
修士論文 (1993年度)

粘性流体中における分散多体系の動的挙動

東北大学大学院理学研究科

物理学第二専攻

市來健吾

(1994年3月25日受理)

概要

本研究では、「粘性流体中における分散多体系の動的挙動」として、粉体流動層の数値シミュレーションと、粘性流体中の多粒子系の平均沈降速度の理論に関して行なった。これらは、「粉体」の現象に対する実験的側面と、解析的側面として捉えることが出来る。両者の間に存在する溝を埋めることは、非常に重要であり、粉体の引き起こす現象の、物理的理解には欠くことの出来ない課題である。残念ながら、本研究において、この目的は達せられなかった。しかし、現在もこの文脈で研究を継続中である。はじめに、本論文の概要をまとめておく。

まず、粉体流動層の数値シミュレーションについて述べる。これまで、粘性流体中の多粒子のダイナミクスに関する研究は、流体力学的な相互作用の取り扱いが複雑であったため、コロイド粒子系に対して幾つか行なわれていた程度である [1]。今回、コロイドより粒子のスケールが大きな系に対して、同様の手法を用いてシミュレーションを行なうことが出来た。この場合は、熱的なランダム力よりも、粒子の慣性の効果の方が重要であり、この効果を導入して計算を行なった。

シミュレーションの結果から、粒子の速度分布が、Maxwell 分布ではなく、指数分布的であることが得られた。同様の分布は、乱流の中でも「ハード乱流」と呼ばれる現象に対しても得られているものである。以上のことから、粉体粒子の速度場と、乱流との関連についての研究が待たれる。

次に、本研究のもう一つの課題である、粘性流体中の多粒子系の平均沈降速度の理論に関して述べる。シミュレーションの定式化でも問題になる流体力学的な相互作用の長距離性による発散の問題や、流体力学的な多体相互作用の複雑さから、これまでの沈降速度の理論は、Batchelor (1972) [2] での希薄極限での扱いに限られていた。高濃度への拡張の試みの一つとして Brady & Durlofsky [3] による方法を紹介し、彼らの方法の問題点を明らかにする。次に本研究で行なった Stokesian Dynamics の方法の沈降速度の問題への適用について紹介する [4]。その結果、Brady & Durlofsky の結果を改善し、希薄極限で Batchelor とほぼ等しい結果が得られた。

目次

第1章 Introduction	735
1.1 はじめに	735
1.2 粉体について	735
1.2.1 砂丘のパターンのダイナミクス	736
1.2.2 粉体振動層	736
1.3 粉体流動層	736
1.3.1 流体力学的移動境界値問題	737
1.3.2 離散要素法	738
1.3.3 Boltzmann 方程式による手法	738
1.3.4 二流体モデル	738
1.3.5 本研究の位置付け	738
1.3.6 本研究の結論	739
1.4 本論文の構成	739
第I部 粉体流動層の数値シミュレーション	740
第2章 シミュレーションの方法について	740
2.1 はじめに	740
2.2 粉体粒子系	743
2.3 具体的な parameter について	746
2.4 シミュレーションにおける仮定	748
第3章 流体力学的相互作用	749
3.1 はじめに	749
3.2 有限粒子系	750
3.2.1 定式化	750
3.2.2 2粒子問題	753
3.2.3 計算結果	756
3.2.4 議論	757
3.3 無限粒子系	760
3.3.1 周期境界条件	760
3.3.2 計算法の確認	761
3.4 固定粒子の導入	762

市來 健吾

目次

第4章 シミュレーション結果	763
4.1 はじめに	763
4.2 スラッグ	763
4.3 気泡と対流	764
4.4 固定粒子の効果	765
4.5 粒子の速度分布	767
第II部 粘性流体中の多粒子系の基礎的性質	768
第5章 平均沈降速度	768
5.1 意義	768
5.2 周期格子を組む粒子系	768
5.3 ランダムな配置の粒子系	769
5.3.1 Batchelor の練り込み	769
5.3.2 希薄極限での沈降速度	776
5.4 物理的解釈	778
5.5 高濃度への拡張	780
5.5.1 Brady&Durlofsky のアプローチ	780
5.5.2 Stokesian Dynamics の方法	781
第III部 まとめ	786
第6章 シミュレーションについての議論	786
6.1 結果と解析	786
6.2 課題	787
第7章 沈降速度についての議論	788
7.1 結果と課題	788
謝辞	789
参考文献	789

第1章

Introduction

1.1 はじめに

一般に、「粘性流体中における分散多体系」といった場合、それは、コロイド粒子のような小さい粒子から、粉体と呼ばれる、比較的大きな粒子からなる系を指す。コロイド粒子とは、普通 $1[\text{nm}] \sim 1[\mu\text{m}]$ 程度の粒子を指す。粉体については、後の 1.2 節で詳しく紹介するが、一般には、タバコの煙から、火砕流のように、非常に広い範囲の大きさの粒子から成る系を指す。粉体の中で、粒子が大きい場合は、流体の効果が無視できるようになる。パチンコの玉や、ビリヤードのボールなどは、まさにその例である。このような系は、「粘性流体中における分散多体系」とは呼べないものであり、本研究の直接の対象ではない。

ここでは粉体を、「粘性流体中における分散多体系」の中での、コロイド粒子系に対するものとして、次のように定義することにする。つまり、コロイド粒子系を、ランダム力が支配的な系であるのに対して、粉体を、ランダム力が無視できる系という意味で用いることとする。従って、コロイド粒子系には、熱平衡状態が存在するが、粉体には存在しないと、言い換えることが可能である。

希薄なコロイド系では、流体の効果も小さく、純粋な Brown 粒子系と見做し得る。つまり、コロイド粒子のダイナミクスは、拡散によって支配される。高濃度では、粒子間の多体相互作用が重要になってくる。この粒子の多体相互作用は、流体を介しての相互作用であり、基本的には流体に対して、粒子表面での境界値問題を解いて得られるものであり、それ自体非常に複雑である¹。その取り扱いは、後述する Brady *et al.*(1988) [1] の Stokesian Dynamics と呼ばれる手法によって、効率的に計算することが出来る。コロイド粒子系は基本的に熱平衡にある系であり、その取り扱いは、これまでの多くの歴史がある。また、高濃度での流体力学的な効果も含めた解析など、近年、大きく発展している [5]。

一方、粉体系は、基本的に熱平衡からはなれた系であり、その統計力学的な性質は、解明されていない。

この文脈から、本研究の課題である「粘性流体中における分散多体系の動的挙動」として、大きく二つの問題を設定する。一つは、熱平衡から離れた状態にある系である、粉体粒子系の動的な性質の研究。もう一つは、特に高濃度で重要になってくる流体力学的な相互作用の理解に向けて、基本的であるが、未だ完全に理解されていない、「多粒子系の平均沈降速度の問題」である。

本論にはいる前に、聞き慣れない「粉体」と呼ばれる系について、これまでの歴史と、本研究の位置付けについて概観しておく。

1.2 粉体について

本研究で扱う対象である「粉体」という系について、その特徴的な現象を紹介する。

¹付録を参照。

粉体とは、粉の集団のことである。粉といっても、一般には数 100Å 程のタバコの煙から、数メートルの岩石までと、様々なスケールを含む。従って、粉体は一見単純である。しかし、その単純さにも拘らず、多様な現象を引き起こすことが知られている。例えば、タバコの煙の複雑な挙動や、地震などの際に生じる地盤の流動化現象、砂丘の表面に発生する風紋など。研究の対象としても、容器の中に粉を入れ、底から流体を流したり、容器自体を振動させることにより起こる流動化現象など、枚挙に暇がない。

この分野は、工学の世界では歴史は長く、粉体の起こす様々な現象を、定量的に再現することも出来ている。

近年、粉体が、物理の領域でも、興味の対象になってきた [6, 7]。これは、粉体が、非線形非平衡系であり、物理に於ける未開拓の領域のまたとない対象である、との認識によるものであろう。実際、この分野で活躍している物理学者の多くは、粉体を通して、物理的に何か新しいものを見出そうとしている。

現在日本で、物理学者の研究の対象となっている粉体に関する現象は、大きく分けて次の 3 つである。

- 砂丘のパターンのダイナミクス
- 粉体振動層
- 粉体流動層

最後のものが、本研究の主題とするものであるが、それに触れる前に、はじめの 2 つについても、簡単に紹介しておく。

1.2.1 砂丘のパターンのダイナミクス

風によって、砂丘表面に引き起こされる風紋のパターンも、粉体（この場合は砂）のつくり出す現象である。この問題は、気体の水平方向の流れによる、粉体集団の表面の不安定性の問題とも関連がある。この現象は、西森、大内両氏が中心となって [8-11]、精力的に研究が行なわれている。そこでは、理論的なモデルが、シンプルに構成されている。しかし、得られている現象は、風紋のパターンや、砂丘の形成など、非常に多様なものとなっている。また、dislocation の運動や、パターンソリトンの振舞いなど、興味深い問題も数多くあり、これからの発展が期待される。

1.2.2 粉体振動層

²容器の中に粉を入れ、その容器を微小に振動させたときも、容器の中の粉は、興味深い振舞いをする。この現象は、田口氏ら [19, 20] により様々な研究が行なわれ、粉体粒子の対流現象が示され、また粒子の挙動が乱流的であることなどが分かってきている。一見単純なこの現象も、流体のようなものを導入していないため、粉体集団の散逸の起源をどこに求めるかという、基礎的な困難性がある。つまり、散逸がないと容器を振動させることにより粉体系に供給されるエネルギーのために、粒子が発散してしまう。また、剛体球モデルは、数値的に不安定であり、何らかの弾性的なモデルが必要となっている。更に、常に系自身が振動しており、この系の流体的解析も難しいために、現象をどう解釈、解析するべきかが、大きな問題となっている。

1.3 粉体流動層

次に、本研究での対象である、粉体流動層の現象について紹介する。粉体流動層とは、典型的には、容器の中に粉を詰めて、容器の底から空気や水などの流体を流した時の、粒子と流体からなる混相流の系で

²この分野に関する参考文献をまとめておく。size segregation については [12-16]、通常の実験については [17, 18]、数値シミュレーションは [19-22] レビューとしては [23, 24] などがある。

ある。流入する流体の速度を変化させると、この系は、様々な状態に転移していく。流体を気体として、実際に起こる現象を簡単に説明する。まず、気体が流れていない場合、粉体は、重力のために容器の底に固まっている。(固体に似た状態) 気体を少しずつ流していくと、ある速度を越えたところで、粉体が流動化する。このまま速度を上げていくと、粉体は一様に膨張していくが、あるところで、気泡が発生しはじめる。(一様性の破れ) さらに速度を上げていくと、気泡はだんだん大きくなり、スラグと呼ばれる膜状の空隙層が出現し、更には、乱流状態に遷移する。なお高速な気体を流入させると、気体の中にわずかに粉体粒子が浮かんだ状態になり、最後には、一様性を回復する。このように、単純な系でありながら、複雑で物理的に興味深い現象を引き起こすことが、物理学者の注目を惹く原因となっている。

このように、粉体流動層は流体によって起こされる現象であり、粉体振動層など他の現象と比べて、流体力学的相互作用が重要な役割を果たしている現象であると思われる。このことから、本研究では、この現象を第一の対象として扱う。

粉体流動層の実験では、その粒子の大きさは、数10ミクロンから数ミリぐらいであることが多い。そのため、重力や、流体から受けるドラッグの効果が大きく、ブラウン運動などの熱運動は、粒子にほとんど影響しない。(ここが、より小さいコロイド粒子など、いわゆるブラウン粒子と最も異なる点である。コロイドの場合、その大きさはせいぜい数ミクロン程度であり、ブラウン運動の影響が支配的である。) 従って、粉体流動層には、そもそも熱平衡状態が存在しないのである。先にあげた気泡流動は、現象としては液体の沸騰に非常に類似しているが、粉体系の転移は熱的相転移ではないという点で、そのメカニズムは、全く異なるはずである。そのため、粉体流動層の物理的な取り扱い、未だ確立したものはなく、その解析が著しく混乱したものとなっている。

近年のコンピュータの性能の向上にともなって、粉体の研究に、数値解析というアプローチが可能となった。コンピュータを用いて、直接粉体粒子系をシミュレートすることで、従来知られていなかった知見を得ることができる。また、粉体系には挙動を特徴付ける、よい統計量の同定は不十分である。そのため、コンピュータによる数値実験によって、粉体そのものの挙動を観察することが、現時点では重要となっている。従って、コンピュータによる粉体流動層の研究は、時宜に叶ったものであり、現在急速に研究が盛んになりつつある。

現在、粉体流動層のシミュレーションに用いられる数値的な方法には、いくつかある。それらは、扱っているスケールから、2つに大別できる。つまり、粉体粒子を、粒として扱うか、連続体として扱うかである。その結果、対象とする現象のスケールも、自ずから変わってくる。前者としては、本研究で筆者の用いた方法と、「離散要素法」と呼ばれる方法とがある。後者には、Boltzmann 方程式を用いた方法と、「二流体モデル」とがある。これらについて、その特徴や、メリット、デメリットなどを、簡単に紹介する。

1.3.1 流体力学的移動境界値問題

粉体流動層の問題では、一般に粒子は、重力や流体からのドラッグ、粒子間相互作用を受ける。しかし、流動化現象を引き起こす最も重要な原因は、流体によるドラッグである。このことから、流体の効果、特に流体を介しての粒子間の多体効果が、非常に重要であることが分かる。この流体力学的相互作用は、本来、粒子表面での境界値問題を解いて得られるものである。この相互作用を正當に評価しようとするアプローチが、この方法の特徴である。この方法ははじめ、コロイド粒子系のシミュレーション手法として開発されたものである。そこでこの流体力学的相互作用の扱いは、粉体系に対しても、そのまま適用することが可能であると考えられる。この場合、流体力学的な相互作用に関しては、現象論的パラメータを一切導入する必要がない。但し、この方法は大変複雑で、現在、粒子数が100個程の規模の計算しか出来ていない。また、この手法は、流体の慣性が効かないという仮定(低 Reynolds 数)のもとで定式化しており、余り大きい粉体粒子の記述には適さないことは、念頭におくべきである。

1.3.2 離散要素法

離散要素法は、工学の分野で発達したもので³、もともと、流体の効果のない多粒子系に対して、粒子の接触による多体効果を記述するために開発されたものである。具体的には、粒子間の接触を表すために、バネやダッシュポット、スライダーと呼ばれるメカニカルなモデルを、接触している粒子の間に導入している。また、流体の運動は、ある種の平均場近似を用いて表している。この方法は、田中、辻氏を中心に開発され [26-29]、その計算規模は、粒子数で数十万個程度が可能であり、現象も非常に良く再現している。その意味では、ここで述べた方法の中で、一番成功を収めており、最もオーソドックスな手法となっている。しかし、その記述はあくまで現象論的であり、用いるモデルの物理的意味などの問題が残る。また、各種パラメータを実験に合うように選んでいるため、純粋な数値実験とは呼べない側面もある。更に、現象は再現できるが、その現象の物理的な本質を、何も明らかにしておらず、物理的手法としてみた場合、多くの不満が残る。

1.3.3 Boltzmann 方程式による手法

この Boltzmann 方程式による手法 [30-35] は、気体運動論のフレームワークで、粉体の挙動を確率的に扱うものである。(従って、この手法は固気混相流のような粒子間衝突が重要な場合にのみ有効である。) 次に述べる、二流体モデルとの関連もあり、この手法の発展は期待される。しかしこの方法は、幾つかの本質的な問題を含んでいる。まず、(1) 粉体粒子のみに着目し、流体の存在を考えていない。(2) 希薄な場合に有効な Boltzmann 方程式は、高濃度な粉体粒子系には適さない。(3) この手法によって、次に紹介する二流体モデルでの、幾つかのパラメータを決定することは、一応可能である。しかし、二流体モデルと切り離して粉体系を記述することは不可能である。(4) この方法からは、流体と粒子の間の相互作用を表す、ドラッグ係数を与えることが出来ない。つまり、このアプローチが、他の現象論的な方法の基礎付けにはなり得ない。(5) 更に、本論で明らかにした通り、粉体流動層では、粉体粒子集団の速度分布は、正規分布からかけ離れたものであることが分かる。従って、気体運動論独特の性質を利用している点は、問題がある。

これらの点を勘案すると、この手法が、粉体流動層の問題の、基礎的なアプローチとは言い難い。

1.3.4 二流体モデル

二流体モデルは、その名の通り、粒子も流体として取り扱う方法である。この方法では、いくつかの基礎的な仮定のもとに、非常にシンプルなモデルを構成している。この手法は、先の Boltzmann 方程式の手法や、その他の現象論によって決められたパラメータの値を用いることによって、工学者によって広く用いられている。その歴史は、離散要素法に比べても古く、1つの、極めてオーソドックスな手法といえる。更に、粉体の問題を離れても、混相流の基礎的問題を扱うモデルとして、汎用性に富み、多くの物理現象を記述し得ることが期待される。実際に最近、早川、小松ら [36-42] により、混相流モデルを系統的に調べることによって、1次元の場合に、粒子密度のソリトンの振舞いなど、非常に興味深い現象を予見している。これらは、粉体流動層と切り離しても、興味深い対象である。ただ、このモデルも、現象論であり、パラメータ等の選び方などの基礎付けは必要である。また、現実の粉体流動層との対応を考える際には、粒子の果たす役割がはっきりしないなど、不十分な点がある。

1.3.5 本研究の位置付け

以上、粉体の現象のうち、特に粉体流動層に対して、これまで行われてきた物理的解析について概観してきた。そこで分かったように、粉体流動層の現象論的なアプローチについては、非常に活発に行なわ

³工学的な粉体のシミュレーション法のレビューは、[25]を参照。

れており、成果を上げてきたと言えよう。しかし、物理的観点に立つと、それら現象論のもつ、理論の基礎的な土台に対する曖昧さが残る。特に、流体と粒子の相互作用については、その複雑さのため、これまで避けられていたようである。

物理的に、現象論の基礎となり得る解析を行なうことが、本研究のそもそもの動機である。そのため、ここでは、粉体集団に内在する複雑性（例えば、粒子間の相互作用、混合によって生じる化学反応、粒径分布や形状の分散によって引き起こされる、工業的には重要であるが、複雑である側面）を捨象し、特に重要であると思われる機構に着目し、解析を行なう。当然、系を理想化し過ぎて、現実の現象に結び付かないと言う、否定的な結果を生むかも知れない。しかし、現在発展途上にあるこの分野にとっては、何が否定的で、何が重要であるかを特定することは、今後の発展には欠かせないものである。

1.3.6 本研究の結論

本研究のシミュレーション結果から、粉体粒子の速度分布が、Maxwell 分布ではなく、指数分布的であることが得られた。同様の分布は、乱流の中でも「ハード乱流」と呼ばれる現象に対しても得られているものである。以上のことから、粉体粒子の速度場と、乱流との関連についての研究が待たれる。

1.4 本論文の構成

本論文の構成は次のとおりである。

第 I 部では、粉体流動層の数値シミュレーションについて述べる。第 2 章で、手法について概観する。ここでは、流体力学的な効果や、粒子の慣性の寄与、粒子間の剛体的な接触などについて考察し、シミュレーションする上で用いた仮定を明らかにする。続く第 3 章では、本研究で用いたシミュレーション手法において重要な役割を果たす、流体力学的相互作用の取り扱いについて述べる。ここでは、有限粒子系と無限粒子系の性質の違いが示され、粉体流動層のモデルには、無限系を考慮しなければならないことが分かる。第 4 章では、実際の計算結果と解析結果について示す。

第 II 部では、粘性流体中の多粒子系の基礎的性質に関する解析について述べる。第 5 章では、平均沈降速度の問題を扱う。この問題は、流体力学的な相互作用の長距離性のため、単純ではない。この平均沈降速度の関係式は、二流体モデルなどの粉体流動層の現象論で、粉体粒子相と流体の間の相互作用を表すもので、非常に重要である。長距離性のために起こる発散の問題の解決と、高濃度領域への拡張について、これまでの成果をまとめ、残された課題について触れる。

第 III 部で、本研究の結論として、ここで得られた「粉体」の物理的な理解についてまとめ、残された課題について触れる。第 6 章では、シミュレーションについて、これまでの成果と、残された課題について述べる。第 7 章では、沈降に関するまとめを行なう。

4。

⁴本論で用いた低 Reynolds 数の粘性流体の基礎理論に関しては、少し古いのが Happel & Brenner [43] がある。また最近書かれた、この分野の基礎理論と、数値的取り扱いに詳しい、Kim & Karrila [44] がある。

第 I 部 粉体流動層の数値シミュレーション

第 2 章

シミュレーションの方法について

2.1 はじめに

まずはじめに、一般的な流体中の多粒子系 (suspension) を考えよう。この系は、微視的に見て、流体分子と、それに比べて粒子サイズが十分大きな粒子 (コロイドや粉体など) の、2 種類の粒子から成る。以下では、コロイド粒子系 (Brown 粒子系) の統計力学の取り扱いに於ける、Langevin equation を記述するようなスケールで議論を行なう。この場合、流体分子としての粒子は、連続体 (流体) として取り扱うことが出来る。(以下、粒子といった場合は、大きな粒子を指すこととする。) 従って、粒子の運動方程式 (Langevin equation) は、次のように書ける。

$$m_{\alpha} \frac{d}{dt} \mathbf{U}^{(\alpha)}(t) = \mathbf{F}_f^{(\alpha)} + \mathbf{F}_g^{(\alpha)} + \mathbf{F}_i^{(\alpha)} + \mathbf{F}_b^{(\alpha)} \quad (2.1.1)$$

ここで、 α は粒子を表す番号である。 m_{α} は α 粒子の mass、 $\mathbf{U}^{(\alpha)}(t)$ は velocity である。(粒子の position は $\mathbf{x}^{(\alpha)}$ とする。) $\mathbf{F}^{(\alpha)}$ は、 α 粒子に働く力で、一般に他の粒子の position や velocity に依存する。 \mathbf{F}_f は、流体から受ける drag force である。 \mathbf{F}_g は、粒子が受ける重力である。 \mathbf{F}_i は、粒子間相互作用による力で、 \mathbf{F}_b は、流体から受ける Brownian force (random force) である。以下、理想化のため (簡単のため)、粒子の大きさは同じである、monodisperse suspension を考える。

次のような notation を定義しておく。

$$\mathbf{U} = \begin{bmatrix} \mathbf{U}^{(1)} \\ \vdots \\ \mathbf{U}^{(N)} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{x} = \begin{bmatrix} \mathbf{x}^{(1)} \\ \vdots \\ \mathbf{x}^{(N)} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{F} = \begin{bmatrix} \mathbf{F}^{(1)} \\ \vdots \\ \mathbf{F}^{(N)} \end{bmatrix} \quad (2.1.2)$$

この notation を使うと、Langevin equation (2.1.1) は、

$$m \frac{d}{dt} \mathbf{U}(t) = \mathbf{F}_f + \mathbf{F}_g + \mathbf{F}_i + \mathbf{F}_b \quad (2.1.3)$$

と書ける。

この流体中の多粒子系には、次のような無次元量が定義できる。

- Péclet 数 : $Pe = \frac{6\pi\mu a^2 \mathcal{V}}{kT}$
- Reynolds 数 : $Re = \frac{\rho_f a^3 \mathcal{V}^2}{\mu a^2 \mathcal{V}} = \frac{\rho_f a \mathcal{V}}{\mu}$
- Stokes 数 : $St = \frac{m \mathcal{V}^2}{6\pi\mu a^2 \mathcal{V}} = \frac{2}{9} \frac{\rho_p a \mathcal{V}}{\mu}$

ここで、 a は粒子の半径で、 ρ_p は粒子の密度である。 μ は流体の粘性率、 ρ_f は流体の密度で、 \mathcal{V} は系の特徴的速度で、例えば、粒子の沈降速度のようなものである。この無次元量は、エネルギーの比として理解できる。Péclet 数は、drag force によるエネルギー ($6\pi\mu a^2 \mathcal{V}$) と、熱エネルギー (kT) の比である。Reynolds 数は、流体の運動エネルギー ($\rho_f a^3 \mathcal{V}^2$) と、ドラッグ (drag force) によるエネルギー ($\mu a^2 \mathcal{V}$) の比である。Stokes 数は、粒子の運動エネルギー ($m \mathcal{V}^2$) と、ドラッグによるエネルギーの比である。この Stokes 数は、二流体モデルの立場では、系の実効 Reynolds 数を表現するものと考えられる。

次に、それぞれの力についてみていく。 \mathbf{F}_g は、流体から受ける浮力を考慮して、次のように書ける。

$$\mathbf{F}_g = -m'g\mathbf{E}_z \quad (2.1.4)$$

ここで、 $m' = \frac{4}{3}\pi a^3(\rho_p - \rho_f)$ である。また、重力は $-z$ 方向であるとした。 \mathbf{e}_z は z 方向の unit vector である。 \mathbf{E}_z は、unit vector \mathbf{e}_z を notation (2.1.2) 式のように拡張したものである。

\mathbf{F}_i は一般に、charged particles の電気的な相互作用など、いろいろな場合が考えられる。しかし、系の理想化のために、ここでは hard-sphere 相互作用に限ることとする。また、衝突によるエネルギー散逸は無いと仮定する。つまり、完全弾性的な衝突である。

$$\mathbf{F}_i = \mathbf{F}_c \quad (2.1.5)$$

\mathbf{F}_c は、contact force を表す。実際のシミュレーションでの扱いは、次節で紹介する。

\mathbf{F}_f は、流体の支配方程式から決められる。流体の stress tensor $\overleftrightarrow{\Pi}$ を用いると、流体の運動方程式は、次のように書ける [45]。

$$\rho_f \{ \partial_t \mathbf{u} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} \} = \nabla \cdot \overleftrightarrow{\Pi} \quad (2.1.6)$$

stress tensor は、粘性係数 μ, ζ を用いて、一般に次のように書ける。

$$\Pi_{ij} = -p\delta_{ij} + \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3}\delta_{ij} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right) + \zeta \delta_{ij} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \quad (2.1.7)$$

ここで、 $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ は流体の速度場、 $p(\mathbf{x}, t)$ は圧力場である。一方、流体の連続の式から、次の関係が成り立つ。

$$\frac{D\rho}{Dt} + \rho \nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (2.1.8)$$

ここで、

$$\frac{D\rho}{Dt} = \frac{\partial \rho}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \rho \quad (2.1.9)$$

である。また、 ρ は、流体の密度である。非圧縮流体の場合は、

$$\frac{D\rho}{Dt} = 0 \quad (2.1.10)$$

から、

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (2.1.11)$$

市来 健吾

となる。空気のような、一般に圧縮性の流体も、

$$\frac{D\rho}{Dt} \simeq 0 \quad (2.1.12)$$

となるようなゆっくりとした time scale で見た場合、近似的に非圧縮であると見做せる。

$$\nabla \cdot \mathbf{u} \simeq 0 \quad (2.1.13)$$

この時、流体の支配方程式は、Navier-Stokes equation

$$\rho_f \{ \partial_t \mathbf{u} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} \} = \mu \nabla^2 \mathbf{u} - \nabla p \quad (2.1.14)$$

になる。 \mathbf{F}_f は、この Navier-Stokes 方程式の境界値問題を解いて決められるもので、一般に非常に複雑である。Navier-Stokes equation を、特徴的速度 v と、特徴的長さ a とで無次元化する。

$$Re \{ \hat{\partial}_t \hat{\mathbf{u}} + (\hat{\mathbf{u}} \cdot \hat{\nabla}) \hat{\mathbf{u}} \} = \hat{\nabla}^2 \hat{\mathbf{u}} - \hat{\nabla} \hat{p} \quad (2.1.15)$$

ここで、 $\hat{\cdot}$ は、無次元化された量を表す。但し、圧力は次のように無次元化する。

$$\hat{p} = \frac{a}{\mu v} p \quad (2.1.16)$$

従って、 $Re \ll 1$ の場合、Navier-Stokes equation の左辺が無視できて、線形化できる。この近似を Stokes 近似と言い、線形化された Navier-Stokes equation

$$-\mu \nabla^2 \mathbf{u} + \nabla p = \vec{0} \quad (2.1.17)$$

を Stokes equation という。この時、流体中の粒子の速度 $\mathbf{U}^{(\alpha)}$ と、粒子が流体に及ぼす力 $\mathbf{F}_p^{(\alpha)}$ が、次のような線形の行列方程式で表すことが出来る¹。

$$\mathbf{F}_p = \mathbf{R}(\mathbf{x}) \cdot (\mathbf{U} - \mathbf{u}) \quad (2.1.18)$$

ここで、 \mathbf{R} は resistance matrix と呼ばれるものである。 \mathbf{u} は、流体の速度を notation (2.1.2) 式で拡張したものである。また力 \mathbf{F}_p は、先に定義した流体から受ける力 \mathbf{F}_f と、

$$\mathbf{F}_p = -\mathbf{F}_f \quad (2.1.19)$$

の関係がある。以下の議論では、 $Re \ll 1$ を仮定する。

\mathbf{F}_b は、流体の熱揺らぎによる random force であり、

$$\langle \mathbf{F}_b \rangle = \vec{0} \quad (2.1.20)$$

$$\langle \mathbf{F}_b(0) \mathbf{F}_b(t) \rangle = 2kTR\delta(t) \quad (2.1.21)$$

で、特徴つけられる。

ここで、コロイド粒子系と粉体粒子系の違いについてみる。コロイド粒子系は、力のうちで random force \mathbf{F}_b が支配的な系である。一方、粉体粒子系では、random force \mathbf{F}_b が無視できる。この違いは、Péclet 数の大小に対応する。また、粉体粒子系の中にも、粉体流動層と、容器の振動による粉体振動層がある。これらの違いは、前者では \mathbf{F}_f が支配的であるが、後者では \mathbf{F}_c が支配的である点である。この違いは、Stokes 数の大小に対応する。詳しくは、次に述べる。

¹ [43, 44] を参照。

2.2 粉体粒子系

Langevin equation (2.1.3) に、力の具体的な形を代入する。

$$m \frac{d}{dt} \mathbf{U}(t) = -\mathbf{R}(\mathbf{x}) \cdot (\mathbf{U}(t) - \mathbf{u}) - m'g \mathbf{E}_z \quad (2.2.1)$$

この方程式を、速度 ν と長さ a で無次元化する。無次元化された量を $\hat{\cdot}$ で表すと、

$$\frac{m\nu}{6\pi\mu a^2} \frac{d}{dt} \hat{\mathbf{U}} = -\hat{\mathbf{R}} \cdot (\hat{\mathbf{U}} - \hat{\mathbf{u}}) - \frac{m'g}{6\pi\mu a \nu} \mathbf{E}_z \quad (2.2.2)$$

となる。ここで、resistance matrix は 1 粒子の drag factor $6\pi\mu a$ で無次元化した。また、時間は a/ν でスケールされている。左辺に掛かる因子は、先に定義した Stokes 数である。右辺第 2 項のはじめの因子は、1 粒子の沈降速度

$$\nu_0 = \frac{m'g}{6\pi\mu a} = \frac{2}{9} \frac{a^2(\rho_p - \rho_f)g}{\mu} \quad (2.2.3)$$

である。いま、特徴的速度 ν をこの 1 粒子の沈降速度 ν_0 にとると、

$$\nu = \nu_0 \quad (2.2.4)$$

無次元化された Langevin equation は、

$$St_0 \frac{d}{dt} \hat{\mathbf{U}}(t) = -\hat{\mathbf{R}}(\mathbf{x}) \cdot (\hat{\mathbf{U}}(t) - \hat{\mathbf{u}}) - \mathbf{E}_z \quad (2.2.5)$$

となる。添字の 0 は、 $\nu = \nu_0$ としたことを表す。つまり、 St_0 は

$$St_0 = \frac{m\nu_0}{6\pi\mu a^2} = \left(\frac{2}{9}\right)^2 \frac{a^3 \rho_p(\rho_p - \rho_f)g}{\mu^2} \quad (2.2.6)$$

である。この系の振舞いは、無次元量 St_0 の値によって特徴付けられる。

St_0 の大小は、 \mathbf{x} と \mathbf{U} の変化の時間スケールに関係する。このことは、粒子の position と velocity の関係

$$\frac{d}{dt} \mathbf{x}(t) = \mathbf{U}(t) \quad (2.2.7)$$

を、同じように無次元化し、

$$\frac{d}{dt} \hat{\mathbf{x}}(t) = \hat{\mathbf{U}}(t) \quad (2.2.8)$$

この式と、無次元化された速度の発展式 (2.2.5) と比較すると分かりやすい。 \mathbf{x} の時間発展の速さ (変化の時間スケール) が $O(1)$ とすると、 \mathbf{U} の速さは $O(1/St_0)$ である。つまり $St_0 < 1$ の場合、 \mathbf{U} の変化が \mathbf{x} の変化に比べて十分速く、逆に $St_0 > 1$ のときは、 \mathbf{x} の方が速い。

St_0 の値に関して、大きく 4 つに分けて、系の dynamics について見ていく。まず、 $St_0 \ll 1$ の時、Langevin equation (2.2.5) は、次のようになる。

$$-\hat{\mathbf{R}}(\mathbf{x}) \cdot (\hat{\mathbf{U}}(t) - \hat{\mathbf{u}}) - \mathbf{E}_z \sim \mathbf{0} \quad (2.2.9)$$

この式は $\hat{\mathbf{U}}$ について解ける。

$$\hat{\mathbf{U}}(t) = -\hat{\mathbf{R}}^{-1}(\mathbf{x}(t)) \cdot \mathbf{E}_z + \hat{\mathbf{u}} \quad (2.2.10)$$

市来 健吾

粒子の configuration \boldsymbol{x} が決まれば、粒子の速度 \boldsymbol{U} は決定される。このことは、 \boldsymbol{U} が系の dynamics に影響を与えないことを意味している。この時の、接触力 \boldsymbol{F}_c の効果について見ておく。流体力学的相互作用には、lubrication と呼ばれる効果がある。そのため、粒子が接触しようとする時、粒子の mobility は 0 となり、resistance は発散する。つまり、粒子の速度が完全に流体力学的に決められる場合、粒子の接触は妨げられる。従って、 \boldsymbol{F}_c は導入する必要はない。

一方、逆の極限 $St_0 \gg 1$ の場合、Langevin equation (2.2.5) は、

$$\frac{d}{dt}\hat{\boldsymbol{U}}(t) \sim \vec{0} \quad (2.2.11)$$

となり、 \boldsymbol{U} は時間的に変化しない。この時、流体の効果は系の dynamics に影響を与えない。そのため lubrication も効かなくなり、粒子は接触する。この場合、 \boldsymbol{F}_f よりも \boldsymbol{F}_c が支配的となる。

上に述べた 2 つの極限の間のレベルでは、系の dynamics に \boldsymbol{x} と \boldsymbol{U} の両者が関係してくる。 $St_0 < 1$ の場合について見ていく。Langevin equation (2.2.5) は、

$$\begin{aligned} St_0 \frac{d}{dt}\hat{\boldsymbol{U}}(t) &= -\hat{\boldsymbol{R}}(\boldsymbol{x}(t)) \cdot (\hat{\boldsymbol{U}}(t) - \hat{\boldsymbol{u}}) - \boldsymbol{E}_z \\ &= -\hat{\boldsymbol{R}}(\boldsymbol{x}(t)) \cdot \hat{\boldsymbol{U}}(t) + \hat{\boldsymbol{R}}(\boldsymbol{x}(t)) \cdot \hat{\boldsymbol{u}} - \boldsymbol{E}_z \end{aligned} \quad (2.2.12)$$

となる。 $St_0 < 1$ より、 \boldsymbol{U} の変化に注目する時、 \boldsymbol{x} は一定として良い。従って resistance matrix \boldsymbol{R} も定数であり、右辺の第 2 項と第 3 項も時間的に一定とみなせる。この時、resistance matrix \boldsymbol{R} が対角化可能であれば、連立微分方程式 (2.2.12) は原理的に解くことが出来る。 $\boldsymbol{U}(t)$ は次のような 2 つの部分に分けられて、

$$\hat{\boldsymbol{U}}(t) = \hat{\boldsymbol{U}}_0 + \hat{\boldsymbol{U}}_1(t) \quad (2.2.13)$$

それぞれ、次のように決められる。

$$\vec{0} = -\hat{\boldsymbol{R}}(\boldsymbol{x}) \cdot (\hat{\boldsymbol{U}}_0 - \hat{\boldsymbol{u}}) - \boldsymbol{E}_z \quad (2.2.14)$$

$$St_0 \frac{d}{dt}\hat{\boldsymbol{U}}_1(t) = -\hat{\boldsymbol{R}}(\boldsymbol{x}) \cdot \hat{\boldsymbol{U}}_1(t) \quad (2.2.15)$$

\boldsymbol{U}_0 は、 $St_0 \ll 1$ の場合の速度と同じである。実際に (2.2.13) が (2.2.12) の解になっていることは、代入すれば明らかである。

$$\begin{aligned} St_0 \frac{d}{dt}\hat{\boldsymbol{U}}(t) &= St_0 \frac{d}{dt}\hat{\boldsymbol{U}}_1(t) \\ -\hat{\boldsymbol{R}}(\boldsymbol{x}) \cdot (\hat{\boldsymbol{U}}(t) - \hat{\boldsymbol{u}}) - \boldsymbol{E}_z &= -\hat{\boldsymbol{R}}(\boldsymbol{x}) \cdot \hat{\boldsymbol{U}}_1(t) - \hat{\boldsymbol{R}}(\boldsymbol{x}) \cdot (\hat{\boldsymbol{U}}(t) - \hat{\boldsymbol{u}}) - \boldsymbol{E}_z \\ &= -\hat{\boldsymbol{R}}(\boldsymbol{x}) \cdot \hat{\boldsymbol{U}}_1(t) \end{aligned}$$

$\boldsymbol{U}_1(t)$ に関する微分方程式 (2.2.15) を解くことを考える。問題を一般的な形にする。

$$\frac{d}{dt}\boldsymbol{x}(t) = \boldsymbol{A} \cdot \boldsymbol{x}(t) \quad (2.2.16)$$

この方程式の初期値問題を解くことは、次のように定義される解核行列 (resolvent) $\boldsymbol{B}(t)$ を解くことに帰着する。

$$\frac{d}{dt}\boldsymbol{B}(t) = \boldsymbol{A} \cdot \boldsymbol{B}(t) \quad (2.2.17)$$

$$\boldsymbol{A}(0) = \boldsymbol{I} \quad (2.2.18)$$

この解核行列 $\boldsymbol{B}(t)$ は次のような行列の指数関数で表すことが出来る。

$$B(t) = \exp(tA) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{t^k}{k!} A^k \quad (2.2.19)$$

実際、この指数関数を微分すると、

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \exp(tA) &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{d}{dt} \frac{t^k}{k!} A^k \\ &= \sum_{k=1}^{\infty} \frac{t^{k-1}}{(k-1)!} A^k \\ &= A \sum_{k=1}^{\infty} \frac{t^{k-1}}{(k-1)!} A^{k-1} \\ &= A \exp(tA) \end{aligned}$$

となり、解核行列になっていることが分かる。従って $\mathbf{x}(t)$ の初期値問題の答えは、

$$\mathbf{x}(t) = B(t) \cdot \mathbf{x}(0) \quad (2.2.20)$$

で与えられる。行列 A が対角行列の場合、

$$A = \begin{bmatrix} \lambda_1 & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & \lambda_n \end{bmatrix} \quad (2.2.21)$$

解核行列 $B(t)$ は、

$$B(t) = \exp(tA) = \begin{bmatrix} e^{\lambda_1 t} & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & e^{\lambda_n t} \end{bmatrix} \quad (2.2.22)$$

となる。次に行列 A が対角化可能な場合

$$T^{-1}AT = D = \begin{bmatrix} \lambda_1 & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & \lambda_n \end{bmatrix} \quad (2.2.23)$$

を考える。ここで、 λ は A の固有値、 T は各固有ベクトルを列ベクトルに持つ行列である。この時、

$$A^k = TD^kT^{-1} \quad (2.2.24)$$

であるから、解核行列 $B(t)$ は、

$$B(t) = T \exp(tA) T^{-1} = T \begin{bmatrix} e^{\lambda_1 t} & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & e^{\lambda_n t} \end{bmatrix} T^{-1} \quad (2.2.25)$$

となる。

しかし、行列の対角化は計算効率が悪く、dynamic simulation に対しては負担が多過ぎる。そこで何らかの近似が必要になる。1番簡単な近似は、resistance matrix R が、多体効果を持たない極限で考えるものである。この時、

市來 健吾

$$\hat{R} \sim I \quad (2.2.26)$$

と対角行列となる。従って、

$$\hat{U}_1(\hat{t}) = \hat{U}_1(0) \exp\left(-\frac{\hat{t}}{St_0}\right) \quad (2.2.27)$$

が得られる。つまり、

$$\hat{U}(\hat{t}) = \hat{U}_0 + \hat{U}_1(0) \exp\left(-\frac{\hat{t}}{St_0}\right) \quad (2.2.28)$$

である。初期条件を $\hat{U}(0)$ で与えると、 $\hat{U}(0) = \hat{U}_0 + \hat{U}_1(0)$ から、

$$\hat{U}(\hat{t}) = \hat{U}_0 + (\hat{U}(0) - \hat{U}_0) \exp\left(-\frac{\hat{t}}{St_0}\right) \quad (2.2.29)$$

となる。これは、粒子の慣性の効果によって粒子の速度が、初速度 $\hat{U}(0)$ から \hat{U}_0 へ、指数的に緩和していることを表している。このことから、 \hat{U}_0 は終端速度と呼ばれる。 $St_0 \ll 1$ の極限では、この緩和時間が非常に短いため、粒子は configuration が変化すると直ちに終端速度となる。そのため、その領域では速度が系の dynamics に影響を与えないのである。

最後に、 $St_0 \geq 1$ の場合を見ておく。この領域も系の dynamics に関して configuration \mathbf{x} と速度 \mathbf{U} の両者が重要である。 $St_0 \geq 1$ から、 $\hat{\mathbf{x}}$ の変化の方が $\hat{\mathbf{U}}$ の変化よりも速い。つまり、系の configuration の dynamics に注目する時、 $\hat{\mathbf{U}}$ は緩やかな変化しかしない。従って粒子の配置の発展を見る際に、速度の発展も Runge-Kutta method などの差分法を用いて扱えると思われた。しかし、このスキームは非常に不安定であることが分かった。その原因として考えられることは、lubrication の為に、mobility matrix がゼロになるのに対し、その逆行列である resistance matrix は発散することである。このため粒子が接近する時、速度の微分が非常に大きな値となり、差分スキームが破綻すると考えられる。しかし、今興味があるのは、粒子の configuration の時間発展である。つまり、粒子の position がほとんど変化しないような、微小時間の間の発展が分かれば良い。この時間スケールでの position は定数とみなせる。このことから、速度の時間発展に対して、先に見た $St_0 < 1$ の場合のスキームが使えることが分かる。(当然、この場合 $St_0 > 1$ から速度はほとんど緩和しない、つまり変化しないことが分かる。) 従って、実際の計算では $St_0 < 1$ の場合のスキームを用いて行なった。

2.3 具体的な parameter について

ここに出てきた3つの無次元量を、具体的なパラメータの値を用いて計算してみる。特に粒子半径 a に対する依存性に注目する。但し、特徴的速度 v は、1粒子の沈降速度 v_0 にとる。粒子としてガラスを考える。

$$\rho_p = 2.5[\text{gcm}^{-3}] \quad (2.3.1)$$

流体は水と空気の2種類を考える。Boltzmann 定数は $1.38 \times 10^{-16}[\text{erg K}^{-1}]$ であり、温度は常温 ($T =$

	密度 $[\text{g/cm}^3]$	粘性率 $\mu[\text{g/cm} \cdot \text{sec}]$
空気	1.2×10^{-3}	1.8×10^{-4}
水	1.0	1.0×10^{-2}

298[K] = 25[°C]) とした。重力加速度は $g = 981[\text{cmsec}^2]$ として計算する。

まず Stokes 数を計算する。式(2.2.6)より、

$$St_0 = \left(\frac{2}{9}\right)^2 \frac{a^3 \rho_p (\rho_p - \rho_f) g}{\mu^2} \quad (2.3.2)$$

である。水に対する値は、

$$St_0^{water} = 1.815 \times 10^6 a^3 \quad (2.3.3)$$

となる。 $St_0^{water} = 1$ となる粒子半径を計算すると、

$$a_{St}^{water} = 0.820 \times 10^{-2} [\text{cm}] \quad (2.3.4)$$

となる。空気に対しては、

$$St_0^{air} = 9.34 \times 10^9 a^3 \quad a_{St}^{air} = 0.475 \times 10^{-3} [\text{cm}] \quad (2.3.5)$$

となる。

Péclet 数は定義から、

$$Pe_0 = \frac{6\pi\mu a^2 \mathcal{V}_0}{kT} = \frac{4\pi a^4 (\rho_p - \rho_f) g}{3 kT} \quad (2.3.6)$$

となる。これから、

$$Pe_0^{water} = 1.499 \times 10^{17} a^4 \quad a_{Pe}^{water} = 0.508 \times 10^{-4} [\text{cm}] \quad (2.3.7)$$

$$Pe_0^{air} = 2.497 \times 10^{17} a^4 \quad a_{Pe}^{air} = 0.447 \times 10^{-4} [\text{cm}] \quad (2.3.8)$$

となる。

Reynolds 数は、

$$Re = \frac{\rho_f a \mathcal{V}_0}{\mu} = \frac{2 a^3 \rho_f (\rho_p - \rho_f) g}{9 \mu^2} = \frac{9 \rho_f}{2 \rho_p} St_0 \quad (2.3.9)$$

である。結果は、

$$Re_0^{water} = 3.270 \times 10^6 a^3 \quad a_{Re}^{water} = 0.674 \times 10^{-2} [\text{cm}] \quad (2.3.10)$$

$$Re_0^{air} = 2.009 \times 10^7 a^3 \quad a_{Re}^{air} = 0.368 \times 10^{-2} [\text{cm}] \quad (2.3.11)$$

となる。

以上の結果を表 2.1 と図 2.1 にまとめておく。

	$St_0 = 1$	$Pe_0 = 1$	$Re_0 = 1$
water	$0.820 \times 10^{-2} [\text{cm}]$	$0.508 \times 10^{-4} [\text{cm}]$	$0.674 \times 10^{-2} [\text{cm}]$
air	$0.475 \times 10^{-3} [\text{cm}]$	$0.447 \times 10^{-4} [\text{cm}]$	$0.368 \times 10^{-2} [\text{cm}]$

表 2.1 各無次元量の大小の基準となる粒子半径 a

ここで、図 2.1 の各領域について簡単にコメントする。(この図は、水と空気に対して、粒子半径のみを変化させた時の見積りを、便宜上、縦に並べて各々直線で結んだものであることは、断っておく。) $Pe = 1$ の線より左の、粒子が小さい部分は、ランダム力が支配的で、ブラウン粒子系などに相当する。逆に $Pe = 1$ の線より右の、比較的大きな粒子では、ランダム力が無視でき、流体のドラッグや、粒子間の相互作用が重要な系である。

市來 健吾

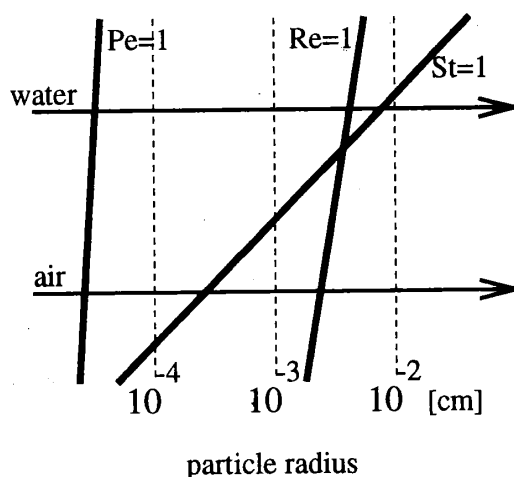


図 2.1 粒子半径と無次元量の関係。直線は、各無次元量が1となる粒子半径を、水と空気について結んだものである。

$Re = 1$ の線より左の、粒子の小さい領域は、流体が Stokes 方程式に従い、その取り扱いが比較的容易である。 $Re = 1$ の線より右の、粒子の大きい方の領域では、Navier-Stokes 方程式を扱わなければならない。

$St = 1$ の線より左の、粒子の小さい領域は、粒子の慣性の効果が無視できるような大きさである。つまり、粒子は終端速度で動いていく。 $St = 1$ の線より右の、粒子の大きい方の領域では、粒子の慣性の方が、流体のドラッグより強く、粒子は慣性運動に近い挙動を示す。極端な例が、パチンコ玉や、ビリヤードのボールの運動である。

この内、本研究で取り扱う系は、 $Pe > 1$ で、 $Re < 1$ の領域の系、つまり、ランダム力が無視できて、流体が Stokes 方程式に従う系である。

本論で紹介するシミュレーションでは、粒子半径を 10^{-3} [cm] とした。この時の、各々の無次元数を見積もっておく。

	Water	Air
St	1.8151×10^{-3}	9.34×10^0
Pe	1.499×10^5	2.497×10^5
Re	3.270×10^{-3}	2.009×10^{-2}

表 2.2 粒子半径が 10^{-3} [cm] の時の無次元数の値。

2.4 シミュレーションにおける仮定

これまでの考察から、粉体流動層のモデル化に当たり、ここで以下の仮定を採用する。

1. 粒子半径がすべて同じであるとする。
2. 熱運動を無視する。
3. 流体の慣性の効果を無視する。

4. 粒子間の相互作用を剛体的なものに限定する。
5. 剛体的な相互作用を速度関係で導入する。
6. 粒子間の衝突は完全弾性的であるとする。

仮定 2 と 3 は、図 2.1 から分かるとおり、粒子半径が $1[\mu\text{m}]$ から $10[\mu\text{m}]$ 程度であれば、水でも空気でも成立する。仮定 1 は、1.3.5 節でも述べたように、系の理想化のために、ここでは採用する。(当然、粒径の違いの引き起こす効果は、研究されるべき対象ではある。) 仮定 4 も、同様な系の理想化のための仮定である。仮定 5 は、粒子の剛体的な接触を、hard-sphere potential を用いるような、力としては導入せず、衝突時の粒子速度の交換関係を用いて導入するということである。このことは、2.2 節でも触れたが、剛体的な接触力の導入が必要な場合、系のダイナミクスに速度が関係することを考えると、可能であることが分かる。また、特に流体力学的相互作用を考えた場合、接触力を力として導入することは、スキーム上の困難をもたらすことは、既に述べた。仮定 6 は、やはり系の理想化のために採用した仮定である。

第 3 章

流体力学的相互作用

3.1 はじめに

この章では、粉体流動層のシミュレーションにおける、流体力学的相互作用の取り扱いについて、具体的に示す。2.1 節で見たように、流体力学的相互作用を表すことと、resistance 行列を構成する問題は同じである。この resistance 行列は、粒子の配置に依存する量で、粒子の時間発展をシミュレーションする場合、行列の構成法の効率が、シミュレーションの効率に大きく影響する。この問題を、出来る限り正確に扱おうとするのが、ここで紹介する手法の基本的姿勢である。つまり、粘性流体の粒子表面での境界値問題を、出来る限り正しく、出来る限り高速に処理するようにする。

粘性流体の境界値問題に対する手法は、様々なものがある。ここでは、Stokeslet の多重極展開をもとにした Stokesian Dynamics と呼ばれる手法に限って紹介する。

多重極展開は、当然粒子間隔が大きい場合に対して正しいものであり、粉体流動層のような高濃度の多粒子系を扱うには適さない。ここで Brady を中心とした人たちによって、Stokesian Dynamics と呼ばれる手法が、コロイド粒子系の研究に対して開発された [1]。そこでの流体力学的扱いは、Stokes 近似のもとでの定式化であり、粉体流動層に対しても用いることが可能である。彼らは、流体を介しての粒子間相互作用を、長距離効果と、近接効果に分けて扱った。長距離効果を表すためには、多重極展開の方法が問題なく使える。一方、近接効果は、2 粒子問題に対して得られている厳密解を用いることで表す。この方法は、高濃度まで正しい結果を引き出すことが、コロイド粒子系の解析において分かっている。

以上を踏まえた上で、この定式化を、有限粒子系と無限粒子系に対して適用してみる。

3.2 有限粒子系

3.2.1 定式化

まず有限粒子系に対して、Stokesian Dynamics の方法を用いる [46, 47]。

粘性流体中の多粒子の問題を、流体の速度場の、粒子表面での境界値問題としてみた場合を考える。流体の速度場を $\mathbf{u}(\mathbf{x})$ とする。 N 個の粒子を考える。 α 粒子の位置を \mathbf{x}^α とし、その粒子の表面を S_α とする。粒子の並進速度と回転速度をそれぞれ、 \mathbf{U}^α 、 $\boldsymbol{\Omega}^\alpha$ とする。このとき、粒子表面で満たされるべき境界条件は、次のように書ける。

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \mathbf{U}^\alpha + \boldsymbol{\Omega}^\alpha \times (\mathbf{x} - \mathbf{x}^\alpha) \quad \text{on } S_\alpha \quad (3.2.1)$$

このような境界条件での速度場を表すのに、遠距離効果を多重極展開を用い、近接効果は、二粒子の厳密解を用いることにする。

遠距離効果の速度場への寄与は、多重極展開の形で書ける。ここでは、力とトルクのみを考え、高次のモーメントは無視することにする¹。従って、流体中に N 個の粒子が存在する場合、流体の速度場は、次のように書ける。

$$\mathbf{u}_i(\mathbf{x}) = \mathbf{u}_i^\infty(\mathbf{x}) + \frac{1}{8\pi\mu} \sum_\alpha^N \left\{ \left(1 + \frac{1}{6} a^2 \nabla^2 \right) J_{ij} F_j^\alpha + R_{ij} T_j^\alpha \right\} \quad (3.2.2)$$

ここで、

$$J_{ij}(\mathbf{r}) = \frac{\delta_{ij}}{r} + \frac{r_i r_j}{r^3} \quad (3.2.3)$$

$$R_{ij}(\mathbf{r}) = -\epsilon_{ijk} \frac{r_k}{r^3} \quad (3.2.4)$$

である。また、 $\mathbf{u}^\infty(\mathbf{x})$ は、粒子が存在しない時の流体の速度場で、並進速度 \mathbf{U}^∞ と回転速度 $\boldsymbol{\Omega}^\infty$ を用いて、次のように書けるとする。

$$\mathbf{u}^\infty(\mathbf{x}) = \mathbf{U}^\infty + \boldsymbol{\Omega}^\infty \times \mathbf{x} \quad (3.2.5)$$

この (3.2.2) 式に、Faxén の法則を用いると、 N 粒子の問題を mobility 形式にまとめることが出来る。

Faxén の法則により、ある速度場 $\mathbf{v}(\mathbf{x})$ 中に、粒子を速度 \mathbf{U} 、角速度 $\boldsymbol{\Omega}$ で \mathbf{x}_0 に置いた場合、その粒子が流体に及ぼす力 \mathbf{F} とトルク \mathbf{T} は、次のように書ける。

$$\begin{aligned} \mathbf{F} &= -6\pi\mu a \left(1 + \frac{1}{6} a^2 \nabla^2 \right) [\mathbf{v}(\mathbf{x}) - \{\mathbf{U} + \boldsymbol{\Omega} \times (\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)\}]_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_0} \\ &= -6\pi\mu a \left(1 + \frac{1}{6} a^2 \nabla^2 \right) \mathbf{v}(\mathbf{x}_0) + 6\pi\mu a \mathbf{U} \end{aligned} \quad (3.2.6)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{T} &= -4\pi\mu a^3 \nabla \times [\mathbf{v}(\mathbf{x}) - \{\mathbf{U} + \boldsymbol{\Omega} \times (\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)\}]_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_0} \\ &= -4\pi\mu a^3 \nabla \times \mathbf{v}(\mathbf{x}_0) + 8\pi\mu a^3 \boldsymbol{\Omega} \end{aligned} \quad (3.2.7)$$

ここで、次の関係を用いた。

¹高次の補正は、Durlinsky *et. al.* [46] を参照。

$$\begin{aligned}
[\nabla \times \{\boldsymbol{\Omega} \times (\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)\}]_i &= \epsilon_{ijk} \frac{\partial}{\partial x_j} \epsilon_{klm} \Omega_l (x - x_0)_m \\
&= \epsilon_{ijk} \epsilon_{klm} \Omega_l \frac{\partial}{\partial x_j} (x - x_0)_m \\
&= \Omega_i \delta_{jj} - \Omega_j \delta_{ij} \\
&= 2\Omega_i
\end{aligned}$$

今ある一つの粒子 α の問題に着目する。従って、次のような速度場 $\mathbf{v}(\mathbf{x})$

$$\mathbf{v}(\mathbf{x}) = \mathbf{u}^\infty(\mathbf{x}) + \mathbf{u}'(\mathbf{x}) \quad (3.2.8)$$

の中に粒子 α を置いた場合の、粒子が流体に及ぼす力 \mathbf{F}^α とトルク \mathbf{T}^α を考える。ここで、 \mathbf{u}' は粒子 α 以外の作る速度乱れで、次のように定義される。

$$\mathbf{u}'_i(\mathbf{x}) = \frac{1}{8\pi\mu} \sum_{\beta \neq \alpha} \left\{ \left(1 + \frac{1}{6} a^2 \nabla^2\right) J_{ij}(\mathbf{x} - \mathbf{x}^\beta) F_j^\beta + R_{ij}(\mathbf{x} - \mathbf{x}^\beta) T_j^\beta \right\} \quad (3.2.9)$$

(3.2.6) 式と (3.2.7) 式から、粒子が流体に及ぼす力 \mathbf{F}^α とトルク \mathbf{T}^α は次のように書ける。

$$\begin{aligned}
\mathbf{F}^\alpha &= -6\pi\mu a \left(1 + \frac{1}{6} a^2 \nabla^2\right) \{\mathbf{u}^\infty(\mathbf{x}^\alpha) + \mathbf{u}'(\mathbf{x}^\alpha)\} + 6\pi\mu a \mathbf{U}^\alpha \\
&= -6\pi\mu a \left(1 + \frac{1}{6} a^2 \nabla^2\right) \mathbf{u}'(\mathbf{x}^\alpha) + 6\pi\mu a \{\mathbf{U}^\alpha - \mathbf{u}^\infty(\mathbf{x}^\alpha)\}
\end{aligned}$$

$$\mathbf{U}_i^\alpha - \mathbf{u}_i^\infty(\mathbf{x}^\alpha) = \frac{\mathbf{F}_i^\alpha}{6\pi\mu a} + \left(1 + \frac{1}{6} a^2 \nabla^2\right) \mathbf{u}'_i(\mathbf{x}^\alpha) \quad (3.2.10)$$

$$\begin{aligned}
\mathbf{T}^\alpha &= -4\pi\mu a^3 \nabla \times \{\mathbf{u}^\infty(\mathbf{x}^\alpha) + \mathbf{u}'(\mathbf{x}^\alpha)\} + 8\pi\mu a^3 \boldsymbol{\Omega}^\alpha \\
&= -4\pi\mu a^3 \nabla \times \mathbf{u}'(\mathbf{x}^\alpha) + 8\pi\mu a^3 (\boldsymbol{\Omega}^\alpha - \boldsymbol{\Omega}^\infty)
\end{aligned}$$

$$\boldsymbol{\Omega}_i^\alpha - \boldsymbol{\Omega}_i^\infty = \frac{T_i^\alpha}{8\pi\mu a^3} + \frac{1}{2} \epsilon_{ijk} \nabla_j u'_k(\mathbf{x}^\alpha) \quad (3.2.11)$$

ここで、 $\mathbf{u}'_i(\mathbf{x})$ は自分 (粒子 α) 以外の粒子による速度の乱れである。この Faxén の法則 (3.2.10) 式と (3.2.11) 式に、(3.2.9) 式の数値場の展開式を代入すると、粒子の速度 \mathbf{U} と角速度 $\boldsymbol{\Omega}$ が、各々の粒子が流体に及ぼす力 \mathbf{F} とトルク \mathbf{T} によって表される。従って、遠距離部分の mobility 行列 \mathbf{M}^∞ が計算できる。

$$\begin{bmatrix} \mathbf{U}^{(1)} - \mathbf{u}^\infty(\mathbf{x}^{(1)}) \\ \vdots \\ \boldsymbol{\Omega}^{(1)} - \boldsymbol{\Omega}^\infty \\ \vdots \end{bmatrix} = \mathbf{M}^\infty \begin{bmatrix} \mathbf{F}^{(1)} \\ \vdots \\ \mathbf{T}^{(1)} \\ \vdots \end{bmatrix} \quad (3.2.12)$$

行列要素は、

市來 健吾

$$M^\infty = \begin{bmatrix} a^{(11)} & a^{(12)} & \dots & \tilde{b}^{(11)} & \tilde{b}^{(12)} & \dots \\ a^{(21)} & a^{(22)} & \dots & \tilde{b}^{(21)} & \tilde{b}^{(22)} & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots \\ b^{(11)} & b^{(12)} & \dots & c^{(11)} & c^{(12)} & \dots \\ b^{(21)} & b^{(22)} & \dots & c^{(21)} & c^{(22)} & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} \quad (3.2.13)$$

$$a_{ij}^{(11)} = \frac{\delta_{ij}}{6\pi\mu a} \quad (3.2.14)$$

$$a_{ij}^{(12)} = \frac{1}{6\pi\mu a} \left\{ \left(\frac{3}{4}r^{-1} + \frac{1}{2}r^{-3} \right) \delta_{ij} + \left(\frac{3}{4}r^{-1} - \frac{3}{2}r^{-3} \right) e_i e_j \right\} \quad (3.2.15)$$

$$b_{ij}^{(11)} = 0 \quad (3.2.16)$$

$$b_{ij}^{(12)} = \frac{1}{4\pi\mu a^2} \left(-\frac{1}{2}r^{-2} \epsilon_{ijk} e_k \right) \quad (3.2.17)$$

$$c_{ij}^{(11)} = \frac{\delta_{ij}}{8\pi\mu a^3} \quad (3.2.18)$$

$$c_{ij}^{(12)} = \frac{1}{8\pi\mu} \left(-\frac{1}{2}r^{-3} \delta_{ij} + \frac{3}{2}r^{-3} e_i e_j \right) \quad (3.2.19)$$

ここで、 r はすべて粒子半径 a で割ったもので、また $\mathbf{e} = \mathbf{r}/r$ である。 $a^{(12)}$ は、Rotne-Prager テンソルと呼ばれるものである。

次にこの M^∞ に、近距離効果を導入することを考える。この近距離効果は、流体力学的な反発力である lubrication force と呼ばれるものである。これを導入するために、2体問題での厳密な resistance 関数を用いる。これは、Jeffrey and Onishi (1984) [48] により解析的に、Kim and Mifflin (1985) [49] により数値的に解かれている²。

$$\begin{bmatrix} \mathbf{F}^{(1)} \\ \mathbf{F}^{(2)} \\ \mathbf{T}^{(1)} \\ \mathbf{T}^{(2)} \end{bmatrix} = \mathbf{R}_{2B} \begin{bmatrix} \mathbf{U}^{(1)} - \mathbf{u}^\infty(\mathbf{x}^{(1)}) \\ \mathbf{U}^{(2)} - \mathbf{u}^\infty(\mathbf{x}^{(2)}) \\ \boldsymbol{\Omega}^{(1)} - \boldsymbol{\Omega}^\infty \\ \boldsymbol{\Omega}^{(2)} - \boldsymbol{\Omega}^\infty \end{bmatrix} \quad (3.2.20)$$

ここで \mathbf{R}_{2B} から、遠距離効果の寄与をあらかじめ引いておく必要がある。これは、この遠距離の寄与を二重に数えないためだ。このために、2体問題での遠距離効果を表す mobility 行列 \mathbf{M}_{2B}^∞ を導入し、2体問題の厳密解である resistance 行列 \mathbf{R}_{2B} から引いておく。従って、近接効果を表す2体問題の行列 \mathbf{R}_{2B}^{lub} は、

$$\mathbf{R}_{2B}^{lub} = \mathbf{R}_{2B} - (\mathbf{M}_{2B}^\infty)^{-1} \quad (3.2.21)$$

となる。これを N 粒子系のすべてのペアに対して重ね合わせたものを、 \mathbf{R}^{lub} とする。これを用いて、 N 体の resistance 行列を次のように近似する。

$$\mathbf{R} = (\mathbf{M}^\infty)^{-1} + \mathbf{R}^{lub} \quad (3.2.22)$$

以上から、resistance 行列を構成することが出来た。従って、流体中の粒子系の流体からの効果を計算することが可能となった。

次節では本研究で用いた Jeffrey & Onishi [48] による2粒子問題の厳密解をまとめておく。

²次節を参照。

3.2.2 2 粒子問題

ここでは Jeffrey & Onishi(1984) [48] による、2つの剛体球の resistance 関数と mobility 関数の計算を見る。

まず以下に諸定義を示す。

$$\begin{aligned}
 \mathbf{F}^\alpha &: \text{球}\alpha\text{が流体に及ぼす力} \\
 \mathbf{T}^\alpha &: \text{球}\alpha\text{が流体に及ぼすトルク} \\
 \mathbf{U}^\alpha &: \text{球}\alpha\text{の並進速度} \\
 \boldsymbol{\Omega}^\alpha &: \text{球}\alpha\text{の中心に関する角速度} \\
 \mathbf{x}^\alpha &: \text{球}\alpha\text{の中心} \\
 \mathbf{r} = \mathbf{x}^{(2)} - \mathbf{x}^{(1)} &: \text{center-to-center vector} \\
 a_\alpha &: \text{球}\alpha\text{の半径}
 \end{aligned}$$

これらのベクトルは簡単のため2次元であるとする。このことにより一般性を失うことは、2体問題の対称性からない。粒子が無いときの流体の流れは、一様流 \mathbf{U}_0 と原点に関する剛体的な回転 $\boldsymbol{\Omega}$ の重ね合わせであるとする。

$$\mathbf{U}(\mathbf{x}) = \mathbf{U}_0 + \boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{x} \quad (3.2.23)$$

このとき、以下のような resistance 問題が定義できる。

$$\begin{bmatrix} \mathbf{F}^{(1)} \\ \mathbf{F}^{(2)} \\ \mathbf{T}^{(1)} \\ \mathbf{T}^{(2)} \end{bmatrix} = \mu \begin{bmatrix} \mathbf{A}^{(11)} & \mathbf{A}^{(12)} & \tilde{\mathbf{B}}^{(11)} & \tilde{\mathbf{B}}^{(12)} \\ \mathbf{A}^{(21)} & \mathbf{A}^{(22)} & \tilde{\mathbf{B}}^{(21)} & \tilde{\mathbf{B}}^{(22)} \\ \mathbf{B}^{(11)} & \mathbf{B}^{(12)} & \mathbf{C}^{(11)} & \mathbf{C}^{(12)} \\ \mathbf{B}^{(21)} & \mathbf{B}^{(22)} & \mathbf{C}^{(21)} & \mathbf{C}^{(22)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{U}^{(1)} - \mathbf{U}(\mathbf{x}^{(1)}) \\ \mathbf{U}^{(2)} - \mathbf{U}(\mathbf{x}^{(2)}) \\ \boldsymbol{\Omega}^{(1)} - \boldsymbol{\Omega} \\ \boldsymbol{\Omega}^{(2)} - \boldsymbol{\Omega} \end{bmatrix} \quad (3.2.24)$$

ここで $\mathbf{A}^{\alpha\beta}, \mathbf{B}^{\alpha\beta}, \tilde{\mathbf{B}}^{\alpha\beta}, \mathbf{C}^{\alpha\beta}$ は2階 tensor である。これらから成る、速度を力と関連付ける行列を resistance matrix という。この行列は、以下のような様々な対称性から、いくつかのスカラー関数で表すことが出来る。まず相反定理から、resistance matrix が対称行列なので、

$$\mathbf{A}_{ij}^{\alpha\beta} = \mathbf{A}_{ji}^{\beta\alpha} \quad (3.2.25)$$

$$\tilde{\mathbf{B}}_{ij}^{\alpha\beta} = \mathbf{B}_{ji}^{\beta\alpha} \quad (3.2.26)$$

$$\mathbf{C}_{ij}^{\alpha\beta} = \mathbf{C}_{ji}^{\beta\alpha} \quad (3.2.27)$$

となることが分かる。次に、粒子1と粒子2の入れ替えに対する対称性から、各 tensor は(ここでは、A に対してのみ書く。B, $\tilde{\mathbf{B}}$, C に対しても同様に成り立つ。),

$$\mathbf{A}_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, a_1, a_2) = \mathbf{A}_{3-\alpha, 3-\beta}(-\mathbf{r}, a_2, a_1) \quad (3.2.28)$$

という対称性を持つ事が分かる。同じ大きさの球の場合は、

$$\mathbf{A}_{\alpha\beta}(\mathbf{r}) = \mathbf{A}_{3-\alpha, 3-\beta}(-\mathbf{r}) \quad (3.2.29)$$

である。また系は center-to-center vector \mathbf{r} に関して対称であり、B, $\tilde{\mathbf{B}}$ は、軸性ベクトルと方位性ベクトルを結び付ける tensor であることから、単位ベクトル $\mathbf{e} = \mathbf{r}/r$ を用いて、

$$\mathbf{A}_{ij}^{\alpha\beta} = \frac{1}{6\pi a} \{ X_{\alpha\beta}^A e_i e_j + Y_{\alpha\beta}^A (\delta_{ij} - e_i e_j) \} \quad (3.2.30)$$

$$\mathbf{B}_{ij}^{\alpha\beta} = \frac{1}{4\pi a^2} Y_{\alpha\beta}^B \epsilon_{ijk} e_k \quad (3.2.31)$$

市来 健吾

$$C_{ij}^{\alpha\beta} = \frac{1}{8\pi a^3} \{X_{\alpha\beta}^C e_i e_j + Y_{\alpha\beta}^C (\delta_{ij} - e_i e_j)\} \quad (3.2.32)$$

と表すことが出来る。ここで X, Y は r に依存するスカラー関数である。また X は軸対称な運動に関する部分である。実際に、

$$e = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (3.2.33)$$

である場合を考えると、

$$A_{xy}^{\alpha\beta} = A_{yx}^{\alpha\beta} = 0 \quad (3.2.34)$$

$$A_{xx}^{\alpha\beta} = Y_{\alpha\beta}^A \quad (3.2.35)$$

$$A_{yy}^{\alpha\beta} = X_{\alpha\beta}^A \quad (3.2.36)$$

$$\begin{bmatrix} A_{xx}^{11} & A_{xy}^{11} & A_{xx}^{12} & A_{xy}^{12} \\ A_{yx}^{11} & A_{yy}^{11} & A_{yx}^{12} & A_{yy}^{12} \\ A_{xx}^{21} & A_{xy}^{21} & A_{xx}^{22} & A_{xy}^{22} \\ A_{yx}^{21} & A_{yy}^{21} & A_{yx}^{22} & A_{yy}^{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} Y_{11}^A & 0 & Y_{12}^A & 0 \\ 0 & X_{11}^A & 0 & X_{12}^A \\ Y_{21}^A & 0 & Y_{22}^A & 0 \\ 0 & X_{21}^A & 0 & X_{22}^A \end{bmatrix} \quad (3.2.37)$$

となる。速度が軸対称な場合、

$$U^\alpha = \begin{bmatrix} 0 \\ U^\alpha \end{bmatrix} \quad (3.2.38)$$

$A_{xx}^{\alpha\beta}$ は効いてこないで、 $A_{yy}^{\alpha\beta} = X_{\alpha\beta}^A$ が効く。一方、速度が非軸対称な場合では、

$$U^\alpha = \begin{bmatrix} U^\alpha \\ 0 \end{bmatrix} \quad (3.2.39)$$

$A_{yy}^{\alpha\beta}$ は効いてこないで、 $A_{xx}^{\alpha\beta} = Y_{\alpha\beta}^A$ が効く。

この resistance 関数は、Jeffrey & Onishi (1984) [48] と、その間違いを訂正し、shear rate も含めた形で Kim & Karrila (1991) [44] にある。

本論で実際に用いた結果をまとめておく。(粒子は、同じ大きさとした。)

n	f_n^{XA}	f_n^{YA}	f_n^{YB}	f_n^{XC}	f_n^{YC}
0	1	1	0	1	1
1	3	3/2	0	0	0
2	9	9/4	-6	0	0
3	19	59/8	-9	8	4
4	93	465/16	-27/2	0	12
5	387	2259/32	-273/4	0	18
6	1197	14745/64	-1683/8	64	283
7	5331	89643/128	-17625/16	0	369/2
8	19821	570017/256	-129003/32	768	11955/4
9	76115	4451395/512	-1017825/64	512	5945/8
10	320173	33678825/1024	-7087107/128	6144	711755/16
11	1178451	266862875/2048	-47478057/256	12288	448833/32

表 3.1 二粒子問題の厳密解の、展開係数。Jeffrey & Onishi (1984) [48] に依る。

$$X_{11}^A = \frac{1}{4} \frac{1}{1-4/s^2} - \frac{9}{40} \ln(1-4/s^2) - \frac{3}{112} (1-4/s^2) \ln(1-4/s^2) + f_0^{XA} - \frac{1}{4} + \sum_{m=2,4,\dots}^{\infty} \left\{ \left(\frac{1}{4} \right)^m f_m^{XA} - \frac{1}{4} - \frac{9}{20} \frac{1}{m} + \frac{12}{112} \frac{1}{mm_1} \right\} \left(\frac{2}{s} \right)^m \quad (3.2.40)$$

$$X_{12}^A = -\frac{1}{2} \frac{1}{s(1-4/s^2)} - \frac{9}{40} \ln \frac{s+2}{s-2} - \frac{3}{112} (1-4/s^2) \ln \frac{s+2}{s-2} - \frac{12}{112} \frac{1}{s} - \sum_{m=1,3,\dots}^{\infty} \left\{ \left(\frac{1}{4} \right)^m f_m^{XA} - \frac{1}{4} - \frac{9}{20} \frac{1}{m} + \frac{12}{112} \frac{1}{mm_1} \right\} \left(\frac{2}{s} \right)^m \quad (3.2.41)$$

$$Y_{11}^A = -\frac{1}{6} \ln(1-4/s^2) + f_0^{YA} + \sum_{m=2,4,\dots}^{\infty} \left\{ \left(\frac{1}{4} \right)^m f_m^{YA} - \frac{1}{3} \frac{1}{m} \right\} \left(\frac{2}{s} \right)^m \quad (3.2.42)$$

$$Y_{12}^A = -\frac{1}{6} \ln \frac{s+2}{s-2} + \sum_{m=1,3,\dots}^{\infty} \left\{ \left(\frac{1}{4} \right)^m f_m^{YA} - \frac{1}{3} \frac{1}{m} \right\} \left(\frac{2}{s} \right)^m \quad (3.2.43)$$

$$Y_{11}^B = -\frac{1}{4} \ln \frac{s+2}{s-2} - \frac{1}{8} (1-4/s^2) \ln \frac{s+2}{s-2} - \frac{1}{2s} + \sum_{m=2,4,\dots}^{\infty} \left\{ \left(\frac{1}{4} \right)^m f_m^{YB} + \frac{1}{2} \frac{1}{m} - \frac{1}{2} \frac{1}{mm_1} \right\} \left(\frac{2}{s} \right)^m \quad (3.2.44)$$

$$Y_{12}^B = -\frac{1}{4} \ln(1-4/s^2) - \frac{1}{8} (1-4/s^2) \ln(1-4/s^2) - \sum_{m=1,3,\dots}^{\infty} \left\{ \left(\frac{1}{4} \right)^m f_m^{YB} + \frac{1}{2} \frac{1}{m} - \frac{1}{2} \frac{1}{mm_1} \right\} \left(\frac{2}{s} \right)^m \quad (3.2.45)$$

$$X_{11}^C = \frac{1}{4} \ln(1-4/s^2) + \frac{1}{2s} \ln \frac{s+2}{s-2} + 1 + \sum_{k=1}^{\infty} \left\{ \left(\frac{1}{4} \right)^k f_{2k}^{XC} - 2^{2k+1} \frac{1}{k(2k-1)} \right\} \left(\frac{1}{s} \right)^{2k} \quad (3.2.46)$$

$$X_{12}^C = -\sum_{k=0}^{\infty} f_{2k+1}^{XC} \left(\frac{1}{2s} \right)^{2k+1} \quad (3.2.47)$$

$$Y_{11}^C = -\frac{1}{2} \ln(1-4/s^2) - \frac{47}{250} (1-4/s^2) \ln(1-4/s^2) + f_0^{YC} + \sum_{m=2,4,\dots}^{\infty} \left\{ \left(\frac{1}{4} \right)^m f_m^{YC} - \frac{2}{5} \frac{1}{m} + \frac{94}{125} \frac{1}{mm_1} \right\} \left(\frac{2}{s} \right)^m \quad (3.2.48)$$

$$Y_{12}^C = \frac{1}{20} \ln \frac{s+2}{s-2} + \frac{31}{250} (1-4/s^2) \ln \frac{s+2}{s-2} + \frac{62}{250s} + \sum_{m=2,4,\dots}^{\infty} \left\{ \left(\frac{1}{4} \right)^m f_m^{YC} - \frac{1}{10} \frac{1}{m} + \frac{62}{125} \frac{1}{mm_1} \right\} \left(\frac{2}{s} \right)^m \quad (3.2.49)$$

ここで、 m_1 は次のように定義される。

$$m_1 = -2\delta_{m2} + (m-2)(1-\delta_{m2}) \quad (3.2.50)$$

また、 s は粒子半径 a で割った粒子間距離 r である。

$$s = \frac{r}{a} \quad (3.2.51)$$

3.2.3 計算結果

この節で紹介する、有限粒子系に対する計算では、2.2節で述べた粒子の慣性の寄与は取り入れていない³。つまり、 $St = 0$ での計算である。プログラムのチェックも兼ねて、Durlafsky & Brady (1987) [46]⁴の

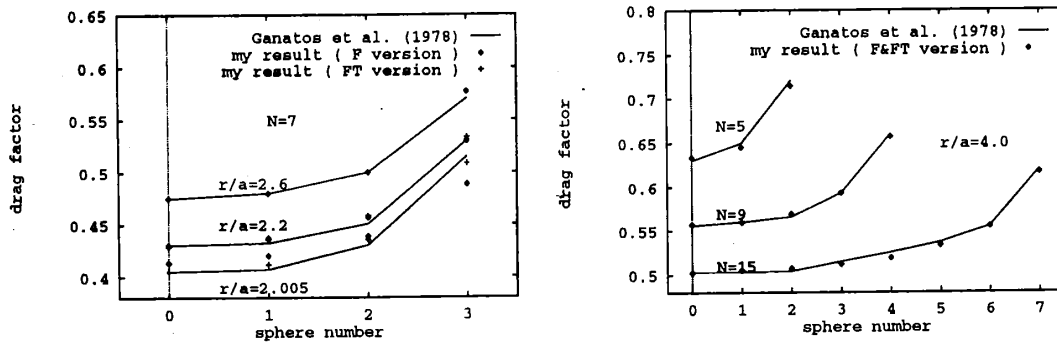


図 3.1 水平に並んだ粒子の受けるドラッグ。Ganatos *et al.* [50] との比較。粒子番号は、中心の粒子から外側に付けた通し番号で、対称性から、右半分の値を示している。

結果に与えられている様々な計算を確かめてみる。まず、水平に直線上に並べた粒子系のドラッグを計算した。その結果を、図 3.1 に示す。ここで比較しているデータは、Ganatos *et al.* (1978) [50] によるもので、やはり数値的に求めたものである。彼らの手法は粒子表面での境界条件を直接扱う方法で、原理的には、精度を無限に上げることが出来る。私の計算結果は、粒子の回転とトルクを無視した F 版と回転、トルクも考慮した FT 版について行なった結果を示したこの結果から、プログラムは、正しく働いていることが分かる。

この結果は、後の考察で重要になるので、少し解説しておく。図 3.1 で示したドラッグとは、粒子が流体から受ける力のことである。この結果を見ると、粒子の密度が高い程、ドラッグが小さくなることが分かる。もし同じ粒子があった場合、ドラッグが小さい方が速く落ちるので、ドラッグが小さいと言うことは、沈降速度が大きいことを意味する。つまり、粒子の密度が高いほど粒子の沈降速度は速くなるということである。このことについては、次の 3.2.4 節で再び触れる。

次に、3つの粒子を不等間隔で並べて、自由沈降させた時の軌跡を図 3.2 に示す。この結果は、やはり Durlafsky *et al.* に示してある。また、Ganatos *et al.* にも同様の結果が得られている。このように、流体力学的相互作用により、粒子の軌跡は非常に複雑になることが分かる。

以上は、重力場中で自由に沈降する系を計算したが、粉体流動層は、容器に入れられて底に溜っているところを、流体の流れによって流動化されたものである。従って、粉体流動層をシミュレートするという観点から、粒子を支える容器に対応するものを導入した計算を次に示す。具体的には、粒子を支える容器として、流体力学的効果を何も持たず、粒子に外力として作用する壁を考慮した。最初に、流体の流れをゼロにした時の様子を図 3.3 に示す。このとき、流体力学的相互作用の近接効果として、2粒子の厳密解から導入した lubrication のために、粒子がオーバーラップしないことが分かる。

では、流体を流した場合に粒子はどのように振舞うであろうか。その結果を、図 3.4 に示す。そこでは、空間に固定した粒子も導入しているが⁵、そのどれもが、予想したのとは異なった振舞いを示した。つまり、流体の流速を上げていくと、あるところで、不安定化を起し、粒子は上昇をはじめると、一様流動

³しかし、このことは、後で述べる有限粒子系の困難に結び付くものではない。

⁴この節での計算は、粒子の慣性を無視しているため、Durlafsky & Brady (1987) と同じものである。

⁵その取り扱いは、3.4 節を参照。

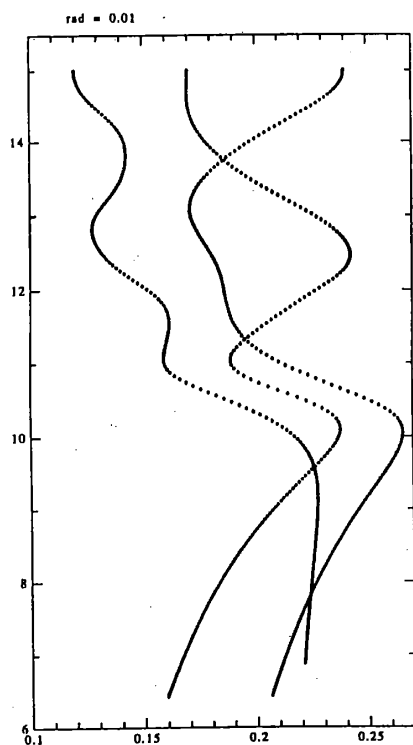


図 3.2 3 粒子の自由沈降の軌跡。FT 版での計算結果。

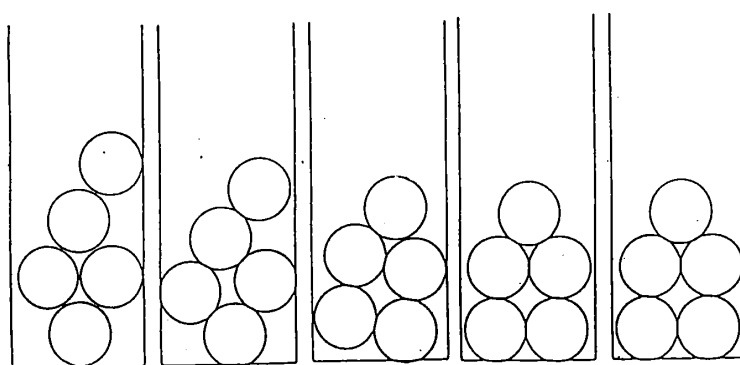


図 3.3 流体力学的相互作用の近接効果 (lubrication)

層のようなものは得られなかった。むしろ、不安定化するとそのまま吹き飛ばされてしまった。

3.2.4 議論

以上の結果から、有限粒子系の流体力学的相互作用の効果についてまとめる。有限粒子系の沈降速度は、粒子が接近すると大きくなることが分かった。しかし、この性質では、粉体流動層が安定に存在しないことが、次のような考察から簡単に分かる。

市來 健吾

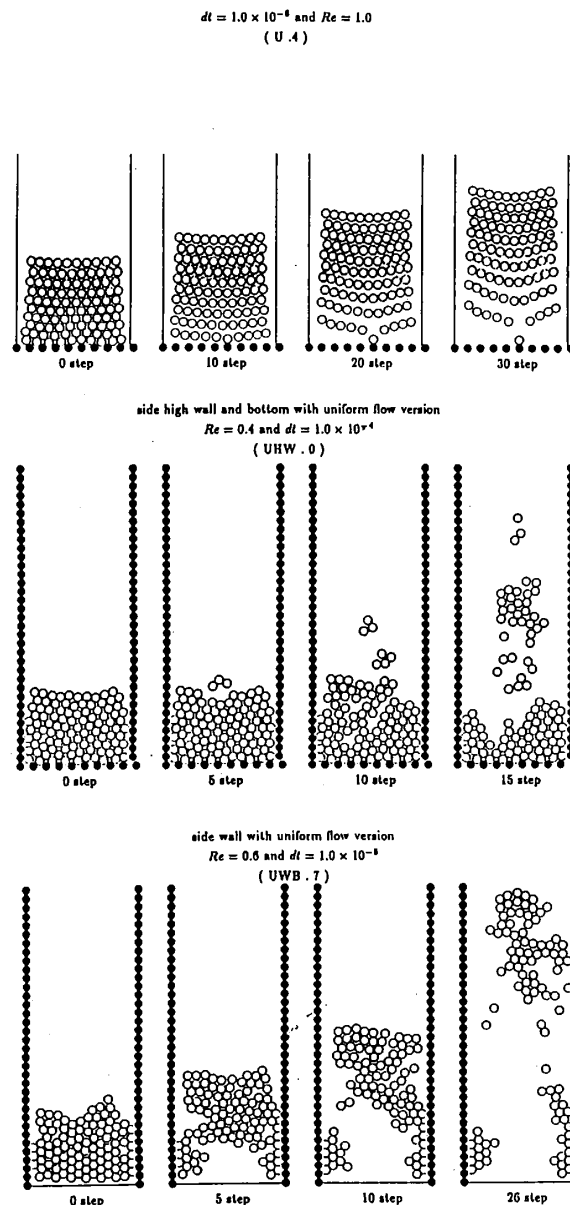


図 3.4 有限粒子系に、一様流を重ね合わせた場合の振舞い。黒い粒子は、空間に固定された粒子である。

「粒子が接近すると沈降速度が大きくなる時、粉体流動層は安定か？」

まず、ある流入速度で流体を流し、粉体はある濃度で安定に存在しているとする。この時、表面のある粒子が、少し飛び上がったとする。すると、その粒子は他の粒子から遠くなり、その沈降速度は遅くなる。(∵ 接近した方が沈降速度は大きいから。) 従って、その粒子は更にはなれていく。(∵ 沈降速度とは、落下速度であるから。) すると、更にその粒子の上昇速度は増加していく。

一方、実験的にも、経験的にも良く知られていることであるが、沈降速度は、濃度が高いほど遅くなる。この場合、先ほどの考察を行なうと、粉体流動層は、ある安定な濃度に達することが分かる。

従って、粉体流動層をモデル化しようとする場合、「濃度が高いほど沈降速度が遅くなる」性質が必要で

あることが分かった。では、流体力学的相互作用を真面目にとり入れている、先ほどの考察では、なぜその性質を示さないのでしょうか。有限粒子系での、「粒子が接近すると沈降速度が大きくなる」性質は間違っているのでしょうか？この性質は、次のように理解することが出来る。

「粒子が接近すると沈降速度が大きくなる」

粒子が単独に1つある場合、粒子が沈降すると、粘性境界条件から、その回りの流体も引きずられていく。もしここにもう1つの粒子を加えた場合、その粒子の沈降速度はどうなるであろうか。はじめの粒子が回りの流体をひきずる大きさは、粒子からの距離に反比例することが知られている。(つまり、距離を r とすると $1/r$ となる。これが、無限系で問題になる発散を引き起こす、流体力学的相互作用の長距離性である。)つまり、はじめの粒子の近くにもう1つの粒子を加えた方が、その沈降速度は大きいはずである。

すると、実験的にも経験的にもよく知られている、「沈降速度は、濃度が高いほど遅くなる」性質が間違っているのか？これにも、次のような簡単な説明が出来る。

「沈降速度は、濃度が高いほど遅くなる」

粒子濃度が高い場合は、粒子濃度が低い場合に比べて、流れ易いであろうことは、当然である。流れ易いと言うことは、粒子と流体の相対速度が大きいたうことである。沈降速度とは、粒子と流体の相対速度に他ならないわけで、粒子濃度が高い方が、沈降速度は遅いことは正しいようである。

一見、大きな矛盾を示しているように見えるこの混乱も、流体の流れに目を向けると、簡単に理解できる。図3.5を見れば分かるように、有限粒子系に対して流体を流そうとすると、流体は粒子が存在する領域

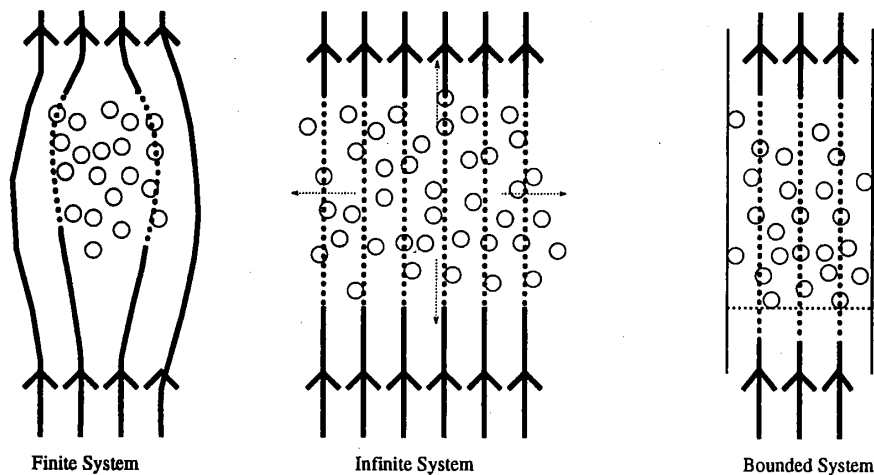


図 3.5 粒子が存在する領域に流体を流した場合の模式図。左から、有限粒子系、無限粒子系、現実の粉体流動層を表す。

を避けて流れようとする。粒子が集まれば、流体は出来るだけそこを避けるように流れる。従って、流体から受ける力(ドラッグ)は小さくなり、沈降速度が大きくなる。逆に、粒子が単独であると、流体の流れをダイレクトに受けて、流体に吹き流される。つまり、沈降速度は小さくなる。一方、無限粒子系の場合、流体は粒子を避けようがなく、粒子の間を流れなければならない。従って、粒子濃度が濃いほど、流れにくい。現実の系はどうなっているかと言うと、流体は容器によってboundされている為、流体はやはり粒子の間を流れざるを得ない。つまり、有限粒子系に対して行なっていた計算は正しいものであるが、有限

系と現実の系は対応していないのである。

以上のことから、粉体流動層のモデル化は、有限粒子系では不可能であり、無限系を考えるか、現実の系の様に、容器のような流体を bound する境界を、モデルに導入する必要がある。後者のアプローチは、現実との対応を考える場合、非常に魅力的である。しかし、bound された流体中の多粒子系の問題は、動的な解析に適用できるほど、効率的ではない⁶。従って、ここでは前者の方法を採用する。

3.3 無限粒子系

3.3.1 周期境界条件

3.2節での、有限粒子系の考察から、粉体流動層のモデル化には、無限粒子系が必要であることが分かった。ここでは、周期境界条件を用いて無限粒子系を表すことにする。

計算効率の問題から、実際の計算では力と並進速度のみを扱っている。そこで、有限粒子系では、粒子の回転も考慮に入れていたが、ここでは、粒子の回転は無視することにする⁷。

この場合、周期境界の基本セルの中の粒子に関する mobility 問題は、Beenakker [53] が示したように、Ewald 和の方法を用いて次のように書ける

$$6\pi\mu a U_i^\alpha = F_i^\alpha + \sum_{\gamma} \sum_{\beta=1}^N M_{ij}^{(1)}(\mathbf{x}^\alpha - \mathbf{x}^\beta + \mathbf{r}_\gamma) F_j^\beta - \frac{1}{V} \sum_{\lambda} \sum_{\beta=1}^N \cos(\mathbf{k}_\lambda \cdot (\mathbf{x}^\alpha - \mathbf{x}^\beta)) M_{ij}^{(2)}(\mathbf{k}_\lambda) F_j^\beta - M_{ij}^{(2)}(\mathbf{r} = \vec{0}) F_j^\alpha \quad (3.3.1)$$

ここで、各行列は次のように書ける。

$$M_{ij}^{(1)}(\mathbf{r}) = \operatorname{erfc}(\xi r) \left\{ \delta_{ij} \left(\frac{3a}{4r} + \frac{1}{2} \frac{a^3}{r^3} \right) + \hat{r}_i \hat{r}_j \left(\frac{3a}{4r} - \frac{3}{2} \frac{a^3}{r^3} \right) \right\} + \frac{e^{-\xi^2 r^2}}{\sqrt{\pi}} \left[\delta_{ij} \left(4a^3 \xi^7 r^4 + 3a \xi^3 r^2 - 20a^3 \xi^5 r^2 - \frac{9}{2} a \xi + 14a^3 \xi^3 + a^3 \xi \frac{1}{r^2} \right) + \hat{r}_i \hat{r}_j \left(-4a^3 \xi^7 r^4 - 3a \xi^3 r^2 + 16a^3 \xi^5 r^2 \frac{3}{2} a \xi - 2a^3 \xi^3 - 3a^3 \xi \frac{1}{r^2} \right) \right] \quad (3.3.2)$$

$$M_{ij}^{(2)}(\mathbf{k}) = 6\pi a \left(\delta_{ij} - \hat{k}_i \hat{k}_j \right) \frac{1}{k^2} \left(1 - \frac{1}{3} a^2 k^2 \right) \left(1 + \frac{k^2}{4\xi^2} + \frac{k^4}{8\xi^4} \right) e^{-\frac{k^2}{4\xi^2}} \quad (3.3.3)$$

$$M_{ij}^{(2)}(\mathbf{r} = \vec{0}) = \frac{\delta_{ij}}{\sqrt{\pi}} \left(6a\xi - \frac{40}{3} a^3 \xi^3 \right) \quad (3.3.4)$$

γ は、実空間の基本セルを表す index である。 \mathbf{r}_γ は、格子 vector である。つまり、 $\gamma = (n_1, n_2, n_3)$ として、

$$\mathbf{r}_\gamma = \begin{bmatrix} n_1 L_1 \\ n_2 L_2 \\ n_3 L_3 \end{bmatrix} \quad (3.3.5)$$

⁶この方向でのアプローチについては、Weinbaum *et al.*(1990) [51] にまとめられている。

⁷原理的には、回転を含め、高次のモーメントも導入可能である。実際、Brady *et al.*(1988) [52] は、shear rate まで含んだ形式で行なっている。

と書ける。 L_1, L_2, L_3 は、基本セルの長さである。また、 λ は、波数 vector の index (m_1, m_2, m_3) を表し、 k_λ は次のように定義する。

$$k_\lambda = \left(\frac{2\pi m_1}{L_1}, \frac{2\pi m_2}{L_2}, \frac{2\pi m_3}{L_3} \right)$$

$M_{ij}^{(1)}$ の和の記号のダッシュは、自分自身の寄与を除くことを意味する。つまり、 $\gamma = 0$ で、かつ $\alpha = \beta$ の和をとらないと言うことである。 ξ は、分離パラメータであり、実空間でとるべき格子和の数と、波数空間での格子和の数の両方が、小さくなるように選ぶ。

しかし、この式を直接計算すると、発散してしまう。これは、波数部分の格子和の、 $k = \vec{0}$ の寄与が引き起こすものである。この発散を回避する方法は、単に、 $k = \vec{0}$ の寄与を無視することで行なわれる。この物理的意味については、5.4節での議論に譲る⁸。

3.3.2 計算法の確認

プログラムの確認のため、粒子配列が規則的な格子の沈降速度を計算した。比較の対象として、同じ精度(力のみを考慮し、トルクなどの高次のモーメントを無視したもの)の計算として Brady *et al.* [52] の結果を、また、数値厳密解として Zick & Homsey (1982) [55] の結果を用いた。配列は、sc 配列、bcc 配列、fcc 配列の3種類について行なった。sc 配列は、2次元配列版と3次元配列版の両方で、その他の配列は3次元配列版のプログラムを用いた。

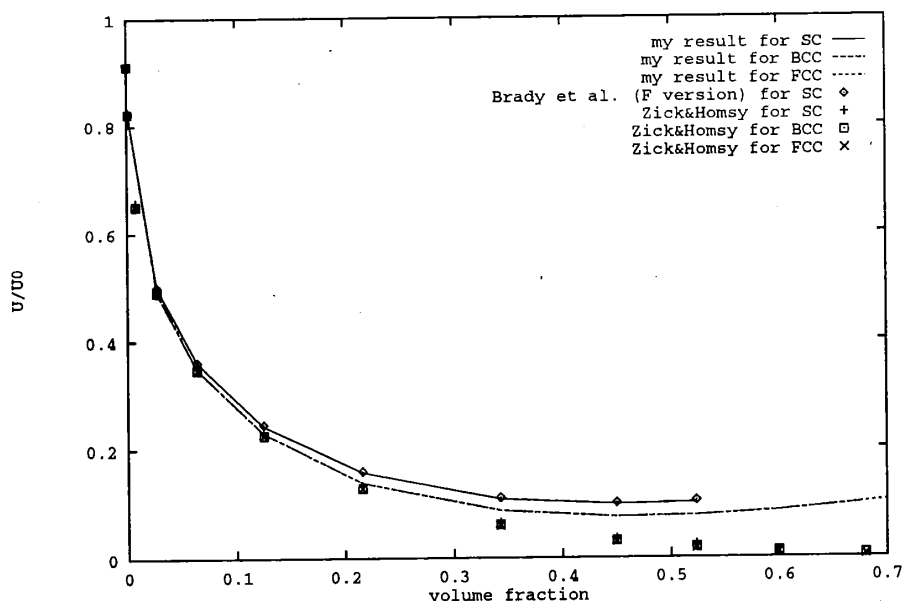


図 3.6 格子配列の粒子の沈降速度。線で示したものが私の結果である。(これはトルクなどを無視している。) Brady *et al.* は、同じ精度の計算である。Zick & Homsey は、数値厳密解である。

このグラフを見る通り、我々のプログラムは、Brady *et al.* の結果を完全に再現しており、正しく動作していることが確認できた。また、Zick & Homsey の数値厳密解と比較して、非常に高濃度の領域を除けば、高次のモーメントを無視しても良いことが分かる。

⁸この手法のオリジナルである Brady *et al.* (1988) [52] では、O'Brien (1979) [54] の方法を用いて示してあるが、その物理的意味は同じである。

3.4 固定粒子の導入

2.2節で見たように、系の時間発展を行なうために必要な流体力学的な計算は、 $St = 0$ での粒子の速度、つまり終端速度である。これは、resistance 行列が求まれば計算できる。この節では、系の中に固定粒子を導入した場合の、終端速度の計算について示す。ここでの議論は、粒子のトルクも考慮することにする。

まず、自由粒子と固定粒子を含めた系の resistance 行列が計算できているとする。(resistance 行列は粒子の配置にのみ依存するので、自由粒子と固定粒子の区別はない。)ここでは簡単のため、粒子のない時の流体の剛体的な回転はないとする。つまり、 $\Omega^\infty = \vec{0}$ とする。

$$\begin{bmatrix} \mathbf{F}_m \\ \mathbf{F}_f \\ \mathbf{T}_m \\ \mathbf{T}_f \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A_{mm} & A_{mf} & \tilde{B}_{mm} & \tilde{B}_{mf} \\ A_{fm} & A_{ff} & \tilde{B}_{fm} & \tilde{B}_{ff} \\ B_{mm} & B_{mf} & C_{mm} & C_{mf} \\ B_{fm} & B_{ff} & C_{fm} & C_{ff} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \mathbf{U}_m - \mathbf{U}_m^\infty \\ -\mathbf{U}_f^\infty \\ \Omega_m \\ \vec{0} \end{bmatrix} \quad (3.4.1)$$

ここで、自由粒子の部分は添字 m を、固定粒子の部分は添字 f を用いて表す。自由粒子に働く力は既知であるが、その速度は解くべき量である。一方、固定粒子の速度は既知であるが、働く力は解くべき量である。求めたいものは、自由粒子の終端速度で、これを既知の量で表したい。

(3.4.1) 式から、自由粒子の力の部分を抜き出してみる。

$$\begin{bmatrix} \mathbf{F}_m \\ \mathbf{T}_m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A_{mm} & \tilde{B}_{mm} \\ B_{mm} & C_{mm} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \mathbf{U}_m - \mathbf{U}_m^\infty \\ \Omega_m \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} A_{mf} \\ B_{mf} \end{bmatrix} \cdot \mathbf{U}_f^\infty \quad (3.4.2)$$

この式を自由粒子の速度についてとくと、次の式が得られる。

$$\begin{bmatrix} \mathbf{U}_m - \mathbf{U}_m^\infty \\ \Omega_m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A_{mm} & \tilde{B}_{mm} \\ B_{mm} & C_{mm} \end{bmatrix}^{-1} \cdot \left\{ \begin{bmatrix} \mathbf{F}_m \\ \mathbf{T}_m \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} A_{mf} \\ B_{mf} \end{bmatrix} \cdot \mathbf{U}_f^\infty \right\} \quad (3.4.3)$$

従って、自由粒子の終端速度が求められた。

この式は、無限粒子系に対しても用いることが出来る。実際、(3.3.1) 式から、基本セル内の粒子に対して mobility 行列が構成できることが分かる。

粒子の慣性を、2.2節の方法で取り入れた場合は、固定粒子と自由粒子の衝突が起こり得る。この場合は、固定された粒子と自由粒子の衝突時の速度関係を用いて、この接触を表す。

第4章

シミュレーション結果

4.1 はじめに

この章では、3.3節で見た、周期境界条件を用いた無限粒子系に対する計算結果を、幾つかの現象や、評価すべき効果に分けて紹介する。ここで示す計算において、粒子の慣性の効果は、2.2節に述べた方法で取り入れている。固定粒子についても、3.4節で示した方法で取り入れている。

4.2 スラッグ

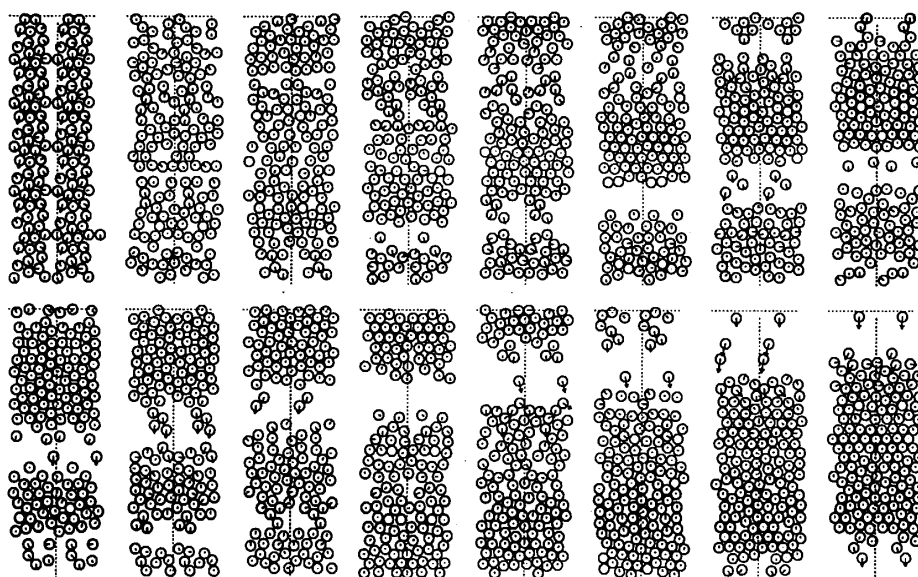


図 4.1 流体は空気、粒子半径は $10[\mu\text{m}]$ 、粒子数は 72 個、基本セルを横の 2 つ並べて表示してある。粒子の体積分率は 0.35 で、時間経過は左から右に進み、その時間は $0.16[\text{sec}]$ である。図の矢印は粒子の速度を表す。

まず、流体が空気の場合の計算結果を紹介する。周期境界の基本セルの横幅が狭い場合（粒子直径の 4.25 倍）、系の振舞いは一次元的になり、スラッグと呼ばれる、膜状の空隙層が生じ、安定に存在することが分

市來 健吾

かった。この様子を、図 4.1 に示す。このスラグは、粒子の平均速度に比べて上昇している。従って、粒子はスラグの中を落下している様子が見られる。

この結果を見ると、周期境界の影響を非常に強く受け、粒子の自由が妨げられていることが分かる。実際、粒子の集まっている領域では、ほとんど closed pack の状態になり、粒子間に大きな相対的な運動は見られない。

4.3 気泡と対流

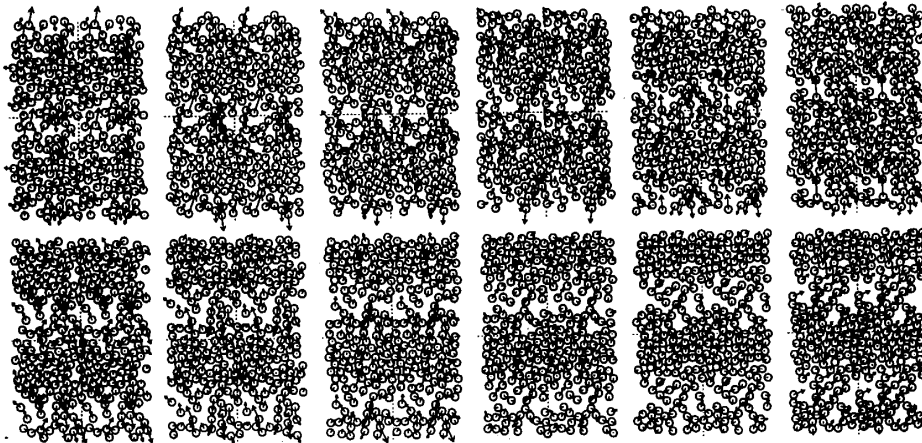


図 4.2 流体は空気、粒子半径は $10[\mu\text{m}]$ 、粒子数は 72 個、基本セルを縦横それぞれの 2 つ並べて表示してある。時間経過は左から右に進み、時間は $0.024[\text{sec}]$ である。

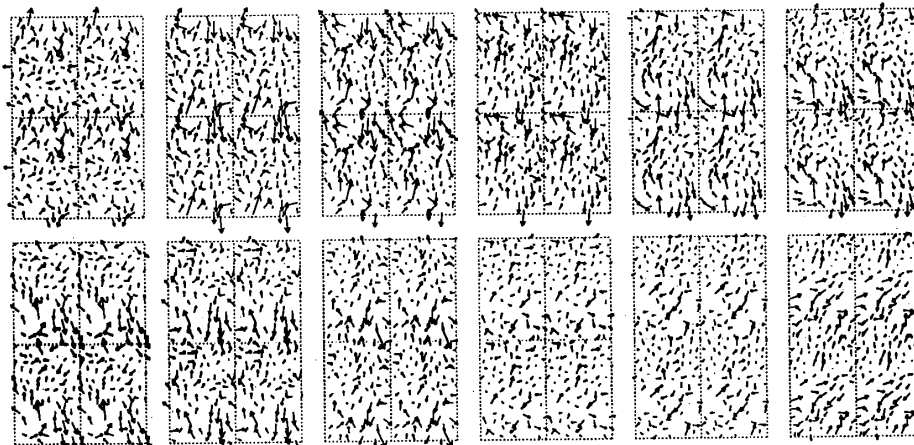


図 4.3 図 4.2 で、粒子の速度のみを表示したもの。

粒子の体積分や、粒子半径、その他パラメータは図 4.1 の計算と同じで、基本セルが正方形に近い場合の、粒子の挙動について見る。

図 4.2, 4.3 に示すように、局所的に見た時、粒子濃度が低いところでは、粒子が上昇し、逆に濃いところ

では下降している様子が見られる。はっきりした気泡とは呼べないが、この粒子濃度の低い領域を中心に、粒子が対流のように渦を巻いているように見える。ただ、この対流や、気泡は安定ではなく、生成、消滅を繰り返している。図に示した結果は、前後の継りが分かるように、実際行なった計算の、極短い部分を示したものである。

3.2.4節で見たように、「粒子濃度が高いほど沈降速度が大きい」という性質は、有限粒子系の特徴であり、無限粒子系では逆に「粒子濃度が高いほど沈降速度が小さい」ものであった。従って、ここで示した計算結果は、その主張と矛盾しているようにも思われる。しかし、粒子が少ないところは、流体がよく流れ、従ってそこでの流速は速いと思われる。また、粒子が多いところは、流体は殆んど流れず、流速は遅いだろう。

ここで用いた計算手法では、粒子の速度（つまり、粒子表面での流体の速度）のみを扱い、流体の速度という情報を落しているため、この考察に対して、はっきりしたことは言えない。しかし、実験的には、このシミュレーションで見られるような、気泡の中を粒子は吹き上げられ、気泡のまわりで粒子が下降することが知られている。

4.4 固定粒子の効果

底に固定粒子を置いた場合のシミュレーション結果を示す。固定粒子の間隔は、半径の1.5倍とした。（つまり、間を擦り抜けないような間隔。）

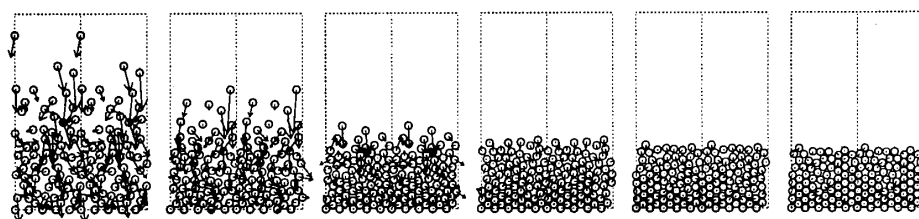


図 4.4 底に固定粒子を置いた場合の計算結果。流体の流入速度は 0 である。流体は空気、粒子半径は $10[\mu\text{m}]$ 、粒子数は 72 個、基本セルを横の 2 つ並べて表示してある。時間経過は左から右に進み、その時間は $0.06[\text{sec}]$ である。

はじめに、堆積過程を示す。ここでは、流体は流されていない。この様子を、図 4.4 に示す。

次に、堆積過程の後に、流体を流した時の系の変化を見てみる。まず、流体の流速を $0.15U_0$ とした場合の結果を、図 4.5 に示す。良く見ると、4 コマから 5 コマに一つずつ、粒子の直径の 4 倍程度の気泡が次々に発生し、上に抜けていく様子が見られる。はじめに、粒子全体が持ち上がっているのは、おそらくこの計算が、流体の流速を 0 から有限の値に、不連続に変化させたことに対応しているためと思われる。

先と同様に、積過程の後に、流速が $0.30U_0$ の流体を流した時の系の変化を、図 4.6 に示す。この場合も、はじめに粒子全体が持ち上がって、下の粒子から不安定化している。先ほどと比べて、粉体の高さも高くなっており、従って粒子濃度が薄くなっていることが分かる。気泡のようなものも発生しているが、先程に比べて不安定である。おそらく、気泡の大きさが、基本セルの横幅程度に増したためと思われる。

市來 健吾

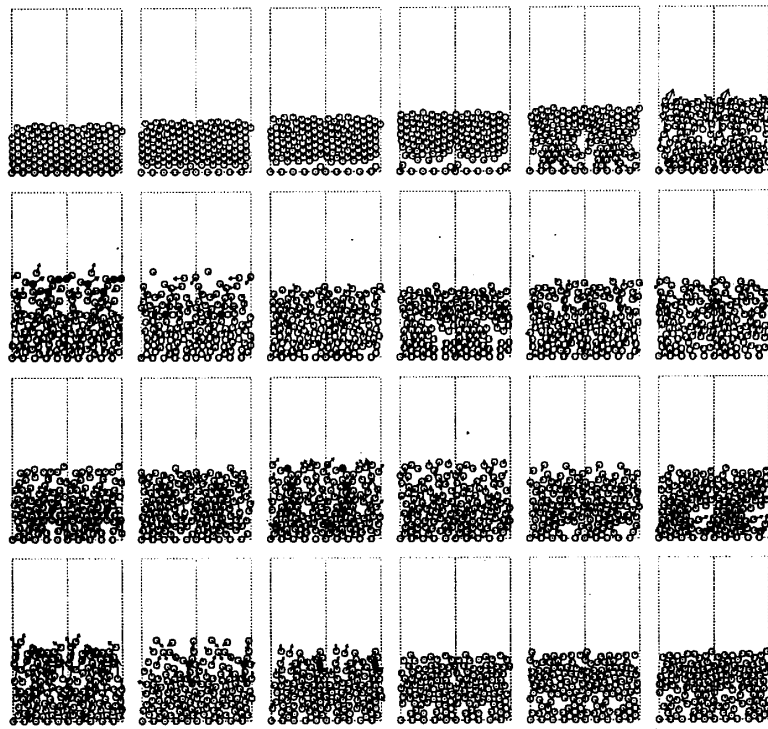


図 4.5 底に固定粒子を置いた場合の計算結果。流体の流入速度は $0.15U_0$ である。流体は空気、粒子半径は $10[\mu\text{m}]$ 、粒子数は 72 個、基本セルを横の 2 つ並べて表示してある。時間経過は左から右に進み、その時間は $0.18[\text{sec}]$ である。

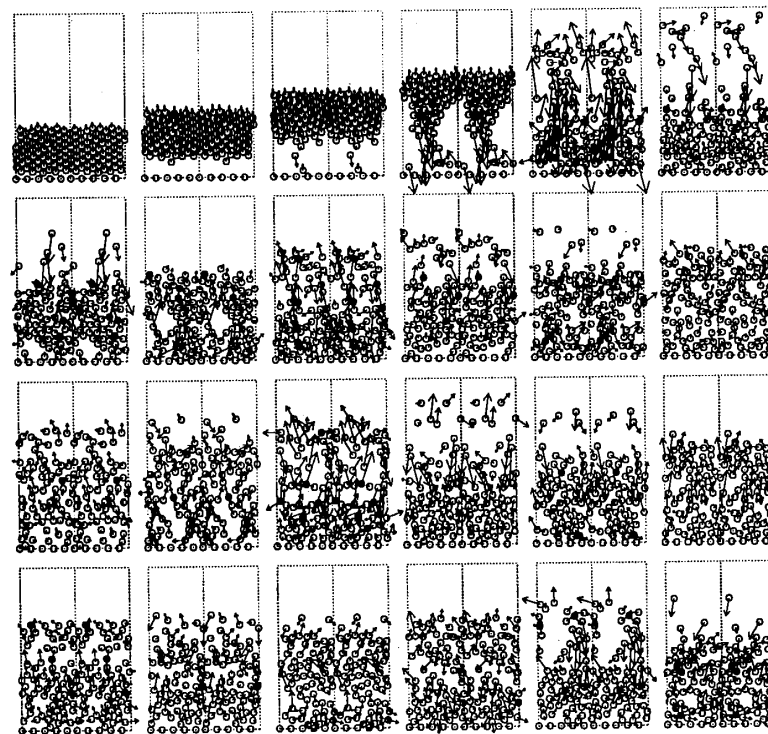


図 4.6 底に固定粒子を置いた場合の計算結果。流体の流入速度は $0.3U_0$ である。流体は空気、粒子半径は $10[\mu\text{m}]$ 、粒子数は 72 個、基本セルを横の 2 つ並べて表示してある。時間経過は左から右に進み、その時間は $0.18[\text{sec}]$ である。

4.5 粒子の速度分布

つぎに、粒子速度の分布についてみる。図 4.7 に、特徴的な速度分布を示す。この結果は、スラグが得られたシミュレーション (図 4.1) のものである。この図は semi-log プロットであり、結果から指数分布を示していることが分かる。

底に固定粒子を置いた場合のシミュレーションにおいても、やはり指数分布が得られた。図 4.5 のシミュレーションでの、粒子の速度分布を計算した結果を、図 4.8 に示す。

一方、図 4.2 に示したのシミュレーションに対して粒子の速度分布を見ると、図 4.9 に示すように、幾分 Gauss 分布的になる。その場合も、tail 部分はやはり指数分布的である。

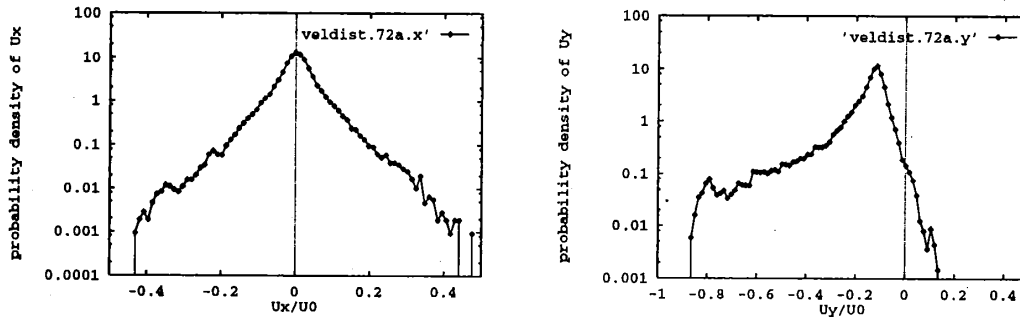


図 4.7 粒子の速度分布。図 4.1 の結果のものである。縦軸は log scale である。左図が水平方向の速度成分の分布、右図が垂直方向の速度成分の分布 (上方を正とし、流体に対する粒子の速度を示したものの)。それぞれ 1 粒子の沈降速度 U_0 でスケールしてある。

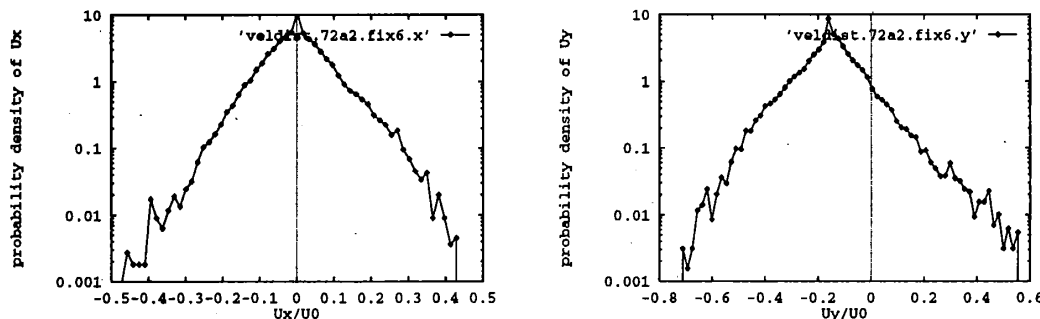


図 4.8 粒子の速度分布。固定粒子をおいた場合の図 4.5 の結果のものである。

このように、速度が指数分布を示す結果は、粉体振動層での粒子の速度分布に対して得られている [23]。また、流体の乱流現象の中の、「ハード乱流」と呼ばれる現象 [56] において、その速度分布が指数的になることが知られている。その物理的な意味は、まだ解明されていない。

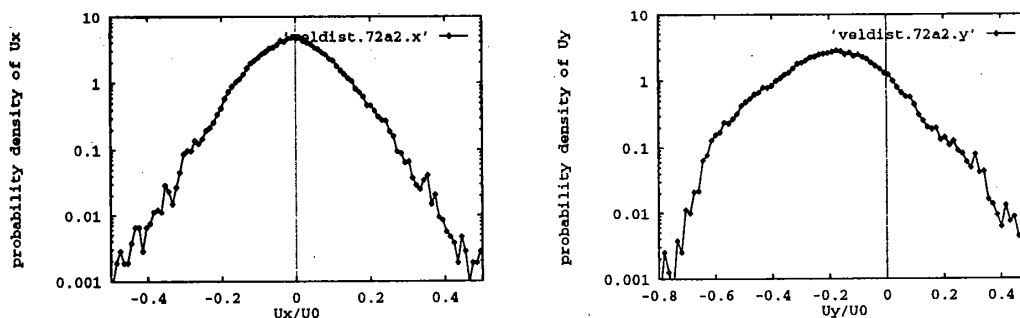


図 4.9 粒子の速度分布。図 4.2 の結果のものである。

第 II 部 粘性流体中の多粒子系の基礎的性質

第 5 章

平均沈降速度

5.1 意義

粘性流体中の多粒子系で、重力が働く場合、粒子の平均沈降速度は、最も基本的な物理量である¹。このように、非常に重要な量であるにも拘らず、物理的に完全な理解は、未だに得られていない。その原因は、これまでも幾度となく触れてきた、流体力学的相互作用の複雑さや、その長距離性の為である。

粉体系の解析という側面から見ても、沈降速度は重要である。粉体流動層を記述する現象論的なモデルの殆んどは、粒子の平均沈降速度の、粒子濃度依存性を用いている。この沈降速度の、粒子濃度依存性を表す関係式は、幾つかの経験的な法則が得られている。その中でも、比較的広範囲で実験値と良く一致するものに、Recharadson & Zaki relation と呼ばれるものがある。それは、次の形を持つ。

$$\frac{U}{U_0} = (1 - \phi)^n \quad (5.1.1)$$

ここで、 U は粒子の平均沈降速度、 U_0 は1粒子が単独にある時の沈降速度で、良く知られた Stokes の法則から $U_0 = 6\pi\mu a$ となる。 ϕ は、粒子の体積分率である。 n は、フィッティングパラメータで、 $n = 5.5$ 程度が良く用いられる。しかし、これらの現象論的關係式を与える、物理的な理論は、未だ存在しない。

このように、沈降速度の問題は、粘性流体中の多粒子系の基礎的な問題であるだけでなく、様々な現象を引き起こす粉体流動層の物理的な理解に、欠かすことの出来ない重要なものである。

流体力学的相互作用は、距離 r に関して $1/r$ 依存性を示す、長距離的なものである。そのため、無限粒子系を考慮する場合は、遠方での境界条件をあからさまに考慮する必要がある。ここで考察する系も、本質的に粉体流動層と同じで、各粒子の寄与の、単純な重ね合わせでは、やはり発散の困難を招いてしまう。この章では、平均沈降速度の理論の発展を、歴史的順序にしたがって紹介していくことにする。

5.2 周期格子を組む粒子系

粒子が流体中を自由に動けるのではなく、ある配列を固定したような系での、粒子の沈降速度に対して、Hasimoto(1959) [59] が、はじめて解析を行なった。彼は、単純格子、体心立方格子、面心立方格子を組む無限粒子系に対して、

$$\frac{U}{U_0} = 1 - \alpha\phi^{1/3} \quad (5.2.1)$$

¹この分野に関する詳しい議論は、Russel *et al.* [57] の “Colloidal Dispersion” の 12 章や、Davis *et al.* のレビュー [58] がある。

という結果を得た。ここで α は、格子に依存する正の定数である。彼は、3.3.1節で紹介したものとは、詳細は異なるが、周期境界条件のもとでの、流体力学的相互作用を扱う上で、Ewald summation techniqueを用いている。また、発散を引き起こす、波数0の寄与が、圧力勾配の存在によって打ち消し合うことなどを、既にこの時指摘している。

5.3 ランダムな配置の粒子系

5.3.1 Batchelor の繰り込み

Batchelor(1972) [2] による、希薄で、ランダムで一様な分布の suspension の沈降速度の、 $O(\phi)$ (ϕ は粒子の volume fraction) の精度での見積りをみる。

N 粒子の configuration ($C_N = \{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N\}$) に対する確率分布を次のように定義する。

$$\int dC_N P(C_N) = N! \quad (5.3.1)$$

1 粒子の確率分布は、一様性の仮定の下で、次のようになる。

$$P(C_1) = N/V = n \quad (5.3.2)$$

また、条件つき確率も次のように定義できる。

$$P(C_N) = P(C_1)P(C_{N-1}|C_1) = nP(C_{N-1}|C_1) \quad (5.3.3)$$

$$P(C_N|\mathbf{x}) = P(C_1|\mathbf{x})P(C_{N-1}|\mathbf{x}, C_1) \quad (5.3.4)$$

粒子濃度が低く、large range order がない場合、次の近似が許される。

$$P(C_N|\mathbf{x}) \simeq P(C_N) \quad (5.3.5)$$

この確率分布を用いて、次のような2種類の物理量の平均値を定義する。まず、空間全体に渡って定義できる量 $G(\mathbf{x}, C_N)$ の平均は、

$$\bar{G} = \frac{1}{N!} \int dC_N G(\mathbf{x}, C_N) P(C_N) \quad (5.3.6)$$

と定義される。一方、粒子中心でしか定義されない量 $H(\mathbf{x}, C_N)$ の平均は、次のように定義される。

$$\bar{H} = \frac{1}{N!} \int dC_N H(\mathbf{x}, C_N) P(C_N|\mathbf{x}) \quad (5.3.7)$$

希薄の極限で、これらの平均値は次のように近似できる。

$$\begin{aligned} \bar{G} &= \frac{1}{N!} \sum_{\alpha=1}^N \int dC_{N-1} P(C_{N-1}) \int d\mathbf{x}_\alpha G(\mathbf{x}, \mathbf{x}_\alpha) P(\mathbf{x}_\alpha) + O(\phi^2) \\ &\simeq \int d\mathbf{r} G(\mathbf{x}, \mathbf{x} + \mathbf{r}) P(\mathbf{x} + \mathbf{r}) \\ \bar{H} &\simeq \int d\mathbf{r} H(\mathbf{x}, \mathbf{x} + \mathbf{r}) P(\mathbf{x} + \mathbf{r}|\mathbf{x}) \end{aligned} \quad (5.3.8)$$

これは、 N 体問題を2体問題に reduce したことになる。

粒子の平均沈降速度は、次のように定義できる。

市来 健吾

$$\bar{U} = \frac{1}{N!} \int dC_N U(\mathbf{x}_0, C_N) P(C_N | \mathbf{x}_0) \quad (5.3.9)$$

ここで、 $U(\mathbf{x}_0, C_N)$ は粒子配置が C_N の suspension 中で、 \mathbf{x}_0 にある test particle の沈降速度である。これは、次のように書くことができる。

$$U(\mathbf{x}_0, C_N) = U_0 + V(\mathbf{x}_0, C_N) + \bar{W}(\mathbf{x}_0, C_N) \quad (5.3.10)$$

U_0 は、1 粒子の沈降速度で、Stokes' law から次のようになる。

$$U_0 = \frac{F}{6\pi\mu a} \quad (5.3.11)$$

V は、 N 粒子が点 \mathbf{x}_0 につくる velocity disturbance ${}^2u(\mathbf{x}_0, C_N)$ の、test particle 表面 S_0 での平均である。従ってこの u は test particle がない時の速度場である。これは、流体の速度場 u に対する slow motion 近似 ($\nabla^4 u = 0$) のもとで、粒子中心で Taylor 展開すると、次のように書ける。

$$\begin{aligned} V(\mathbf{x}_0, C_N) &= \frac{1}{4\pi a^2} \int_{S_0} d\mathbf{x} u(\mathbf{x}, C_N) \\ &= u(\mathbf{x}_0, C_N) + \frac{1}{6} a^2 \nabla^2 u(\mathbf{x}, C_N)|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_0} \end{aligned} \quad (5.3.12)$$

u は Stokes 方程式を満たすものである。 \bar{W} は、 U_0, V で表すことの出来ない高次の補正、つまり test particle を含む 2 体以上の相互作用を表す部分といえる。

次に希薄極限を用いて、一般的には N 粒子の多体効果を含む平均沈降速度を簡単化する。まず \bar{W} の項から見ていく。(5.3.8) 式から、

$$\begin{aligned} \bar{W} &= \frac{1}{N!} \int dC_N W(\mathbf{x}_0, C_N) P(C_N | \mathbf{x}_0) \\ &\simeq \int d\mathbf{r} W(\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_0 + \mathbf{r}) P(\mathbf{x}_0 + \mathbf{r} | \mathbf{x}_0) + O(\phi^2) \end{aligned}$$

$$\bar{W} \simeq \int d\mathbf{r} W(\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_0 + \mathbf{r}) P(\mathbf{x}_0 + \mathbf{r} | \mathbf{x}_0) \quad (5.3.13)$$

次に、 V の寄与を考える。まず、 \bar{V} を二つの項に分けて考える。

$$\bar{V} = \bar{V}' + \bar{V}'' \quad (5.3.14)$$

$$\bar{V}' = \frac{1}{N!} \int dC_N u(\mathbf{x}_0, C_N) P(C_N | \mathbf{x}_0) \quad (5.3.15)$$

$$\bar{V}'' = \frac{1}{N!} \int dC_N \frac{1}{6} a^2 [\nabla^2 u(\mathbf{x}_0, C_N)]_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_0} P(C_N | \mathbf{x}_0) \quad (5.3.16)$$

いま、 u が disturbance であることに注意すると³、

$$\bar{u} = \frac{1}{N!} \int dC_N u(\mathbf{x}_0, C_N) P(C_N) = 0 \quad (5.3.17)$$

となる。従って、 \bar{V}' は次のように書ける。

$$\bar{V}' = \frac{1}{N!} \int dC_N u(\mathbf{x}_0, C_N) \{P(C_N | \mathbf{x}_0) - P(C_N)\} \quad (5.3.18)$$

²これは、無限遠での境界条件をゼロに置いていると言う意味である。

³つまり、無限遠でゼロになるという条件。

ここで、確率分布の差は、

$$\begin{aligned} P(C_N|\mathbf{x}_0) - P(C_N) &= P(\mathbf{x}_0 + \mathbf{r}|\mathbf{x}_0)P(C_{N-1}|\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_0 + \mathbf{r}) - P(\mathbf{x}_0 + \mathbf{r})P(C_{N-1}|\mathbf{x}_0 + \mathbf{r}) \\ &\simeq \{P(\mathbf{x}_0 + \mathbf{r}|\mathbf{x}_0) - P(\mathbf{x}_0 + \mathbf{r})\}P(C_{N-1}) + O(\phi^2) \end{aligned}$$

と近似できる。従って、 $O(\phi)$ の精度で、 \bar{V}' は次のように書ける。

$$\bar{V}' = \int d\mathbf{r} \mathbf{u}(\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_0 + \mathbf{r}) \{P(\mathbf{x}_0 + \mathbf{r}|\mathbf{x}_0) - P(\mathbf{x}_0 + \mathbf{r})\} \quad (5.3.19)$$

\bar{V}'' について見るために、次のように定義される deviatoric stress tensor d_{ij} の性質に注目する。

$$d_{ij} = \sigma_{ij} - \frac{1}{3}\delta_{ij}\sigma_{kk} \quad (5.3.20)$$

ここで σ_{ij} は stress tensor である。Newtonian fluid の場合、 $d_{ij} = 2\mu e_{ij}$ となる。 e_{ij} は rate-of-strain tensor で、次のように定義される。

$$e_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (5.3.21)$$

uniform suspension では、deviatoric tensor d_{ij} の平均は、空間的に一定となる。従って、その空間微分は当然ゼロになる。

$$\frac{1}{N!} \int dC_N \frac{\partial d_{ij}(\mathbf{x}, C_N)}{\partial x_j} P(C_N) = 0 \quad (5.3.22)$$

流体中での deviatoric stress は、(つまり、全ての α について $|\mathbf{x} - \mathbf{x}_\alpha| > a$ である \mathbf{x} に対して、)

$$\frac{\partial d_{ij}(\mathbf{x}, C_N)}{\partial x_j} = \mu \nabla^2 u_i(\mathbf{x}, C_N) \quad (5.3.23)$$

となる。一方粒子の内部では、(つまり $|\mathbf{x} - \mathbf{x}_\alpha| \leq a$ で、)

$$\begin{aligned} \frac{1}{N!} \int dC_{N-1} \int_{|\mathbf{x} - \mathbf{x}_\alpha| \leq a} d\mathbf{x}_\alpha \frac{\partial d_{ij}(\mathbf{x}, C_N)}{\partial x_j} P(C_N) &\simeq \frac{1}{N!} \int dC_{N-1} \int_{|\mathbf{x} - \mathbf{x}_\alpha| \leq a} d\mathbf{x}_\alpha \frac{\partial d_{ij}(\mathbf{x}, C_N)}{\partial x_j} n P(C_{N-1}|\mathbf{x}_\alpha) \\ &\simeq \frac{n}{N!} \int dC_{N-1} P(C_{N-1}|\mathbf{x}_\alpha) \int_{|\mathbf{x} - \mathbf{x}_\alpha| \leq a} d\mathbf{x}_\alpha \frac{\partial d_{ij}(\mathbf{x}, C_N)}{\partial x_j} \\ &\simeq \frac{n}{N!} \int dC_{N-1} P(C_{N-1}|\mathbf{x}_\alpha) \int_{|\mathbf{x} - \mathbf{x}_\alpha| \leq a} d\mathbf{x} \frac{\partial d_{ij}(\mathbf{x}, C_N)}{\partial x_j} \\ &= \frac{n}{N!} \int dC_{N-1} P(C_{N-1}|\mathbf{x}_\alpha) \int_{S_\alpha} dx_j d_{ij}(\mathbf{x}, C_N) \\ &= \frac{n}{N!} \int dC_{N-1} P(C_{N-1}|\mathbf{x}_\alpha) f_i(\mathbf{x}_\alpha, C_{N-1}) \end{aligned} \quad (5.3.24)$$

となる。ここで、 f は次のように定義される。

$$f_i(\mathbf{x}_\alpha, C_{N-1}) = \int_{S_\alpha} dx_j d_{ij}(\mathbf{x}, C_N) \quad (5.3.25)$$

この (5.3.23) 式と (5.3.24) 式を用いて、(5.3.22) 式の関係は、次のように書ける。

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{1}{N!} \int_{|\mathbf{x} - \mathbf{x}_\alpha| > a, \text{all } \alpha} dC_N \mu \nabla^2 u_i(\mathbf{x}, C_N) P(C_N) \\ &\quad + \sum_{\alpha=1}^N \frac{n}{N!} \int dC_{N-1} f_i(\mathbf{x}_\alpha, C_{N-1}) P(C_{N-1}|\mathbf{x}_\alpha) \end{aligned} \quad (5.3.26)$$

市來 健吾

この結果を用いて、(5.3.16)式を書き換えると、 \bar{V}'' に対して次の表式が得られる。

$$\begin{aligned}
 \bar{V}'' &= \frac{1}{N!} \int dC_N \frac{1}{6} a^2 [\nabla^2 \mathbf{u}(\mathbf{x}_0, C_N)]_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_0} P(C_N | \mathbf{x}_0) \\
 &\simeq \frac{1}{N!} \int_{|\mathbf{x}-\mathbf{x}_\alpha| > a, \text{all } \alpha} dC_N \frac{1}{6} a^2 [\nabla^2 \mathbf{u}(\mathbf{x}, C_N)]_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_0} \{P(C_N | \mathbf{x}_0) - P(C_N)\} \\
 &\quad - \sum_{\alpha=1}^N \frac{1}{6} a^2 \frac{1}{\mu} \frac{n}{N!} \int dC_{N-1} \mathbf{f}(\mathbf{x}_\alpha, C_{N-1}) P(C_{N-1} | \mathbf{x}_\alpha) \\
 &\simeq \frac{1}{N!} \int_{|\mathbf{x}-\mathbf{x}_\alpha| > a, \text{all } \alpha} dC_N \frac{1}{6} a^2 [\nabla^2 \mathbf{u}(\mathbf{x}, C_N)]_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_0} \{P(C_N | \mathbf{x}_0) - P(C_N)\} \\
 &\quad - N \frac{1}{N!} \int dC_{N-1} \frac{na^2}{6\mu} \mathbf{f}(\mathbf{x}_0, C_{N-1}) P(C_{N-1} | \mathbf{x}_0)
 \end{aligned} \tag{5.3.27}$$

ここで、 \mathbf{f} の項は粒子依存性がないとして、test particleで代表させた。 \mathbf{f} は、 $\phi \rightarrow 0$ で、

$$\begin{aligned}
 f_i &\simeq \int_{S_0} dx_j d_{ij}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0) \\
 &= \int_{r=a} dr_j d_{ij}(\mathbf{r} + \mathbf{x}_0, \mathbf{x}_0) \\
 &= a^2 \int_{r=a} d\hat{r} d_{ij}(\mathbf{r} + \mathbf{x}_0, \mathbf{x}_0) \hat{r}_j
 \end{aligned} \tag{5.3.28}$$

となる。 \hat{r} は、球表面 S_0 の法線 vectorである。ここで、

$$d_{ij}(\mathbf{r} + \mathbf{x}_0, \mathbf{x}_0) = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \tag{5.3.29}$$

$$\mathbf{u}(\mathbf{r} + \mathbf{x}_0, \mathbf{x}_0) = \frac{1}{8\pi\mu} \left[\overleftrightarrow{I} \left(\frac{1}{r} + \frac{a^2}{3} \frac{1}{r^3} \right) + \frac{\mathbf{r}\mathbf{r}}{r^2} \left(\frac{1}{r} - \frac{a^2}{r^3} \right) \right] \cdot \mathbf{F} \tag{5.3.30}$$

である⁴。

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial u_i}{\partial x_j} &= \frac{F_k}{8\pi\mu} \left[\delta_{ik} \frac{r_j}{r} \left(-\frac{1}{r^2} - \frac{a^2}{r^4} \right) + \left(\frac{1}{r^3} - \frac{a^2}{r^5} \right) (\delta_{ji} r_k + \delta_{jk} r_i) \right. \\
 &\quad \left. + r_i r_k \frac{r_j}{r} \left(-\frac{3}{r^4} + \frac{5a^2}{r^6} \right) \right]
 \end{aligned}$$

より、

$$\begin{aligned}
 d_{ij}(\mathbf{r} + \mathbf{x}_0, \mathbf{x}_0) \hat{r}_j &= \frac{F_k}{8\pi} \hat{r}_j \left[-\left(\frac{1}{r^2} + \frac{a^2}{r^4} \right) (\delta_{ik} \hat{r}_j + \delta_{jk} \hat{r}_i) \right. \\
 &\quad \left. + \left(\frac{1}{r^2} - \frac{a^2}{r^4} \right) (2\delta_{ji} \hat{r}_k + \delta_{jk} \hat{r}_i + \delta_{ik} \hat{r}_j) - \left(\frac{3}{r^2} - \frac{5a^2}{r^4} \right) 2\hat{r}_i \hat{r}_k \hat{r}_j \right] \\
 &= \frac{F_k}{8\pi} \left[-2\frac{a^2}{r^4} (\delta_{ik} + \hat{r}_i \hat{r}_k) + \left(\frac{1}{r^2} - \frac{a^2}{r^4} \right) 2\hat{r}_i \hat{r}_k - \left(\frac{3}{r^2} - \frac{5a^2}{r^4} \right) 2\hat{r}_i \hat{r}_k \right]
 \end{aligned} \tag{5.3.31}$$

となる。従って、(5.3.28)式から、 \mathbf{f} は次のようになる。

$$\begin{aligned}
 f_i &\simeq a^2 \int_{r=a} d\hat{r} \frac{F_k}{8\pi} \left[-2\frac{a^2}{r^4} (\delta_{ik} + \hat{r}_i \hat{r}_k) + \left(\frac{1}{r^2} - \frac{a^2}{r^4} \right) 2\hat{r}_i \hat{r}_k - \left(\frac{3}{r^2} - \frac{5a^2}{r^4} \right) 2\hat{r}_i \hat{r}_k \right] \\
 &= \frac{F_k}{8\pi} \int d\hat{r} [-2(\delta_{ik} + \hat{r}_i \hat{r}_k) + 4\hat{r}_i \hat{r}_k] \\
 &= \frac{F_k}{8\pi} \left(-2\delta_{ik} 4\pi + 2\delta_{ik} \frac{4\pi}{3} \right) \\
 &= \frac{2}{3} F_i
 \end{aligned} \tag{5.3.32}$$

⁴ $\mathbf{u}(\mathbf{r} + \mathbf{x}_0, \mathbf{x}_0)$ は、 \mathbf{x}_0 にある一つの粒子が、 $\mathbf{r} + \mathbf{x}_0$ に作る速度場である。

ここで、 $\int d\hat{r} \hat{r} \hat{r} = \frac{4\pi}{3} \vec{I}$ を用いた。

$$\int d\hat{r} \hat{r}_i \hat{r}_j = \delta_{ij} \frac{4}{3} \pi \quad (5.3.33)$$

この式は、実際、 $i = j$ の場合、次のように計算できる。

$$\begin{aligned} \int d\hat{r} \hat{r}_i \hat{r}_i &= 2\pi \int_0^\pi d\theta \sin\theta \cos^2\theta \\ &= 2\pi \int_{-1}^1 dX X^2 \\ &= \frac{4}{3} \pi \end{aligned}$$

また、 $i \neq j$ の場合は、 $\sin\phi$ か $\cos\phi$ の ϕ 積分がでてきて、ゼロになる。(5.3.32) 式の結果から、(5.3.27) 式の f の部分は、

$$\begin{aligned} \frac{na^2}{6\mu} f &\simeq -\frac{2}{3} \frac{na^2}{6\mu} F \\ &= -\frac{na^2}{9\mu} 6\pi\mu a U_0 \\ &= -\frac{2}{3} \pi a^3 n U_0 \\ &= -\frac{1}{2} \phi U_0 \end{aligned}$$

となる。ここで、(5.3.19) 式の導出と同様の近似をする。

$$\begin{aligned} \bar{V}'' &\simeq \frac{1}{N!} \int_{|\mathbf{x}-\mathbf{x}_\alpha| > a, \text{all } \alpha} dC_N \frac{1}{6} a^2 [\nabla^2 \mathbf{u}(\mathbf{x}, C_N)]_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_0} \{P(C_N|\mathbf{x}_0) - P(C_N)\} \\ &\quad - \frac{1}{(N-1)!} \int dC_{N-1} \frac{na^2}{6\mu} f(\mathbf{x}_0, C_{N-1}) P(C_{N-1}|\mathbf{x}_0) \\ &\simeq \int_{|\mathbf{x}-\mathbf{x}_\alpha| > a, \text{all } \alpha} d\mathbf{r} \frac{1}{6} a^2 [\nabla^2 \mathbf{u}(\mathbf{x}, \mathbf{x} + \mathbf{r})]_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_0} \{P(\mathbf{x}_0 + \mathbf{r}|\mathbf{x}_0) - P(\mathbf{x}_0 + \mathbf{r})\} \\ &\quad - \frac{1}{(N-1)!} (N-1)! \frac{na^2}{6\mu} f + O(\phi^2) \\ &\simeq \int_{r>a} d\mathbf{r} \frac{1}{6} a^2 [\nabla^2 \mathbf{u}(\mathbf{x}, \mathbf{x} + \mathbf{r})]_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_0} \{P(\mathbf{x}_0 + \mathbf{r}|\mathbf{x}_0) - P(\mathbf{x}_0 + \mathbf{r})\} \\ &\quad + \frac{1}{2} \phi U_0 + O(\phi^2). \end{aligned}$$

$$\bar{V}'' \simeq \int_{r>a} d\mathbf{r} \frac{1}{6} a^2 [\nabla^2 \mathbf{u}(\mathbf{x}, \mathbf{x} + \mathbf{r})]_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_0} \{P(\mathbf{x}_0 + \mathbf{r}|\mathbf{x}_0) - P(\mathbf{x}_0 + \mathbf{r})\} + \frac{1}{2} \phi U_0 \quad (5.3.34)$$

以上をまとめると、希薄極限で沈降速度は次のように書ける。

$$\begin{aligned}
\bar{U} &= U_0 + \int dr \mathbf{u}(\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_0 + \mathbf{r}) \{P(\mathbf{x}_0 + \mathbf{r}|\mathbf{x}_0) - P(\mathbf{x}_0 + \mathbf{r})\} \\
&\quad + \int_{r>a} dr \frac{1}{6} a^2 [\nabla^2 \mathbf{u}(\mathbf{x}, \mathbf{x} + \mathbf{r})]_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_0} \{P(\mathbf{x}_0 + \mathbf{r}|\mathbf{x}_0) - P(\mathbf{x}_0 + \mathbf{r})\} + \frac{1}{2} \phi U_0 \\
&\quad + \int dr W(\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_0 + \mathbf{r}) P(\mathbf{x}_0 + \mathbf{r}|\mathbf{x}_0)
\end{aligned} \tag{5.3.35}$$

まず、条件付き確率 $P(\mathbf{x}_0 + \mathbf{r}|\mathbf{x}_0)$ が pair distribution function $g(r)$ で表されるとする。つまり、 P に角度依存がないとすると、角度積分が出来る。

$$\begin{aligned}
\bar{U} &= U_0 + n \int dr \mathbf{u}(\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_0 + \mathbf{r}) \{g(r) - 1\} \\
&\quad + n \int_{r>a} dr \frac{1}{6} a^2 [\nabla^2 \mathbf{u}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0 + \mathbf{r})]_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_0} \{g(r) - 1\} + \frac{1}{2} \phi U_0 \\
&\quad + n \int dr W(\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_0 + \mathbf{r}) g(r)
\end{aligned} \tag{5.3.36}$$

$\mathbf{u}(\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_0 + \mathbf{r})$ は、 $\mathbf{x}_0 + \mathbf{r}$ にある粒子が \mathbf{x}_0 につくる速度場であり、1粒子問題である。この解は次のように書ける⁵。

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_0 + \mathbf{r}) = \begin{cases} U_0 & r < a \\ \left[\overleftarrow{\mathbf{T}} \left(\frac{3a}{4r} + \frac{a^3}{4r^3} \right) + \frac{\mathbf{r}\mathbf{r}}{r^2} \left(\frac{3a}{4r} - \frac{3a^3}{4r^3} \right) \right] \cdot U_0 & r > a \end{cases} \tag{5.3.37}$$

また、Laplacian を作用させて、次の式を得る。

$$\nabla^2 \mathbf{u}(\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_0 + \mathbf{r}) = \begin{cases} \vec{0} & r < a \\ \left(\overleftarrow{\mathbf{T}} \frac{3a}{2r^3} - \frac{\mathbf{r}\mathbf{r}}{r^2} \frac{9a}{2r^3} \right) \cdot U_0 & r > a \end{cases} \tag{5.3.38}$$

(5.3.38) 式を導くには、次の関係を用いる。

$$\begin{aligned}
\nabla^2 \frac{1}{r} &= 0 \\
\nabla^2 \frac{1}{r^3} &= \frac{6}{r^5} \\
\frac{\partial^2}{\partial r_i \partial r_i} \frac{r_i r_j}{r^3} &= 2 \frac{\delta_{ij}}{r^3} - 6 \frac{r_i r_j}{r^5} \\
\frac{\partial^2}{\partial r_i \partial r_i} \frac{r_i r_j}{r^5} &= 2 \frac{\delta_{ij}}{r^5}
\end{aligned}$$

まずはじめに、(5.3.36) 式の $\nabla^2 \mathbf{u}$ の項を見る。

$$\begin{aligned}
n \int_{r>a} dr \nabla^2 \mathbf{u}(\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_0 + \mathbf{r}) \{g(r) - 1\} &= n \int_{r>a} dr \{g(r) - 1\} \left(\frac{3a}{2r^3} \overleftarrow{\mathbf{T}} - \frac{9a}{2r^3} \frac{\mathbf{r}\mathbf{r}}{r^2} \right) \cdot U_0 \\
&= n \int_a^\infty dr r^2 \{g(r) - 1\} \int \hat{r} \left(\frac{3a}{2r^3} \overleftarrow{\mathbf{T}} - \frac{9a}{2r^3} \frac{\mathbf{r}\mathbf{r}}{r^2} \right) \cdot U_0 \\
&= 0
\end{aligned}$$

ここで、 $g(r) = 0$ ($r < 2a$) を用いた。 r' は、 r を粒子の半径 a でスケールしたものである。また、 $\hat{r}_i \hat{r}_j$ の積分は、(5.3.33) 式の結果 ($\int d\hat{r} \hat{r} \hat{r} = \frac{4\pi}{3} \overleftarrow{\mathbf{T}}$) を用いた。

⁵ $r > a$ での解は、Stokeslet $J_{ij} = (\delta_{ij} + r_i r_j / r^2) / r$ を用いると、 $\mathbf{u} = (1/8\pi\mu)(1 + (a^2/6)\nabla^2) \mathbf{J} \cdot \mathbf{F}$ と書ける。

(5.3.36) 式の \mathbf{u} の項も、同様に角度積分が出来る。

$$\begin{aligned}
& n \int d\mathbf{r} \mathbf{u}(\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_0 + \mathbf{r}) \{g(r) - 1\} \\
&= n \int_{r < a} d\mathbf{r} \mathbf{u}(\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_0 + \mathbf{r}) \{g(r) - 1\} + n \int_{r > a} d\mathbf{r} \mathbf{u}(\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_0 + \mathbf{r}) \{g(r) - 1\} \\
&= n \int_0^a dr r^2 \{g(r) - 1\} \int d\hat{\mathbf{r}} \mathbf{U}_0 \\
&\quad + n \int_a^\infty dr r^2 \{g(r) - 1\} \int d\hat{\mathbf{r}} \left[\left(\frac{3a}{4r} + \frac{a^3}{4r^3} \right) \overleftarrow{\mathbf{T}} + \left(\frac{3a}{4r} - \frac{3a^3}{4r^3} \frac{\mathbf{r}\mathbf{r}}{r^2} \right) \right] \cdot \mathbf{U}_0 \\
&= 4\pi a^3 n \mathbf{U}_0 \int_0^1 dr' r'^2 \{g(r') - 1\} \\
&\quad + na^3 \int_1^\infty dr' r'^2 \{g(r') - 1\} \int d\hat{\mathbf{r}}' \left[\left(\frac{3}{4r'} + \frac{1}{4r'^3} \right) \overleftarrow{\mathbf{T}} + \left(\frac{3}{4r'} - \frac{3}{4r'^3} \hat{\mathbf{r}}' \hat{\mathbf{r}}' \right) \right] \cdot \mathbf{U}_0 \\
&= -\phi \mathbf{U}_0 + 4\pi a^3 n \mathbf{U}_0 \int_1^\infty dr' r'^2 \{g(r') - 1\} \left[\left(\frac{3}{4r'} + \frac{1}{4r'^3} \right) + \frac{1}{3} \left(\frac{3}{4r'} - \frac{3}{4r'^3} \right) \right] \\
&= -\phi \mathbf{U}_0 + 3\phi \mathbf{U}_0 \int_1^\infty dr' r' \{g(r') - 1\} \\
&= -\phi \mathbf{U}_0 - 3\phi \mathbf{U}_0 \int_1^2 dr' r' + 3\phi \mathbf{U}_0 \int_2^\infty dr' r' \{g(r') - 1\} \\
&= -\phi \mathbf{U}_0 - \frac{9}{2} \phi \mathbf{U}_0 + 3\phi \mathbf{U}_0 \int_2^\infty dr' r' \{g(r') - 1\} \\
&= -\frac{11}{2} \phi \mathbf{U}_0 + 3\phi \mathbf{U}_0 \int_2^\infty dr' r' \{g(r') - 1\}
\end{aligned}$$

(5.3.35) 式の段階で、test particle も含めて 2 粒子の問題になった。 $\mathbf{u}(\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_0 + \mathbf{r})$ は、test particle が無い時の速度場であるので、1 粒子のつくる速度場である。これは、(5.3.37) 式のように解析的に分かっている。従って $\overleftarrow{\mathbf{V}}$ は簡単に計算することが出来た。しかし、 \mathbf{W} は 2 粒子の効果を含んでいるため、このように簡単に計算できない。(5.3.10) 式から、 \mathbf{W} は次のように書ける。

$$\mathbf{W}(\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_0 + \mathbf{r}) = \mathbf{U}(\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_0 + \mathbf{r}) - \mathbf{U}_0 - \mathbf{u}(\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_0 + \mathbf{r}) - \frac{1}{6} a^2 \nabla^2 \mathbf{u}(\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_0 + \mathbf{r}) \quad (5.3.39)$$

$\mathbf{U}(\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_0 + \mathbf{r})$ は、test particle も考えた時の速度場である。この 2 粒子のつくる速度場は、数値的には分かっている。[48, 49] 従って $\overleftarrow{\mathbf{W}}$ は数値的に計算することが出来る。Jeffrey & Onishi [48] の notation で $\mathbf{U}(\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_0 + \mathbf{r})$ を書くと、次のようになる。

$$\begin{aligned}
\mathbf{U}(\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_0 + \mathbf{r}) &= \frac{1}{6\pi\mu a} (\mathbf{a}_{11} \cdot \mathbf{F} + \mathbf{a}_{12} \cdot \mathbf{F}) \\
&= \left[x_{11}^a \frac{\mathbf{r}\mathbf{r}}{r^2} + y_{11}^a \left(\overleftarrow{\mathbf{T}} - \frac{\mathbf{r}\mathbf{r}}{r^2} \right) + x_{12}^a \frac{\mathbf{r}\mathbf{r}}{r^2} + y_{12}^a \left(\overleftarrow{\mathbf{T}} - \frac{\mathbf{r}\mathbf{r}}{r^2} \right) \right] \cdot \mathbf{U}_0 \\
&= \left[\overleftarrow{\mathbf{T}} (y_{11}^a + y_{12}^a) + \frac{\mathbf{r}\mathbf{r}}{r^2} (x_{11}^a - y_{11}^a + x_{12}^a - y_{12}^a) \right] \cdot \mathbf{U}_0
\end{aligned}$$

x^a, y^a は、いわゆる mobility 関数で、 r/a の関数である。従って \mathbf{W} は次のように書ける。

$$\begin{aligned}
\mathbf{W}(\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_0 + \mathbf{r}) &= \mathbf{U}(\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_0 + \mathbf{r}) - \mathbf{U}_0 - \mathbf{u}(\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_0 + \mathbf{r}) - \frac{1}{6} \nabla^2 \mathbf{u}(\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_0 + \mathbf{r}) \\
&= \left[\overleftarrow{\mathbf{T}} (y_{11}^a + y_{12}^a - 1) + \frac{\mathbf{r}\mathbf{r}}{r^2} (x_{11}^a - y_{11}^a + x_{12}^a - y_{12}^a) \right] \cdot \mathbf{U}_0 \\
&\quad - \left[\left(\overleftarrow{\mathbf{T}} \frac{3a}{4r} + \frac{a^3}{4r^3} \right) + \frac{\mathbf{r}\mathbf{r}}{r^2} \left(\frac{3a}{4r} - \frac{3a^3}{4r^3} \right) \right] \cdot \mathbf{U}_0
\end{aligned}$$

市来 健吾

$$\begin{aligned}
& -\frac{1}{6}a^2 \left(\overleftarrow{I} \frac{3a}{2r^3} - \frac{\mathbf{r}\mathbf{r}}{r^2} \frac{9a}{2r^3} \right) \cdot \mathbf{U}_0 \\
& = \left[\overleftarrow{I} \left(y_{11}^a - 1 + y_{12}^a - \frac{3a}{4r} - \frac{a^3}{4r^3} - \frac{a^3}{4r^3} \right) \right. \\
& \quad \left. + \frac{\mathbf{r}\mathbf{r}}{r^2} \left(x_{11}^a - y_{11}^a + x_{12}^a - y_{12}^a - \frac{3a}{4r} + \frac{3a^3}{4r^3} + \frac{3a^3}{4r^3} \right) \right] \cdot \mathbf{U}_0 \\
& = \left[\overleftarrow{I} \left(y_{11}^a - 1 + y_{12}^a - \frac{3a}{4r} - \frac{a^3}{2r^3} \right) + \frac{\mathbf{r}\mathbf{r}}{r^2} \left(x_{11}^a - y_{11}^a + x_{12}^a - y_{12}^a - \frac{3a}{4r} + \frac{3a^3}{2r^3} \right) \right] \cdot \mathbf{U}_0
\end{aligned}$$

この結果から、(5.3.36) 式の W の項も、角度積分が出来る。

$$\begin{aligned}
n \int d\mathbf{r} W(\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_0 + \mathbf{r}) g(r) &= n \int_{r>2a} d\mathbf{r} g(r) \left[\overleftarrow{I} \left(y_{11}^a - 1 + y_{12}^a - \frac{3a}{4r} - \frac{a^3}{2r^3} \right) \right. \\
& \quad \left. + \frac{\mathbf{r}\mathbf{r}}{r^2} \left(x_{11}^a - y_{11}^a + x_{12}^a - y_{12}^a - \frac{3a}{4r} + \frac{3a^3}{2r^3} \right) \right] \cdot \mathbf{U}_0 \\
&= n \int_{2a}^{\infty} dr r^2 g(r) \int d\hat{\mathbf{r}} \left[\overleftarrow{I} \left(y_{11}^a - 1 + y_{12}^a - \frac{3a}{4r} - \frac{a^3}{2r^3} \right) \right. \\
& \quad \left. + \hat{\mathbf{r}}\hat{\mathbf{r}} \left(x_{11}^a - y_{11}^a + x_{12}^a - y_{12}^a - \frac{3a}{4r} + \frac{3a^3}{2r^3} \right) \right] \cdot \mathbf{U}_0 \\
&= 4\pi n \mathbf{U}_0 \int_{2a}^{\infty} dr r^2 g(r) \left[\left(y_{11}^a - 1 + y_{12}^a - \frac{3a}{4r} - \frac{a^3}{2r^3} \right) \right. \\
& \quad \left. + \frac{1}{3} \left(x_{11}^a - y_{11}^a + x_{12}^a - y_{12}^a - \frac{3a}{4r} + \frac{3a^3}{2r^3} \right) \right] \\
&= \frac{4\pi n}{3} \mathbf{U}_0 \int_{2a}^{\infty} dr r^2 g(r) (3y_{11}^a - 3 + 3y_{12}^a + x_{11}^a - y_{11}^a + x_{12}^a - y_{12}^a \\
& \quad - 3\frac{3a}{4r} - 3\frac{a^3}{2r^3} - \frac{3a}{4r} + \frac{3a^3}{2r^3}) \\
&= \frac{4\pi n}{3} \mathbf{U}_0 \int_{2a}^{\infty} dr r^2 g(r) \left(x_{11}^a + 2y_{11}^a + x_{12}^a + 2y_{12}^a - 3 - 3\frac{a}{r} \right) \\
&= \frac{4\pi n}{3} a^3 \mathbf{U}_0 \int_2^{\infty} dr' r'^2 g(r') \left(x_{11}^a + 2y_{11}^a + x_{12}^a + 2y_{12}^a - 3 - \frac{3}{r'} \right) \\
&= \phi \mathbf{U}_0 \int_2^{\infty} dr' r'^2 g(r') \left(x_{11}^a + 2y_{11}^a + x_{12}^a + 2y_{12}^a - 3 - \frac{3}{r'} \right)
\end{aligned}$$

ここで、 $g(r) = 0$ ($r < 2a$) と、(5.3.33) 式の結果 $\int d\hat{\mathbf{r}} \hat{\mathbf{r}}\hat{\mathbf{r}} = \frac{4\pi}{3} \overleftarrow{I}$ を用いた。

従って、(5.3.36) 式は、動径分布関数 (pair distribution function) $g(r)$ を用いて次のように書ける⁶。

$$\begin{aligned}
\frac{\bar{U}}{U_0} &= \left[1 - 5\phi + 3\phi \int_2^{\infty} dr' r' \{g(r') - 1\} \right. \\
& \quad \left. + \phi \int_2^{\infty} dr' r'^2 g(r') \left\{ x_{11}^a + 2y_{11}^a + x_{12}^a + 2y_{12}^a - 3 \left(1 + \frac{1}{r'} \right) \right\} \right] + O(\phi^2) \quad (5.3.40)
\end{aligned}$$

5.3.2 希薄極限での沈降速度

希薄で、一様の仮定から、pair distribution function が次のように書ける場合について考える。

⁶この式は、別の幾つかの方法で全く同じ形で導かれる。[3, 60] 参照。)

$$g(r) = \begin{cases} 1 & r > 2a \\ 0 & r < 2a \end{cases} \quad (5.3.41)$$

この時、沈降速度は (5.3.40) 式から、次のようになる。

$$\frac{\bar{U}}{U_0} = \left[1 - 5\phi + \phi \int_2^\infty dr' r'^2 \left\{ x_{11}^a + 2y_{11}^a + x_{12}^a + 2y_{12}^a - 3 \left(1 + \frac{1}{r'} \right) \right\} \right] \quad (5.3.42)$$

この積分を計算するために、Jeffrey & Onishi (1984) [48] の結果を用いる。彼らは、mobility 関数については、離れた場合と、接近した場合についてそれぞれ表式を与えている。それらは、しかしその中間に対して非常に精度が悪い。一方、resistance 関数については、二つの極限を任意に表せる表式を与えている。mobility 関数 x^a, y^a, \dots と、resistance 関数 X^A, Y^A, \dots については、対称性を考慮して、次の関係が成り立つ。

$$\begin{bmatrix} x_{11}^a & x_{12}^a \\ x_{12}^a & x_{11}^a \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} X_{11}^A & X_{12}^A \\ X_{12}^A & X_{11}^A \end{bmatrix}^{-1} \quad (5.3.43)$$

$$\begin{bmatrix} y_{11}^a & y_{12}^a & y_{11}^b & y_{21}^b \\ y_{12}^a & y_{11}^a & y_{12}^b & y_{22}^b \\ y_{11}^b & y_{12}^b & y_{11}^c & y_{12}^c \\ y_{22}^b & y_{22}^b & y_{12}^c & y_{11}^c \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} Y_{11}^A & Y_{12}^A & Y_{11}^B & Y_{21}^B \\ Y_{12}^A & Y_{11}^A & Y_{12}^B & Y_{22}^B \\ Y_{11}^B & Y_{12}^B & Y_{11}^C & Y_{12}^C \\ Y_{22}^B & Y_{22}^B & Y_{12}^C & Y_{11}^C \end{bmatrix}^{-1} \quad (5.3.44)$$

resistance 関数からつくった mobility 関数が比較的精度良く、簡単に計算できる。

r の大きい部分の積分は、mobility 関数の漸近形を用いる。Jeffrey & Onishi より、

$$x_{11}^a = \sum_{k=0}^{\infty} f_{2k}^{xa} \left(\frac{1}{2r'} \right)^{2k} \quad (5.3.45)$$

$$x_{12}^a = - \sum_{k=0}^{\infty} f_{2k+1}^{xa} \left(\frac{1}{2r'} \right)^{2k+1} \quad (5.3.46)$$

$$y_{11}^a = \sum_{k=0}^{\infty} f_{2k}^{ya} \left(\frac{1}{2r'} \right)^{2k} \quad (5.3.47)$$

$$y_{12}^a = \sum_{k=0}^{\infty} f_{2k+1}^{ya} \left(\frac{1}{2r'} \right)^{2k+1} \quad (5.3.48)$$

となる。ここで、 r' は粒子半径 a で割った、粒子間距離 r である。(5.3.42) 式の integrand は、次のように書ける。

$$\begin{aligned} & x_{11}^a + 2y_{11}^a + x_{12}^a + 2y_{12}^a - 3 \left(1 + \frac{1}{r'} \right) \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} \left\{ f_{2k}^{xa} \left(\frac{1}{2r'} \right)^{2k} - f_{2k+1}^{xa} \left(\frac{1}{2r'} \right)^{2k+1} + 2f_{2k}^{ya} \left(\frac{1}{2r'} \right)^{2k} + 2f_{2k+1}^{ya} \left(\frac{1}{2r'} \right)^{2k+1} \right\} - 3 \left(1 + \frac{1}{r'} \right) \\ &= 1 + 2 + (3+3) \frac{1}{2r'} + 0 \frac{1}{4r'^2} + (-8+8) \frac{1}{8r'^3} - 60 \frac{1}{16r'^4} + 0 \frac{1}{32r'^5} + \dots - 3 \left(1 + \frac{1}{r'} \right) \\ &\approx -\frac{15}{4} \frac{1}{r'^4} + O(r'^{-6}) \end{aligned}$$

この漸近形は積分可能で、次のようになる。

市来 健吾

n	$f_n^{x^a}$	$f_n^{y^a}$
0	1	1
1	-3	3/2
2	0	0
3	8	4
4	-60	0
5	0	0

表 5.1 二粒子問題の厳密解の展開係数。Jeffrey & Onishi (1984) [48] に依る。

$$\int_x^\infty dr' \left(-\frac{15}{4} \frac{1}{r'^2} \right) = -\frac{15}{4x} \quad (5.3.49)$$

従って、

$$\int_8^\infty dr' \left(-\frac{15}{4} \frac{1}{r'^2} \right) = -\frac{15}{32} = -0.46875 \quad (5.3.50)$$

となる。Jeffrey *et al.*(1984) の resistance 関数を用いて、(5.3.42) 式の積分を、区間 [2, 8] で数値的に行なった結果は、次のようになる。

$$\int_2^8 dr' r'^2 \left\{ x_{11}^a + 2y_{11}^a + x_{12}^a + 2y_{12}^a - 3 \left(1 + \frac{1}{r'} \right) \right\} = -1.08307 \dots \quad (5.3.51)$$

従って、(5.3.42) 式の積分は次のように書ける。

$$\int_2^\infty dr' r'^2 \left\{ x_{11}^a + 2y_{11}^a + x_{12}^a + 2y_{12}^a - 3 \left(1 + \frac{1}{r'} \right) \right\} = -0.46875 - 1.08307$$

以上から、粒子の沈降速度は

$$\frac{\bar{U}}{U_0} = 1 - 6.55\phi + O(\phi^2) \quad (5.3.52)$$

となる。

5.4 物理的解釈

Saffman(1973) [61] は、やはり流体中の多粒子系について、その沈降速度を解析した。そこでは、粒子のサイズ効果を見捨て、粒子を point force として扱っている。但し、系の取り扱いが系統的であり、規則配列をする粒子の間を流体が流れる場合と、ランダムな自由に動ける粒子系の場合、ランダムではあるが空間に固定されている粒子系の場合について解析を行ない、沈降速度が、系の構造に依存することを示した。また、彼の定式化では、発散の問題を避けるために、あらかじめ reduced pressure を導入している。彼の解析結果が、その精度の範囲で Batchelor [2] と一致していることから、Batchelor の行なった技巧的な方法が、重力の釣り合うべき圧力勾配を導入することと、本質的に等価であることが分かる。彼の解析を、ここで簡単に紹介する。

粒子を point force とすると、流体は次の Stokes 方程式を満たす。

$$-\mu \nabla^2 \mathbf{u} + \nabla p = \sum_{\alpha} \mathbf{F}^{\alpha} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}^{\alpha}) \quad (5.4.1)$$

α 粒子の速度は、次の Faxén の法則から決められる。今粒子を point force として扱っているので、次のようになる。

$$\mathbf{F} = 6\pi\mu a [\mathbf{v}^{\alpha} - \mathbf{u}'(\mathbf{r})]_{\mathbf{r}=\mathbf{r}^{\alpha}} \quad (5.4.2)$$

ここで、 \mathbf{v}^{α} は、 α 粒子の速度であり、また、 \mathbf{u}' は α 粒子の無い時の \mathbf{r} での流体の速度であり、次のように与えられる。

$$\mathbf{u}'(\mathbf{r}) = \mathbf{u}(\mathbf{r}) - \frac{1}{8\pi\mu} \mathbf{J}(\mathbf{r} - \mathbf{r}^{\alpha}) \cdot \mathbf{F}^{\alpha} \quad (5.4.3)$$

$\mathbf{J}(\mathbf{r})$ は、Stokes 方程式 (5.4.1) の解で、Stokeslet と呼ばれる。

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}) = \left(\frac{1}{r} + \frac{\mathbf{r}\mathbf{r}}{r^3} \right) \quad (5.4.4)$$

Stokes 方程式 (5.4.1) は、Fourier 変換を用いて解くことが出来る。ここで、Fourier 変換を次のように定義する。

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{k}) &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \mathbf{u}(\mathbf{r}) \\ \mathbf{u}(\mathbf{k}) &= \int d\mathbf{k} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{k}) \end{aligned}$$

すると、(5.4.1) 式と、流体の非圧縮の式 $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$ は、次のように変換される。

$$\mu k^2 \tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{k}) + i\mathbf{k}\tilde{p}(\mathbf{k}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \sum_{\alpha} \mathbf{F}^{\alpha} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad (5.4.5)$$

$$\mathbf{k} \cdot \tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{k}) = 0 \quad (5.4.6)$$

しかし今の場合、(5.4.1) 式の右辺に無限級数が存在していることに、注意を払わなければならない。実際、重力のように、 \mathbf{F} が一定であると、

$$\begin{aligned} \frac{1}{(2\pi)^3} \sum_{\alpha} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} &\simeq \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{1}{(\Delta r)^3} \int d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \\ &= n\delta(\mathbf{k}) \end{aligned}$$

となり、発散を引き起こす。ここで、 n は粒子数濃度である。

ここで、圧力を次のように置くことで、発散の問題を回避する。

$$\begin{aligned} p(\mathbf{r}) &= \bar{p}(\mathbf{r}) + p'(\mathbf{r}) \\ \tilde{p}(\mathbf{k}) &= \bar{\tilde{p}}(\mathbf{k}) + \tilde{p}'(\mathbf{k}) \\ i\mathbf{k}\tilde{p}' &= n\bar{\mathbf{F}}\delta(\mathbf{k}) \end{aligned} \quad (5.4.7)$$

ここで、 $\bar{\mathbf{F}}$ は粒子に働く平均の力である。これらを (5.4.5) に代入すると、次のように書ける。

$$\mu k^2 \tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{k}) + i\mathbf{k}\bar{\tilde{p}}(\mathbf{k}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \sum_{\alpha} \mathbf{F}^{\alpha} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} - n\bar{\mathbf{F}}\delta(\mathbf{k}) \quad (5.4.8)$$

従って、(5.4.8) 式と (5.4.6) 式から p' を消去すると、速度の Fourier 成分 $\tilde{\mathbf{u}}$ に対する次の式を得る。

$$\mu k^2 \tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{k}) = \left(1 - \frac{\mathbf{k}\mathbf{k}}{k^2} \right) \cdot \left\{ \frac{1}{(2\pi)^3} \sum_{\alpha} \mathbf{F}^{\alpha} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} - n\bar{\mathbf{F}}\delta(\mathbf{k}) \right\} \quad (5.4.9)$$

市來 健吾

一様な力によって起こる発散を回避する為に導入した \bar{p} は、次のように、物理的には理解される。重力のような一様な外場の中にある粒子系は、流体のような支えてくれるものがないと、定常状態には至らない。しかし、粘性流体が存在する時は、流体中に重力を打ち消すような圧力勾配が生じて、粒子系は定常状態に至る。先に導入した \bar{p} は、この圧力勾配に対応する。これは、(5.4.7)式を実空間に戻すと分かる。

$$\begin{aligned} \int dk e^{ik \cdot r} \{ik \bar{p}(k)\} &= \nabla \int dk e^{ik \cdot r} \bar{p}(k) \\ &= \nabla \bar{p}(r) = n \bar{F} \end{aligned}$$

また、 \bar{p} の定義から分かるが、この圧力勾配を導入することは、(5.4.5)式の右辺で、 $k=0$ の寄与を無視することと同じことである。

5.5 高濃度への拡張

5.5.1 Brady&Durlflosky のアプローチ

粒子の沈降速度に対する Batchelor の式 (5.3.52) は、その解析での仮定から、希薄領域でしか正しくない。 $(O(\phi)$ の見積りでしかない。) Brady & Durlflosky (1988) [3] によって行なわれた、この表現を高濃度に拡張する方法の一つとして、(5.3.40)に戻って、そこに現れる動径分布関数 $g(r)$ で、多体効果を表現しようという考え方がある。その式をここで改めて書いておく。

$$\begin{aligned} \frac{\bar{U}}{U_0} &= 1 - 5\phi + 3\phi \int_2^\infty dr' r' \{g(r') - 1\} \\ &\quad + \phi \int_2^\infty dr' r'^2 g(r') \left\{ x_{11}^a + 2y_{11}^a + x_{12}^a + 2y_{12}^a - 3 \left(1 + \frac{1}{r'} \right) \right\} \end{aligned} \quad (5.5.1)$$

ここでは、Brady & Durlflosky (1988) の行なった解析と同じ内容のことを、本研究で用いた2粒子問題の厳密解を用いて、実際に確認してみた。

動径分布関数としては、Percus-Yevick の hard-sphere potential 粒子系に対する動径分布関数を用いる [62-65]。この Percus-Yevick の動径分布関数は、厳密に求めることが出来る。ここでは、Percus-Yevick の動径分布関数を、 $r < 6$ (r は、粒子半径でスケールしている。) で用い、 $r > 6$ では、 $g \simeq 1$ として、粒子の沈降速度の ϕ 依存性を求めてみた。その結果を、次節の図 5.1 の “PY with exact” に示す

この結果から、平均沈降速度の式 (5.5.1) の $g(r)$ に、単に Percus-Yevick を用いると、 $\phi \sim 0.23$ 程度で、負の沈降速度という、非物理的な結果を出してしまうことが分かった。つまり、この拡張は良くないということである。

Brady 達は、更に、粒子間相互作用のうち、高次のモーメントの寄与を無視した場合の計算も行なった。つまり、沈降速度を、次の式を用いて計算した。

$$\frac{\bar{U}}{U_0} = 1 - 5\phi + 3\phi \int_2^\infty dr' r' \{g(r') - 1\} \quad (5.5.2)$$

この場合の結果を、次節の図 5.1 の “Brady & Durlflosky 1988” に示す。この結果を見て分かるように、この場合は高濃度でも破綻することなく、定性的に見て、実験に良く一致しているといえる。しかし、定量的に見た場合、特に高濃度においては、実験値の2倍程度の値を示していることは、無視できない。また、希薄極限において、Batchelor [2] の結果 ($U/U_0 = 1 - 6.55\phi$) と食い違っており、また、高次のモーメントが無視できる物理的な根拠も、言及されてはいるが、完全に解明されたとは言えない。

5.5.2 Stokesian Dynamics の方法

はじめに、これまでの解析についてまとめる。

平均沈降速度の問題は、多粒子系の mobility 問題を考えた時、その平均をとった関係式で、

$$\langle \mathbf{U} \rangle = \frac{1}{6\pi\mu a} \langle \mathbf{M} \rangle \cdot \langle \mathbf{F} \rangle \quad (5.5.3)$$

$\langle \mathbf{M} \rangle$ を求めることである。 $\langle \mathbf{M} \rangle$ は tensor であるが、非対角成分はゼロになることが期待される。

5.3.1節で見たように、Batchelor (1972) [2] は、希薄極限で2粒子の相互作用を重ね合わせて、平均沈降速度を(5.3.40)式のように導いた。つまり、

$$\langle \mathbf{M} \rangle = I \left[1 - 5\phi + 3\phi \int_2^\infty dr r \{g(r) - 1\} \right] \quad (5.5.4)$$

$$+ \phi \int_2^\infty dr r^2 g(r) \left\{ x_{11}^a + x_{12}^a + 2y_{11}^a + 2y_{12}^a - 3 \left(1 + \frac{1}{r} \right) \right\} \quad (5.5.5)$$

となる。ここで I は単位テンソルである。 $g(r)$ に(5.3.41)式を用いると

$$\langle \mathbf{M} \rangle = I(1 - 6.55\phi) \quad (5.5.6)$$

となる。

5.5節で見たように、Brady & Durlofsky [3] は高次のモーメントを無視すると、負の沈降速度という非物理的な結果を避けることが出来ることを指摘した。低次のモーメントに対して Percus-Yevick の radial distribution function [62-64] を用いて

$$\langle \mathbf{M}^\infty \rangle = I \frac{(1 - \phi)^3}{(1 + 2\phi)} \quad (5.5.7)$$

を得た。しかし、この結果は希薄極限で

$$\langle \mathbf{M}^\infty \rangle = I(1 - 5\phi) \quad (5.5.8)$$

となり、Batchelor の結果(5.5.6)と食い違う。そのわけは、高次のモーメントを無視している為である。

Beenakker & Mazur (1984) [66] は、流体力学的相互作用のある種の平均場近似を用いて表した。この扱いを沈降問題についてみる。彼らの論文の(5.5)式から、

$$\frac{G(\mathbf{k})D(\mathbf{k})}{D_0} = 1 + \hat{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{A}_{\gamma_0}^{(1,1)}(\mathbf{r}=0) \cdot \hat{\mathbf{k}} + n \int d\mathbf{r} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \hat{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{A}_{\gamma_0}^{(1,1)}(\mathbf{r}) \cdot \hat{\mathbf{k}}' \{g(r) - 1\} \quad (5.5.9)$$

となることが分かる。 $G(\mathbf{k})$ は構造因子、 $D(\mathbf{k})$ は拡散係数である。しかしここで重要なのは、この式の右辺が $\mathbf{k} = 0$ の極限で mobility 行列の平均になっていることである。

$$\langle \mathbf{M} \rangle = I G(0)D(0)/D_0 \quad (5.5.10)$$

彼らの \mathbf{A} は Rotne-Prager テンソルに $1/(1 + \phi S(x))$ の補正がついたものである。Rotne-Prager 近似の場合の $\langle \mathbf{M}^\infty \rangle$ が(5.5.7)式で与えられることから、 $\langle \mathbf{M} \rangle$ は近似的に次のように書ける。

$$\langle \mathbf{M} \rangle = I \frac{(1 - \phi)^3}{(1 + 2\phi)(1 + 5\phi/2)} \quad (5.5.11)$$

$g(r)$ は radial distribution function であり、ここで Percus-Yevick 近似を用いる。Percus-Yevick 近似の $g(r)$ の Fourier 変換を用いて(5.5.9)式を書き直すと、次のように書ける。

市來 健吾

$$\langle M \rangle = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty dx \left(\frac{\sin x}{x} \right)^2 \frac{1}{1 + \phi S_{\gamma_0}(x)} \frac{1}{1 + 3\phi \tilde{c}(x)} \quad (5.5.12)$$

ここで、 $ka \equiv x$ とした。また、

$$\tilde{c}(k) = \frac{1}{x^3} \left[\alpha (\sin(2x) - 2x \cos(2x)) + \frac{\beta}{x} \{ 2x \sin(2x) - (2x^2 - 1) \cos(2x) - 1 \} \right] \quad (5.5.13)$$

$$+ \frac{\gamma}{x^3} \{ 2x(2x^2 - 3) \sin(2x) - (2x^4 - 6x^2 + 3) \cos(2x) + 3 \} \quad (5.5.14)$$

$$\alpha = \frac{(1 + 2\phi)^2}{(1 - \phi)^4}, \quad \beta = -6\phi \frac{(1 + \frac{1}{2}\phi)^2}{(1 - \phi)^4}, \quad \gamma = \phi \frac{(1 + 2\phi)^2}{2(1 - \phi)^4} \quad (5.5.15)$$

希薄極限で

$$\frac{1}{1 + 3\phi \tilde{c}(x)} = 1 - 3\phi \frac{1}{x^3} (\sin 2ka - 2ka \cos 2ka) + O(\phi^2) \quad (5.5.16)$$

$$S_{\gamma_0}(x) \simeq \frac{5}{2} \quad (5.5.17)$$

$$\frac{1}{1 + \phi S_{\gamma_0}(x)} \simeq 1 - \frac{5}{2}\phi + O(\phi^2) \quad (5.5.18)$$

$$\langle M \rangle = 1 \left(1 - \frac{15}{2}\phi \right) \quad (5.5.19)$$

我々は Stokesian Dynamics の方法 [1] を、沈降問題に適用してみる [4]。Stokesian Dynamics では、(3.2.22) 式のように resistance 行列を遠距離部分と近接部分に分離する。

$$R = (M^\infty)^{-1} + R^{lub} \quad (5.5.20)$$

R^{lub} は、

$$R_{2B}^{lub} = R_{2B} - M_{2B}^\infty \quad (5.5.21)$$

を重ね合わせて得られる。この概念を沈降の問題に適用してみると、

$$\langle F \rangle = 6\pi\mu a \left\{ \langle (M^\infty)^{-1} \rangle + \langle R^{lub} \rangle \right\} \cdot \langle U \rangle \quad (5.5.22)$$

と書ける。 $\langle M^\infty \rangle$ は遠距離部分の寄与、つまり Rotne-Prager 近似での mobility 行列の平均である。従って Brady & Durlofsky (1988) より得られたものと同じものである。

$$\langle M^\infty \rangle = \frac{(1 - \phi)^3}{(1 + 2\phi)} \quad (5.5.23)$$

一方、 $\langle R^{lub} \rangle$ は (5.5.21) 式から

$$\langle R^{lub} \rangle = n \int_2^\infty dr g(r) [A_{11} + A_{12} - \{(M_{2B}^\infty)^{-1}_{11} + (M_{2B}^\infty)^{-1}_{12}\}] \langle F \rangle \quad (5.5.24)$$

である。ここで A は二粒子問題の厳密解で、次のように書ける。(Jeffrey & Onishi(1984) [48])

$$\begin{bmatrix} F_1 \\ F_2 \end{bmatrix} = 6\pi\mu a \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} U_1 \\ U_2 \end{bmatrix} \quad (5.5.25)$$

また M_{2B}^∞ は (5.5.22) 式で用いた M^∞ の 2 粒子問題での mobility 行列である。Brady & Durlofsky (1988) の考慮した従って

$$\begin{bmatrix} U_1 \\ U_2 \end{bmatrix} = \frac{1}{6\pi\mu a} M_{2B}^\infty \cdot \begin{bmatrix} F_1 \\ F_2 \end{bmatrix} \quad (5.5.26)$$

$$M_{2B}^\infty = \begin{bmatrix} 1 & a^\infty \\ a^\infty & 1 \end{bmatrix} \quad (5.5.27)$$

となる。ここで、 a^∞ は Rotne-Prager tensor で、

$$a^\infty = \left[\frac{3a}{2r} - \left(\frac{a}{r}\right)^3 \right] \frac{rr}{r^2} + \left[\frac{3a}{4r} + \frac{1}{2} \left(\frac{a}{r}\right)^3 \right] \left(1 - \frac{rr}{r^2} \right) \quad (5.5.28)$$

$$x^\infty(r) = \frac{3a}{2r} - \left(\frac{a}{r}\right)^3, \quad y^\infty(r) = \frac{3a}{4r} + \frac{1}{2} \left(\frac{a}{r}\right)^3 \quad (5.5.29)$$

この、Rotne-Prager 近似の mobility の逆行列 $(M_{2B}^\infty)^{-1}$ は、次のように求められる。ここで議論する沈降問題の場合、 $F_1 = F_2 = F$ であり、mobility 行列の対象関係から一般に $a_{11} = a_{22}$ and $a_{12} = a_{21}$ である。従って $U_1 = U_2 = U$ となることが分かる。また、(5.5.24) 式から $\langle R^{lub} \rangle$ の計算に必要な行列は $(M_{2B}^\infty)^{-1}_{11} + (M_{2B}^\infty)^{-1}_{12}$ の形である。従ってこの逆行列を求める際には、次の形の 1 粒子問題で考えて良い。

$$U = M_{1B}^\infty \cdot F \quad (5.5.30)$$

ここで $M_{1B}^\infty = (1 + a^\infty)$ で、 2×2 行列である。(2 粒子問題は粒子の配置の対称性から、一般性を失うことなく 2 次元で考えられる。) M_{1B}^∞ の逆行列は、明らかに M_{2B}^∞ と次の関係がある。

$$(M_{1B}^\infty)^{-1} = (M_{2B}^\infty)^{-1}_{11} + (M_{2B}^\infty)^{-1}_{12} \quad (5.5.31)$$

この行列も一般に r の関数で書ける。

$$(M_{1B}^\infty)^{-1} = X^\infty(r) \hat{r}_i \hat{r}_j + Y^\infty(r) (\delta_{ij} - \hat{r}_i \hat{r}_j) \quad (5.5.32)$$

と書ける。更に $r = (0, 0, r)$ の場合を考えると、各行列の要素が次のようになる。

$$M_{1B}^\infty = \begin{bmatrix} 1 + y^\infty(r) & 0 \\ 0 & 1 + x^\infty(r) \end{bmatrix} \quad (5.5.33)$$

$$(M_{1B}^\infty)^{-1} = \begin{bmatrix} Y^\infty(r) & 0 \\ 0 & X^\infty(r) \end{bmatrix} \quad (5.5.34)$$

従って、 $(M_{1B}^\infty)^{-1}$ は求まった。

$$X(r) = \frac{1}{1 + x^\infty(r)}, \quad Y(r) = \frac{1}{1 + y^\infty(r)} \quad (5.5.35)$$

従って、(5.5.24) 式は次のように書ける。

$$\begin{aligned} \langle R^{lub} \rangle &= n \int d\mathbf{r} g(r) (A_{11} + A_{12} - (M_{1B}^\infty)^{-1}) \\ &= \phi \int dr r^2 g(r) \left\{ X_{11} + X_{12} + 2Y_{11} + 2Y_{12} - \frac{6r^3(-2 + 5r^2 + 4r^3)}{(-2 + 3r^2 + 2r^3)(2 + 3r^2 + 4r^3)} \right\} \end{aligned} \quad (5.5.36)$$

この積分を数値的に見積もるために、被積分関数を $1/r^n$ で展開してみる。

$$\frac{6r^3(-2 + 5r^2 + 4r^3)}{(-2 + 3r^2 + 2r^3)(2 + 3r^2 + 4r^3)} = 3 \left(1 - \frac{1}{r} + \frac{9}{8} \frac{1}{r^2} - \frac{45}{32} \frac{1}{r^3} + \frac{179}{128} \frac{1}{r^4} + \frac{513}{512} \frac{1}{r^5} + O(r^{-6}) \right) \quad (5.5.37)$$

市来 健吾

一方、Jeffrey & Onishi (1984) [48] から、

$$X_{11} + X_{12} + 2Y_{11} + 2Y_{12} = 3 \left(1 - \frac{1}{r} + \frac{9}{8} \frac{1}{r^2} - \frac{45}{32} \frac{1}{r^3} + \frac{403}{128} \frac{1}{r^4} - \frac{2817}{512} \frac{1}{r^5} + O(r^{-6}) \right) \quad (5.5.38)$$

従って、被積分関数全体は次のように展開される。

$$X_{11} + X_{12} + 2Y_{11} + 2Y_{12} - \frac{6r^3(-2 + 5r^2 + 4r^3)}{(-2 + 3r^2 + 2r^3)(2 + 3r^2 + 4r^3)} = \frac{21}{4} \frac{1}{r^4} - \frac{789}{64} \frac{1}{r^5} + O(r^{-6}) \quad (5.5.39)$$

 $g(r) = 1$ として $\langle R^{lub} \rangle$ を見積もる。

$$\langle R^{lub} \rangle \simeq \phi \int_2^{20} dr r^2 \left(X_{11} + X_{12} + 2Y_{11} + 2Y_{12} - \frac{6r^3(-2 + 5r^2 + 4r^3)}{(-2 + 3r^2 + 2r^3)(2 + 3r^2 + 4r^3)} \right) \quad (5.5.40)$$

$$+ \phi \int_{20}^{\infty} dr r^2 \left(\frac{21}{4} \frac{1}{r^4} - \frac{789}{64} \frac{1}{r^5} \right) \quad (5.5.41)$$

$$= \phi \left(1.2448392 + \frac{21}{4} \frac{1}{20} - \frac{789}{128} \frac{1}{400} \right) \quad (5.5.42)$$

$$= 1.491929\phi \quad (5.5.43)$$

以上から、求めようとする mobility 行列 (drag coefficient) は、次のようになる。

$$\langle M \rangle = \frac{1}{\langle (M^\infty)^{-1} \rangle + \langle R^{lub} \rangle} \quad (5.5.44)$$

$$= \frac{\langle M^\infty \rangle}{1 + \langle R^{lub} \rangle \langle M^\infty \rangle} \quad (5.5.45)$$

 $\langle M^\infty \rangle$ に Brady & Durlofsky (1988) [3] の結果を用いると、

$$\langle M \rangle = \frac{(1 - \phi)^3}{(1 + 2\phi) \left(1 + \frac{(1 - \phi)^3}{(1 + 2\phi)} \langle R^{lub} \rangle \right)} \quad (5.5.46)$$

$$= \frac{(1 - \phi)^3}{1 + 2\phi + \tilde{R}\phi(1 - \phi)^3} \quad (5.5.47)$$

$$= 1 - (5 + \tilde{R})\phi + O(\phi^2) \quad (5.5.48)$$

となる。ここで、 \tilde{R} は次のように定義する。

$$\phi \tilde{R} = R^{lub} \quad (5.5.49)$$

この結果は、希薄極限で

$$U/U_0 = 1(1 - 6.49\phi) \quad (5.5.50)$$

となる。

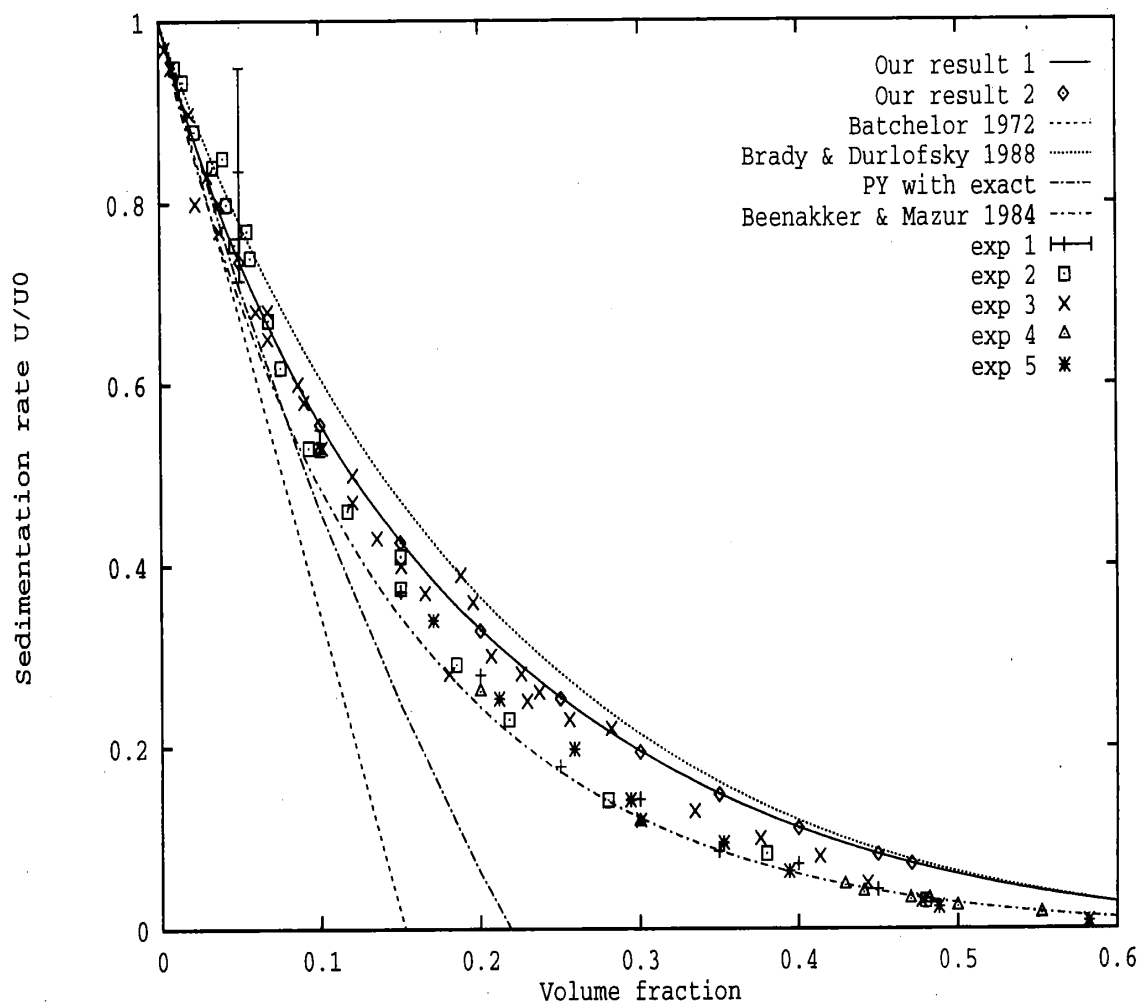


図 5.1 ランダム配置の粒子系の沈降速度。Our result 1 は (5.5.47) 式、Our result 2 は Percus-Yevick を用いて数値積分を行なった結果、Batchelor 1972 は (5.5.6) 式、Brady & Durlofsky 1988 は (5.5.7) 式、Beenakker & Mazur 1984 は (5.5.11) 式である。その他のマークは各々以下の実験結果である。exp 1 は Bacri *et al.*(1986) [67]、exp 2 は Buscall *et al.*(1982) [68]、exp 3 は de Kruif *et al.*(1987) [69]、exp 4 は Paulin *et al.*(1990) [70]、exp 5 は Xue *et al.*(1990) [71]。

第 III 部 まとめ

第 6 章

シミュレーションについての議論

6.1 結果と解析

はじめに、シミュレーション手法に関する結果をまとめる。本研究において、流体力学的相互作用を直接取り入れた、粒子を粒として扱う、粉体流動層の計算手法を開発した。その流体力学的取り扱い、コロイド粒子系に対して開発された Stokesian Dynamics [1] と呼ばれる手法を用いて行ない、粉体系に特徴的な、粒子の慣性の効果は、速度の関係式で導入した。また、空間に固定された粒子を導入することも行ない、現実の系での容器に対応するものの効果を評価も行なった。

この手法の開発の過程で、有限個の粒子から成る系と、無限個の粒子から成る系が、本質的に異なった性質を持つことが明らかになった。具体的には、有限粒子系では、粒子密度が増すと、その沈降速度も増加するのに対し、無限粒子系では、粒子密度が増すと、沈降速度は小さくなる。有限粒子系では、一様流動層が存在できない。従って、粉体流動層のモデル化は、有限個の粒子からなる系では不可能であり、容器のような流体を閉じ込めるものをあからさまに考慮するか、無限個の粒子が空間に分布するような系を考える必要がある。

次にシミュレーションの結果についてまとめる。周期境界の基本セルの形状により、その振舞いは大きく異なったものになる。横の幅が狭い、一次元的なセルでは、スラグと呼ばれる膜状の空隙層が生じ、安定に存在することが分かった。このスラグは、粒子に対して上昇し、従って、スラグの中を粒子が上から下に流れる様子が見られた。正方形に近いセルを用いた場合の計算結果からは、安定な空隙層は得られなかったが、不安定であるが、気泡のような粒子濃度の薄い部分が生成、消滅している様子が見られた。ローカルに見た場合、粒子濃度の薄い部分にある粒子は、相対的に上昇し、濃い部分にある粒子は下降する様子が見られた。それに伴い、粒子濃度の薄い部分を中心に、粒子の対流現象が見られた。

粒子の慣性の効果（つまり、流体の粘性の効果）については、空気でのシミュレーションを中心に、慣性の効果を全て無視したものと、流体に水を用いたものについて行なった。その結果、水を用いたものや、慣性を無視したものでは、粒子が集団を形成する様子が見られた。これは、流体力学の近接効果である lubrication が、粒子の接近を妨げる効果であるとともに、離れようとすることも妨げるために、一旦接近すると離れにくくなることによる。また、集団を形成するために、粒子の沈降速度が大きくなることが分かった。但し、これに関しては、シミュレーションの実行時間が短い為、特に水の計算に於いては、沈降速度が定常に至っていない。そのため、今回のシミュレーションから、粒子の平均沈降速度に関する系統的な解析は、現時点では行っていない。

現実の系での底の役割をするような固定粒子を導入した計算も行なった。その結果、現実の現象に類似したものが得られた。具体的には、沈降（堆積）過程、及び流動化相転移が見られた。また、一様流動層も得られ、気泡が底で発生し、上方に抜けていく様子が見られた。流入速度を増すと、bed の高さも増し、

粒子濃度が薄くなる性質も再現した。ローカルに見た場合は、先の正方形セルでの結果と同様に、粒子濃度の薄い部分にある粒子は、相対的に上昇し、濃い部分にある粒子は下降している。このことは、実験的に知られている性質に一致する。グローバルに見た場合の、「粒子濃度が高い程、沈降速度が小さい」と言う性質と、ローカルに見た時の性質の違いについては、おそらく、流体の流れの不均一性が引き起こしていると思われる。つまり、粒子の薄い部分では、流体の流速は相対的に速いはずで、従って粒子は吹き上げられ、粒子が集まっているところの流体の流速は遅く、粒子が沈降するのであろう。この解釈の確認は、ここで用いた手法では確かめられない。なぜならば、この手法は粒子表面での流体の速度のみを扱い、流体中の速度場は explicit には、考慮していないためである。

これらの計算結果に対して、今回、粒子の速度分布と、エネルギースペクトルを計算した。

速度分布に関しては、いずれの計算結果に対しても、その分布は Gauss 分布とは大きく違い、特に分布の tail は、指数分布的であることが分かった。速度の指数分布的振舞いは、流体の乱流現象の中の「ハード乱流」と呼ばれる現象でも見られており [56]、粉体流動層の粒子速度分布との関連について、研究が待たれる。また、同様の速度分布が、粉体振動層に於いても得られていることは、興味深い。

三次元等方乱流においては、エネルギースペクトルが、Kolmogorov スケーリング則に従うことが知られている。今回計算した粉体粒子系に対して、エネルギースペクトルを計算した結果、その幾つかは、非常に良く Kolmogorov スケーリング則にしたがっている。今回 Kolmogorov スケーリング則に従わなかった結果も、シミュレーションの計算時間の短さや、システムサイズが小さいことなどを考えた場合、必ずしも Kolmogorov スケーリング則を否定するものではない。逆に言うと、今回の結果からは、スケーリング則を支持することも出来ず、その関連を示唆するに留まる。速度分布と同様、エネルギースペクトルに関しても、粉体振動層においては、Kolmogorov スケーリング則を示す結果が得られており、今後の研究の発展が期待される。

以上のことから、今回の研究で、粉体粒子の速度場と、乱流との関連性について、幾つかの示唆が得られたと言って良いだろう。

6.2 課題

前節で述べたように、今回行なったシミュレーションは、計算した系の種類も、また各系での計算時間も不十分であった。その為、得られた結果から結論を引き出すには至っていない。このことから、特に今回得られた流体の乱流現象との関連を調べるためには、系統的なシミュレーションの実行が必要不可欠である。また、粉体系に対して有効な解析方法の開発も、必要である。

二流体モデルなど、巨視的な手法との関連付を行なうことも、残された重要な課題である。

次に、シミュレーション手法に関するこれからの課題についてまとめる。

これまでの結果から、粉体流動層のモデル化には、容器のような流体を束縛する境界をあからさまに考慮するか、無限粒子系を考える必要があることが分かった。ここでは、3次元的に周期境界条件を課して系を表した。しかし、この3次元周期境界条件を用いた描像には、幾つかの限界がある。その1つは、系の濃度変化が、グローバルに見た場合、起こり得ないことである。このことは、特に粒子を粒として捉えて定式化している本研究での手法にとっては、システムサイズを大きくとれない為に、非常に強い制限になっている。もう一点、実際の系には、容器と言うような形で存在する速度の基準が、シミュレーションを行なった系に存在しないことである。(固定粒子に関しては、後述。) つまり、粉体流動層の問題を、粒子集団の沈降問題と全く同じ状況で、はじめから考察している。以上のことから、粉体流動層においては、本来流体の流入速度がコントロールパラメータであるが、シミュレーションでは、むしろ粒子濃度、つまり基本セルに幾つの粒子を置くかが、コントロールパラメータになっている。

この問題の1つの解決策として、速度の基準となるような固定粒子を導入することを、既に行なった。

市來 健吾

その結果、流入速度というパラメータが意味を持つことになった。実際の計算結果からは、底の役割をする固定粒子を導入し、粉体の堆積過程、及び流動化相転移が得られることが分かった。しかし、この場合も3次元的に周期境界条件を課しており(つまり、縦方向も周期的になっている)、現実との対応を考える場合、不自然なモデルである。底ではなく、側壁に相当する固定粒子を導入することも可能である。その場合は、無限に長いチューブの中を流れる粉体の挙動に対応し、そこでの流体力学的な相互作用の効果などを見ることが出来るであろう。

現実の粉体流動層との対応という意味から、鉛直方向の周期境界条件を取り去った定式化も進めているが、今のところ、この試みは成功していない。幾つか問題点は考えられる。つまり、発散の回避法として波数 $k=0$ の寄与を単純に除くことを行なっているが、この処方が2次元的な周期境界を課した系に対しても正しいのか、と言う疑問がある。これは、遠方での境界条件も取り入れた形で、再定式化する必要があることを示している。

第7章

沈降速度についての議論

7.1 結果と課題

この分野でのコンセンサスは、現時点では、おそらく希薄極限における Batchelor [2] の結果 ($U/U_0 = 1 - 6.55\phi$) だけであろう。本論に於いて紹介した、Brady & Durlofsky [3] のアプローチは、一つの高濃度への拡張であった。そこで得られた結果は、低濃度から高濃度領域までを通して、比較的实验値を良く表すものであった。しかし、そこで行なわれた、高次のモーメントを無視することについては、その物理的な根拠に対して言及されてはいるが、完全に理解されたとは言い難い。また、その一番の問題は、希薄極限で Batchelor の結果を再現しない点であろう。本論では詳しい紹介はしなかった Beenakker & Mazur [66] の結果も、高濃度領域では実験結果との良い一致を見ているが、希薄極限では Batchelor の結果と一致しない。以上の議論から、本研究では、シミュレーションで用いた Stokesian dynamics の方法を沈降速度の計算に用いた。その結果は、高次のモーメントの寄与を取り込んだ形で、全濃度領域で実験結果と良い一致を示している。またこの結果は希薄極限で、Batchelor の結果に非常に近いものとなった。このことは、シミュレーションに於いて Stokesian Dynamics が高濃度でも正しい picture を与え成功していることと関連している。

ただ、Stokesian Dynamics の方法は発見的なものであり、その物理的な意味や、なぜこの方法が成功しているのかといった疑問については、これからの研究が待たれる。

謝辞

「粉体」という興味深い系に関する本研究の課題を与えていただき、研究方針や、様々なアイデアなど、本研究を強力に推進して頂きました、当研究室助手の早川尚男氏に感謝します。

お忙しい時間を割いて、セミナー等で私の疑問にアドバイスをいただきました都築俊夫教授に感謝します。

当研究室の小松さんには、粉体へのアプローチに対して数多くの議論をして頂き、また、本研究のシミュレーションを主に行なった、計算機の環境整備などをして頂き、ありがとうございました。

John F. Brady 教授には、詳しい計算結果を送って頂きました。

早川氏を通じて、本研究に対してアドバイスをいただきました佐々真一氏（京大理）、田口善弘氏（東工大理）、西森拓氏（茨城大理）に感謝します。

東北大学に来られた際、お忙しい中時間を割いて頂き、本研究に対して客観的な立場から助言を頂きました Hans J. Hermann 教授、太田隆夫教授、土井正男教授に感謝します。

快適な研究環境を提供して頂きました本研究室の先生方、院生の皆様に感謝します。

本研究は、ホソカワ粉体工学振興財団及び、文部省科学研究費補助金の補助を受けています。

参考文献

- [1] John F. Brady and Georges Bossis. Stokesian dynamics. *Ann. Rev. Fluid Mech.*, Vol. 20, pp. 111-157, 1988.
- [2] G. K. Batchelor. Sedimentation in a dilute dispersion spheres. *J. Fluid Mech.*, Vol. 52, pp. 245-268, 1972.
- [3] John F. Brady and Luis J. Durlofsky. The sedimentation rate of disordered suspensions. *Phys. Fluids*, Vol. 31, pp. 717-727, 1988.
- [4] Hisao Hayakawa and Kengo Ichiki. Statistical theory of sedimentation of disordered suspensions. 1994. preprint.
- [5] Robert B. Jones and Peter N. Pusey. Dynamics of suspended colloidal shperes. *Annu. Rev. Phys. Chem.*, Vol. 42, pp. 137-169, 1991.
- [6] 早川尚男, 西森拓, 佐々真一, 田口善弘. 粉体の物理とパターン形成. *日本物理学会誌*, Vol. 49, pp. 18-25, 1993.
- [7] Y h. Taguchi, Hisao Hayakawa, Shin Sasa, and H. Nishimori, editors. *Dynamics of powder systems*, Vol. 7, 1993.
- [8] H. Nishimori and N. Ouchi. *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 71, pp. 197-200, 1993.
- [9] R. S. Anderson and Kirby L. Bunas. *Nature*, Vol. 365, pp. 740-741, 1993.
- [10] 西森拓, 大内則幸. 飛砂による地形の動力学 -風紋と砂丘-. *物性研究*, Vol. 61, pp. 32-43, 1993.

市來 健吾

- [11] N. B. Ouchi and H. Nishimori. Modeling of wind-blown sand using cellular automata. preprint, 1993.
- [12] A. Rosato, K. J. Strandburg, F. Prinz, and R. H. Swendsen. *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 58, p. 1038, 1987.
- [13] J. Duran, J. Rajchenbak, and E. Clément. *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 70, p. 2431, 1993.
- [14] R. Jullien, P. Meakin, and A. Pavlovich. *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 69, p. 640, 1992.
- [15] T. Ohtsuki, Y. Takemoto, T. Hata, and S. Kawai. *Int. J. Mod. Phys. B*, Vol. 7, p. 1865, 1993.
- [16] J. B. Knight, H. M. Jaeger, and S. R. Nagel. *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 70, p. 3728, 1993.
- [17] P. Evesque and J. Rajchenbach. *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 61, p. 44, 1989.
- [18] C. Laroche and S. Douady. *J. Phys. (France)*, Vol. 50, p. 699, 1989.
- [19] Y h. Taguchi. *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 69, p. 1367, 1992.
- [20] Jason A. C. Gallas, Hans J. Hermann, and Stefan Sokolowski. *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 69, p. 1371, 1992.
- [21] Y h. Taguchi. Numerical modeling of vibrated beds. *Int. J. Mod. Phys. B*, Vol. 7, pp. 1839–1859, 1993.
- [22] Jason A. C. Gallas, Hans J. Hermann, and Stefan Sokolowski. Granular media on a vibrating plate: a molecular dynamics simulation. *Int. J. Mod. Phys. B*, Vol. 7, pp. 1779–1788, 1993.
- [23] 田口善弘. 重力下の粉粒体の動力学. 物性研究, Vol. 61, pp. 1–31, 1993.
- [24] 田口善弘. 粉粒体は「流れる」か? 固体物理. to be published.
- [25] 湯晋一. 固気混相流および粉粒体運動の数値シミュレーション. 粉体と工学, Vol. 25, No. 11, pp. 30–37, 1993.
- [26] 田中敏嗣, 石田俊哉, 辻裕. 日本機械学会論文集 B, Vol. 57, p. 456, 1991.
- [27] 川口寿裕, 田中敏嗣, 辻裕. 日本機械学会論文集 B, Vol. 58, p. 2119, 1992.
- [28] Y. Tsuji, T. Kawaguchi, and T. Tanaka. Discrete particle simulation of two-dimensional fluidized bed. *Powder Technology*, Vol. 77, pp. 79–87, 1993.
- [29] T. Tanaka, T. Kawaguchi, and Y. Tsuji. Discrete particle simulation of flow patterns in two-dimensional gas fluidized beds. *Int. J. Mod. Phys. B*, Vol. 7, pp. 1889–1898, 1993.
- [30] S. B. Savage. *J. Fluid Mech.*, Vol. 241, p. 109, 1992.
- [31] J. T. Jenkins and S. B. Savage. *J. Fluid Mech.*, Vol. 130, p. 187, 1983.
- [32] C. K. K. Lun, S. B. Savage, D. J. Jeffrey, and N. J. Chepuruiy. *J. Fluid Mech.*, Vol. 140, p. 223, 1984.
- [33] J. S. Lin, M. M. Chen, and B. T. Chao. *AIChE J.*, Vol. 31, p. 465, 1985.

- [34] J. Ding and D. Gidaspow. *AIChE J.*, Vol. 36, p. 523, 1990.
- [35] D. Gidaspow. *Appl. Mech. Rev.*, Vol. 39, p. 1, 1986.
- [36] Shin ichi Sasa and Hisao Hayakawa. Void-fraction dynamics in fluidization. *Europhys. Lett.*, Vol. 17, pp. 685–689, 1992.
- [37] Hisao Hayakawa and Shin ichi Sasa. In L. Garrido, editor, *Complex Fluids*, pp. 319–326. Springer, Berlin, 1993.
- [38] 小松輝久. 粉体流動場の非線形波動. Master's thesis, 東北大学 大学院 理学研究科, 仙台, 1993.
- [39] 小松輝久. 粉体流動場の非線形波動. 物性研究, Vol. 60, pp. 103–159, 1993.
- [40] Teruhisa S. Komatsu and Hisao Hayakawa. Nonlinear waves in fluidized beds. *Phys. Lett. A*, Vol. 183, pp. 56–62, 1993.
- [41] Hisao Hayakawa, Teruhisa S. Komatsu, and Toshio Tsuzuki. *Physica A*. to be published.
- [42] Hisao Hayakawa. *Proc. of NEEDS 93*. to be published.
- [43] J. Happel and Howard Brenner. *Low Reynolds number hydrodynamics*. Martunus Nihhoff, Dordrecht, 1973.
- [44] Sangtae Kim and Seppo J. Karrila. *Microhydrodynamics*. Butterworth-Heinemann, 1991.
- [45] ランダウ, リフシツ. 流体力学. 東京図書, 1970.
- [46] Louis J. Durlofsky, John F. Brady, and Georges Bossis. Dynamic simulation of hydrodynamically interacting particles. *J. Fluid Mech.*, Vol. 180, p. 21, 1987.
- [47] Kengo Ichiki and Hisao Hayakawa. Simulation of granular particles in flow by the Stokesian-Dynamics method. *Int. J. Mod. Phys. B*, Vol. 7, pp. 1899–1911, 1993.
- [48] D. J. Jeffrey and Y. Onishi. Calculation of the resistance and mobility functions for two unequal spheres in low-Reynolds-number flow. *J. Fluid Mech.*, Vol. 139, pp. 261–290, 1984.
- [49] S. Kim and R. T. Mifflin. The resistance and mobility functions of two equal spheres in low-Reynolds-number flow. *Phys. Fluids*, Vol. 28, p. 2033, 1985.
- [50] Peter Ganatos, Robert Pfeffer, and Sheldon Weinbaum. A numerical-solution technique for three-dimensional Stokes flows, with application to the motion of strongly interacting spheres in a plane. *J. Fluid Mech.*, Vol. 84, pp. 79–111, 1978.
- [51] Sheldon Weinbaum and Peter Ganatos. Numerical multipole and boundary integral equation technique in Stokes flow. *Ann. Rev. Fluid Mech.*, Vol. 22, pp. 275–316, 1990.
- [52] John F. Brady, Ronald J. Phillips, Julia C. Lester, and Georges Bossis. Dynamic simulation of hydrodynamically interacting suspensions. *J. Fluid Mech.*, Vol. 195, pp. 257–280, 1988.
- [53] C. W. J. Beenakker. Ewald sum of the Rotne-Prager tensor. *J. Chem. Phys.*, Vol. 85, pp. 1581–1582, 1986.

- [54] R. W. O'Brien. A method for the calculation of the effective transport properties of suspensions of interacting particles. *J. Fluid Mech.*, Vol. 91, pp. 17–39, 1979.
- [55] A. A. Zick and G. M. Homsy. Stokes flow through periodic arrays of spheres. *J. Fluid Mech.*, Vol. 115, pp. 13–26, 1982.
- [56] B. Castaing, G. Gunaratne, F. Heslot, L. P. Kadanoff, A. Libchaber, S. Thomae, X.-Z. Wu, S. Zaleski, and G. Zanetti. Scaling of hard thermal turbulence in Reyleigh-Bénard convection. *J. Fluid Mech.*, Vol. 204, p. 1, 1989.
- [57] William Bailey Russel, Dudley Albert Saville, and William Reymond Schowalter. *Colloidal Dispersions*. Cambridge University Press, Cambridge, 1989.
- [58] Robert H. Davis and Andreas Acrivos. Sedimentation of noncolloidal particles at low Reynolds number. *Ann. Rev. Fluid Mech.*, Vol. 17, pp. 91–118, 1985.
- [59] H. Hasimoto. On the periodic fundamental solutions of the Stokes equations and their application to viscous flow past a cubic array of spheres. *J. Fluid Mech.*, Vol. 5, pp. 317–328, 1959.
- [60] Anthony J. C. Ladd. Dynamical simulations of sedimenting spheres. *Phys. Fluids A*, Vol. 5, pp. 299–310, 1993.
- [61] P. G. Saffman. On the settling speed of free and fixed suspensions. *Stud. Appl. Math.*, Vol. 52, pp. 115–127, 1973.
- [62] Jerome K. Percus and George J. Yevick. Analysis of classical statistical mechanisc by means of collective coordinates. *Phys. Rev.*, Vol. 110, pp. 1–13, 1958.
- [63] M. S. Wertheim. Exact solution of the Percus-Yevick integral equation for hard spheres. *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 10, pp. 321–323, 1963.
- [64] Everett Thiele. Equation of state for hard spheres. *J. Chem. Phys.*, Vol. 39, pp. 474–479, 1963.
- [65] W. R. Smith and D. Henderson. Analytic representation of the Percus-Yevick hard-sphere radial distribution function. *Molec. Phys.*, Vol. 19, pp. 411–415, 1970.
- [66] C. W. J. Beenakker and Peter Mazur. Diffusion of spheres in a concentrated suspension II. *Physica A*, Vol. 126, pp. 349–370, 1984.
- [67] J. C. Bacri, C. Frenois, M. Hoyos, R. Perzynski, N. Rakotomalala, and D. Salin. *Europhys. Lett.*, Vol. 2, p. 123, 1986.
- [68] R. Buscall, J. W. Goodwin, R. H. Ottewill, and T. F. Trados. *J. Colloid Interface Sci.*, Vol. 85, p. 78, 1982.
- [69] C. G. de Kruif, J. W. Jansen, and A. Vrij. A sterically stabilized silica colloid as a model supramolecular fluid. pp. 315–346. Wiley-Interscience, 1987.
- [70] S. E. Paulin and B. J. Ackerson. *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 64, p. 2663, 1990.
- [71] J. Z. Xue, E. Herbolzheimer, M. A. Rutgers, W. B. Russel, and P. M. Chaikin. Diffusion, dispersion, and settling of hard spheres. *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 69, p. 1715, 1992.