粉体流の境界条件

早川尚男
京都大学大学院人間・環境学研究科
606-8501 京都市左京区吉田二本松町
Tel: 075-753-6782, Fax: 075-753-2999,
e-mail: hisao@yuragi.jinkan.kyoto-u.ac.jp

平成 13 年 7 月 7 日

1 はじめに

粉体の流れを流体力学として扱う場合に境界条件の設定をしなければならない. 通常の流体力学では粘性境界条件, 即ち境界での相対速度が 0 である条件を課すが, 粒子スケールが分離できていない粉体の流れではその境界条件は不適切である. また粒子の回転の自由度が境界との相互作用において重要となり, カップルストレス等の概念の導入は避けられなくなる. 即ち境界条件の考察からバルクにおいても回転自由度を考慮した極性流体力学を必然的に導入する必要が生じる.

本ノートでは粉体流の境界条件の考察を J. T. Jenkins, J. Appl. Mech. **114** (1992) 120-127[1] に基づき, スピンの揺らぎを考慮した拡張版 [2] について詳しく紹介する. ここでは簡単のために平らな滑べりのない境界条件についての計算を紹介するが凸凹の境界ではどうなるかについてのコメントも末尾に載せておく.

2 滑べりのない境界での粒子衝突

本ノートでは 2 次元系において滑べりのない平らな境界を考え, そこに衝突する円盤状の粒子と壁の相互作用からどの様な境界条件が必要になるのかを考察する. Notation については Jenkins の論文 [1] に準拠することにする. 従って温度が運動エネルギーと違う次元を持つことを注意しないといけない. またオリジナル論文 [1] では 3 次元系についての計算であり我々 [2] はチェックも兼ねて 2 次元系の計算を行っている. 更にオリジナル論文ではスピン揺らぎを考察していないが, 滑べりのある場合も考察を加えているがここでは物理的機構を明確にするために滑べりは考慮しないがスピン揺らぎは考慮する.

平らな摩擦のある壁を考え法線ベクトルを $\mathbf{n}$ と記す. 粒子と壁との衝突によって運動量が壁から粒子へ移動する. 質量 m の粒子が壁と衝突して速度 $\mathbf{c}$ から $\mathbf{c}'$ に変わったとき, そ

の衝撃 $\mathbf{J}$ は

$$\mathbf{J} = m(\mathbf{c}' - \mathbf{c}) \tag{1}$$

で与えられる. 同様にトルクの伝達もある. 角速度 $\boldsymbol{\omega}$ 慣性モーメント I、半径 a(直径 d) の粒子は衝撃力 $\mathbf{F}$ の衝突では運動方程式 $Id\boldsymbol{\omega}/dt = -a\mathbf{n} \times \mathbf{F}$ に従うので $\mathbf{J} = \mathbf{F}dt$ を思い出すと

$$I(\boldsymbol{\omega}' - \boldsymbol{\omega}) = -\frac{d}{2}(\mathbf{n} \times \mathbf{J}) \tag{2}$$

に従う. ここで 2 次元円盤の慣性モーメントは $I = ma^2/2 = md^2/8$ であることを指摘しておく.

接触点での粒子速度は

$$\mathbf{g} \equiv \mathbf{c} - a\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{n} \tag{3}$$

である. ここで $\mathbf{g} \cdot \mathbf{n} = \mathbf{c} \cdot \mathbf{n}$ である. 反発係数 e は $\mathbf{g}$ に対して定義される:

$$(\mathbf{n} \cdot \mathbf{g}') = -e(\mathbf{n} \cdot \mathbf{g}). \tag{4}$$

また回転自由度を考えるときには接線方向に対しても新たな反発係数 β を

$$(\mathbf{n} \times \mathbf{g}') = -\beta(\mathbf{n} \times \mathbf{g}) \tag{5}$$

で導入しなければならない. β は $-1 \leq \beta \leq 1$ の値を取り得る.

衝撃 $\mathbf{J}$ を $\mathbf{g}$ の法線成分及び接線成分で書くと便利である. ここで定数 A, B を導入し

$$\mathbf{J} = A(\mathbf{n} \cdot \mathbf{g})\mathbf{n} + B[\mathbf{g} - (\mathbf{n} \cdot \mathbf{g})\mathbf{n}] \tag{6}$$

とおいてみる. (3) より

$$ma(\boldsymbol{\omega}' - \boldsymbol{\omega}) \times \mathbf{n} = -2(\mathbf{n} \times \mathbf{J}) \times \mathbf{n} = -2[\mathbf{J} - (\mathbf{J} \cdot \mathbf{n})\mathbf{n}]$$

及び

$$\mathbf{J} - (\mathbf{J} \cdot \mathbf{n})\mathbf{n} = B[\mathbf{g} - (\mathbf{n} \cdot \mathbf{g})\mathbf{n}]$$

から

$$m(\mathbf{g}' - \mathbf{g}) = A(\mathbf{n} \cdot \mathbf{g})\mathbf{n} + 3B[\mathbf{g} - (\mathbf{n} \cdot \mathbf{g})\mathbf{n}] \tag{7}$$

を得る.

(4) と (7) から

$$m\mathbf{n} \cdot (\mathbf{g}' - \mathbf{g}) = -m(1 + e)\mathbf{n} \cdot \mathbf{g} = A(\mathbf{n} \cdot \mathbf{g})$$

であり, (5) と (7) から

$$m\mathbf{n} \times (\mathbf{g}' - \mathbf{g}) = 3B(\mathbf{n} \times \mathbf{g}) = -m(1 + \beta)(\mathbf{n} \times \mathbf{g})$$

が成り立つ. よって衝撃は

$$\mathbf{J} = -m(1 + e)(\mathbf{n} \cdot \mathbf{g})\mathbf{n} - \frac{m}{3}(1 + \beta)[\mathbf{g} - (\mathbf{n} \cdot \mathbf{g})\mathbf{n}] \tag{8}$$

と表すことができる.

全運動エネルギー K は並進部分と回転部分から成る. 従って

$$K = \frac{1}{2}m\mathbf{c}^2 + \frac{1}{2}I\boldsymbol{\omega}^2$$

衝突の際のエネルギー変化 $\Delta K = m(\mathbf{c}'^2 - m\mathbf{c}^2)/2 + I(\boldsymbol{\omega}'^2 - \boldsymbol{\omega}^2)/2$ も問題になる. (2) 及び $\boldsymbol{\omega}'^2 - \boldsymbol{\omega}^2 = (\boldsymbol{\omega} - \boldsymbol{\omega})^2 - \frac{d}{I}\mathbf{J}\cdot(\boldsymbol{\omega}\times\mathbf{n})$ と $\{\mathbf{n}\times(\boldsymbol{\omega}' - \boldsymbol{\omega})\}^2 = (\boldsymbol{\omega} - \boldsymbol{\omega})^2$ に注意して

$$\mathbf{g}\cdot\mathbf{J} = m(\mathbf{c}\cdot\mathbf{c}' - \mathbf{c}^2) - a\mathbf{J}\cdot(\boldsymbol{\omega}\times\mathbf{n})$$

を用いると衝突に伴うエネルギー変化は

$$\Delta K = \mathbf{g}\cdot\mathbf{J} + \frac{3}{2m}\mathbf{J}^2 - \frac{1}{m}(\mathbf{n}\cdot\mathbf{J})^2 \tag{9}$$

となる. 従って (8) 式を (9) 式に代入して整理をすると

$$\Delta K = -\frac{m}{2}(1-e^2)(\mathbf{n}\cdot\mathbf{g})^2 - \frac{m}{6}(1-\beta^2)(\mathbf{g}^2 - (\mathbf{g}\cdot\mathbf{n})^2) \tag{10}$$

となる.

3　平均量、衝突フラックス及び境界条件

3.1　平均量

粒子衝突の素過程から平均量或は流体力学的変数を抽出しなければ粉体流の境界条件を与えることはできない. 今粒子速度及び角速度の分布関数を $f(\mathbf{c}, \boldsymbol{\omega}, \mathbf{r}, t)$ とすると粒子数密度は

$$n(\mathbf{r}, t) = \int d\mathbf{c}\int \boldsymbol{\omega} f(\mathbf{c}, \boldsymbol{\omega}, \mathbf{r}, t) \tag{11}$$

である. また任意の (流体力学的) 変数 Ψ の平均 $<\Psi>$ は

$$<\Psi> = \frac{1}{n}\int d\mathbf{c}\int \boldsymbol{\omega}\Psi(\mathbf{c}, \boldsymbol{\omega}) f(\mathbf{c}, \boldsymbol{\omega}, \mathbf{r}, t) \tag{12}$$

で与えられる. また平均流速 $\mathbf{u}$, 速度揺らぎ $\mathbf{C}$, 粉体温度 T を

$$\mathbf{u} \equiv <\mathbf{c}>, \quad \mathbf{C} \equiv \mathbf{c} - \mathbf{u}, \quad T \equiv \frac{1}{2} < C^2 > \tag{13}$$

で定義する. ここで粉体温度に粒子質量を含めていない定義に注意されたい. また D 次元の粉体温度は $T_D = \frac{1}{D} < C^2 >$ である. 同様に平均角速度 $\mathbf{w}$, スピン揺らぎ速度 $\boldsymbol{\Omega}$, スピン温度 τ を

$$\mathbf{w} \equiv <\boldsymbol{\omega}>, \quad \Omega \equiv \frac{d}{\sqrt{8}}(\omega - \mathbf{w}), \quad \tau \equiv \frac{1}{2} < \Omega^2 > \tag{14}$$

で導入する.

3.2 衝突フラックス

境界条件は静止した壁との運動量、角運動量、エネルギーのやりとりで決まる. 壁の微小面積要素 dA と時間 dt の間に衝突する粒子中心は領域 $-\mathbf{c}\cdot\mathbf{n}dAdt$ 内に存在し, $\mathbf{c}\cdot\mathbf{n}<0$ を充たさねばならない. 衝突に伴い流体力学変数が $\Psi\to\Psi'$ と変化したとする. 壁付近での粒子数密度を $n\chi$ とおく. 但し χ は壁が存在することによる粒子数密度の変化で $\chi\geq 1$ となることが多い. 壁の単位面積当たりの衝突に伴う Ψ の変化率は

$$\mathbf{C}(\Psi)=-\chi\int_{\mathbf{c}\cdot\mathbf{n}\leq 0}d\mathbf{c}\int d\boldsymbol{\omega}(\Psi'-\Psi)f(\mathbf{c},\boldsymbol{\omega}) \tag{15}$$

で与えられる. ここで運動量に対しては

$$\Psi\equiv m\mathbf{c},\ \text{with}\ \Psi'-\Psi=\mathbf{J},\ \text{and}\ \mathbf{M}\equiv\mathbf{C}(m\mathbf{c}) \tag{16}$$

であり, 角運動量に関しては

$$\Psi\equiv I\boldsymbol{\omega},\ \text{with}\ \Psi'-\Psi=-a\mathbf{n}\times\mathbf{J},\ \text{and}\ \mathbf{L}\equiv\mathbf{C}(I\boldsymbol{\omega}) \tag{17}$$

であり, 全エネルギーについては

$$\Psi\equiv\frac{1}{2}m\mathbf{c}^2+\frac{1}{2}I\boldsymbol{\omega}^2,\ \text{with}\ \Psi'-\Psi=\Delta K,\ \text{and}\ -D\equiv\mathbf{C}(\frac{1}{2}m\mathbf{c}^2+\frac{1}{2}I\boldsymbol{\omega}^2) \tag{18}$$

である.

3.3 境界条件

境界条件についてはストレステンソル等の定義から決まる. 例えば壁の単位面積当たりに供給される運動量変化率は力 $\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{n}$ と釣り合う. 従って

$$\mathbf{M}=-\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{n} \tag{19}$$

となる. 符号は法線ベクトルの向きが領域から見ると内向きになっているためである.

角運動量のバランスにはカップルストレスが顔を出す. 定義から

$$\mathbf{r}\times\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{n}+\mathbf{C}\cdot\mathbf{n}+\mathbf{r}\times\mathbf{M}+\mathbf{L}=0 \tag{20}$$

が成り立つが (19) から

$$\mathbf{L}=-\mathbf{C}\cdot\mathbf{n} \tag{21}$$

となる.

エネルギーの釣合については熱流 $\mathbf{q}$ に対して

$$\mathbf{u}\cdot(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{n})+\mathbf{w}\cdot(\mathbf{C}\cdot\mathbf{n})-\mathbf{q}\cdot\mathbf{n}-D=0 \tag{22}$$

が成り立つが (19),(21) を考慮すれば直ちに

$$-\mathbf{u}\cdot\mathbf{M}-\mathbf{w}\cdot\mathbf{L}-D=\mathbf{q}\cdot\mathbf{n} \tag{23}$$

となる. ここで接触点での平均化された速度を

$$\mathbf{g}_0 \equiv \mathbf{u} + a\mathbf{n} \times \mathbf{w} \tag{24}$$

で導入する. (16) 及び (17) より $\mathbf{L} = -a\mathbf{n} \times \mathbf{M}$ という関係式が成り立つので (23) 式は

$$-\mathbf{g}_0 \cdot \mathbf{M} - D = \mathbf{q} \cdot \mathbf{n} \tag{25}$$

となる.

4 具体的計算

Jenkins[1] assumed that (i) the macroscopic spin is equal to the rotation of the flow field, and (ii) the fluctuation of spin variables is negligible. These assumptions, however, are not acceptable.

Instead of Jenkins' assumption we assume that the velocity and the angular velocity obey the Gaussian as

$$f(\mathbf{C}, \Omega) = \frac{n}{(2\pi)^{3/2} T \tau^{1/2}} \exp[-\frac{C^2}{2T} - \frac{\Omega^2}{2\tau}]. \tag{26}$$

This is a simplification but can be justified from (a) the local Gaussian is achieved in homogeneous state and (b) the most important contribution in the polynominal expansion from the Gaussian comes from the Gaussian.

Following Jenkins' paper[1], we retry to derive the rate of collisional production of the momentum per unit area of the wall. What we need to calculate are

$$\mathbf{M} = -\chi \int d\mathbf{C} \int d\Omega \mathbf{J} f(C, \Omega)(\mathbf{C} \cdot \mathbf{n}). \tag{27}$$

and

$$D = -\chi \int d\mathbf{C} \int d\Omega \Delta K f(C, \Omega)(\mathbf{C} \cdot \mathbf{n}). \tag{28}$$

From eq.(8) the impact $\mathbf{J}$ and the energy transfer ΔK for hydrodynamic variables are respectively given by

$$\mathbf{J} = -m(1+e)(\mathbf{n} \cdot \mathbf{C})\mathbf{n} - \frac{m}{3}(1+\beta)[\mathbf{C} - (\mathbf{C} \cdot \mathbf{n})\mathbf{n} - \sqrt{2}(\mathbf{\Omega} \times \mathbf{n}) + \mathbf{g}_0). \tag{29}$$

and

$$\begin{aligned} \Delta K &= -\frac{m}{2}(1-e^2)(\mathbf{n} \cdot \mathbf{C})^2 - \frac{\mathbf{m}}{6}(1-\beta^2)[C^2 + 2(\mathbf{\Omega} \times \mathbf{n})^2 + \\ &\quad 2(\mathbf{C} \cdot \mathbf{n})^2 - 2\sqrt{2}(\mathbf{\Omega} \times \mathbf{n}) \cdot (\mathbf{g}_0 + \mathbf{C}) + g_0^2 - (\mathbf{C} \cdot \mathbf{n})^2] \end{aligned} \tag{30}$$

Substituting these equations into eq.(27) and (28) we obtain

$$\mathbf{M} = \chi m(1+e) I_1 \mathbf{n} - \frac{m(1+\beta)}{3}(\mathbf{I}_2 - I_1 \mathbf{n} - \sqrt{2}\mathbf{I}_3 + I_4 \mathbf{g}_0), \tag{31}$$

and

$$D = -\frac{m}{2}(1-e^2)I_7 - \frac{m}{6}(1-\beta^2)[I_5 + 2I_6 + 2\mathbf{g}_0 \cdot \mathbf{I}_2 - 2\sqrt{2}(\mathbf{I}_3 \cdot \mathbf{g}_0 + I_8) + g_0^2 I_4 - I_7] \quad (32)$$

where

$$\begin{aligned}
I_1 &= \int\int_{(\mathbf{C}\cdot\mathbf{n}\le 0} d\mathbf{C}d\Omega(\mathbf{C}\cdot\mathbf{n})^2 f(\mathbf{C},\Omega) && (33)\\
\mathbf{I}_2 &= \int\int_{(\mathbf{C}\cdot\mathbf{n}\le 0} d\mathbf{C}d\Omega(\mathbf{C}\cdot\mathbf{n})\mathbf{C} f(\mathbf{C},\Omega) && (34)\\
\mathbf{I}_3 &= \int\int_{(\mathbf{C}\cdot\mathbf{n}\le 0} d\mathbf{C}d\Omega(\mathbf{C}\cdot\mathbf{n})(\mathbf{\Omega}\times\mathbf{n}) f(\mathbf{C},\Omega) && (35)\\
I_4 &= \int\int_{(\mathbf{C}\cdot\mathbf{n}\le 0} d\mathbf{C}d\Omega(\mathbf{C}\cdot\mathbf{n}) f(\mathbf{C},\Omega) && (36)\\
I_5 &= \int\int_{(\mathbf{C}\cdot\mathbf{n}\le 0} d\mathbf{C}d\Omega C^2 f(C,\Omega)(\mathbf{C}\cdot\mathbf{n}) && (37)\\
I_6 &= \int\int_{(\mathbf{C}\cdot\mathbf{n}\le 0} d\mathbf{C}d\Omega(\mathbf{\Omega}\times\mathbf{n})^2 f(C,\Omega)(\mathbf{C}\cdot\mathbf{n}) && (38)\\
I_7 &= \int\int_{(\mathbf{C}\cdot\mathbf{n}\le 0} d\mathbf{C}d\Omega(\mathbf{n}\times\mathbf{C})^3 f(C,\Omega) && (39)\\
I_8 &= \int\int_{(\mathbf{C}\cdot\mathbf{n}\le 0} d\mathbf{C}d\Omega(\mathbf{n}\cdot\mathbf{C})\mathbf{C}\cdot(\mathbf{\Omega}\times\mathbf{n}) f(C,\Omega) && (40)
\end{aligned}$$

Thus, the problem is reduced to the integration of I_i.

Note that we can write

$$\mathbf{C} = C\cos\theta\mathbf{n} + C\sin\theta\mathbf{t} \quad (41)$$

with the angle θ between $\mathbf{C}$ and $\mathbf{t}$, and the integration over angle is performed from $\pi/2$ to $3\pi/2$. Thus, I_1 can be calculated as

$$I_1 = \frac{1}{2}nT$$

where we use $\int_{\pi/2}^{3\pi/2}\cos^2\theta = \pi/2$. Similarly it is easy to show

$$\mathbf{I}_2 = \frac{1}{2}nT\mathbf{n}.$$

In addition we can show

$$\mathbf{I}_3 = \mathbf{0}$$

because it includes an integral of the odd function $\Omega\exp[-\Omega^2/(2\tau)]$ between $-\infty$ and ∞.

The most important integral in the tangential $\mathbf{M}$ is I_4 because other contributions are cancelled with each other. The process of the calculation is as follows:

$$\begin{aligned}
I_4 &= \int\int_{(\mathbf{C}\cdot\mathbf{n}\le 0} d\mathbf{C}d\Omega(\mathbf{C}\cdot\mathbf{n}) f(\mathbf{C},\Omega)\\
&= \frac{n}{2\pi T}\int dCC^2\int_{\pi/2}^{3\pi/2} d\theta\cos\theta e^{-C^2/2T}\\
&= -\frac{n}{\pi T}\int dCC^2 e^{-C^2/2T}\\
&= -n\sqrt{\frac{T}{2\pi}} && (42)
\end{aligned}$$

where we use $\int_{\pi/2}^{3\pi/2}\cos\theta = -2$ and

$$\int_0^\infty dCC^2\exp[-\frac{C^2}{2T}] = \sqrt{\frac{\pi}{2}}T^{3/2}. \tag{43}$$

Similarly, the straightforward calculations lead to

$$\begin{aligned} I_5 &= -\frac{3}{2}\sqrt{\frac{2}{\pi}}nT^{3/2}, && (44)\\ I_6 &= -n\sqrt{\frac{T}{2\pi}}\tau && (45)\\ I_7 &= -n\sqrt{\frac{2}{\pi}}T^{3/2} && (46)\\ I_8 &= 0 && (47) \end{aligned}$$

Therefore the expression of $\mathbf{M}$ in eq.(27) is given by

$$\begin{aligned} \mathbf{M} &= \frac{\rho\chi}{2}(1+e)T\mathbf{n} - \frac{\rho\chi}{3}(1+\beta)\sqrt{1/2\pi}T^{1/2}\mathbf{g}_0 \\ &= \frac{\rho\chi}{2}(1+e)T\mathbf{n} - \frac{\rho\chi}{6}(1+\beta)\sqrt{\frac{2}{\pi}}T^{1/2}\mathbf{g}_0. \end{aligned} \tag{48}$$

Similarly D in eq.(32) becomes

$$D = \rho\sqrt{\frac{T}{2\pi}}[(1-e^2)T + \frac{1-\beta^2}{6}\{T+\tau+g_0^2\}]. \tag{49}$$

Thus, the effect of particles' spin appears only in the energy dissipation D. Also we can calculate $\mathbf{L}$ and $Q = \mathbf{q}\cdot\mathbf{n}$, but we do not present its explicit calculation.

5 Bumpy Boudnary Condition

境界面が凸凹であるとここで紹介した計算は使えなくなる. 凸凹の揺らぎが小さい場合には摩擦特性が変化した平らな境界とみなすことが可能であるが粒子スケールの凹凸があると質的に違う効果をもたらす. 特にシミュレーション等においては粒子を境界面に貼りつけて行うことは珍しくはなく、そうした場合の境界条件はやはり重要な問題になる. ここでは論文 [3] を紹介するに留めておこう. というのは我々も計算を試みて一応 explicit な条件式を書き下す事を行ったが得られた式が繁雑でとても使いものにならないからである. 更にバルクの速度プロファイルに依存した形で境界条件が決まる等、単に面倒であるという以上に論理構成そのものに問題がありそうである. 従ってそういう研究があると紹介するに留めて Bumpy Boundary の話の詳細には触れない.

6 Discussion

境界条件の計算をここで紹介した. 冗長な計算の何が嬉しいのか読者には明確ではないかもしれないが粉体の流体力学を考える上で重要な内容を含んでいる. ここでの計算から明らかになったことは

- 角運動量の連続の式が必要になり, そのためにカップルストレスを導入しなけらばならなかったこと. この境界条件と合致するためには極性流体力学を導入する必然があること.
- 流体の境界条件が理論の枠内で決まること. ($\mathbf{g}_0$ は接線方向のベクトルであるので) 境界でのスリップが $1+\beta$ に比例すること. 従って $\beta = -1$ を除き回転とスリップの効果が無視できないこと.

これらの特徴は粉体を流体として考えたときに際立って通常の流体と異なるものである. 従来粉体流においてカップルストレスを具体的に議論した論文は少ない [4]. この反応の鈍さは計測の難しさにある. カップルストレスをどのように実験的に計測するのか誰も明確なアイデアを持っていないためにこの考え方を追求しようという動きは鈍いのである.

カップルストレスは粉体層が破壊するときにも重要な役割を果たす. 粒子の局所的な回転が避けられないためと言ってもよい. そもそもカップルストレスの入った極性弾性体ではポアソン比が通常の弾性体ではあり得ない値を取り得る. この様に静力学においても極性の影響は大きく, 今後, 粉体を連続体として理解する上で最も大事な考え方になると言えるであろう.

参考文献

[1] J. T. Jenkins, J. Appl. Mech. **114** (1992) 120,

[2] N. Mitarai and H. Hayakawa, unpublished note. 多分どっかの論文の Appendix として生かされると思います.

[3] J. T. Jenkins, J. Fluid Mech. **171**, 53 (1986).

[4] C. S. Campbell, J. Fluid Mech. **247**, 111 (1993).