記すと

$$\zeta^* \equiv \frac{\zeta}{\nu_0} = (1-e^2)\frac{5}{6} \tag{38}$$

および

$$\eta^* \equiv \frac{\eta}{\eta_0} = \frac{6}{(1+e)(4e-1)} \tag{39}$$

である. ここで $\nu_0 = 3A_m n\sigma^2\sqrt{T_0/m}$ および $\eta_0 = \sqrt{2m/T_0}T/(3A_m\sigma^2)$ である. また η^* は $e = 1/4$ で発散することに注意されたい.

同様に κ と μ も解析的に計算できるがやや複雑であるので図に結果を示すだけにしよう. ここでそれらは μ_3 を含み、mu_3 は $e = 0.386386$ で発散するのでそれ以下の e での値は無意味であると思われる.

7.3 Hydrodynamics of inelastic Maxwell model

これまでの流体力学の議論をさらに進めて一様状態の線形安定性を議論することも可能である. その目的のためには ζ の 2 次補正 (1 次補正は消える) の

$$\zeta^{(2)} = \zeta_1\nabla^2 T + \zeta_2\nabla^2 n \tag{40}$$

を計算する必要があるが前節と同様に計算可能である. 尚、ζ_1 と ζ_2 はそれぞれ $e = 0.721667$ と 0.783145 で発散する.

線形安定性を特徴づける固有値のうちずりモードは

$$s_\perp(k) = \zeta^* - \frac{\eta^*}{2}k^2 \tag{41}$$

に従い他の 3 つのモードは

$$\begin{aligned} s^3 &+ [\frac{2}{3}\eta^* k^2 - \zeta^* + \frac{5}{4}k^2(\kappa^* - {\zeta_1}^*)]s^2 \\ &+ \frac{5}{12}k^2[4 + (2\eta^* k^2 - 3\zeta^*)(\kappa^* - {\zeta_1}^*)]s \\ &- k^2[\zeta^* - \frac{5}{4}(\kappa^* - \mu^* - {\zeta_1}^* + {\zeta_2}^*)] = 0 \end{aligned} \tag{42}$$

の解となる. $e = 0.9$ の場合の分散関係は図に示す通りであり、ずりモードが最安定という訳でもなくハードコア系と違う特徴をもっている.

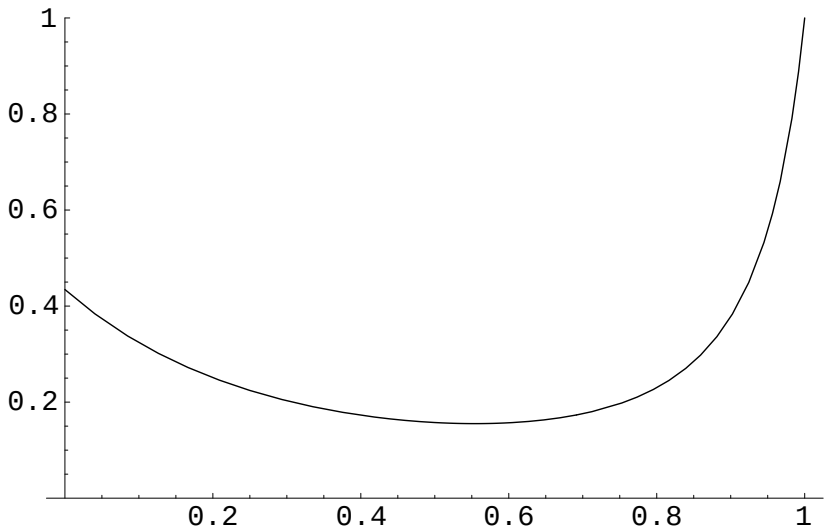

図 6: κ/κ_0 as a function of e.

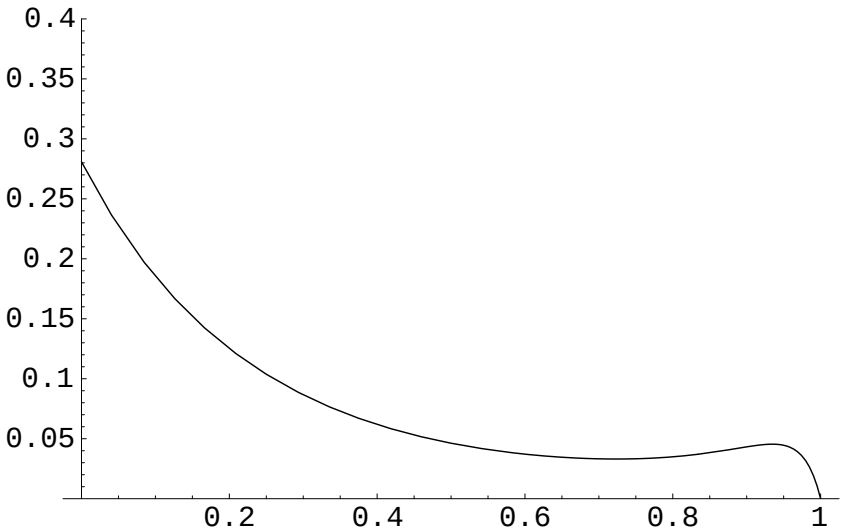

図 7: $n\mu/(\kappa_0 T)$ as a function of e.

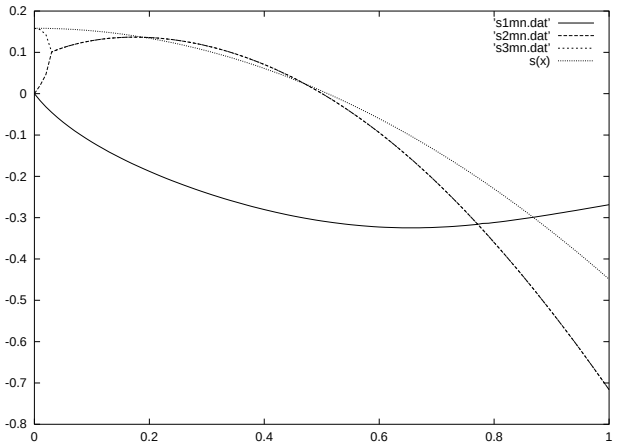

図 8: The dispersion relation as a function of dimensionless k at $e = 0.9$.

8 まとめ

本講義ノートではページ数の制限もあるために個々の記述は表面的なものである. また様々な興味深い現象を示す実験やシミュレーションの記述を極力抑えた. その点については参考文献を読むことで補って欲しい.

本講義ノートで紹介した理論はいずれも出版から 1 年を経ていないものばかりであり, まだ本当に生き残るものかどうかは分からないものである. しかしながらこうした粉体物理の息吹を感じることができ, ここで紹介した不十分な理論を更に乗り越える若い諸君が現われるのであれば筆者にとってこれに過ぎる喜びはない. 尚、本講義ノートを基にして本を執筆する予定があるので出版された本を書店で手に取る機会があったらどこがどう変化したかを見てみるのも一興かと思う.

無論ここで紹介した研究内容が耽美的な物理の指向に応えられるものでないことは百も承知である. 砂に水を混ぜると泥になることからも分かる様に砂の研究は埃っぽいだけでなく泥まみれになる. 安楽椅子できれいな話を夢想するばかりとならないことにも本質がある. 将来, 砂が本質的に持つ汚さを越えて美しい物理像が実を結ぶかどうかこれからの研究が大事であり, その成否は若い諸君の双肩にかかっている.

謝辞

御手洗菜美子さんと金賢得君に原稿を一読して頂き貴重なコメントを頂いた. その点を感謝致します.

参考文献

[1] H. M. Jeager, S. R. Nagel, and R. B. Behringer, Rev. Mod. Phys. **68**, 1259 (1996). Physics of Dry Granular Media, edited by H. J. Herrmann, J.-P. Havi and S. Luding (Kluwer,

Dordrecht, 1998), L. P. Kadanoff, Rev. Mod. Phys. **71**, 435 (1999), P. G. de Gennes, Rev. Mod. Phys. **71**, 374 (1999). 日本粉体工学会編、粉体シミュレーション入門 (産業図書 1998).

[2] 早川尚男, 那須野悟「粉体の物理」現代物理最前線 1 (共立出版 2000), 西森拓, 早川尚男, 田口善弘編集、粉粒体の物理学、物理学論文選集 XI (日本物理学会 1999), 早川尚男、「粉体流シミュレーション」(静電気学会：印刷中), 早川尚男「粉体流と交通流」(応用数理学会誌：印刷中). これらの殆んどは http://ace.phys.h.kyoto-u.ac.jp/ hisao/j-papers.html より入手可能.

[3] H. Hayakawa and H. Kuninaka, Chem. Eng. Sci. **57**, 239 (2002) and references therein.

[4] Granular Gases, edited by T. Pöschel and S. Luding (Springer, 2000) を見ると惑星のリング形成が主要なテーマであることが分かる.

[5] 標準的な静力学については三輪茂雄、粉体工学通論 (日刊工業新聞社 1981)： R. M. Needderman, Statics and Kinetics of Granular Materials (Cambridge University Press, Cambridge, 1992).

[6] D. Serero, G. Reydellet, P. Claudin, E. Clement, cond-mat/0107626.

[7] J.-P. Bouchaud, P. Claudin, D. Levine and M. Otto, Eur. Phys. J. E **4**, 451 (2001).

[8] J. E. S. Socolar, D. G. Schaeffer and P. Claudin, Eur. Phys. J. E **6**, 169 (2002).

[9] O. Pouliquen, Phys, Fluids **11**, 542 (1999).

[10] L. E. Silbert,1 D. Ertas, G. S. Grest, T. C. Halsey, D. Levine, and S. J. Plimpton, Phys. Rev. E **64**, 051302 (2001).

[11] A. Medina, J. Phys. Soc. Jpn. **71**, 1189 (2001).

[12] A. Lemaitre, Phys. Rev. Lett. **89**, 064302 (2002).

[13] T. S. Komatsu, S. Inagaki, N. Nakagawa, and S. Nasuno, Phys. Rev. Lett. **86**, 1757 (2001).

[14] E. Clement and J. Rajchenbach, Europhys. Lett. **16**, 133 (1991).

[15] H. Hayakawa and D. C. Hong, Phys. Rev. Lett. **78**, 2764 (1997).

[16] N. Miatarai, H. Hayakawa and H. Nakanishi, Phys. Rev. Lett. **88**, 174301 (2002).

[17] H. Hayakawa, to be published in Traffic and Granular Flows 2001 edited by Y. Sugiyama and D. E. Wolf (Springer, 2002).

[18] G. Lukaszewicz, *Micropolar Fluids: Theory and Applications* (Birkhäuser, Boston, 1999):

[19] 粉体ガスの研究に従事している多くの人は気体分子運動論の教科書に出て来るような人達である. 文献 [4] を参照. また歴史的に重要な J. T. Jenkins and S. B. Savage, J. Fluid Mech. **130**, 187 (1983) を挙げておく.

[20] see e.g. P. Resibois and M. de Leener, Classical Kinetic Theory of Fluids (John Wiley & Sons, New York, 1977).

[21] C. K. K. Lun, J. Fluid Mech. **233**, 539 (1991).

[22] N. Mitarai and H. Nakanishi, J. Phys. Soc. Jpn. **70**, 2809 (2001).

[23] K. Kanatani, Trans. Jpn. Soc. Mech. Eng. B **45**, 507, 515 (1979) : J. Kano, A. Shimosaka, and J. Hidaka, J. Soc. Powder Techol. Jpn. **33**, 95 (1996).

[24] C. Cercignani, Mathematical Methods in Kinetic Theory : second edition (Plenum, New York, 1990).

[25] 曽根良夫、青木一生：分子気体力学 (流体力学シリーズ 3, 朝倉書店, 1994).

[26] L. Popken and P. W. Clearly, J. Compt. Phys. **155**, 1 (1999).

[27] Y−h. Taguchi and H. Takayasu, Europhys. Lett. **30**, 499 (1995).

[28] K. Ichiki and H. Hayakawa, Phys. Rev. E **52**, 658 (1995).

[29] J. J. Brey, F. Moreno and J. W. Dufty, Phys. Rev. E **54**, 445 (1996).

[30] see e.g., T.P. Nojie and M. H. Ernst, Granular Matter **1**, 57 (1998).

[31] A. V. Bobylev, J. A. Carrillo, and I. M. Gamba, J. Stat. Phys. **98** , 743 (2000)

[32] M. H. Ernst and R. Brito, Europhys. Lett. **58**, 182 (2002).

[33] M. H. Ernst and R. Brito, cond-mat/0112417.

[34] P. Krapivsky and E. Ben-Naim, cond-mat/0111093.

[35] A. Baldassarri, U. M. B. Marconi and A. Puglisi, Europhys.Lett. 58, 14 (2002).

[36] J. T. Jenkins and M. W. Richman, Arch. Ration. Mech. Anal. **87**, 355 (1985); Phys. Fluids **28**, 3485 (1985).

[37] N. Sela and I. Goldhrisch, J. Fluid Mech. **361** , 41 (1998).

[38] J. J. Brey, J. W. Dufty, C. S. Kim and A. Santos, Phys. Rev. E **58**, 4638 (1999).

[39] M. H. Ernst and R. Brito, Phys. Rev. E **65**, 040301 (2002).

[40] H. Hayakawa, in preperation.