

粒子数が冪分布に従う多分散粉体ガスのレオロジー

山路大樹, 石川遥登, 高田智史

東京農工大学 機械システム工学専攻

概要

粒子数が冪分布に従う多分散粉体ガスのレオロジーを運動論により記述する。粒子サイズの種類やサイズ比に対して系の粘性率がどのように変化するかを調べる。その結果、粒子サイズの種類を増やすと系全体の粘性率がある値に漸近していくこと、さらにサイズ比が大きくなると粘性率が単分散のものに漸近することを示す。また分子動力学シミュレーションにより、得られた結果の妥当性についても議論する。

Rheology of polydisperse granular mixtures whose size distribution follows a power distribution

Taiki Yamaji, Haruto Ishikawa, Satoshi Takada

Department of Mechanical Systems Engineering, Tokyo University of Agriculture and Technology

Abstract

The rheology of polydisperse granular mixtures whose number of particles follows the power distribution is described by the kinetic theory. We investigate how the viscosity of the system depends on the distribution. We find that the viscosity converges to a constant when the number of species of particles increases. We also show that the viscosity also converges to that of a monodisperse system when the size ratio becomes sufficiently large. These results are validated by performing the molecular dynamics simulations of the corresponding system.

1 はじめに

密度があまり高くない単分散の粉体ガスのレオロジーについては運動論による記述が有効であり [1, 2]、粒子シミュレーションの結果をよく再現できることが知られている [3, 4]。一方、現実の系は多かれ少なかれ異なるサイズの粒子から成る。このような系を記述するためには多分散に対応した運動論を構築することが必要となる。幸い、この場合においても理論の構築は進んでいるものの [2, 5]、粒子の分散が大規模に渡る系での議論は筆者らが知る限りあまりない。しかしこのような系、特に粒子分布が冪乗則に従う系は自然界においてはしばしば見られる [6, 7]。そこで本研究においては、多分散系の理論について復習するとともに、具体的に系が冪分布に従う場合

のレオロジーを議論する。

2 モデル

図 1 のように、3 次元系において質量 m_i 、直径 σ_i で決まる粒子が $M(> 1)$ 種類あると考える。ここで、 $\sigma_1(\equiv \sigma) > \sigma_2(\equiv \alpha\sigma) > \dots > \sigma_M(\equiv \alpha^{M-1}\sigma)$ および $m_1(\equiv m) > m_2(\equiv \alpha^d m) > \dots > m_M(\equiv (\alpha^{M-1})^d m)$ であると仮定する ($\alpha < 1$)。¹また、これらの粒子が直径の $-\beta$ 乗 ($\beta > 0$) に比例した数密度比 $\nu_i \sim (\sigma_i/\sigma)^{-\beta} = \alpha^{-(i-1)\beta}$ で存在しているとす。また系全体の粒子の充填率を φ と置くことにする。

¹本来、多分散系の連続極限を取るとこの α は不要となる。しかしここでは議論を簡単にするためサイズを有限の種類に離散化させたときにサイズを特徴づける量として導入している。

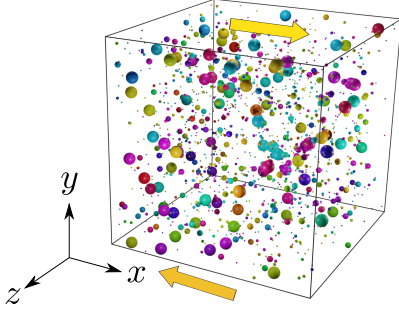


図 1: サイズ比 $\alpha = 1/2$ で $M = 4$ 種類の粒子が分散している場合の系の典型的なスナップショット。矢印は剪断の方向を示す。

種類 “ i ” と “ j ” の粒子が衝突する際にはねかえり係数を e_{ij} とすると、衝突後の粒子 1 (種類 “ i ”) と粒子 2 (種類 “ j ”) の速度 $\mathbf{v}_1^{(i)'}$ および $\mathbf{v}_2^{(j)'}$ は衝突前の速度 $\mathbf{v}_1^{(i)}$ および $\mathbf{v}_2^{(j)}$ を用いて、 $\mathbf{v}_1^{(i)'}$ $= \mathbf{v}_1^{(i)} - \mu_{ji}(1 + e_{ij})(\mathbf{v}_{12}^{(ij)} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}})\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ および $\mathbf{v}_2^{(j)'}$ $= \mathbf{v}_2^{(j)} + \mu_{ij}(1 + e_{ij})(\mathbf{v}_{12}^{(ij)} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}})\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ と記述される。ここで $\mathbf{v}_{12}^{(ij)} \equiv \mathbf{v}_1^{(i)} - \mathbf{v}_2^{(j)}$ 、 $\mu_{ij} \equiv m_i/(m_i + m_j)$ であり、 $\hat{\boldsymbol{\sigma}} = (\mathbf{r}_2^{(j)} - \mathbf{r}_1^{(i)})/|\mathbf{r}_2^{(j)} - \mathbf{r}_1^{(i)}|$ は粒子 1 と 2 を結ぶ単位法線ベクトルである ($\mathbf{r}_1^{(i)}$ と $\mathbf{r}_2^{(j)}$ は粒子 1 と 2 の位置ベクトル)。

これらの条件の下で、各粒子は運動方程式

$$\frac{d\mathbf{r}_k^{(i)}}{dt} = \frac{\mathbf{p}_k^{(i)}}{m_i} + \dot{\gamma} y_k^{(i)} \hat{\mathbf{e}}_x, \quad (1a)$$

$$\frac{d\mathbf{p}_k^{(i)}}{dt} = \mathbf{F}_k^{\text{imp}} - \dot{\gamma} p_{k,y}^{(i)} \hat{\mathbf{e}}_x, \quad (1b)$$

に従って運動する。ここで、 $\mathbf{p}_k^{(i)} \equiv m_i \mathbf{V}_k^{(i)} = m_i(\mathbf{v}_k^{(i)} - \dot{\gamma} y_k^{(i)} \hat{\mathbf{e}}_x)$ 、 $\dot{\gamma}$ は剪断率であり、 $\mathbf{F}_k^{\text{imp}}$ は番号 k の粒子に作用する衝突由来の撃力、 $\hat{\mathbf{e}}_x$ は x 軸方向の単位ベクトルである。また、運動論の結果の妥当性を調べるためにシミュレーションも行った (付録 A)。ここで、パラメータとしては $d = 3$ 次元、粒子数 $N = 1000$ 個、充填率 $\varphi = 0.01$ を選び、無次元剪断率については $\dot{\gamma}^* (\equiv \dot{\gamma} \sqrt{m/k}) = 1.0 \times 10^{-3}$ (k は粒子のバネ定数) を用いている。

3 運動論

運動方程式は以下の Boltzmann 方程式

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} - \dot{\gamma} V_{1,y} \frac{\partial}{\partial V_{1,x}} \right) f_i(\mathbf{V}_1, t) = \sum_j J_{ij}[\mathbf{V}_1 | f_i, f_j], \quad (2)$$

にマップできることが知られている [2, 8, 9, 10, 11]。以下では $d = 3$ 次元を考え、表記を簡単にするため

粒子の種類を表す上付き文字は省略し、 $f_i(\mathbf{V}, t)$ は種類 “ i ” の粒子の速度分布関数とする。また、右辺の衝突項は

$$J_{ij}[\mathbf{V}_1 | f_i, f_j] = \sigma_{ij}^2 \int d\mathbf{V}_2 \int d\hat{\boldsymbol{\sigma}} \Theta(\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{V}_{12}) (\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{V}_{12}) \times \left[\frac{f_i(\mathbf{V}_1'', t) f_j(\mathbf{V}_2'', t)}{e_{ij}^2} - f_i(\mathbf{V}_1, t) f_j(\mathbf{V}_2, t) \right], \quad (3)$$

で与えられる。ここで \mathbf{V}_1'' 、 \mathbf{V}_2'' は衝突後に速度が \mathbf{V}_1 、 \mathbf{V}_2 となる場合の衝突前の速度である。Boltzmann 方程式 (2) の両辺に $m_i V_\alpha V_\beta$ をかけ、それを速度で積分することにより、以下の応力テンソルの時間発展方程式を得る [8, 11] :

$$\frac{\partial}{\partial t} P_{\alpha\beta}^{(i)} + \dot{\gamma} (\delta_{\alpha x} P_{y\beta}^{(i)} + \delta_{\beta x} P_{y\alpha}^{(i)}) = - \sum_{j=1}^M \Lambda_{\alpha\beta}^{(ij)}. \quad (4)$$

ここで $P_{\alpha\beta}^{(i)} \equiv \int d\mathbf{V} m_i V_\alpha V_\beta f_i(\mathbf{V}, t)$ は種類 “ i ” の粒子についての応力テンソル、 $\Lambda_{\alpha\beta}^{(ij)} \equiv - \int d\mathbf{V} m_i V_\alpha V_\beta J_{ij}[\mathbf{V} | f_i, f_j]$ は衝突モーメントである。なお、(4) 式はこのままでは閉じていない方程式となっているため、Grad 展開を用いることで式を閉じさせることにする [2, 8, 9, 10, 11]。この系においては (Bagnold 則に従い) 無次元化された温度 $\theta_i \equiv T_i/(m\sigma^2\dot{\gamma}^2)$ 、異方温度 $\Delta\theta_i \equiv (P_{xx}^{(i)} - P_{yy}^{(i)})/(n_i m\sigma^2\dot{\gamma}^2)$ 、および剪断応力 $\Pi_{xy}^{(i)*} \equiv P_{xy}^{(i)}/(n_i m\sigma^2\dot{\gamma}^2)$ (n_i は種類 “ i ” の数密度) の時間発展を考えれば十分である [8, 11]。ここで $\tau \equiv \dot{\gamma} t$ によって無次元化した時間を導入することにより、系のレオロジーは $3M$ 個の連立方程式 [8, 11]

$$\frac{\partial}{\partial \tau} \theta_i = -\frac{2}{3} \Pi_{xy}^{(i)*} - \sum_{j=1}^M C_{ij} \tilde{\Lambda}_{\alpha\alpha}^{(ij)} \theta_j^{3/2}, \quad (5a)$$

$$\frac{\partial}{\partial \tau} \Delta\theta_i = -2 \Pi_{xy}^{(i)*} - 2 \sum_{j=1}^M C_{ij} \theta_j^{3/2} (\tilde{\Lambda}_{xy}^{(ij)} \Delta\theta_i - \tilde{\Lambda}'_{xy}{}^{(ij)} \Delta\theta_j), \quad (5b)$$

$$\frac{\partial}{\partial \tau} \Pi_{xy}^{(i)*} = - \left(\theta_i - \frac{1}{3} \Delta\theta_i \right) - 2 \sum_{j=1}^M C_{ij} \theta_j^{3/2} (\tilde{\Lambda}_{xy}^{(ij)} \Pi_{xy}^{(i)*} - \tilde{\Lambda}'_{xy}{}^{(ij)} \Pi_{xy}^{(j)}), \quad (5c)$$

により記述される。ここで、 $\theta \equiv \sum_i \nu_i \theta_i$ は系全体の温度であり、 C_{ij} は $m_{ij} \equiv m_i m_j / (m_i + m_j)$ および $\sigma_{ij} \equiv (\sigma_i + \sigma_j)/2$ を用いて

$$C_{ij} \equiv 8 \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\nu_j}{\sum_\ell \nu_\ell (\sigma_\ell / \sigma)^3} \frac{m_{ij}}{m} \left(\frac{\sigma_{ij}}{\sigma} \right)^2 \varphi (1 + e_{ij}), \quad (6)$$

で与えられる。また、 $\tilde{\Lambda}_{\alpha\alpha}^{(ij)}$ 、 $\tilde{\Lambda}_{xy}^{(ij)}$ 、 $\tilde{\Lambda}'_{xy}{}^{(ij)}$ は $\epsilon_i \equiv m_i\theta/(m\theta_i)$ および $\lambda_{ij} \equiv 2(\mu_{ij}\epsilon_j - \mu_{ji}\epsilon_i)/(\epsilon_i + \epsilon_j) + (\mu_{ji}/2)(3 - e_{ij})$ を用いて、

$$\tilde{\Lambda}_{\alpha\alpha}^{(ij)} \equiv \left(\frac{\epsilon_i + \epsilon_j}{\epsilon_i\epsilon_j} \right)^{3/2} \left[\lambda_{ij} - \frac{\mu_{ji}}{2}(1 + e_{ij}) \right], \quad (7a)$$

$$\tilde{\Lambda}_{xy}^{(ij)} \equiv \frac{\theta_i^{-1}}{\sqrt{\epsilon_i\epsilon_j(\epsilon_i + \epsilon_j)}} \left(1 + \frac{3}{5} \frac{\epsilon_i + \epsilon_j}{\epsilon_i} \lambda_{ij} \right), \quad (7b)$$

$$\tilde{\Lambda}'_{xy}{}^{(ij)} \equiv \frac{\theta_j^{-1}}{\sqrt{\epsilon_i\epsilon_j(\epsilon_i + \epsilon_j)}} \left(1 - \frac{3}{5} \frac{\epsilon_i + \epsilon_j}{\epsilon_j} \lambda_{ij} \right), \quad (7c)$$

と書ける [8, 11]。以下では、(5) 式の定常解を求めることにより系のレオロジーを決定する。なお、この系においては常に Bagnold 則が成立している。

4 レオロジー

本章では前章の枠組みから決定される定常値から得られるレオロジーについて調べていく。以下では、充填率 $\varphi = 0.01$ とし、はねかえり係数が $e_{ij} (\equiv e) = 0.9$ ($i, j = 1, 2, \dots, M$) の場合を考える。

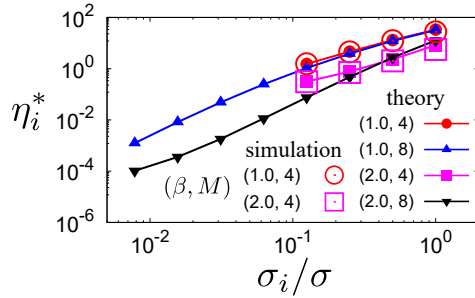


図2: $\alpha = 1/2$ のときにいくつかの (β, M) に対する各サイズ σ_i の粒子の粘性率 η_i ($\eta_i^* \equiv \eta_i/(n_i m \sigma^2 \dot{\gamma})$ は無次元粘性率)。塗りつぶしおよび白抜きマークはそれぞれ理論 (5) およびシミュレーションから得られた結果を示す。

まずは各サイズの粘性率 $\eta_i \equiv -P_{xy}^{(i)}/\dot{\gamma}$ に着目してみる。図2は M および β を変化させたときの粘性率のサイズ依存性である ($\eta_i^* \equiv \eta_i/(n_i m \sigma^2 \dot{\gamma}) = -\Pi_{xy}^{(i)*}$ は無次元粘性率)。この結果は付録 A で説明するシミュレーションの結果ともよく一致している。

さて、ここで系全体の粘性率

$$\eta^{(M)} = \sum_{i=1}^M \eta_i, \quad (8)$$

を考えていく。図3を見ると、粒子の種類 M が十分多くなると粘性率の値は一定の値 $\eta^{(\infty)}$ に収束し、

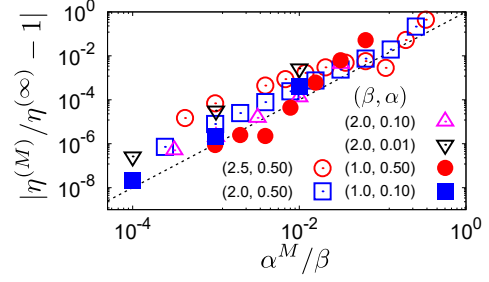


図3: いくつかの (β, α) の組み合わせに対する、種類数 M を変化した際の粘性率 $\eta^{(M)}$ の変化。ここで破線は $(\alpha^M/\beta)^2$ を示す。

その際の収束の様子が近似的に

$$\left| \frac{\eta^{(M)}}{\eta^{(\infty)}} - 1 \right| \sim \left(\frac{\alpha^M}{\beta} \right)^2, \quad (9)$$

で与えられることがわかる。これより、サイズ分散の比が大きい (α が小さい) ほど、また分布の冪 β が小さいほどより少ない種類で一定値に収束していることがわかる。

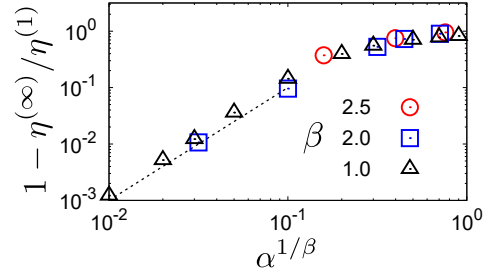


図4: 分布の冪 β をいくつか選んだ時の粘性率 $\eta^{(\infty)}$ のサイズ比 α 依存性。破線は $\alpha^{2/\beta}$ を示す。

図4は、サイズ比 α を変化させた際の粘性率の収束値 $\eta^{(\infty)}$ と単分散系の粘性率 $\eta^{(1)}$ との差をプロットしたものである。ここで、単分散系の粘性率 $\eta^{(1)}$ は

$$\eta^{(1)} = \frac{5(2+e)}{72(1+e)^2(3-e)^3} \sqrt{\frac{5(2+e)}{3(1-e)}} \frac{1}{\varphi} \frac{m}{\sigma} \dot{\gamma}, \quad (10)$$

で与えられる [9]。図4により、サイズ比 α が0に近づくほど、つまり隣り合ったサイズの比が大きくなるほど粘性率は単分散の結果に漸近していく。 α が十分小さくなると $\eta^{(1)}$ との間の相対誤差が

$$1 - \frac{\eta^{(\infty)}}{\eta^{(1)}} \simeq \alpha^{2/\beta}, \quad (11)$$

の形で小さくなっており、ユニバーサルカーブの存在を示唆している。この傾向は、系全体の粘性率の

うち、大きな粒子の影響が支配的になっており [11]、隣り合ったサイズの比が大きくなる極限ではほぼ単一の最大サイズの粒子から粘性率が決まってしまうためであると考えられる。一方、多分散系の連続極限 ($\alpha \rightarrow 1$) においては $\eta^{(\infty)}/\eta^{(1)} \rightarrow 0$ という結果になり、小さな粒子が存在したほうが系の粘性率が減少するというを示している。ただし、この場合の詳細については今後のさらなる研究が必要である。

5 まとめ

本研究では粒子数が冪分布に従う場合の多分散粉体ガスのレオロジーを運動論を用いて記述した。運動論により求めた、各サイズの粒子の粘性率の分布がシミュレーション結果をよく再現すること、系全体の粘性率は粒子の種類を増やすと一定値に収束していくこと、さらにその収束値はサイズ比が大きくなるにしたがって単分散系の結果に収束する一方、連続極限においては粘性率が小さくなるという結果を得た。一方、これらの結果は系の連立方程式を数値的に解くことにより得られたもので、結果を完全には理論的に証明できたわけではない。今後は本研究で得られた知見を基に、それらの方程式を満たす定常解を解析的に求めることを試みたい。

本稿では稀薄系にのみ着目した議論を行った。今後の方向性として、まずは有限濃度の系への理論の拡張などが考えられる。これについては単分散有限濃度系の解析 [12] を適用できることが期待される。

謝辞

本研究は JSPS 科研費 JP20K14428 および JP21H01006 の助成を受けたものです。

A 粒子シミュレーション

本付録では、運動論の結果の妥当性を調べるために実行した粒子シミュレーションの概要について述べる。シミュレーションにおいてはバネとダッシュポットで与えられるソフトコア系の相互作用を考え、これを考慮した運動方程式 (1) を時間刻み Δt で積分することで各時刻の粒子の位置および速度を計算していく。また、充填率を $\varphi = 0.01$ に固定し、全粒子数を $N = \sum_i N_i = 10^3$ (種類 “ i ” の粒子数を N_i と置いた) とした。さらにシステムサイズについては $L = [\sum_i N_i \pi \sigma_i^3 / (6\varphi)]^{1/3}$ で決定した。

図 2 にシミュレーションにより求めたサイズに依

存した各種類の粒子の粘性率をプロットしている。これらの結果は運動論の結果をよく正当化していることがわかる。しかしながら現実の系のように多分散の連続極限を再現するためには $M \rightarrow \infty$ とする必要がある、今回行った $M = 4$ のシミュレーションでは不十分である。ただし、粒子サイズが多岐にわたる ($M \gg 1$) と、それに対応して粒子数 N を多く用意する必要があり、計算時間が増大する。これについては手法についての改良が今後必要となる。

参考文献

- [1] N. V. Brilliantov and T. Pöschel, *Kinetic Theory of Granular Gases* (Oxford University Press, New York, 2004).
- [2] V. Garzó, *Granular Gaseous Flows — A Kinetic Theory Approach to Granular Gaseous Flows* — (Springer Nature, Cham, 2019).
- [3] N. Mitarai and H. Nakanishi, *Phys. Rev. E* **75**, 031305 (2007).
- [4] S. Chialvo and S. Sundaresan, *Phys. Fluids* **25**, 070603 (2013).
- [5] V. Garzó, J. W. Dufty, and C. M. Hrenya, *Phys. Rev. E* **76**, 031303 (2007).
- [6] N. Brilliantov, P. L. Krapivsky, A. Bodrova, F. Spahn, H. Hayakawa, V. Stadnichuk, and J. Schmidt, *Proc. Natl. Acad. Sci.* **112**, 9536 (2015).
- [7] H. Stünitz, N. Keulen, T. Hirose, and R. Heilbronner, *J. Struct. Geol.* **32**, 59 (2010).
- [8] J. M. Montanero and V. Garzó, *Physica A* **310**, 17 (2002), *Mol. Sim.* **29**, 357 (2003).
- [9] A. Santos, V. Garzó, and J. W. Dufty, *Phys. Rev. E* **69**, 061303 (2004).
- [10] H. Hayakawa and S. Takada, *Prog. Theor. Exp. Phys.* **2019**, 083J01 (2019).
- [11] S. Takada, H. Hayakawa, and V. Garzó, arXiv:2107.10522.
- [12] S. Takada, H. Hayakawa, A. Santos, and V. Garzó, *Phys. Rev. E* **102**, 022907 (2020).