引力を持つ稀薄粉体ガスのレオロジーの理論

高田智史 [1], 早川尚男 [2]

[1] 京都大学 理学研究科 物理学・宇宙物理学専攻
[2] 京都大学 基礎物理学研究所

概要

せん断下における引力を持つ稀薄粉体ガスの粘性率を運動論から導出した。具体的には、引力のモデルとして井戸型ポテンシャルを考え、一様せん断下においてボルツマン方程式を解析することで粘性率を導出した。また、対応する分子動力学シミュレーションを行うことで、理論の適用範囲についての議論も行う。

Rheology of cohesive dilute granular gases

Satoshi Takada[1], Hisao Hayakawa[2]

[1] Department of Physics, Kyoto University
[2] Yukawa Institute for Theoretical Physics, Kyoto University

Abstract

The rheology of cohesive dilute granular gases is studied. We analyze the kinetic theory of granular gases having the square-well potential and derive the steady state shear viscosity under a plane shear. We also perform the event-driven molecular dynamics to check the validity of the kinetic theory.

1 はじめに

シアシックニングと呼ばれる、せん断率の増加に伴い粘性率も増加する現象がある。この現象は物理学的だけでなく工業的にも注目されており、メカニズムについて調べている様々な論文がある [1, 2, 3]。

ただし、これらの研究はシミュレーションを中心に行われており、理論的な研究に目を向けると、エンスコッグ方程式を用い有限密度の効果で連続的なシアシックニングが現れることを示した Santos らの論文 [4] があるものの未だ不十分な点が多い。本研究においては一様せん断下における引力を持つ稀薄粉体ガスを運動論を用いて解析することにより、シンプルなモデルから系のレオロジーを解明することを目的とする。

2 一様せん断状態

質量 m、直径 d からなる粒子が一様に分布している系を考える。粒子間のポテンシャルとしては井戸の深さ ε、幅の比 λ で特徴づけられる井戸型ポテンシャルを用いる。この系に一様せん断、すなわち平均流速が $u_x = \dot\gamma y$, $u_y = u_z = 0$ となるようにせん断を加える ($\dot\gamma$ はせん断率)。稀薄な場合においてはこの系はボルツマン方程式

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} - \dot\gamma V_{1y}\frac{\partial}{\partial V_{1x}}\right) f(\boldsymbol{V}_1, t) = J(f, f), \qquad (1)$$

で記述される。ここで、$f(\boldsymbol{V}, t)$ は分布関数、$V_x = v_x - \dot\gamma y$, $V_y = v_y$, $V_z = v_z$ は特性速度、$J(f, f)$ は

衝突積分

$$
\begin{aligned}
J(f,f) = &\int d\boldsymbol{v}_2 \int d\hat{\boldsymbol{k}} \Theta(\min(\lambda,\nu) - \tilde{b}) v_{12} \\
&\times [\chi_e \sigma(\chi, v''_{12}) f(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{v}''_1, t) f(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{v}''_2, t) \\
&\quad - \sigma(\chi, v_{12}) f(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{v}_1, t) f(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{v}_2, t)] \\
&+ \int d\boldsymbol{v}_2 \int d\hat{\boldsymbol{k}} \Theta(\tilde{b} - \min(\lambda,\nu)) v_{12} \\
&\times [\sigma(\chi, v''_{12}) f(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{v}''_1, t) f(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{v}''_2, t) \\
&\quad - \sigma(\chi, v_{12}) f(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{v}_1, t) f(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{v}_2, t)], \quad (2)
\end{aligned}
$$

である。ここで、$\Theta(x)$ はステップ関数、$v_{12} = |\boldsymbol{v}_{12}| = |\boldsymbol{v}_1 - \boldsymbol{v}_2|$ は i 番目と j 番目の粒子の間の相対速度、$\nu \equiv (1 + 4\varepsilon/mv_{12}^2)^{1/2}$ は屈折率 [5, 6]、$\tilde{b} = b/d$ は無次元化した衝突パラメータ、χ_e は衝突前の速度 $(\boldsymbol{v}''_1, \boldsymbol{v}''_2)$ と衝突後の速度 $(\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2)$ との間の変換のヤコビアンに関する量、$\sigma(\chi, v_{12})$ は散乱断面積である。χ は衝突パラメータ b および相対速度 v_{12} により決まる散乱角である。井戸型ポテンシャルの場合、$(\boldsymbol{v}''_1, \boldsymbol{v}''_2)$ と $(\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2)$ との間の関係式は以下のように書ける [7]：

$$
\begin{cases}
\boldsymbol{v}_1 = \boldsymbol{v}''_1 - A(\boldsymbol{v}''_{12} \cdot \hat{\boldsymbol{k}})\hat{\boldsymbol{k}} \\
\boldsymbol{v}_2 = \boldsymbol{v}''_2 + A(\boldsymbol{v}''_{12} \cdot \hat{\boldsymbol{k}})\hat{\boldsymbol{k}}
\end{cases} . \quad (3)
$$

ここで

$$
A = \begin{cases}
1 - \dfrac{1}{2}\epsilon\nu^2 \dfrac{\cos^2\Theta}{\cos^2\theta} & (\tilde{b} \le \min(\lambda,\nu)) \\
1 & (\tilde{b} > \min(\lambda,\nu))
\end{cases}, \quad (4)
$$

であり $\hat{\boldsymbol{k}}$ は粒子が最接近した時の相対位置ベクトルに平行な単位ベクトル、θ は $\boldsymbol{v}_{12}$ と $\hat{\boldsymbol{k}}$ とがなす角度、$\Theta \equiv \cos^{-1}\{1 - b^2/(\nu^2 d^2)\}^{1/2}$ である。

式 (1) に $mV_{1i}V_{1j}$ を乗じ $\boldsymbol{V}_1$ について積分することで、ストレステンソルに関する時間発展

$$
\partial_t P_{ij} + \dot{\gamma}(\delta_{ix}P_{yj} + \delta_{jx}P_{iy}) = -\Lambda_{ij}, \quad (5)
$$

が得られる。ここで、Λ_{ij} は

$$
\overleftrightarrow{\Lambda} \equiv -m \int d\boldsymbol{v}_1 \boldsymbol{V}_1 \boldsymbol{V}_1 J[\boldsymbol{V}_1|f], \quad (6)
$$

で定義されるテンソルである。

解析を行っていくにあたり、分布関数が Grad の 13 モーメント [8]

$$
f(\boldsymbol{V}) = f_{\mathrm{M}}(\boldsymbol{V}) \left[1 + \frac{m}{2T}\left(\frac{P_{ij}}{p} - \delta_{ij}\right) V_i V_j\right], \quad (7)
$$

で与えられると仮定する。ここで $f_{\mathrm{M}}(\boldsymbol{V}) = n(m/2\pi T)^{3/2}\exp(-mV^2/2T)$ は Maxwell 分布であり、$p = nT$ である。

$\overleftrightarrow{\Lambda}$ はストレステンソルの対角項と非対角項の和に分割することができ、

$$
\overleftrightarrow{\Lambda} = \nu_1(\overleftrightarrow{P} - p\mathbf{1}) + \zeta p \mathbf{1}, \quad (8)
$$

と書ける。ここで ν_1 は

$$
\begin{aligned}
\nu_1 = &\frac{8}{15} n d^2 \sqrt{\frac{\pi T}{m}} \int_0^\infty dc_{12} \int_0^\infty d\tilde{b} A \tilde{b} c_{12}^7 \\
&\times \left[(1-A) + \frac{3}{2}A\cos^2\frac{\chi}{2}\right]\sin^2\frac{\chi}{2}\exp\left(-\frac{1}{2}c_{12}^2\right),
\end{aligned} \quad (9)
$$

で与えられる。また ζ は一様冷却過程におけるエネルギー散逸率と一致し、

$$
\begin{aligned}
\zeta = &\frac{8}{3} n d^2 \sqrt{\frac{\pi T}{m}} \int_0^\infty dc_{12} \int_0^\infty d\tilde{b} \\
&\times A(1-A)\tilde{b} c_{12}^5 \sin^2\frac{\chi}{2}\exp\left(-\frac{1}{2}c_{12}^2\right), \quad (10)
\end{aligned}
$$

となる。

式 (5) と式 (8) より圧力 $p \equiv P_{ii}/3$、圧力差 $\Delta p \equiv P_{xx} - P_{yy}$、シアストレス P_{xy} の時間発展の方程式

$$
\begin{cases}
\partial_t p + \frac{2}{3}\dot{\gamma}P_{xy} = -\zeta p \\
\partial_t \Delta P + 2\dot{\gamma}P_{xy} = -\nu_1 \Delta p \\
\partial_t P_{xy} + \dot{\gamma}\left(p - \frac{1}{3}\Delta p\right) = -\nu_1 P_{xy}
\end{cases}, \quad (11)
$$

が得られる。今回は定常状態の値に着目することにすると、式 (11) より定常解

$$
\dot{\gamma}_{\mathrm{s}} = \sqrt{\frac{3}{2}\frac{\nu_1^2 \zeta}{\nu_1 - \zeta}}, \quad (12)
$$

$$
P_{xy,\mathrm{s}} = -\frac{p}{\nu_1}\sqrt{\frac{3}{2}\zeta(\nu_1 - \zeta)}, \quad (13)
$$

$$
\Delta p = \frac{3\zeta}{\nu_1} p, \quad (14)
$$

がそれぞれ得られる。ここで下文字の s は定常状態に関する量であることを示す。図 1 に温度とせん断率の関係 (12) を示す。せん断率が小さい領域においては定常状態が存在せず、またせん断率が大きい領域においてはせん断率の増加に伴って温度が増加するブランチと温度が一定のブランチが存在することがわかる。

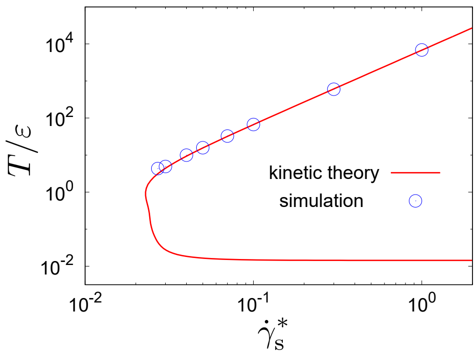

図 1: 運動論 (赤実線) 及びシミュレーション (青丸印) から得られた温度とせん断率の関係。ここで $e = 0.99$、$\lambda = 1.5$ であり、$\dot{\gamma}_s^* = \dot{\gamma}_s(md^2/\varepsilon)^{1/2}$。

また、式 (12) と (13) より粘性率を計算することができ、

$$\eta_s \equiv -\frac{P_{xy,s}}{\dot{\gamma}_s} = \frac{(\nu_1 - \zeta)p}{\nu_1^2}. \tag{15}$$

が得られる。図 2 にせん断率 (12) と粘性率 (15) の関係を示している。粘性率の場合も温度と同様に、低せん断領域においては粘性率が存在せず、高せん断領域においては粘性率がせん断率に比例して増大する Bagnold の領域とせん断率の -2 乗に比例して減少するシアシニングの領域が見られることがわかる。

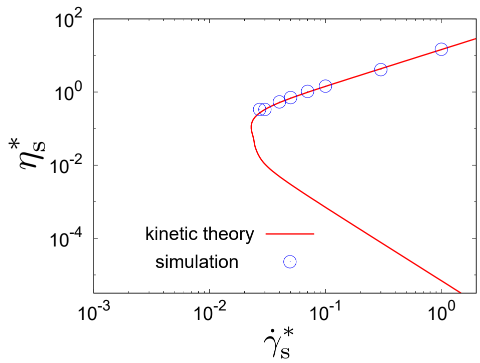

図 2: 運動論 (赤実線) 及びシミュレーション (青丸印) から得られたせん断率と粘性率の関係。ここで $e = 0.99$、$\lambda = 1.5$、$\eta_s^* = \eta d^2/(m\varepsilon)^{1/2}$ 。

3 一様せん断状態の分子動力学シミュレーション

前章で行った解析の結果を比較するため、一様せん断下に置いて event-driven な分子動力学シミュレーション [9, 10] を行った。Lees-Edwards 境界条件 [11] および Sllod 方程式 [12, 13] を用いることで一様せん断系を実現した。粒子数は $N = 10^3$ とし、システムサイズは $L = 37.4d$ を用いた。また本研究においては充填率を $\phi = N(\pi d^3/6)/L^3 = 0.01$、はねかえり係数を $e = 0.99$、ポテンシャル井戸の幅の比を $\lambda = 1.5$ と固定した。

図 1、2 にシミュレーションで測定した温度とせん断率、およびせん断率と粘性率の関係を示している。高せん断率の場合には運動論で得られた 2 つのブランチのうち、Bagnold のブランチに一致した結果が得られている。その一方、シミュレーションにおいても低せん断率の場合においては定常状態が存在しない。実際、この場合に時間発展をプロットしてみると図 3 のように時間と共にクラスターが成長し、最終的にすべての粒子がクラスターに吸収されていくことがわかる。また、2 粒子の距離 r_{ij} が λd 以下の時にクラスタリングしていると判定することで平均クラスターサイズの時間発展を測定した。図 4 のようにせん断率が高い場合には平均クラスターサイズは一定なのに対し、低せん断率の場合には時間と共に平均クラスターサイズは増加していき、最終的にほとんど粒子がクラスターに吸収されていることがわかる。

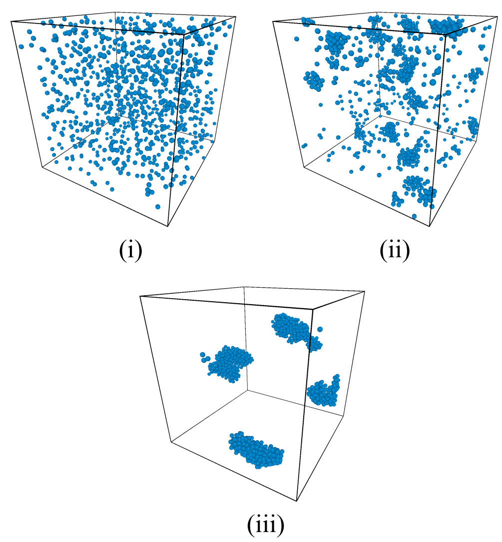

図 3: 定常状態が存在しないせん断率領域における典型的な系の時間発展。(i) $t = 0$, (ii) $2400t_0$, and (iii) $3500t_0$。ここで $\dot{\gamma}_s^* = 0.003$ および $t_0 = (md^2/\varepsilon)^{1/2}$

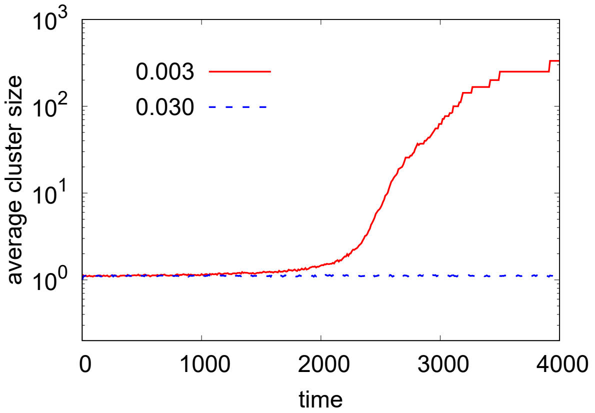

図 4: $\dot{\gamma}^* = 0.003$(赤実線)、0.03(青破線) における平均クラスターサイズの時間発展。

4　まとめ

本研究では引力を持つ稀薄粉体ガスに一様せん断をかけた際の粘性率をボルツマン方程式を解析することによって導出した。その結果、せん断率が低い場合には定常状態が存在せず、高せん断率の場合には Bagnold のブランチとシアシニングのブランチの 2 つが現れることがわかった。これに対応した分子動力学シミュレーションを行うと高せん断率の場合には Bagnold のブランチが選ばれること、低せん断率の場合にはクラスターが生成し一様状態が成り立たなくなることがわかった。

参考文献

[1] M. Otsuki and H. Hayakawa, Phys. Rev. E **83**, 051301 (2011).

[2] R. Seto, R. Mari, J. F. Morris, and M. M. Denn, Phys. Rev. Lett. **111**, 218301 (2013).

[3] T. Kawasaki, A. Ikeda and L. Berthier, EPL **107**, 28009 (2014).

[4] A. Santos, V. Garzó, and J. W. Dufty, Phys. Rev. E **69**, 061303 (2004).

[5] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Mechanics Third Edition* (*Course of Theoretical Physics*) (Butterworth-Heinemann, Oxford, 1976).

[6] H. Goldstein, C. Poole, and J. Safko, *ClassicalMechanics Third Edition* (Addison Wesley, Boston, 2001).

[7] S. Takada, K. Saitoh, and H. Hayakawa, Phys. Rev. E **94**, 012906 (2016).

[8] H. Grad, Commun. Pure Appl. Math. **2**, 331 (1949).

[9] B. J. Alder and T. E. Wainwright, J. Chem. Phys. **31**, 459 (1959).

[10] M. N. Bannerman, R. Sargant, L. Lue, J. Comp. Chem. **32**, 3329 (2011).

[11] A. W. Lees and S. F. Edwards, J. Phys. C **5**, 1921 (1972).

[12] D. J. Evans and G. P. Morriss, Phys. Rev. A **30**, 1528 (1984).

[13] D. J. Evans and G. Morriss, *Statistical Mechanics of Nonequilibrium Liquids, 2nd ed.* (Cambridge University Press, Cambridge, 2008).