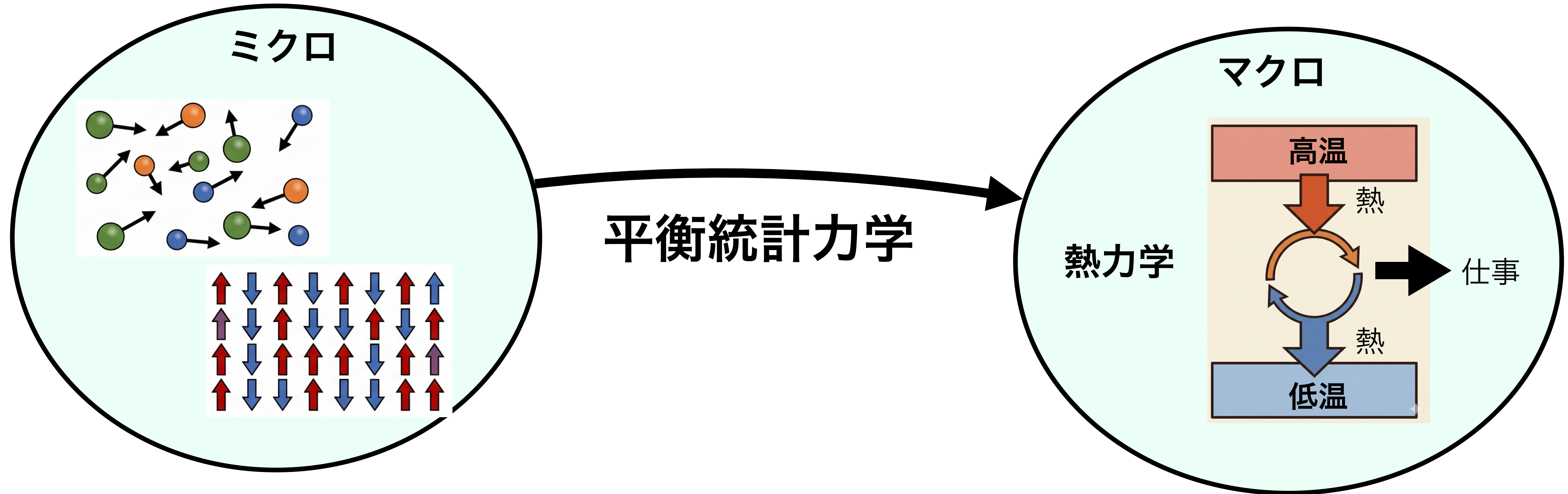


# 2次元流体力学の基礎再考

**中野 裕義 (東大物性研)**

共同研究者：南 佑樹 (岐阜大学), 齊藤圭司 (京都大学)

# 平衡統計力学



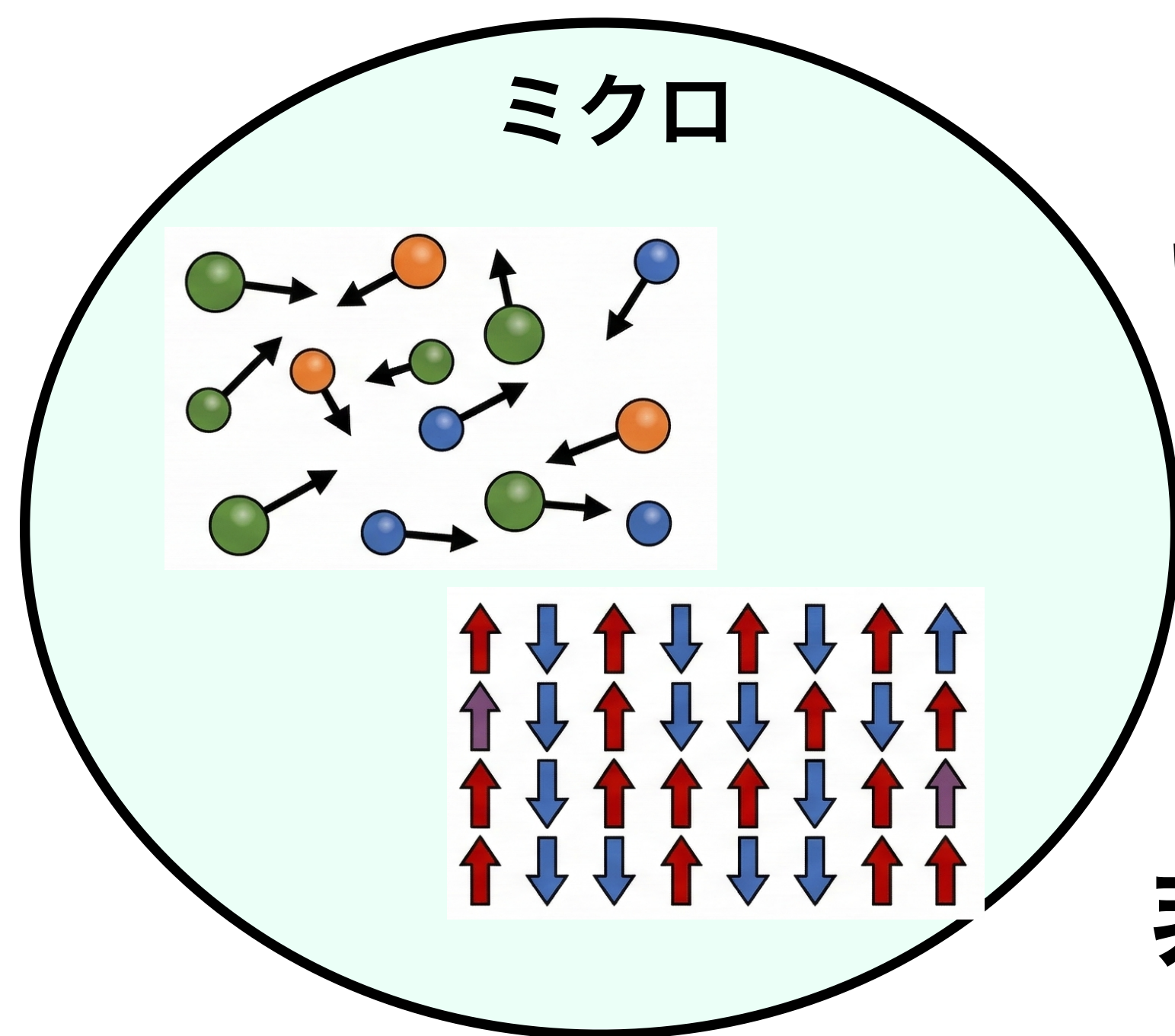
## 平衡統計力学(の一面)

ミクロな『粒子系やスピン系』と、マクロな現象論である『熱力学』の間を橋渡しする理論  
ミクロな相互作用からマクロな物理量を具体的に導く計算手法を提供する

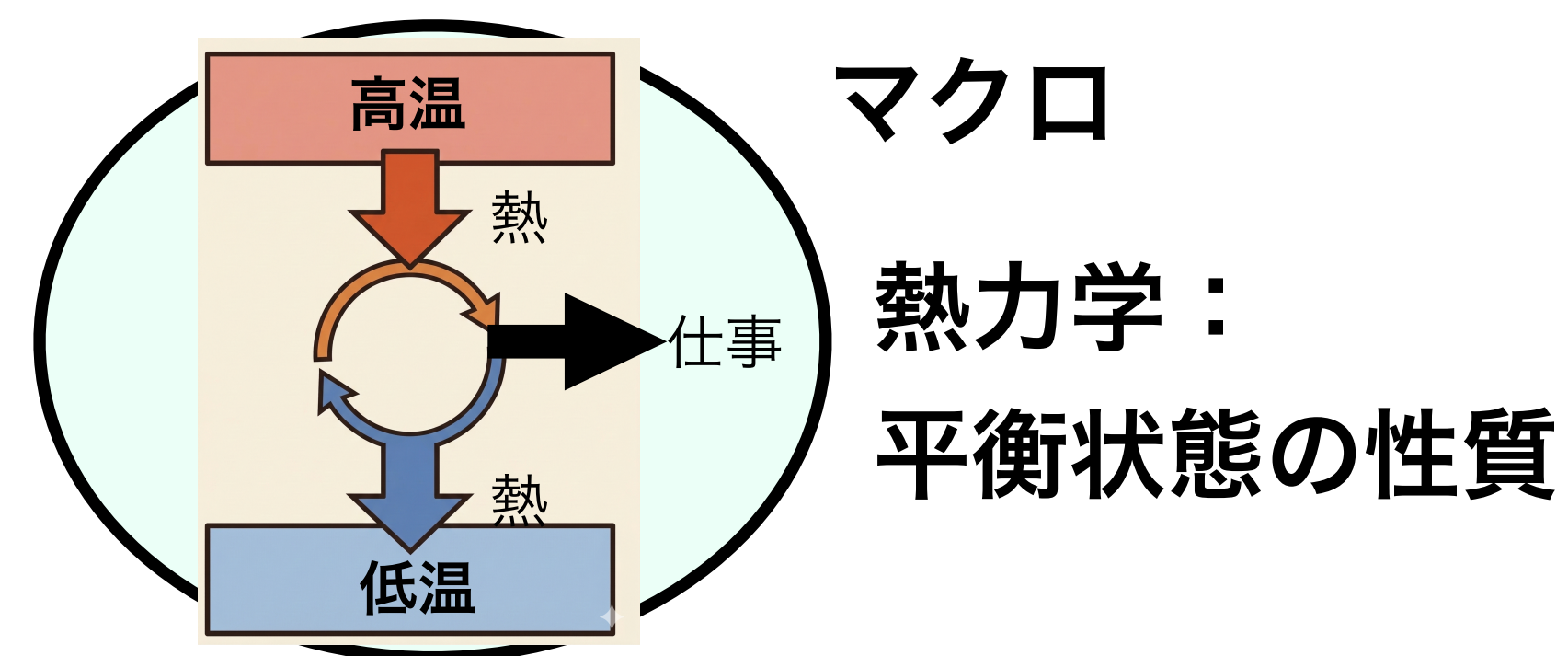
# 非平衡統計力学 (の一面)

## 非平衡統計力学(の一面)

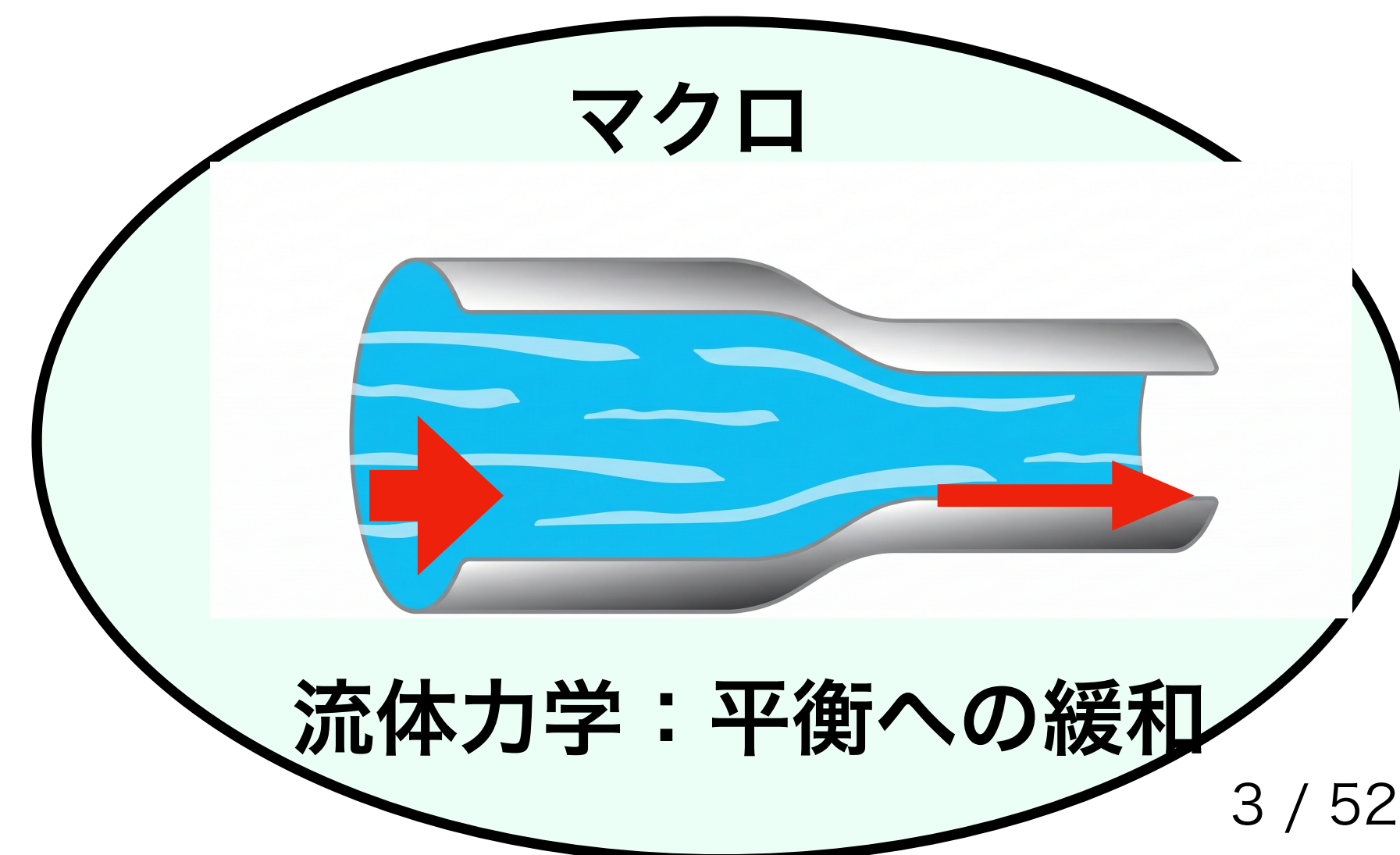
ミクロな『粒子系やスピン系』と、マクロな現象論である『**流体力学**』の間を橋渡しする理論



平衡統計力学



非平衡統計力学？



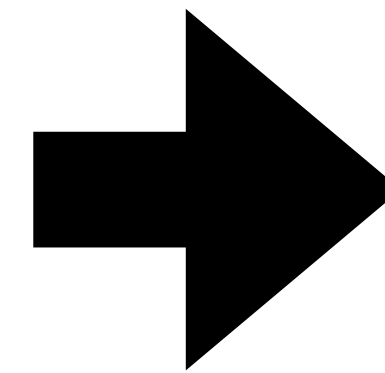
非平衡統計力学分野で流体力学のミクロから基礎づけというものは大きな一つのテーマ

# 流体力学の教科書的理解

Landau and Lifshitz, "Fluid Mechanics"

非圧縮流体のナビエ・ストークス方程式

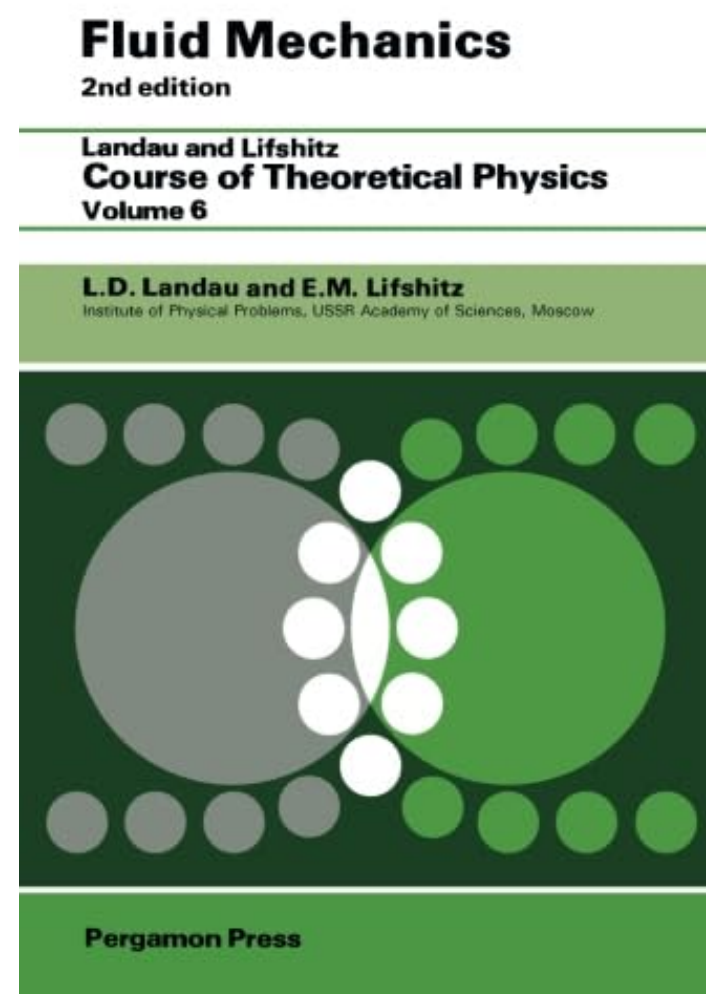
$$\left[ \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} \right] = - \frac{1}{\rho_0} \nabla p + \nu \nabla^2 \mathbf{v}$$
$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$$



マクロな流体现象を  
定量的に予言する



From wikipedia



様々な境界条件のもとでナビエ・ストークス  
方程式自身やその解の性質を議論する

そもそもナビエ・ストークス方程式はどこからきたのか？には答えない

# ナビエ・ストークス方程式の不思議さ/曖昧さ

非圧縮流体のナビエ・ストークス方程式

$$\left[ \frac{\partial \boldsymbol{v}}{\partial t} + (\boldsymbol{v} \cdot \nabla) \boldsymbol{v} \right] = - \frac{1}{\rho_0} \nabla p + \underline{\nu \nabla^2 \boldsymbol{v}}$$

$$\nabla \cdot \boldsymbol{v} = 0$$

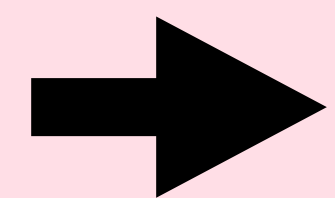
## ▶ 時間の矢

ナビエ・ストークス方程式は時間的に不可逆な方程式。

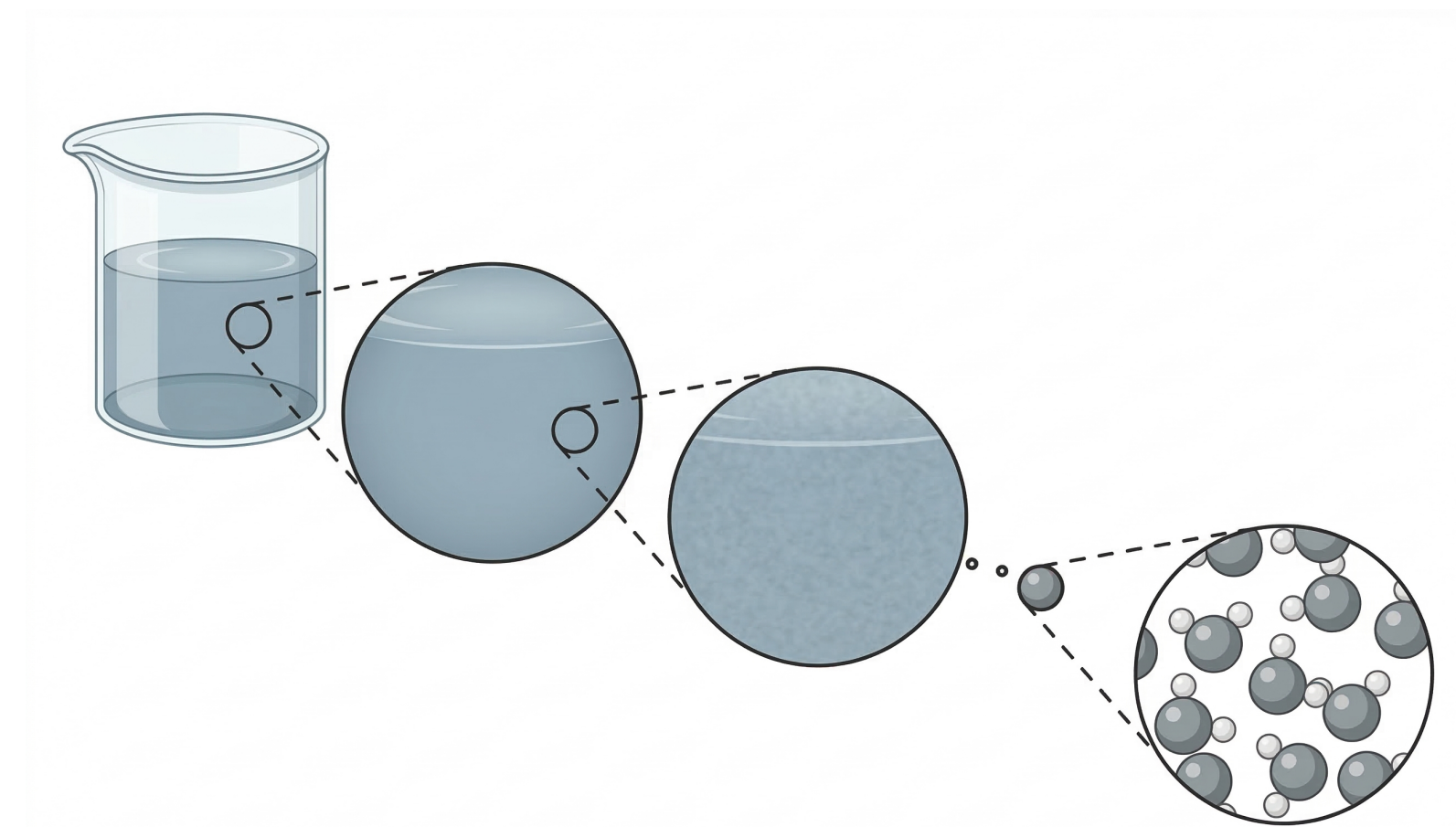
➡ 散逸の起源（時間の矢）は何か？

## ▶ 連続体仮定

流体が連続体として扱われる根拠は、点と見なせる『流体素片』の中にアボガドロ数個の粒子が含まれるから。



注目するスケールを小さくしていくといずれ破綻する？



# 非平衡統計力学の文脈での流体力学

ミクロからマクロへと流体力学を厳密に導出して基礎づけるということは、非平衡統計力学において長年挑まれてきた大きなテーマの一つ

- ボルツマン方程式 (1800年代後半~) : 希薄ガスに対してナビエ・ストークス方程式を基礎付ける
- 線形応答理論 (1950年ごろ~) : あらゆる系に対して、散逸をミクロな揺らぎと関係づける  
Green: J. Chem. Phys. **20** (1952) 1281, J. Chem. Phys. **22** (1954) 398.
- 射影演算子法 (1960年ごろ~) : 形式的・体系的に、ミクロからマクロな方程式を導く  
Zwanzig: Phys. Rev. **124**, 983 (1961), Mori: Prog. Theor. Phys. **33**, 423 (1965),  
Zubarev: "Statistical Mechanics of Nonequilibrium Processes" (1996), K. Saito et al.: Phys. Rev. Lett. **127**, 010601 (2021)
- 初期の分子動力学シミュレーション (1970年ごろ~) : ミクロな古典力学を解いて、流体力学を基礎づける  
Alder and Wainwright: Phys. Rev. A **1**, 18 (1970), Phys. Rev. A **4**, 233 (1971)
- 揺らぎの定理 (1990年ごろ~) : 線形領域を越えた非平衡状態における、エントロピー生成の普遍的な法則を解明  
Sasa: Phys. Rev. Lett. **112**, 100602 (2014), Hayata et al.: Phys. Rev. D **92**, 065008 (2015)

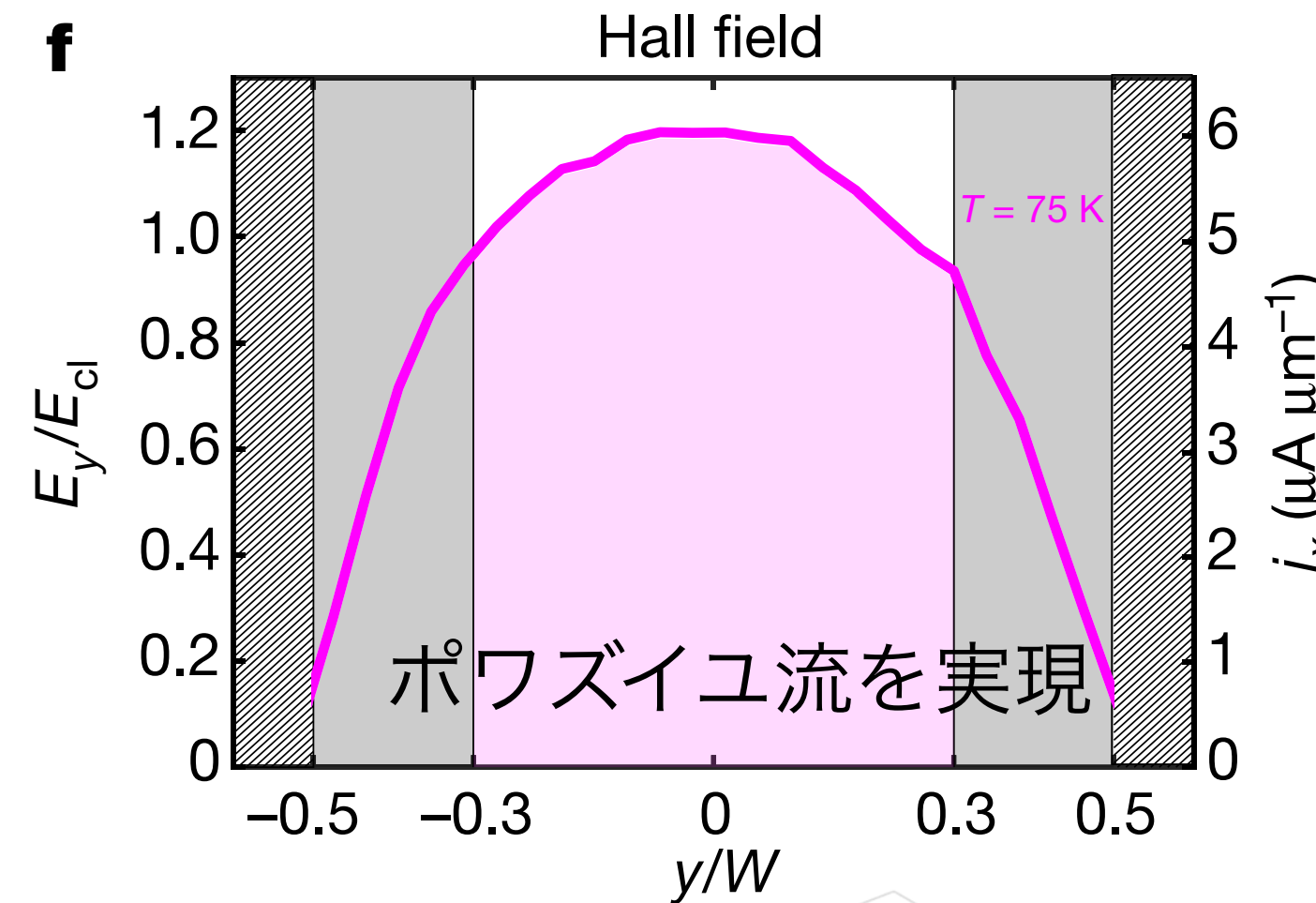
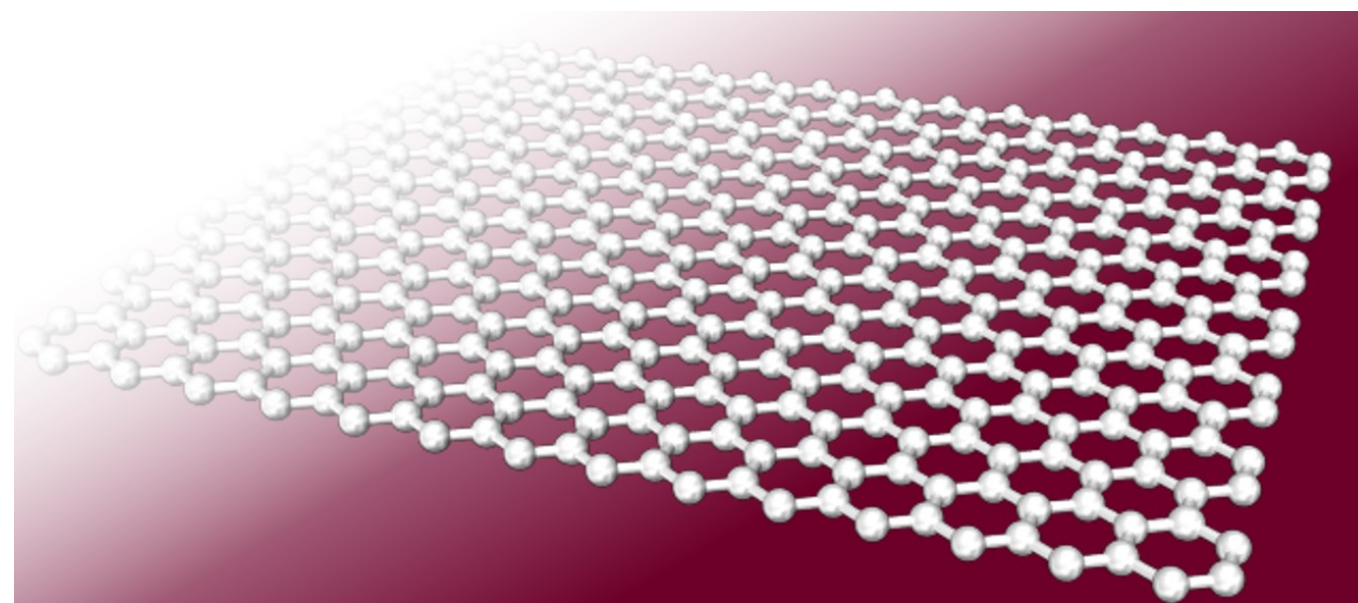
# 流体記述の普遍性1

近年、固体物性や冷却原子の分野から、流体力学の『想像以上の普遍性』を示す思いがけない実験的進展が報告されている

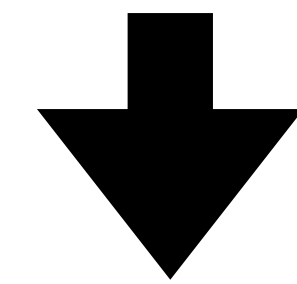
## グラフェン中の電子の流体力学的振る舞い

J. A. Sulpizio et al. Nature (2019)

ウルトラピュアグラフェン



電子が原子核や不純物によって散乱されず、流体的に振る舞う



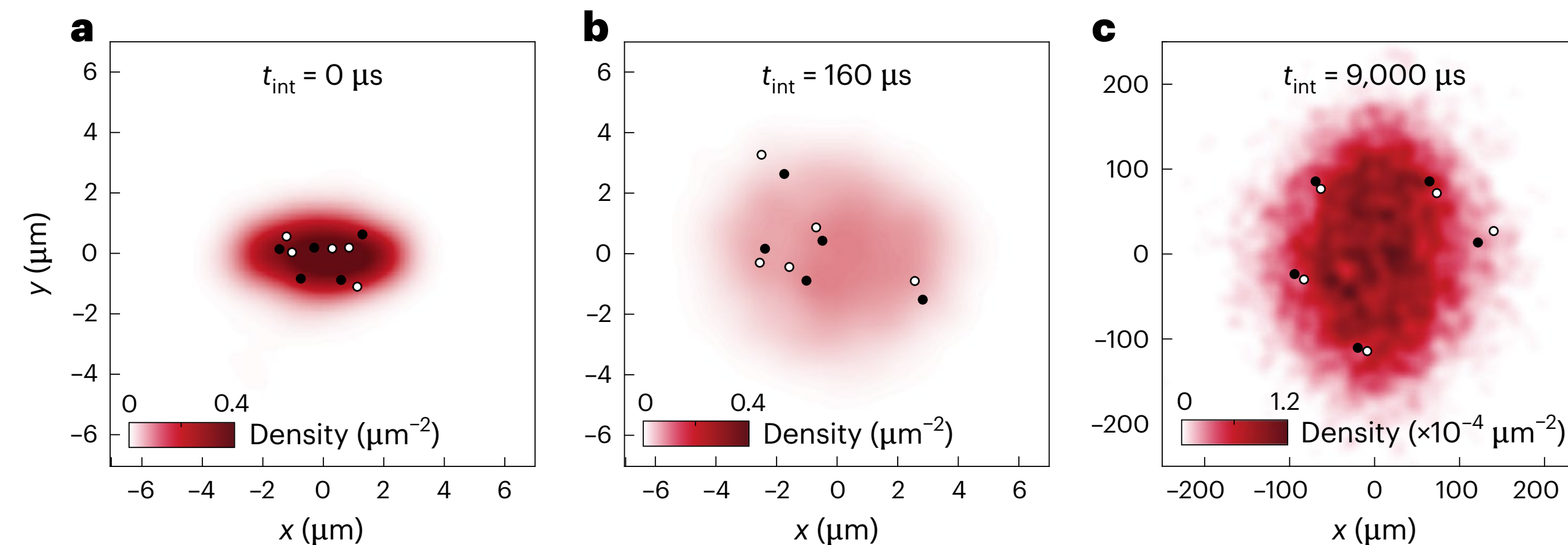
電子集団が一つの流体として振る舞う

従来想定していなかった領域でも、流体力学は普遍的な創発

# 流体記述の普遍性2

最近、思いがけない進展が固体物性や冷却原子の実験の文脈で報告されている

**ごく少数のフェルミオンが示す流体的振る舞い** S. Brandstetter et al. Nature Physics (2025)



冷却原子を用いた実験

数個～十数個程度の強く相互作用するフェルミオンを楕円形のトラップから解放するという実験を行い流体現象の創発を観測

流体力学は想像以上に普遍的に発生する

流体力学が破綻する真の限界はどこにあるのか？

**ミクロな見地から流体の基礎を調べ直す非平衡統計力学の試みは大きな意義を持つ**

# 本発表の主題：2次元流体

本発表のテーマ：

非平衡統計力学分野で行われた流体力学を基礎づけるという研究の一端を紹介する

注目する対象：

**2次元流体**

従来の流体力学が成り立たない例になっている

D. Forster, D. R. Nelson, and M. I. Stephen, Phys. Rev. A 16, 732 (1977)

実は従来の流体力学の妥当性は空間次元に依存する

2次元流体では、従来の流体力学よりも揺らぐ流体力学が基礎的である

我々の最近のシミュレーション結果と絡めながら紹介する

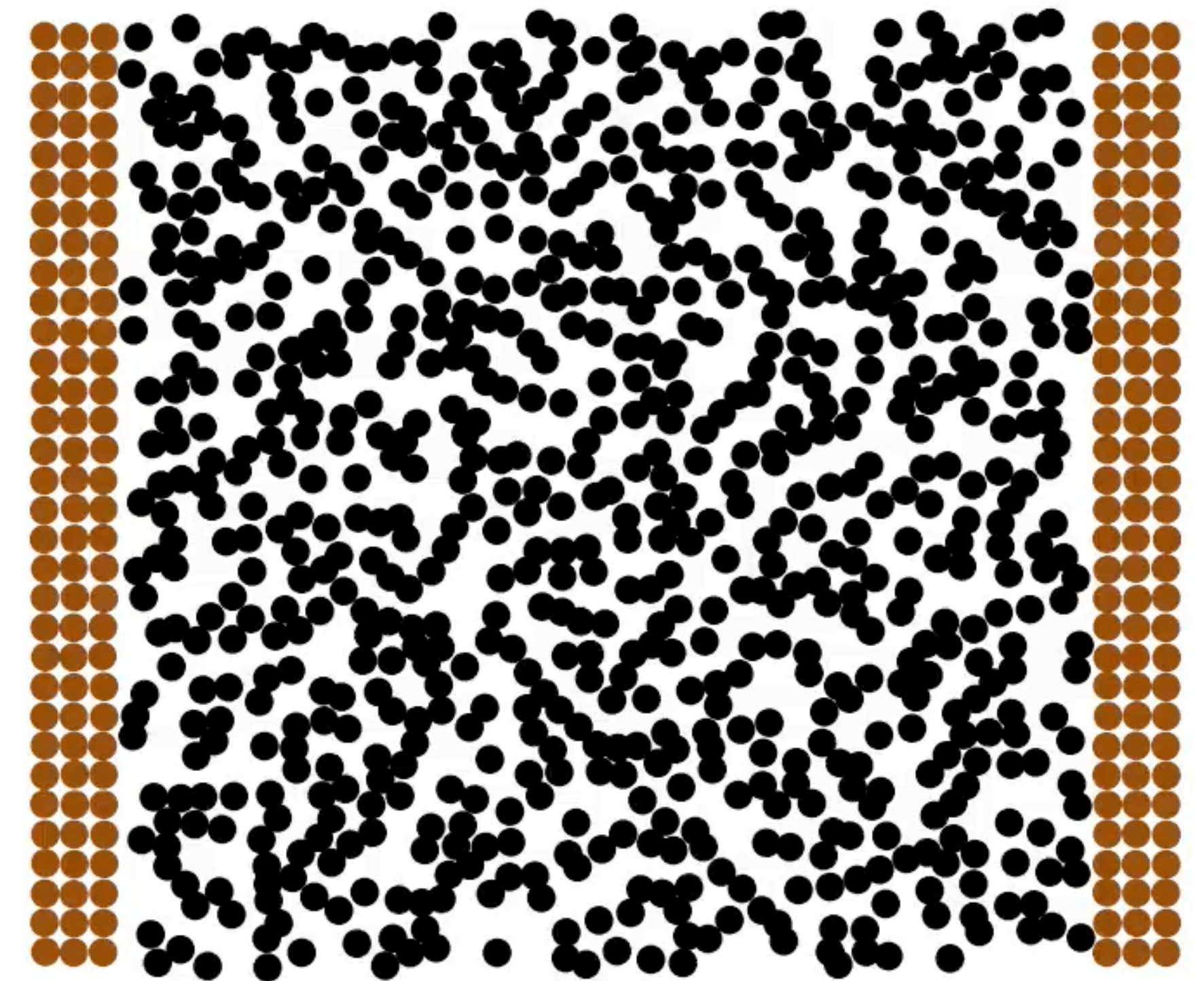
HN, Y. Minami, and K. Saito, arXiv:2502.15241 (2025)

# 本発表のゴール

## ▷ ハミルトンの運動方程式 (古典力学)

$$\frac{dr_i}{dt} = \frac{p_i}{m} \quad \frac{dp_i}{dt} = - \frac{\partial V}{\partial r_i}$$

運動の方向を2次元に制限することで、2次元空間を動き回る多粒子系を実現できる



## 本発表のゴール

1. 従来の流体力学が破綻するとはどういうことか？
2. 揺らぐ流体力学とは何なのか？
3. 我々の最近の研究成果：壁の存在が2次元流体を考える上で欠かせない

# 本発表の目次

1. イントロダクション
  - 非平衡統計力学の文脈での流体力学
2. 揺らぐ流体力学の紹介
  - 従来の流体力学を拡張する、より基礎的な理論枠組み
3. 2次元クエット流の解析（本発表のメイン）
  - 揺らぐ流体を用いた基礎的な流れの計算と、速度プロファイルの変貌
4. 議論
  - 流体力学の基礎づけの観点から見た、2次元流体の粘性係数

# 揺らぐ流体力学とは？

ここでは、2次元系に限らず3次元系も含めて揺らぐ流体力学を紹介する

# 揺らぐ流体力学とは？

連続体のマクロな方程式

+

確率的なノイズ項

揺らぐ流体力学 = 確率偏微分方程式を扱う枠組み

揺らぐナビエ・ストークス方程式

(非圧縮)

$$\rho_0 \left[ \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} \right] = -\nabla p + \eta_0 \nabla^2 \mathbf{v} - \nabla \cdot \mathbf{\Pi}^{\text{ran}}$$

ランダムノイズ項

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$$

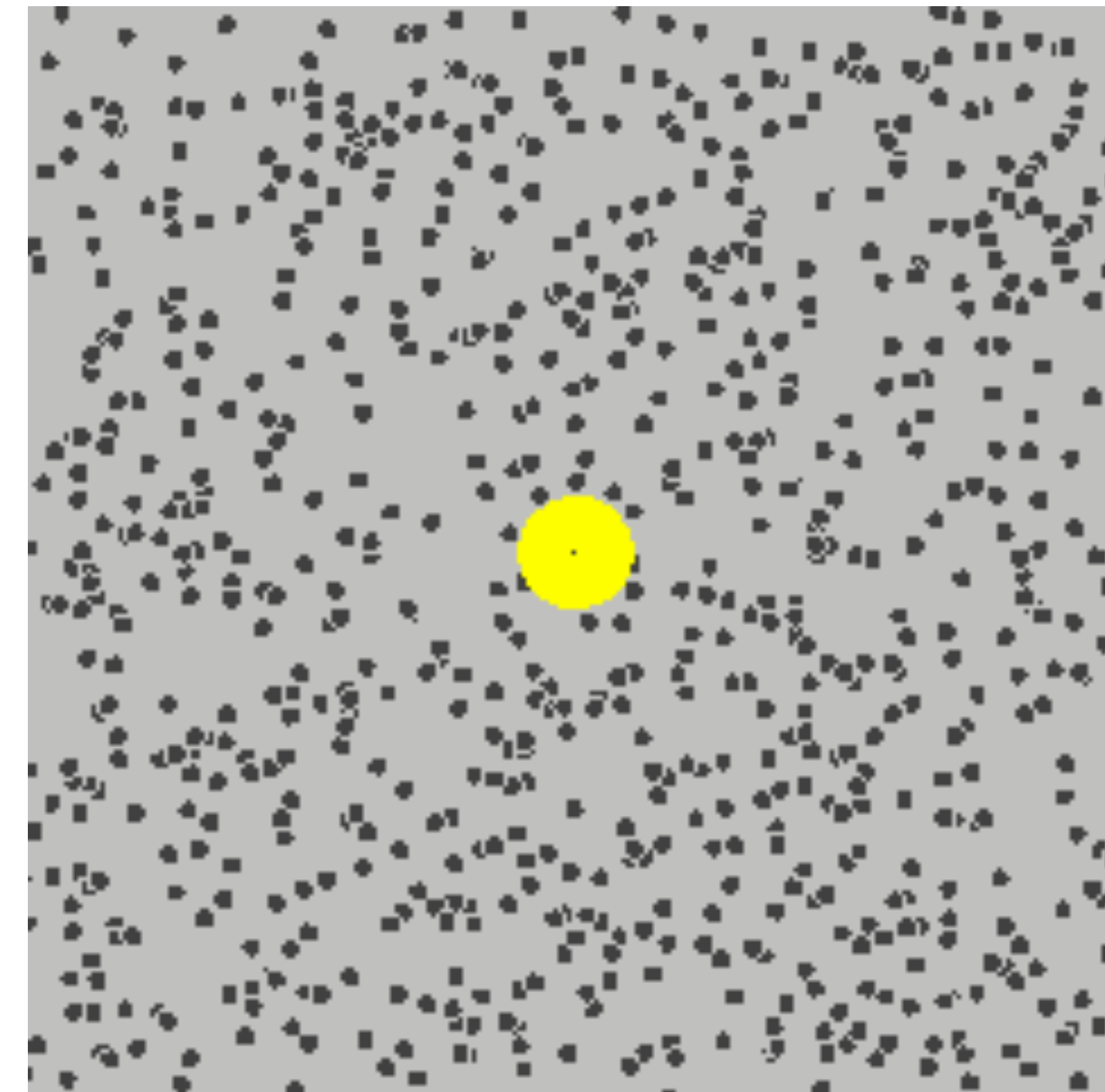
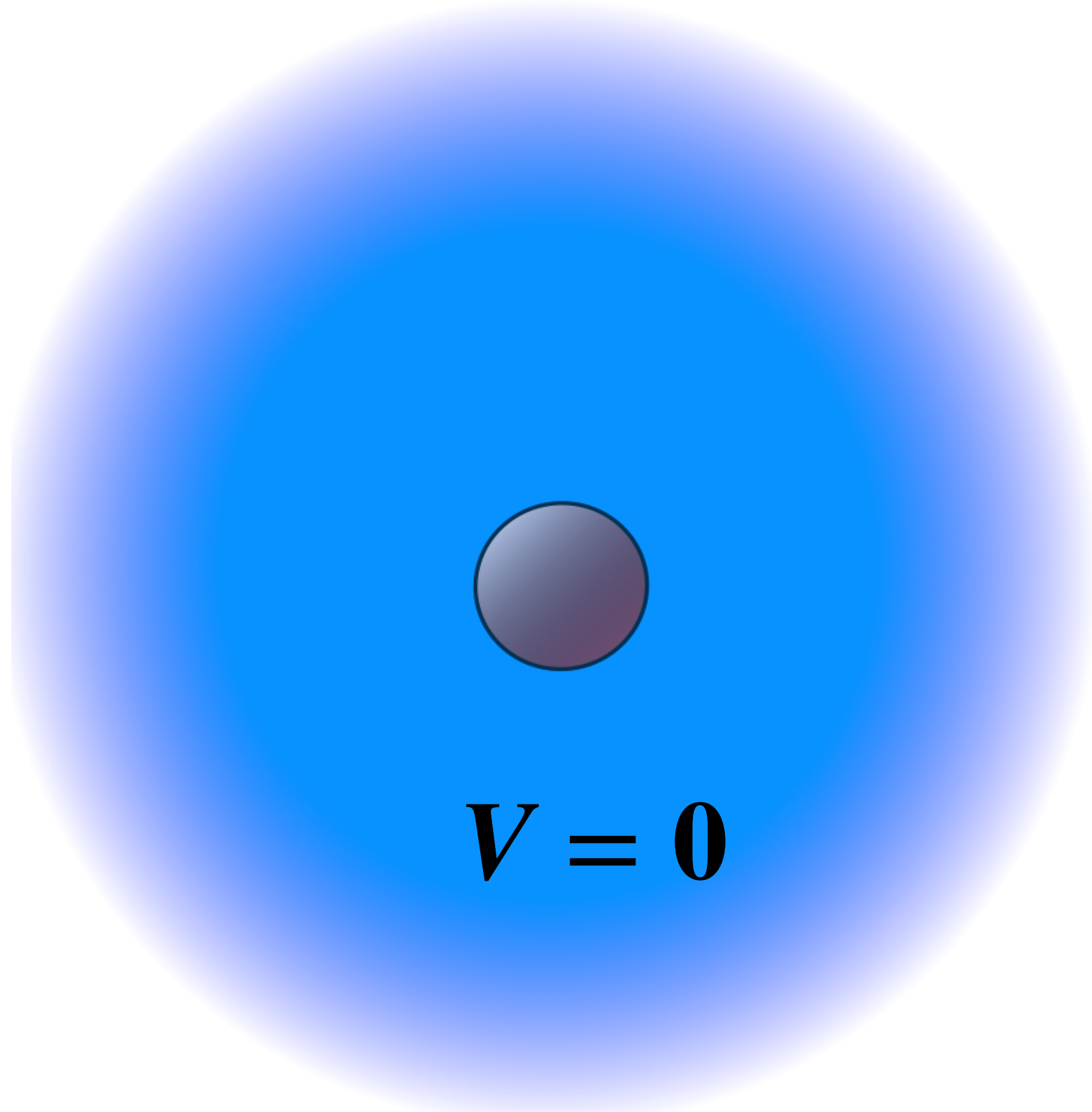
$$\langle \mathbf{\Pi}_{ab}^{\text{ran}}(\mathbf{r}, t) \mathbf{\Pi}_{cd}^{\text{ran}}(\mathbf{r}', t') \rangle = 2k_B T \eta_0 \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t') \left[ \delta_{ac} \delta_{bd} + \delta_{ad} \delta_{bc} - \frac{2}{d} \delta_{ab} \delta_{cd} \right]$$

- ▶ 揺らぐナビエ・ストークス方程式は場のランジュバン方程式である
- ▶ 流体揺らぎまで連続体理論の範疇で扱えるように、従来の流体力学を拡張したもの

どうして、ランダムノイズ項を考えるのか？

# ブラウン運動

静かな流体中に一つの球を置く



From wikipedia

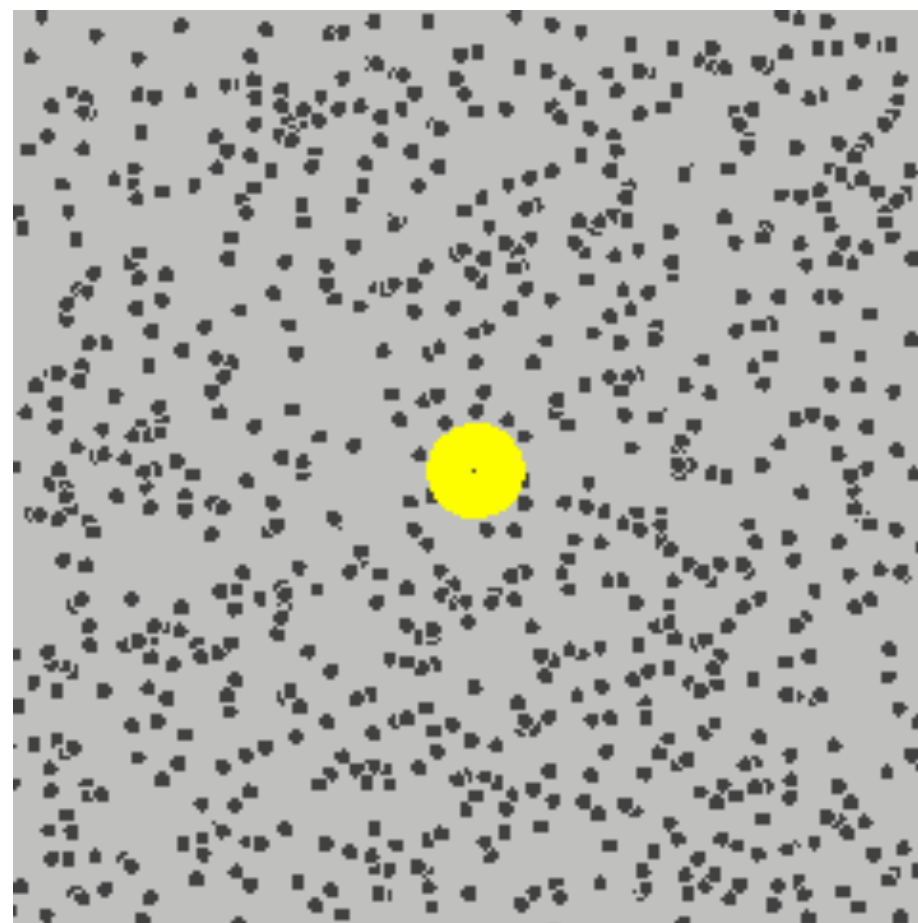
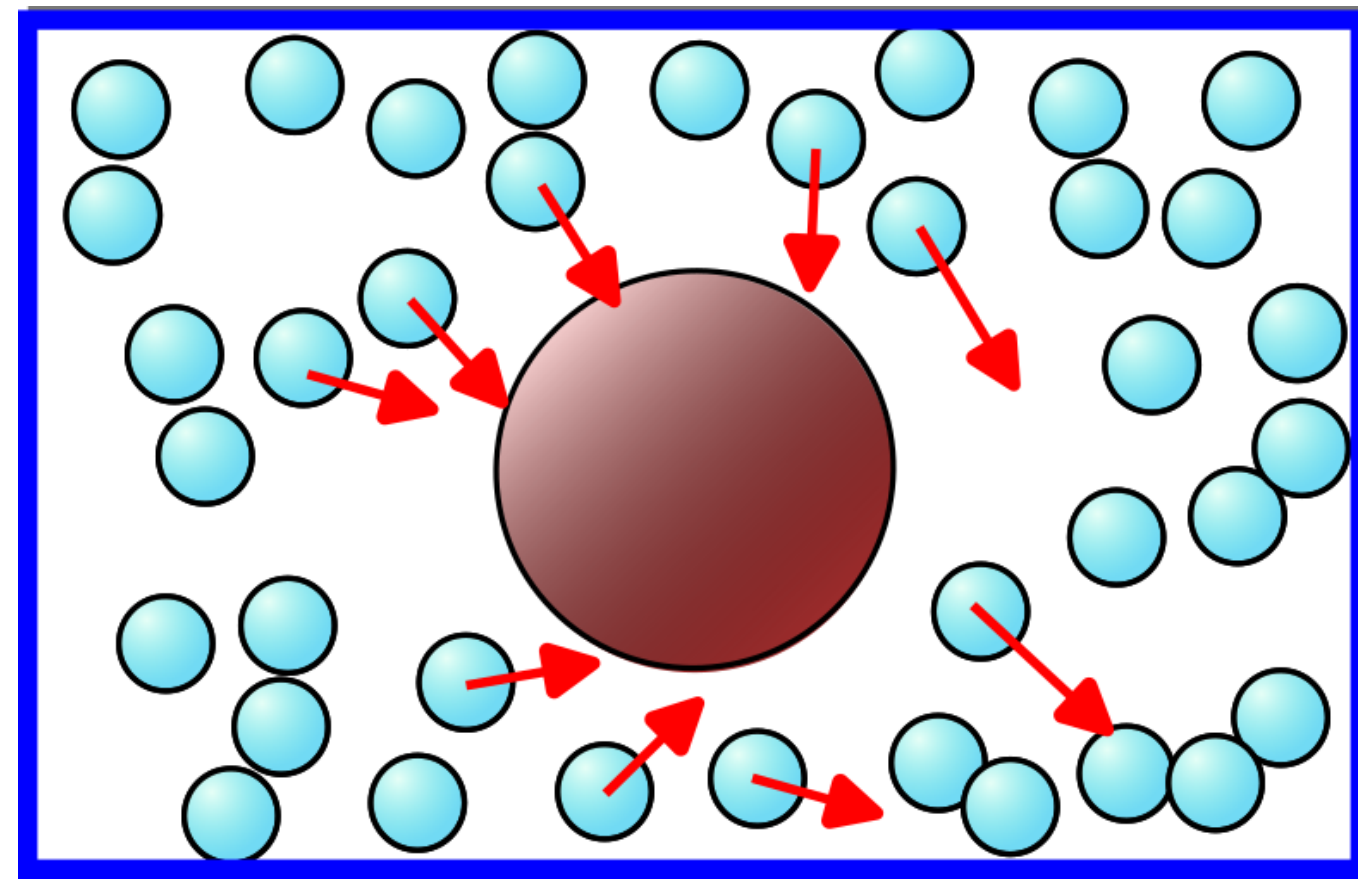
従来の流体力学の枠組みでは、**球の大きさによらずに**、球は定常状態で流体中に静止することが  
予言される

Landau and Lifshitz, "Fluid Mechanics"

実際には、球のサイズを小さくしていくと、球はランダムな運動を示すようになる

# ブラウン運動の起源

ブラウン運動の起源は流体を構成する無数のミクロな粒子が、注目している球に絶えず衝突することにある



From  
wikipedia

ランジュバン方程式

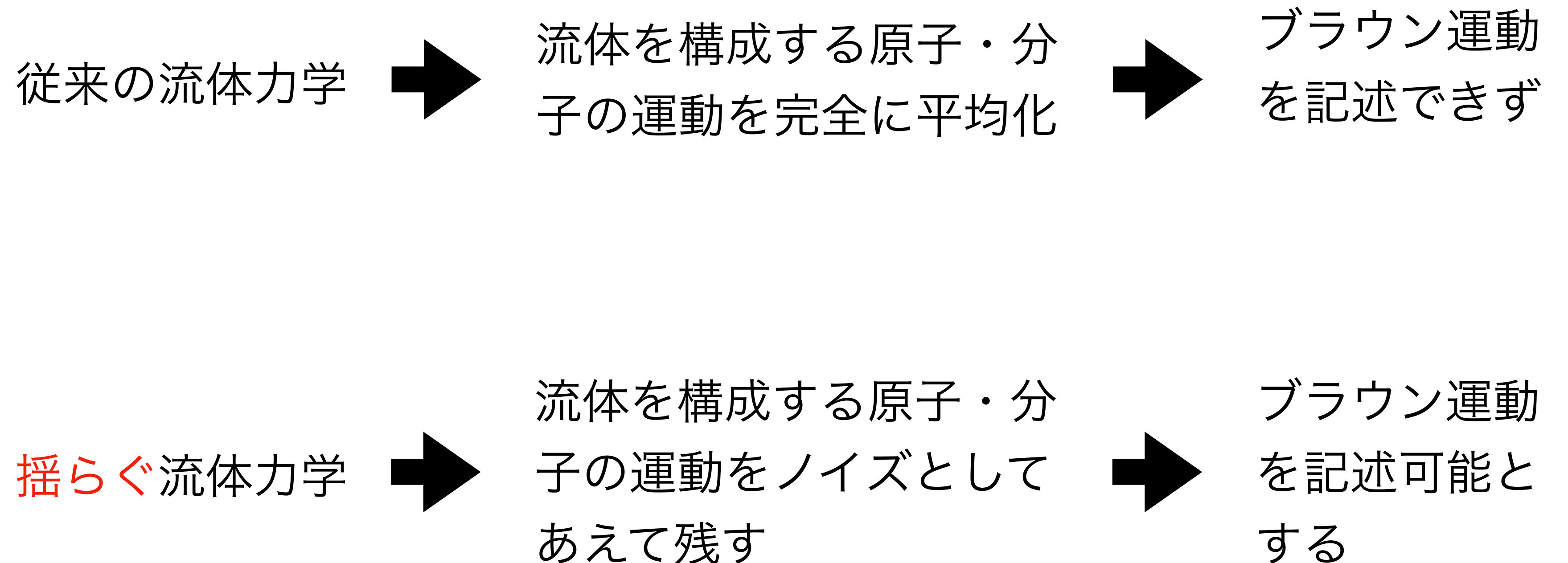
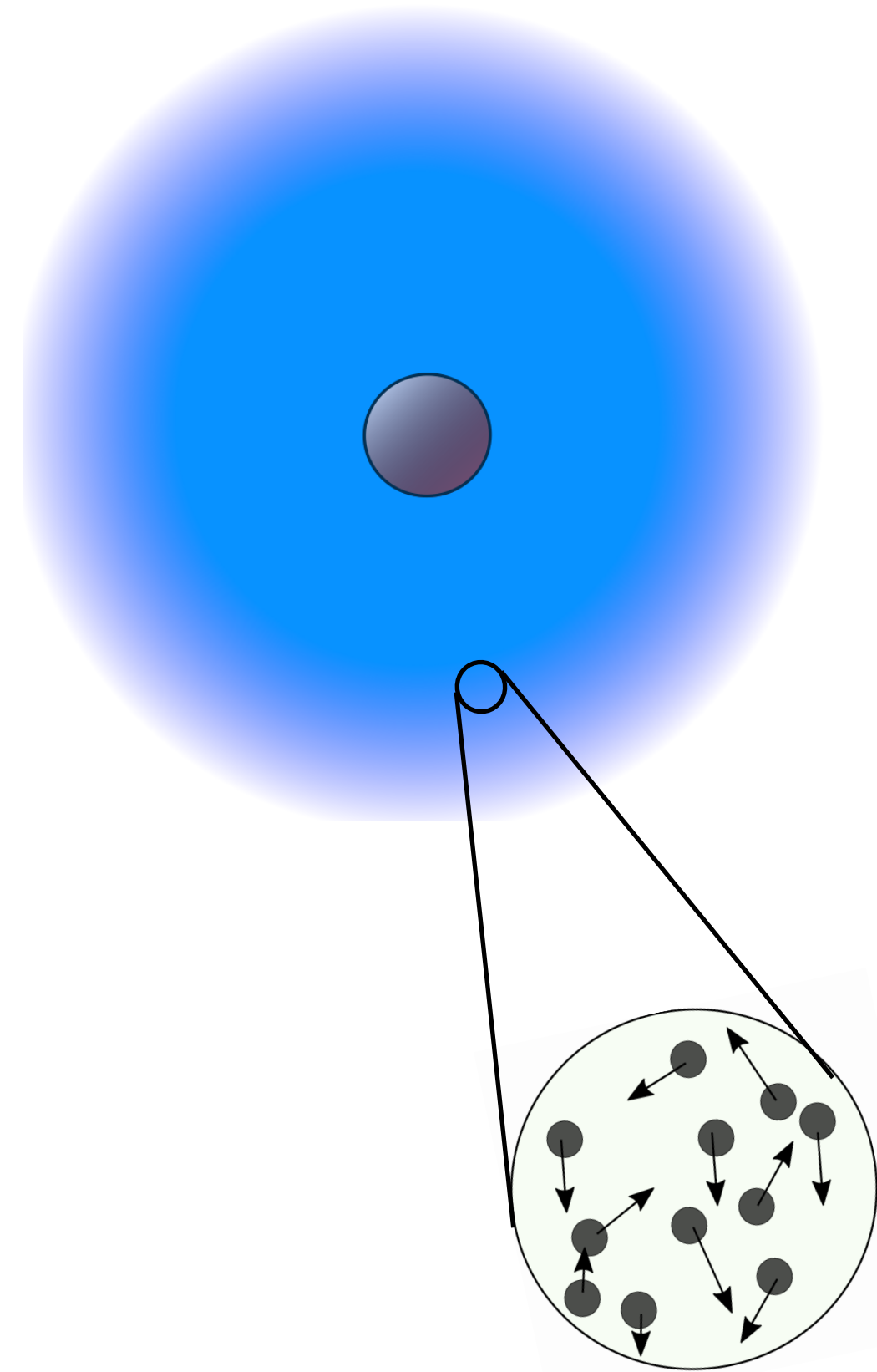
$$\frac{dV}{dt} = -\gamma V + \eta^{\text{ran}}(t)$$

$$\langle \eta_a^{\text{ran}}(t) \eta_b^{\text{ran}}(t') \rangle = 2\gamma k_B T \delta_{ab} \delta(t - t')$$

ランダムノイズ項がミクロな粒子のランダムな衝突をモデル化する

# 揺らぐ流体力学とは

ランジュバン方程式のアイデアを流体そのものに応用したものが揺らぐ流体力学



# 揺らぐ流体方程式

揺らぐ流体力学は従来の流体力学を拡張し、ブラウン運動を記述できるようにしたもの

従来の流体力学  
(非圧縮)

$$\rho_0 \left[ \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} \right] = -\nabla p + \eta_0 \nabla^2 \mathbf{v}$$

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$$

揺らぐ流体力学  
(非圧縮)

$$\rho_0 \left[ \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} \right] = -\nabla p + \eta_0 \nabla^2 \mathbf{v} - \nabla \cdot \mathbf{\Pi}^{\text{ran}}$$

ランダムノイズ項

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$$

球に対するランジュバン方程式と同じように、原子・分子のミクロな運動をモデル化したランダムノイズ項を付け加える

# ランダムノイズ項の性質

揺らぐ流体力学

場のランジュバン方程式

$$\rho_0 \left[ \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} \right] = -\nabla p + \eta_0 \nabla^2 \mathbf{v} - \nabla \cdot \mathbf{\Pi}^{\text{ran}}$$

ランダムノイズ項

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$$

ランダムノイズ項の形は5つの物理的要請から定める

- (1) 流体の平衡状態はカノニカル分布に従う。
- (2) 流体の運動量は保存量である。
- (3) ノイズは等方的である。
- (4) ノイズは一様である。
- (5) ノイズはガウシアン白色ノイズであると仮定する。

➡  $\langle \mathbf{\Pi}_{ab}^{\text{ran}}(\mathbf{r}, t) \mathbf{\Pi}_{cd}^{\text{ran}}(\mathbf{r}', t') \rangle = 2k_B T \eta_0 \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t') \left[ \delta_{ac} \delta_{bd} + \delta_{ad} \delta_{bc} - \frac{2}{d} \delta_{ab} \delta_{cd} \right]$

一意に決定

# 揺らぐナビエ・ストークス方程式

$$\rho_0 \left[ \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} \right] = -\nabla p + \eta_0 \nabla^2 \mathbf{v} - \nabla \cdot \mathbf{\Pi}^{\text{ran}}$$

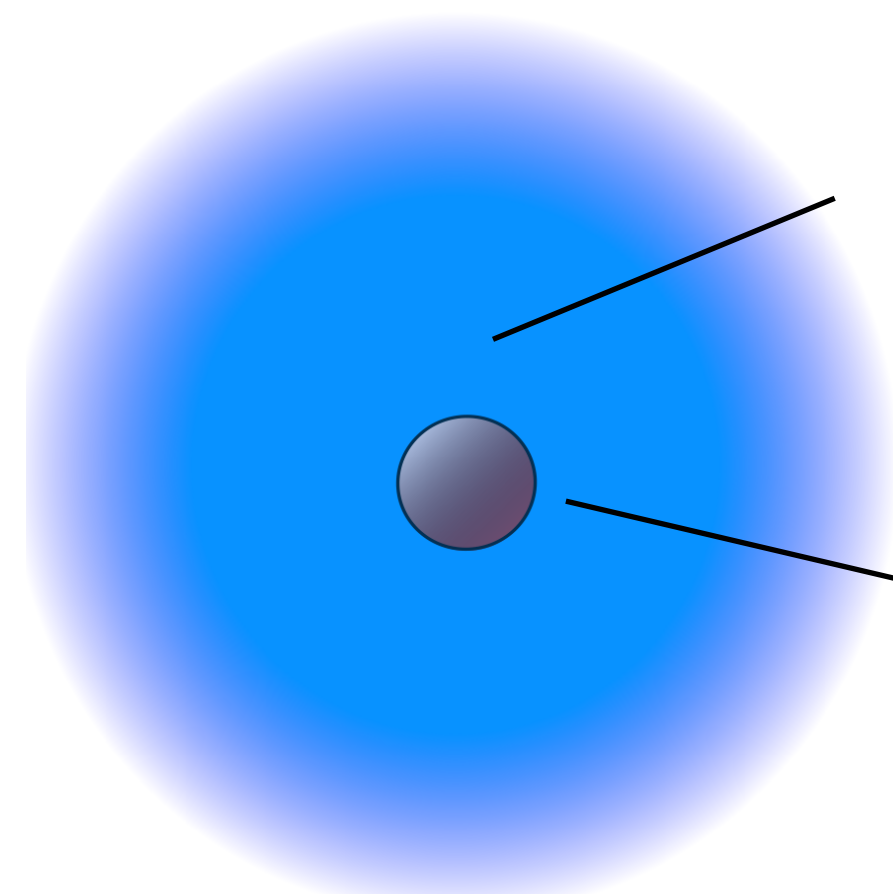
場のランジュバン方程式

ランダムノイズ項

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$$

$$\langle \mathbf{\Pi}_{ab}^{\text{ran}}(\mathbf{r}, t) \mathbf{\Pi}_{cd}^{\text{ran}}(\mathbf{r}', t') \rangle = 2k_B T \eta_0 \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t') \left[ \delta_{ac} \delta_{bd} + \delta_{ad} \delta_{bc} - \frac{2}{d} \delta_{ab} \delta_{cd} \right]$$

この枠組みがブラウン運動を引き起こすミクロな粒子の熱運動（熱揺らぎ）とコンシステント



揺らぐ流体方程式

剛体球



導出できる

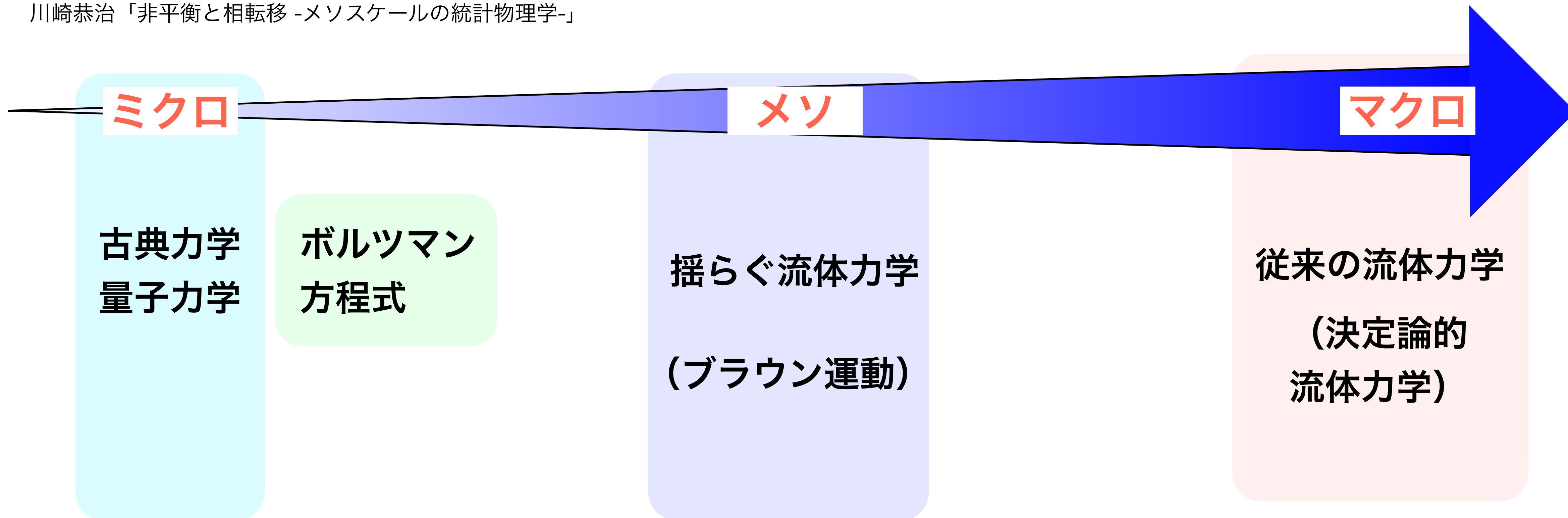
$$\frac{dV}{dt} = -\gamma V + \eta^{\text{ran}}(t)$$

$$\langle \eta_a^{\text{ran}}(t) \eta_b^{\text{ran}}(t') \rangle = 2\gamma k_B T \delta_{ab} \delta(t - t')$$

R. Zwanzig, J. Res. Natl. Bur. Std. (US) B **68**, 143-145 (1964)

# ここまでの整理：流体記述の階層性

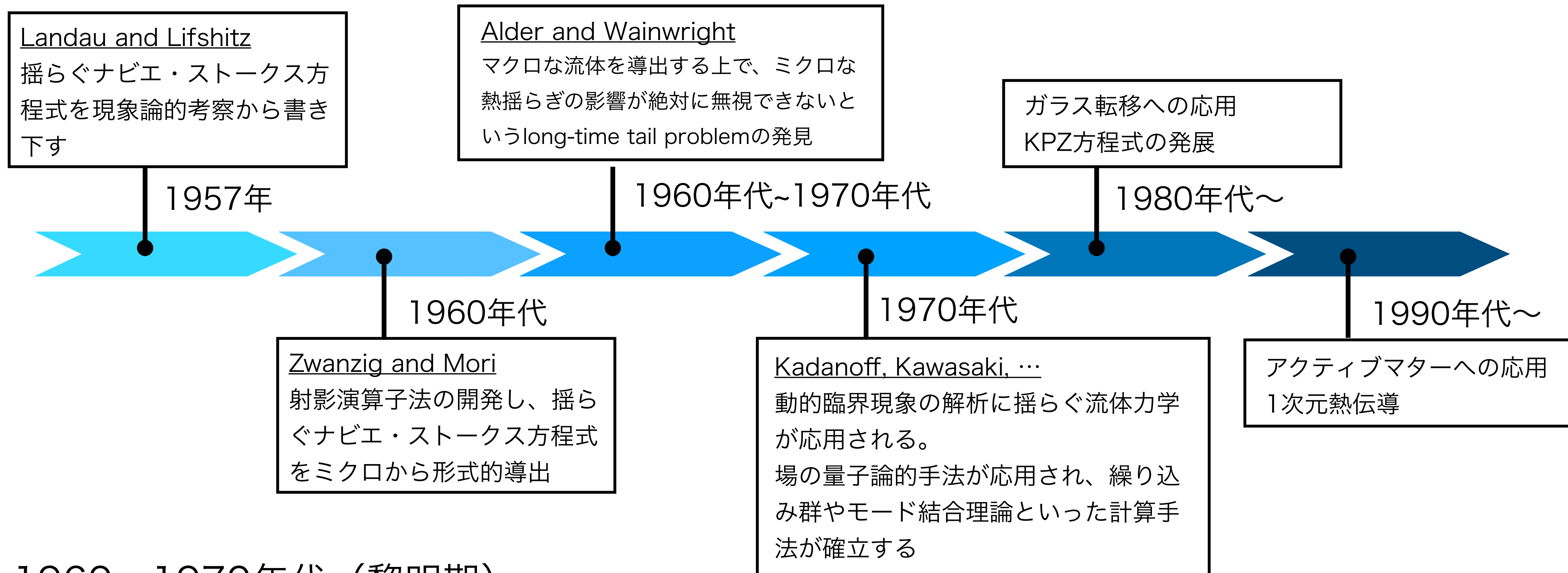
川崎恭治「非平衡と相転移 -メソスケールの統計物理学-」



揺らぐ流体力学は、広く受け入れた理論

古典力学を小さいスケール領域に突き詰めていくと量子力学があったように、  
従来の決定論的流体力学を小さいスケール領域に突き詰めていくと揺らぐ流体力学がある

# 揺らぐ流体力学的发展



## ▶ 1960~1970年代 (黎明期)

ミクロとマクロを繋ぐメソスケール記述である揺らぐ流体力学が流体導出には欠かせないという描像が確立

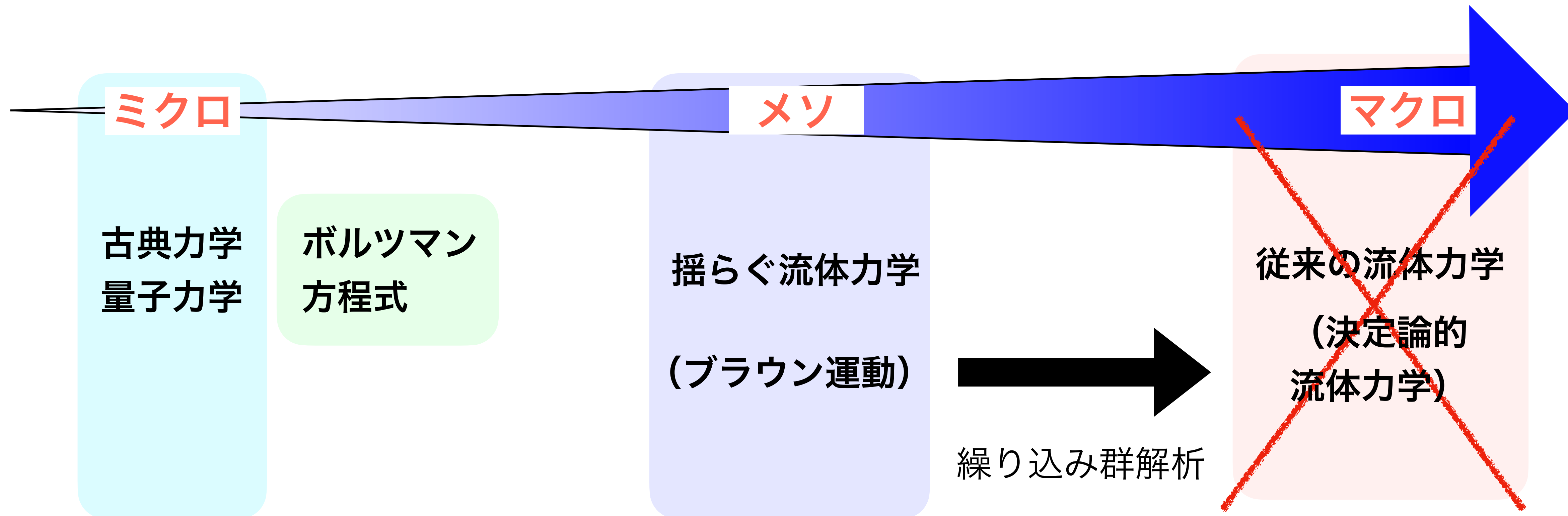
同時期に、揺らぐ流体力学の理論解析に場の量子論的な手法が応用され、計算手法が確立する

# 2次元クエット流の解析

ここから本題：『2次元では従来の決定論的流体力学が破綻する』とはどういうことか？

HN, Y. Minami, and K. Saito, arXiv:2502.15241 (2025)

# 1970年代の2次元流体に関する知見

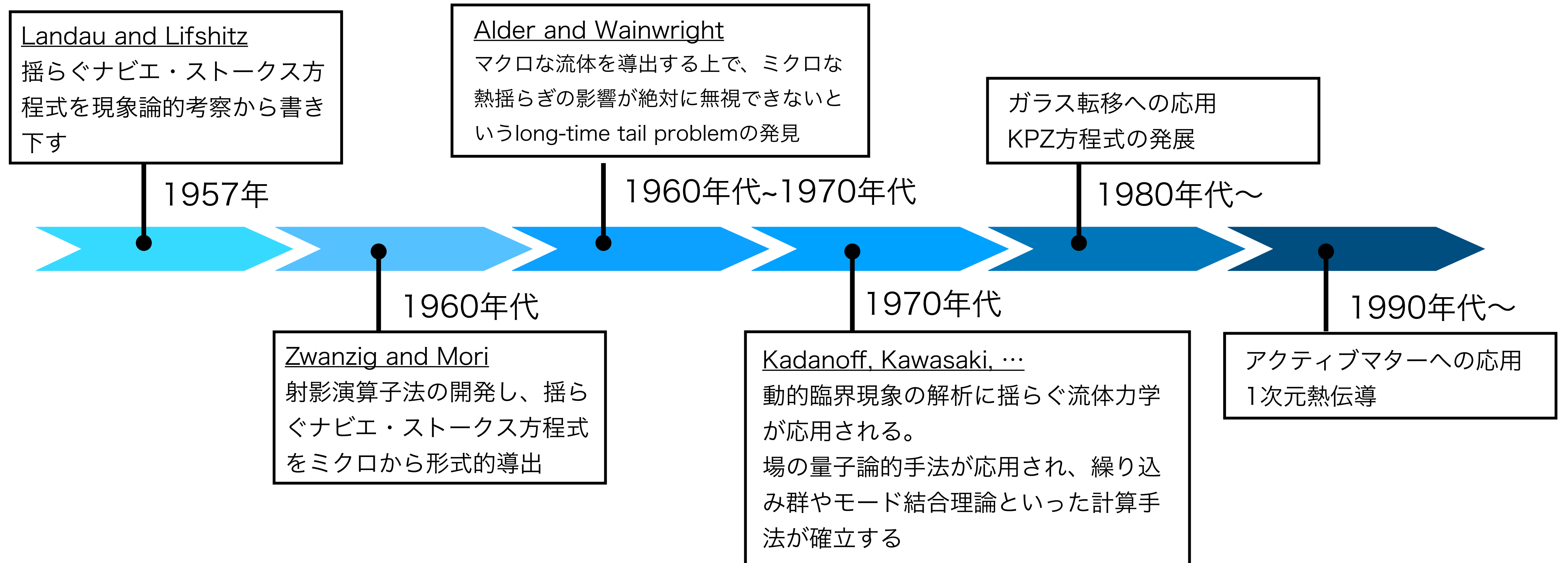


D. Forster, D. R. Nelson, and M. I. Stephen, Phys. Rev. A 16, 732 (1977)

2次元では、従来の決定論的な流体力学は成り立たず、揺らぐ流体力学による記述こそが本質である

(繰り込み群解析によって、2次元では粘性係数がシステムサイズに依存して発散してしまうことが数学的に示された)

# 2次元流体力学の理解の遅延



1970年代以降、2次元流体に関する研究にほとんど進展はなかった

私  
の  
考  
え

1. 繰り込み群やモード結合理論以外に簡単な理論解析手法がない
2. 実験がない（数値実験もない）

研究するモチベーションがなかった？（私の想像）

# 2010年代の数値計算技術の発展

2010年代に揺らぐ流体方程式の数値シミュレーション手法の知見が少しずつ蓄積

特に、Garcia, Bell, Donevらの研究グループが貢献。

揺らぐ流体方程式を数値的に安定かつ高精度に解くための計算スキームそのものの研究を行う

確率偏微分方程式（揺動散逸関係を満たす）を数値的にどう解くか？

A. L. Garcia, et al. arXiv:2406.12157 (2025)

## AN INTRODUCTION TO COMPUTATIONAL FLUCTUATING HYDRODYNAMICS\*

ALEJANDRO L. GARCIA<sup>†</sup>, JOHN B. BELL<sup>‡</sup>, ANDREW NONAKA<sup>‡</sup>, ISHAN SRIVASTAVA<sup>‡</sup>  
, DANIEL LADIGES<sup>‡</sup>, AND CHANGHO KIM<sup>§</sup>

1970年代よりも複雑なゆらぐ流体現象を調べることが可能になった

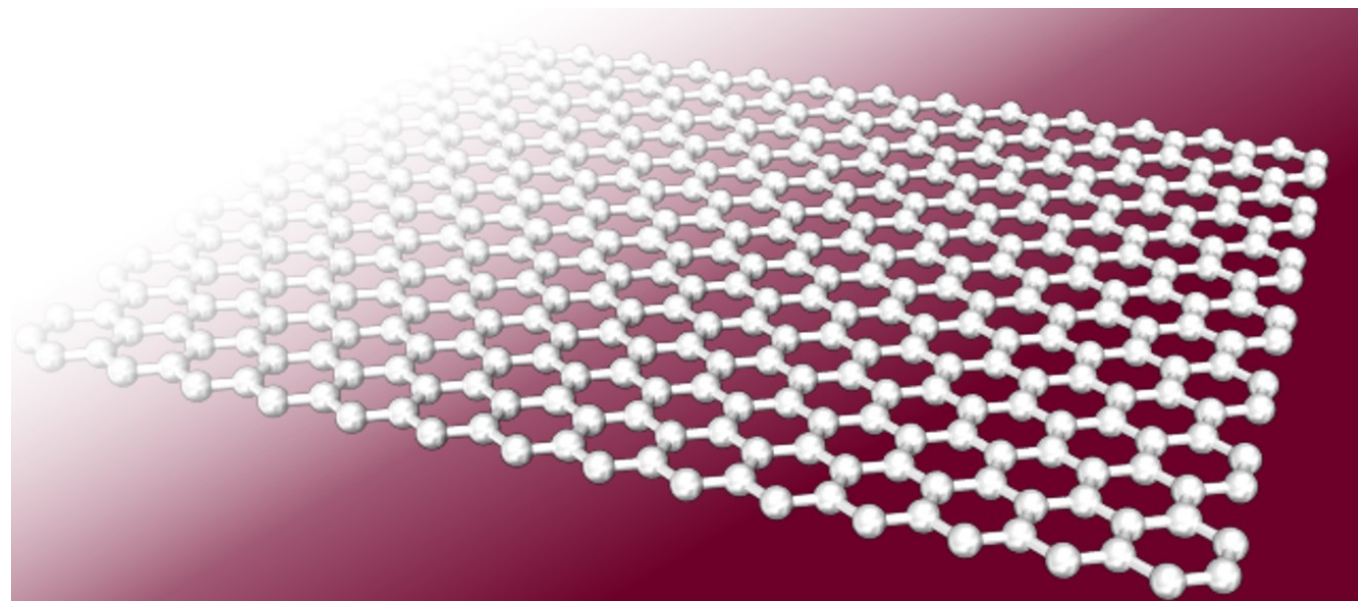
# 実験も可能な時代に？

未だ2次元流体の揺らぎの効果まで含む実験は行われていない

## 固体物性分野での流体力学

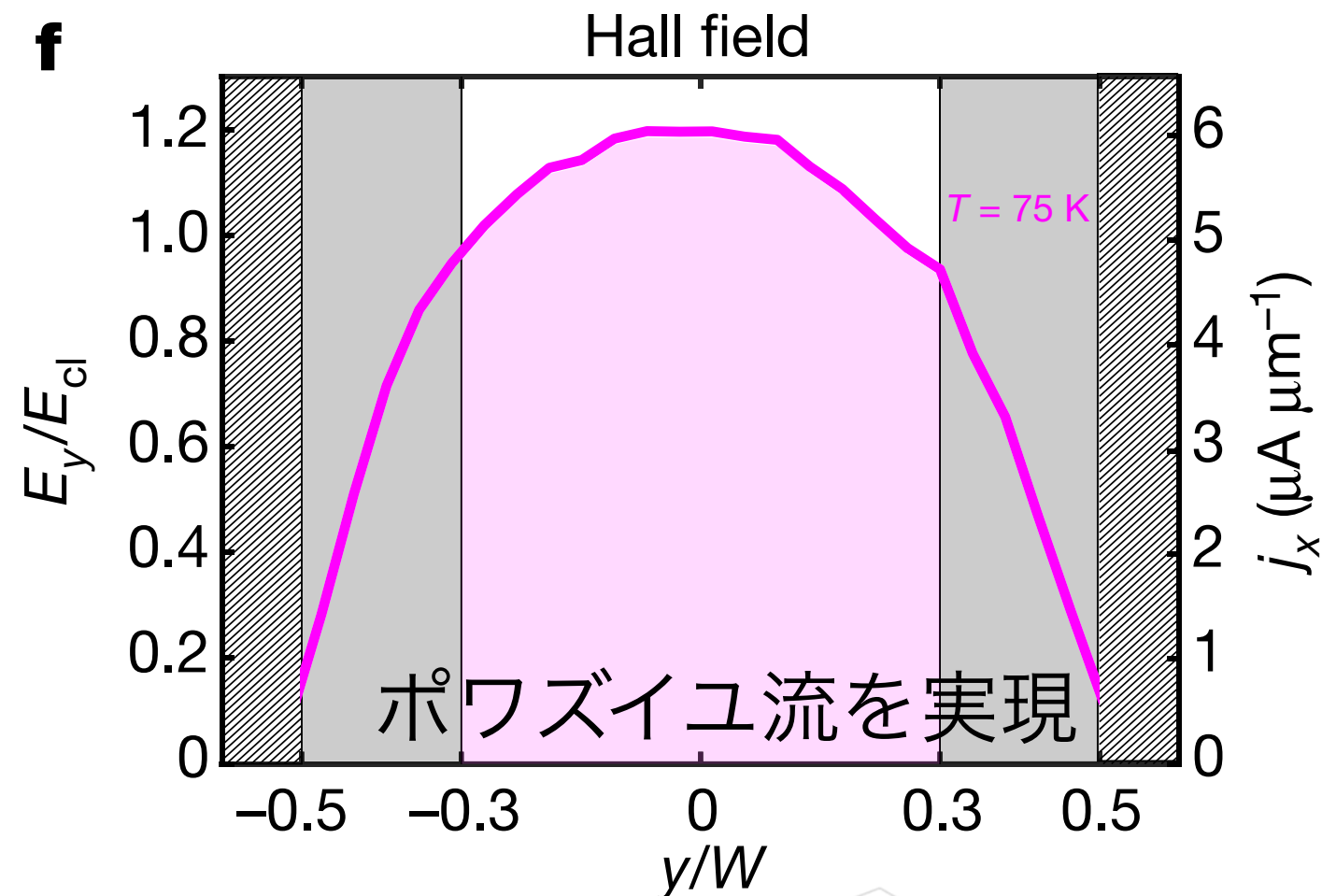
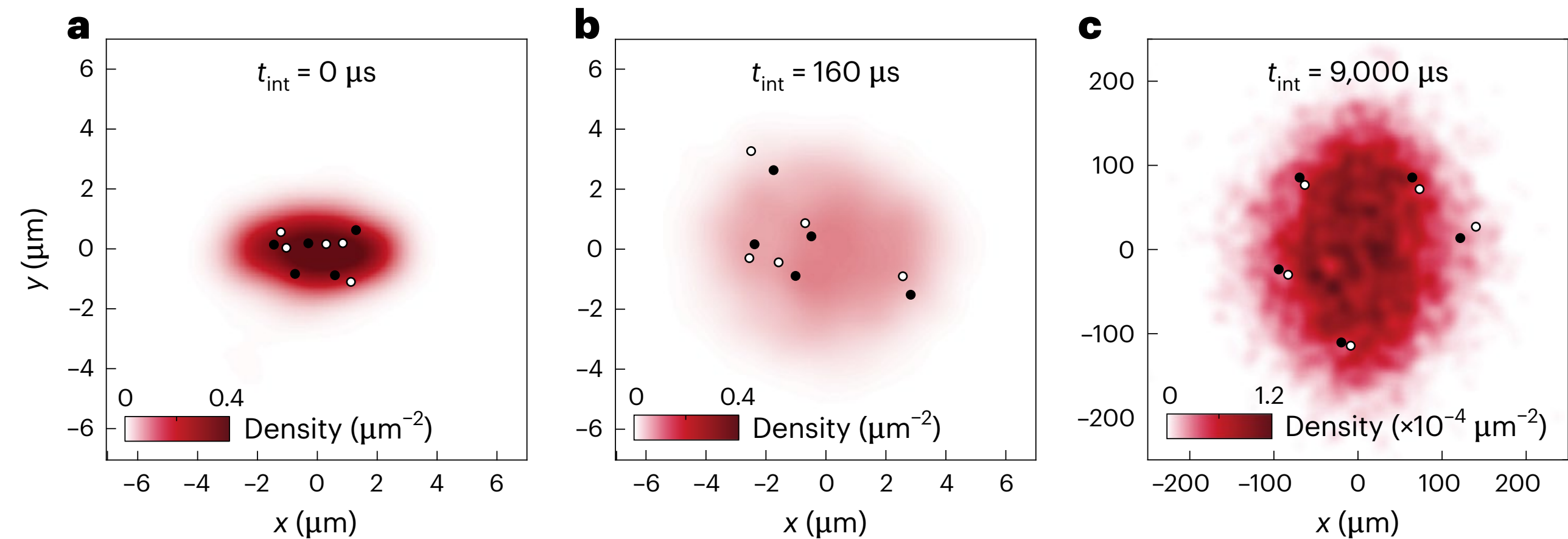
J. A. Sulpizio et al. Nature (2019)

### ウルトラピュアグラフェン



## 冷却原子系での流体力学

S. Brandstetter et al. Nature Physics (2025)



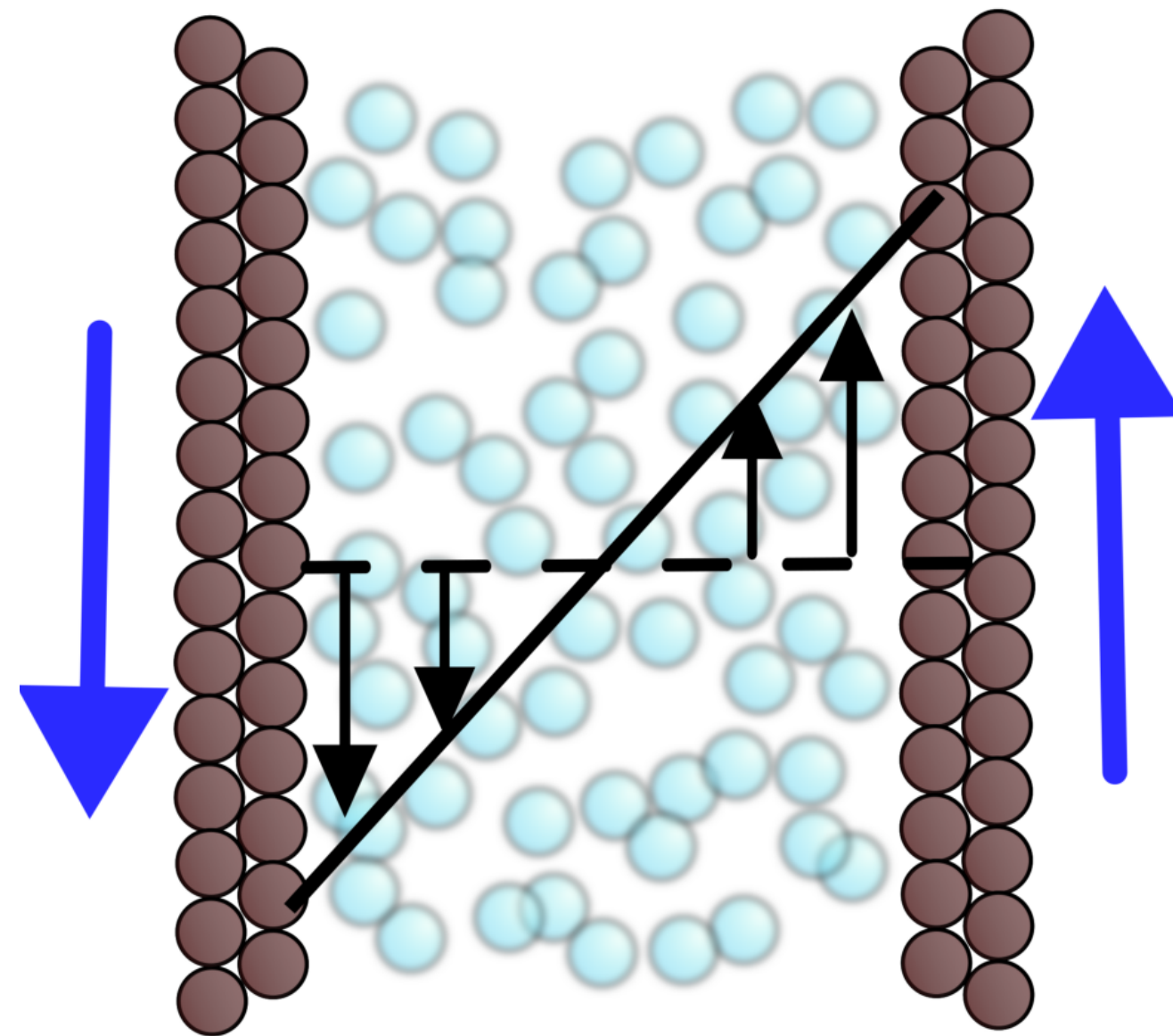
新しい流体力学の土壌では、低次元系がよく議論されている

今こそ2次元流体の実験的実現も可能な時代？

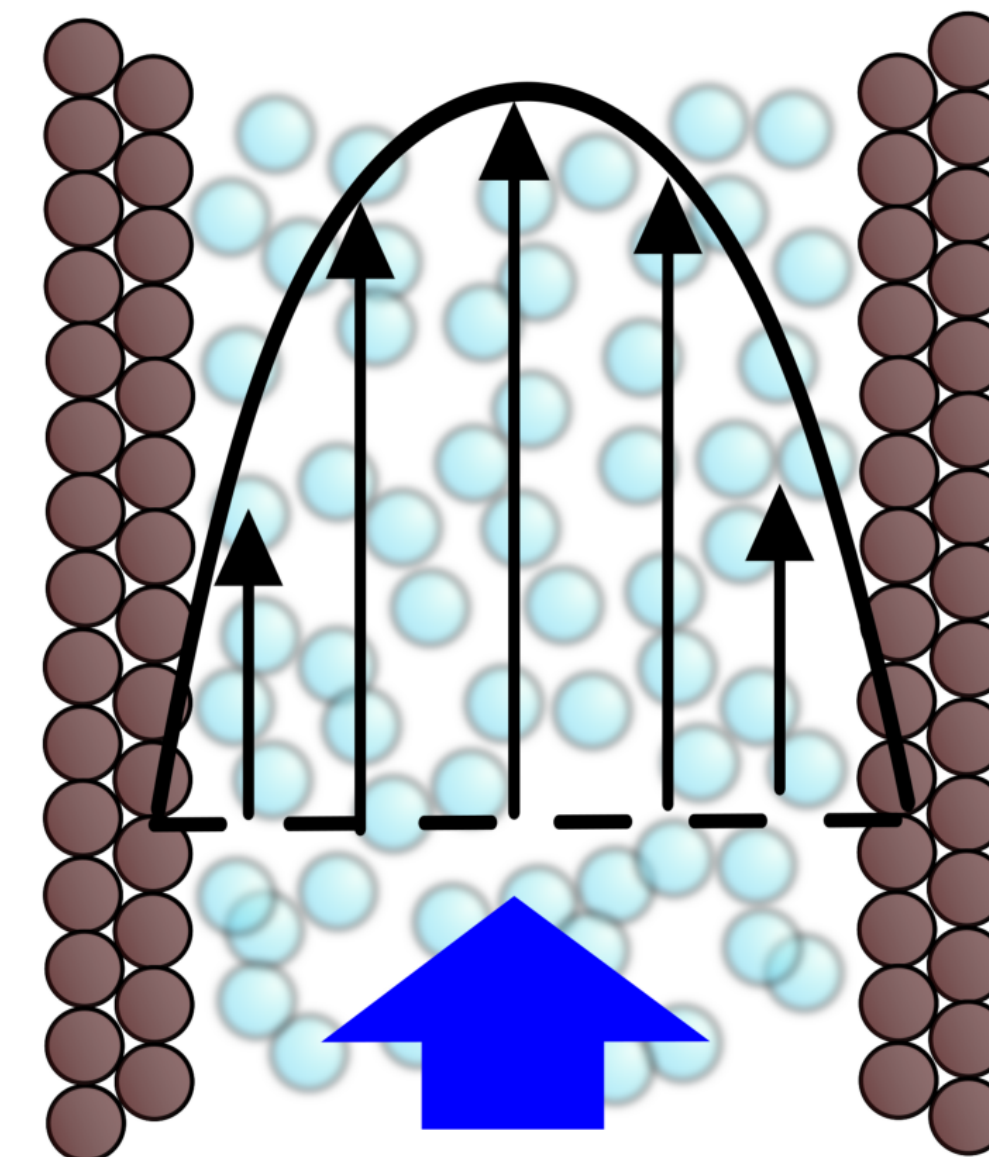
# 我々の成果

HN, Y. Minami, and K. Saito, arXiv:2502.15241 (2025)

数値シミュレーションを駆使して、2枚の平行な壁に挟まれたより現実的な流れを解析した



Couette geometry



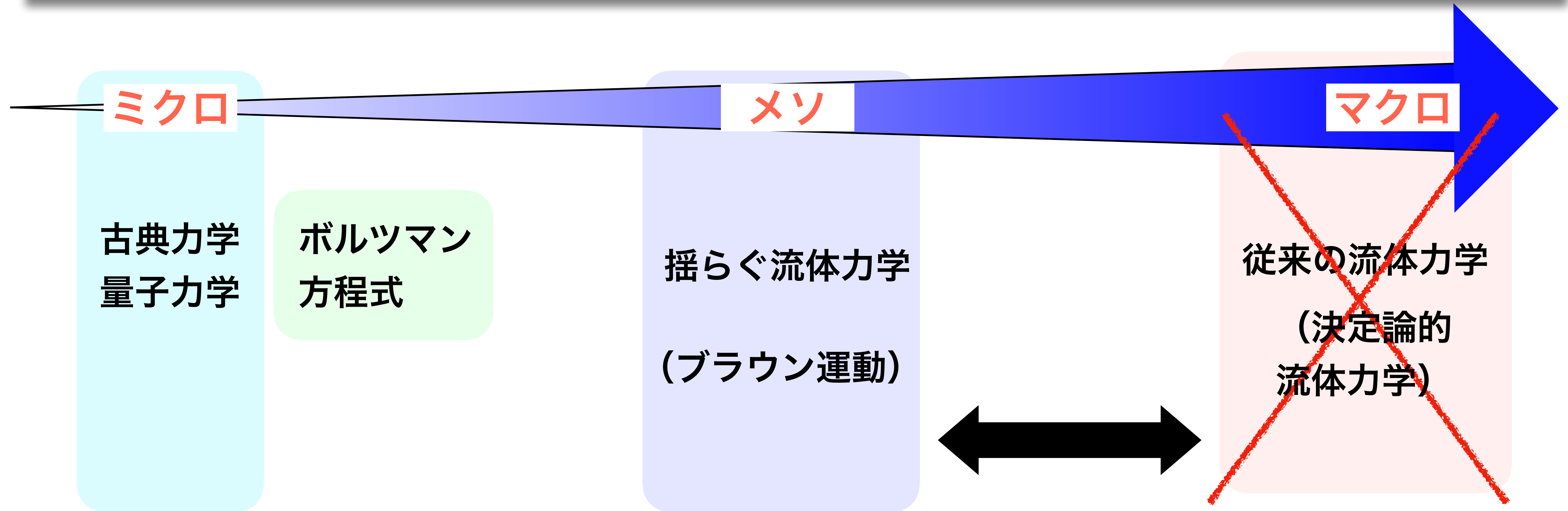
Poiseuille geometry

従来の研究：壁から十分離れたバルク領域のみ扱う

我々の結果：壁の存在は揺らぐ流体力学において本質的に重要であることを見つけた

さらに、壁の存在によって、2次元流体の粘性係数とは何か？という問いに対する新しいアプローチが可能となる

# 流体現象に対する熱揺らぎの効果



揺らぐ流体力学の予言を紹介し、  
熱揺らぎが流体現象に強い影響を  
与えることを示す

# 揺らぐ流体力学シミュレーションの設定

Couette geometry :

2枚の平行な壁に挟まれた流体

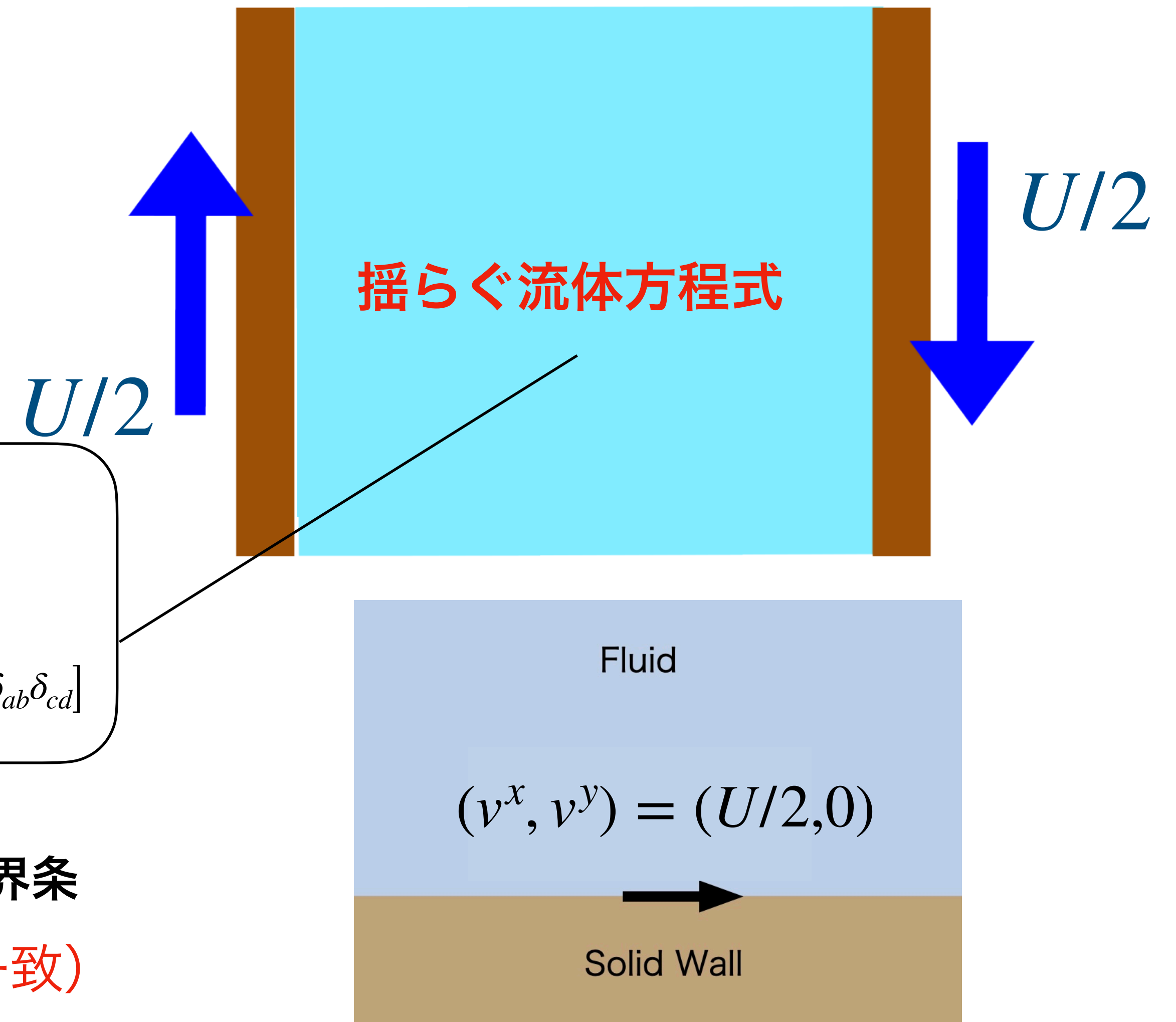
壁を反対方向に一定の速さで動かすことで  
流れを引き起こす

## ■ 流体は揺らぐ流体方程式に従う

$$\rho_0 \left[ \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} \right] = -\nabla p + \eta_0 \nabla^2 \mathbf{v} - \nabla \cdot \mathbf{\Pi}^{\text{ran}}$$
$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$$

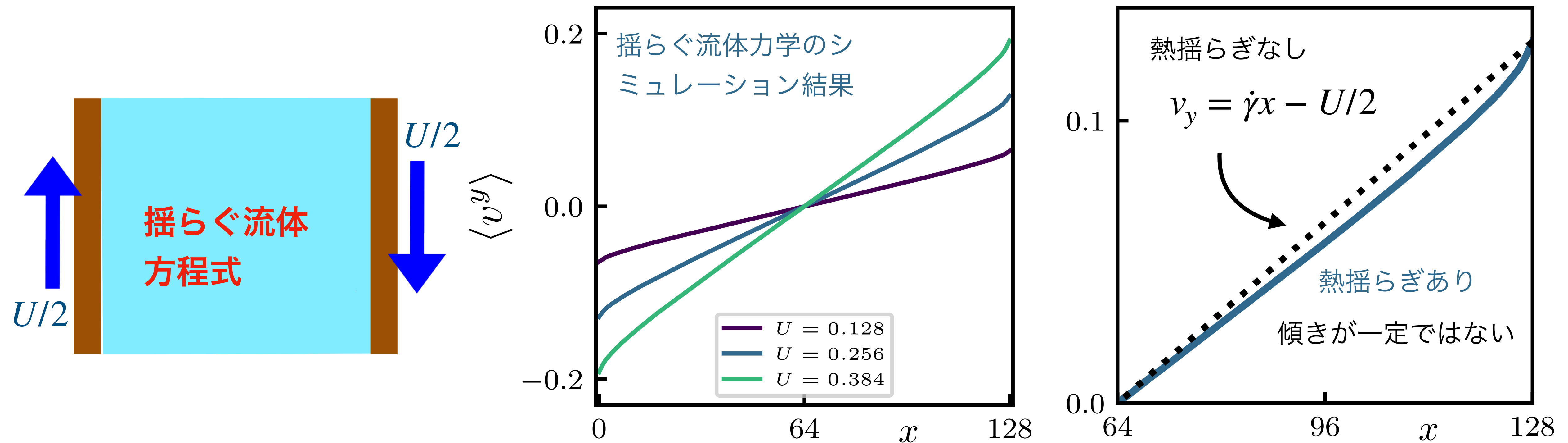
$$\langle \mathbf{\Pi}_{ab}^{\text{ran}}(\mathbf{r}, t) \mathbf{\Pi}_{cd}^{\text{ran}}(\mathbf{r}', t') \rangle = 2k_B T \eta_0 \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t') \left[ \delta_{ac} \delta_{bd} + \delta_{ad} \delta_{bc} - \frac{2}{d} \delta_{ab} \delta_{cd} \right]$$

- 固体壁と流体の間の境界条件として、no-slip境界条件を採用する (流速は壁の動く速度と完全に一致)



揺らぐ流体方程式のシミュレーション結果を紹介する

# 速度プロファイルのシミュレーション結果



揺らぐ流体力学は、Couette geometryに対して、傾きが一定でない速度場を予言する

熱揺らぎの存在（ランダムノイズ項）は流体現象を質的に変える

# せん断応力

流体力学において重要な観測量の一つがせん断応力

壁でのせん断応力 = 壁に働く力 = 観測量

$$\rho_0 \left[ \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} \right] = -\nabla p + \eta_0 \nabla^2 \mathbf{v} - \nabla \cdot \mathbf{\Pi}^{\text{ran}} \quad \nabla \cdot \mathbf{v} = 0$$

ランダムノイズ項

揺らぐナビエ・ストークス方程式を連続の式で書き直す

運動量フラックステンソル

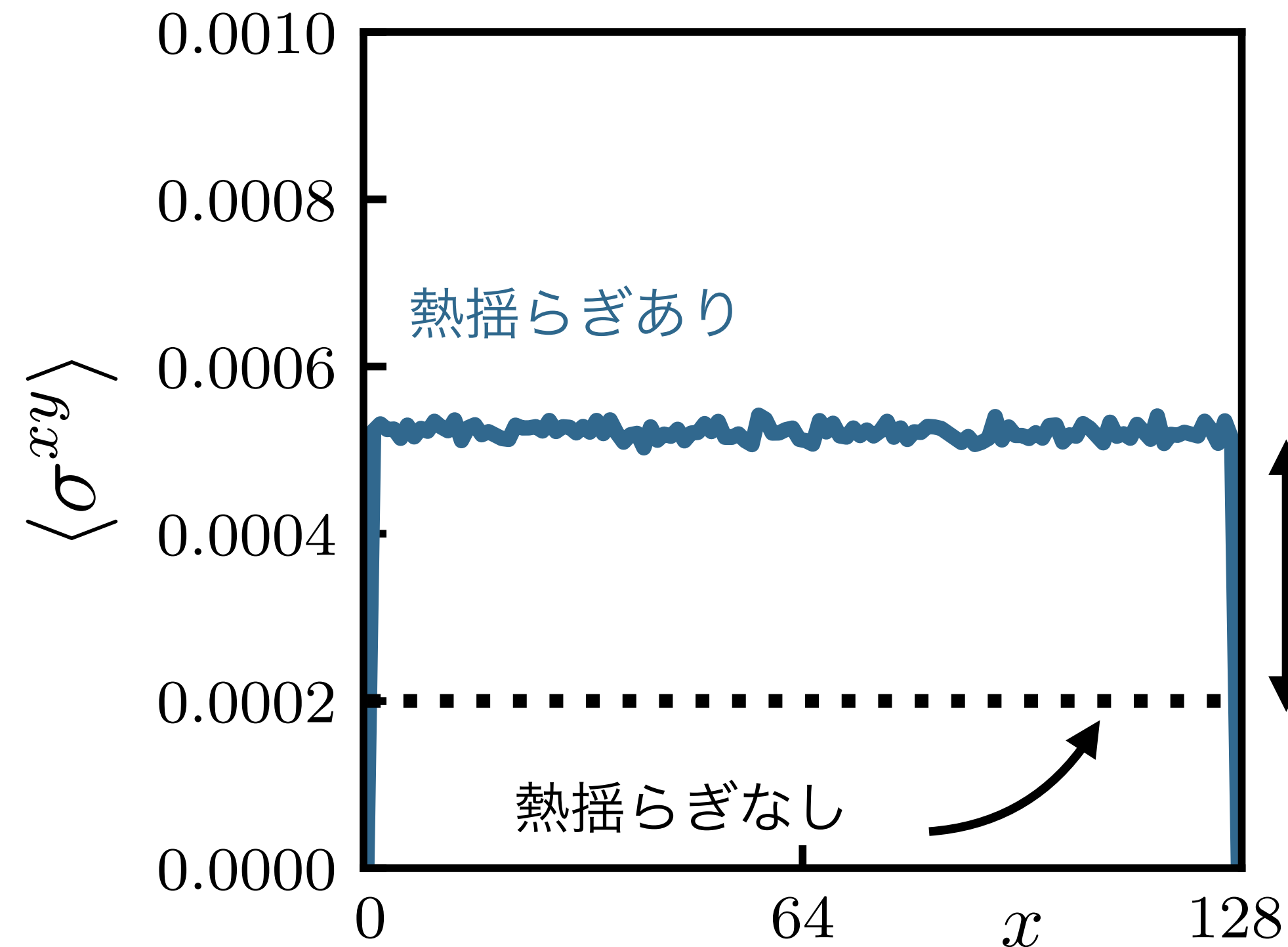
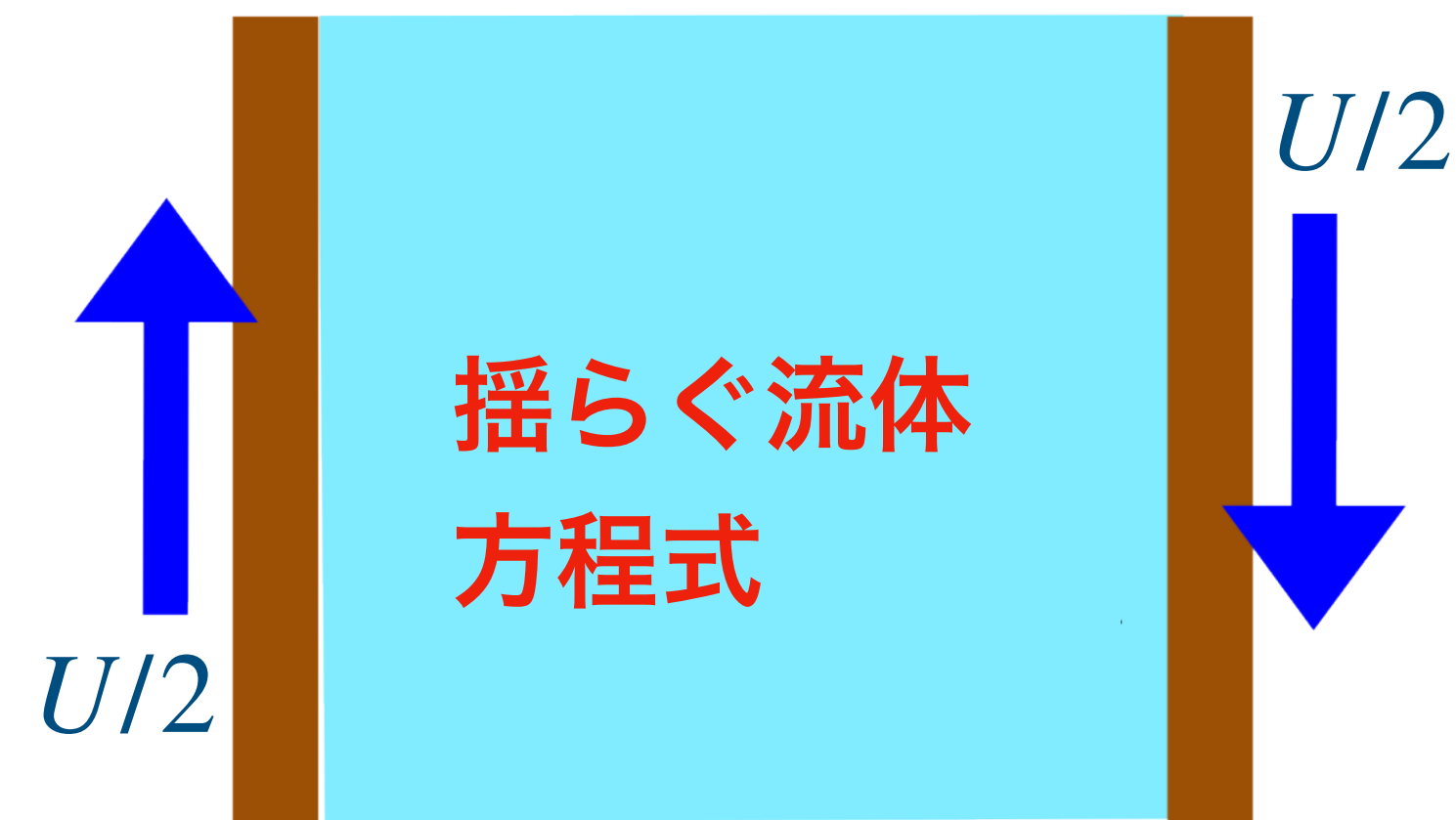
$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_0 \mathbf{v}) + \nabla \cdot \mathbf{\Pi} = 0 \quad \rightarrow \quad \Pi_{ab} = \rho_0 v_a v_b + p \delta_{ab} - \eta_0 \left( \partial_a v_b + \partial_b v_a \right) + \Pi_{ab}^{\text{ran}}$$

空間のある点での  
せん断応力

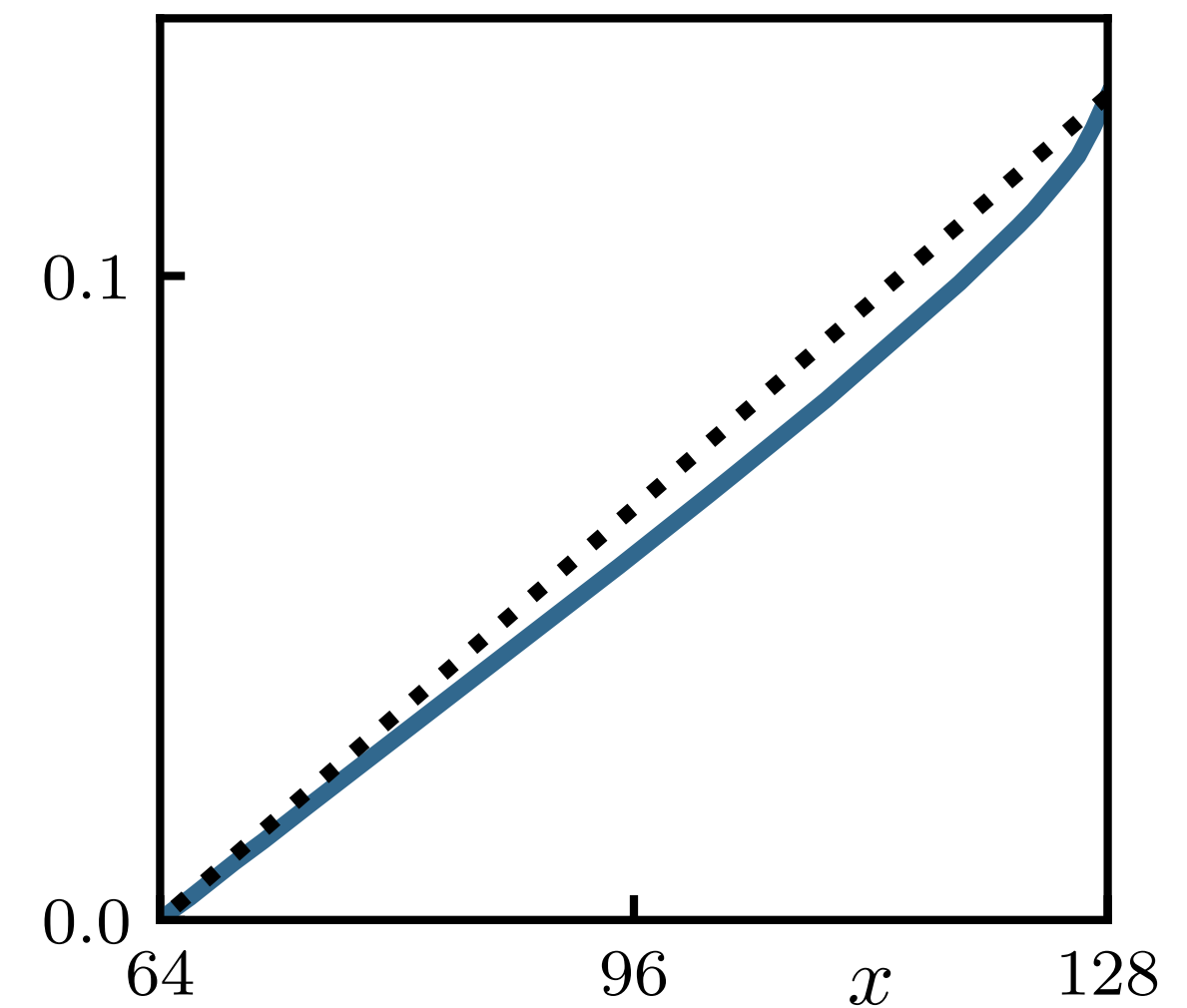
= Couette geometryの場合  
運動量フラックステンソルの非対角成分のマイナス

$$\langle \sigma_{xy} \rangle = -\langle \Pi_{xy} \rangle = -\rho_0 \langle v_x v_y \rangle + \eta_0 \partial_x \langle v_y \rangle$$

# せん断応力のシミュレーション結果



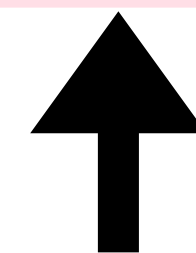
対応する速度プロファイル



揺らぐ流体力学での応力

$$\langle \sigma_{xy} \rangle = - \langle \Pi_{xy} \rangle = - \rho_0 \langle v_x v_y \rangle + \eta_0 \partial_x \langle v_y \rangle$$

熱揺らぎなしの時には、  
この項も0



流体揺らぎの非線形結合が応力の  
底上げる

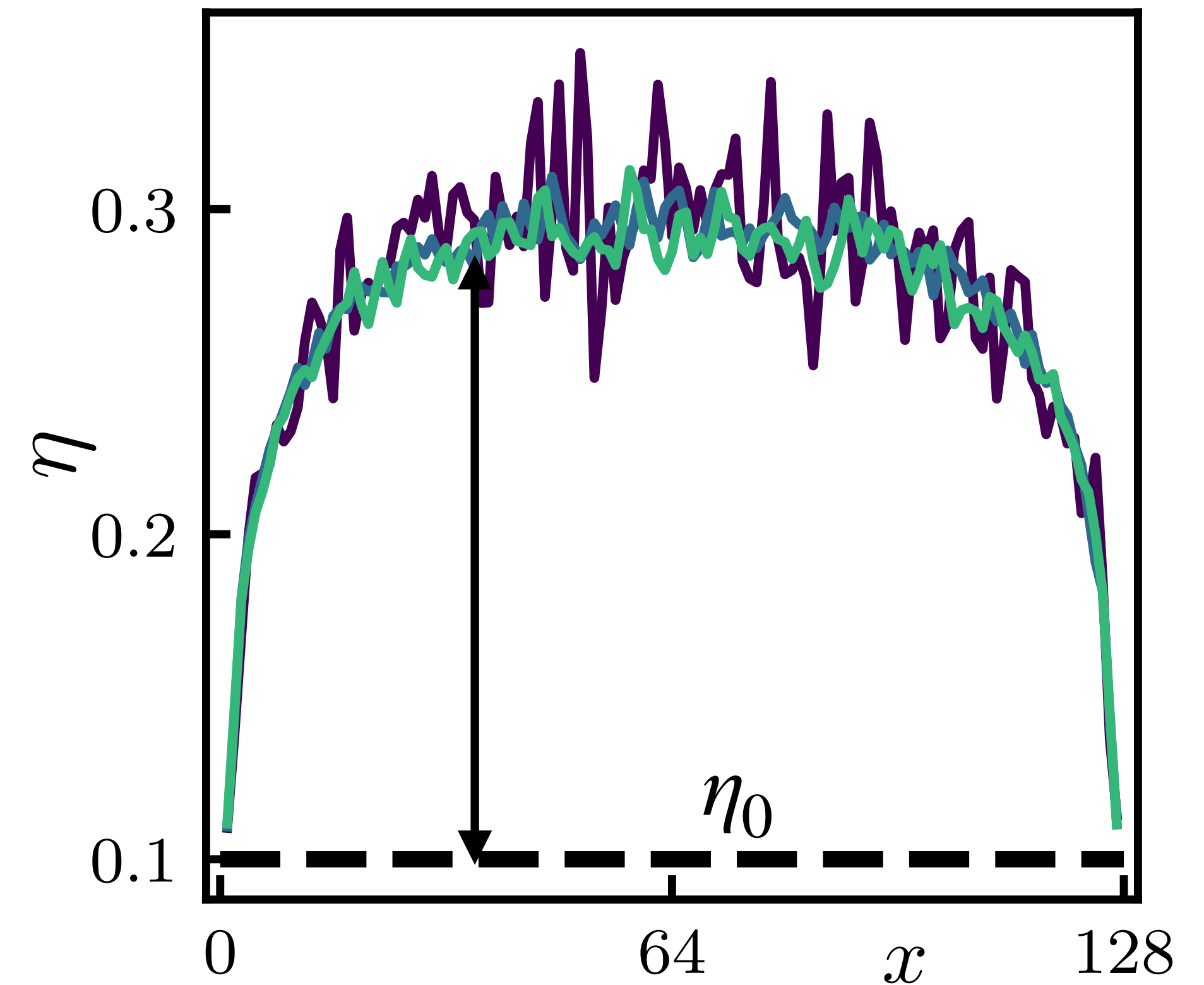
# 粘性係数

粘性係数はせん断応力と速度勾配の比として定義される  $\langle \sigma_{xy} \rangle = \eta \partial_x \langle v_y \rangle$

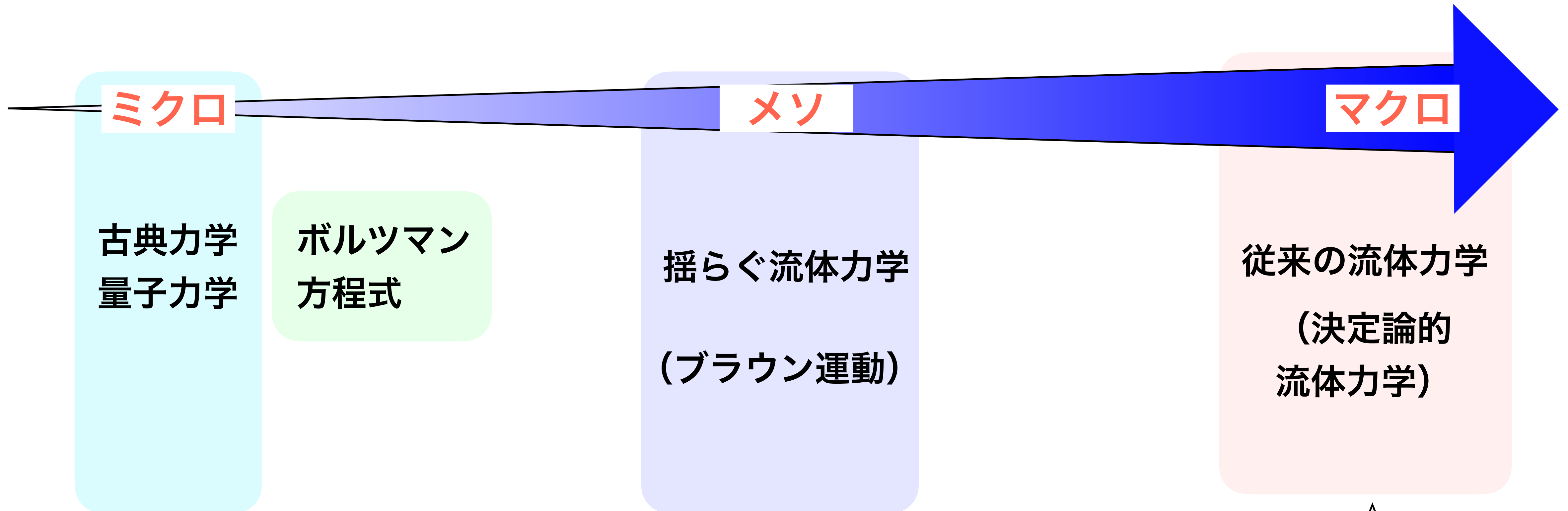
$$\langle \sigma_{xy} \rangle = - \langle \Pi_{xy} \rangle = - \rho_0 \langle v_x v_y \rangle + \eta_0 \partial_x \langle v_y \rangle$$

$$\eta = \frac{\langle \sigma_{xy} \rangle}{\partial_x \langle v_y \rangle} = \eta_0 - \rho_0 \frac{\langle v_x v_y \rangle}{\partial_x \langle v_y \rangle}$$

揺らぐ流体力学における粘性係数には揺らぎから来る補正項が存在する



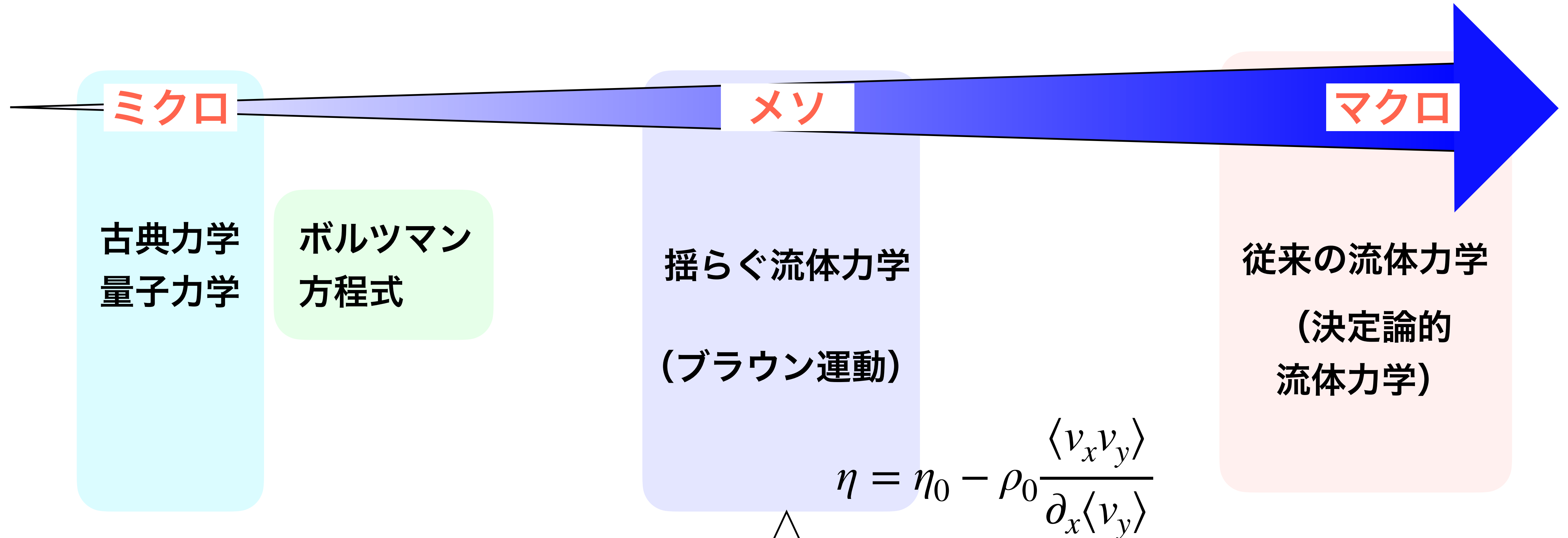
# 注意：実験で観測されている粘性係数は何か？



従来の決定論的  
流体力学  
(非圧縮)

$$\rho_0 \left[ \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} \right] = - \nabla p + \underline{\eta \nabla^2 \mathbf{v}}$$
$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$$

注意：実験で観測されている粘性係数は何か？



3次元の流体実験でも、これまで観測されてきた粘性係数はこの  $\eta$  である。

揺らぐ流体力学 (非圧縮)

$$\rho_0 \left[ \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} \right] = -\nabla p + \eta_0 \nabla^2 \mathbf{v} - \nabla \cdot \mathbf{\Pi}^{\text{ran}}$$

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$$

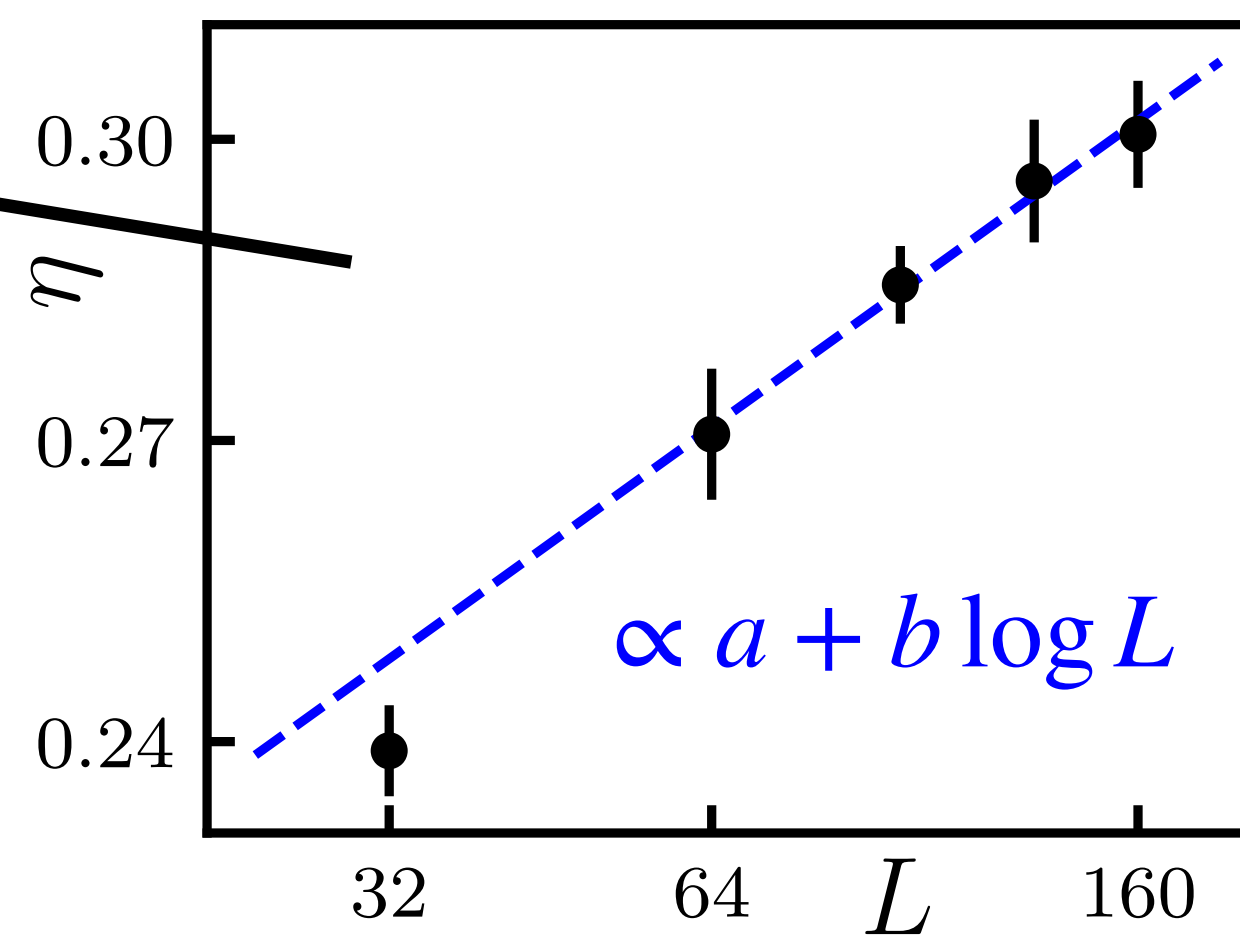
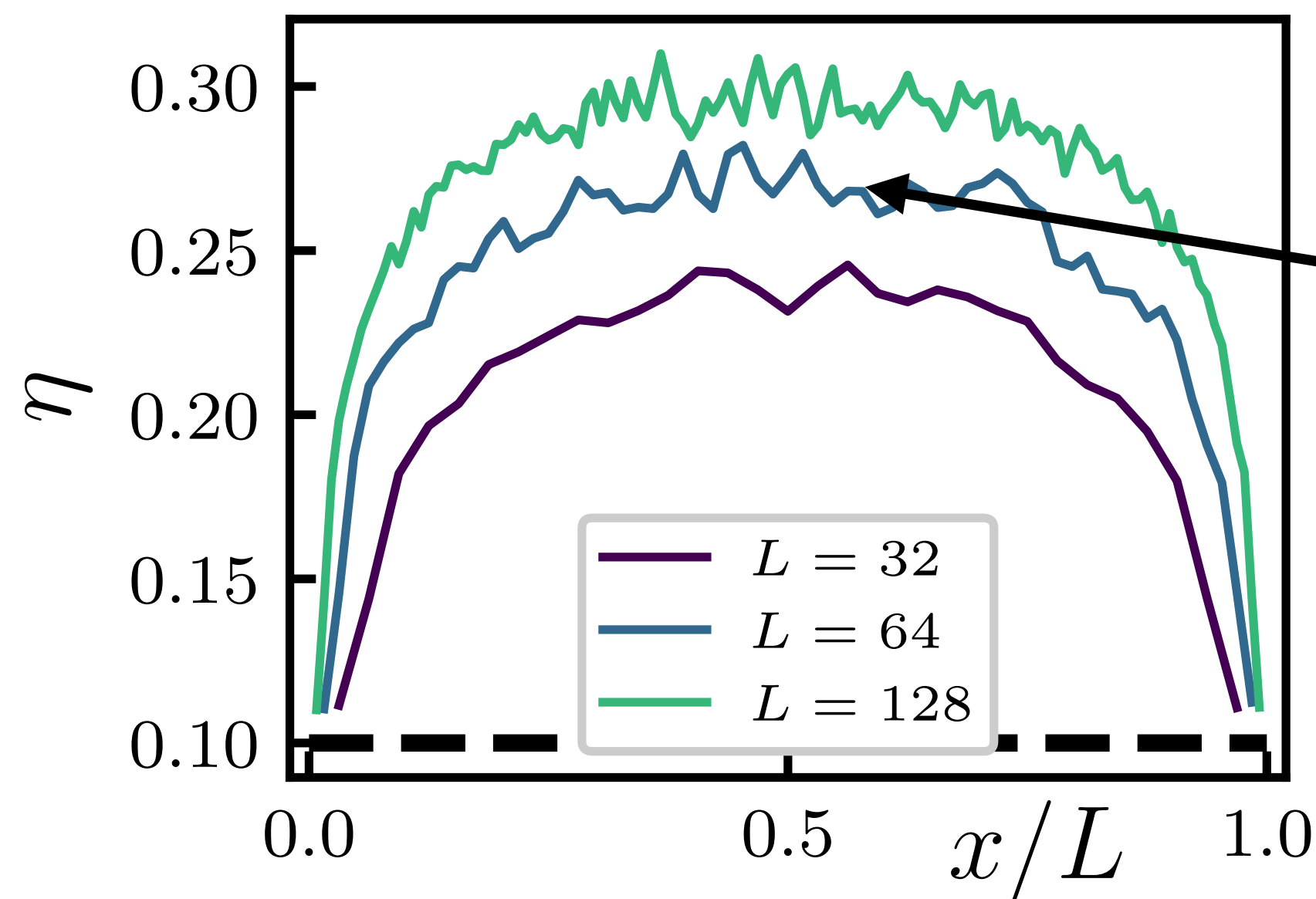
# 2次元流体における繰り込まれた粘性係数の性質

D. Forster, D. R. Nelson, and M. I. Stephen, Phys. Rev. A 16, 732 (1977) K. Yokota, M. Itami, and S. Sasa, Phys. Rev. Research 8, 013234 (2026)

$$\eta = \frac{\langle \sigma_{xy} \rangle}{\partial_x \langle v_y \rangle} = \eta_0 - \rho_0 \frac{\langle v_x v_y \rangle}{\partial_x \langle v_y \rangle} \leftarrow \int_{2\pi/L} \frac{d^2 \mathbf{k}}{(2\pi)^2} \frac{1}{|\mathbf{k}|^2} \sim \log L$$

繰り込まれた粘性係数

繰り込み補正



2次元揺らぐ流体における揺らぎの効果はシステムサイズを大きくしていくと、無限に増大する

# 2次元流体における繰り込まれた粘性係数の性質

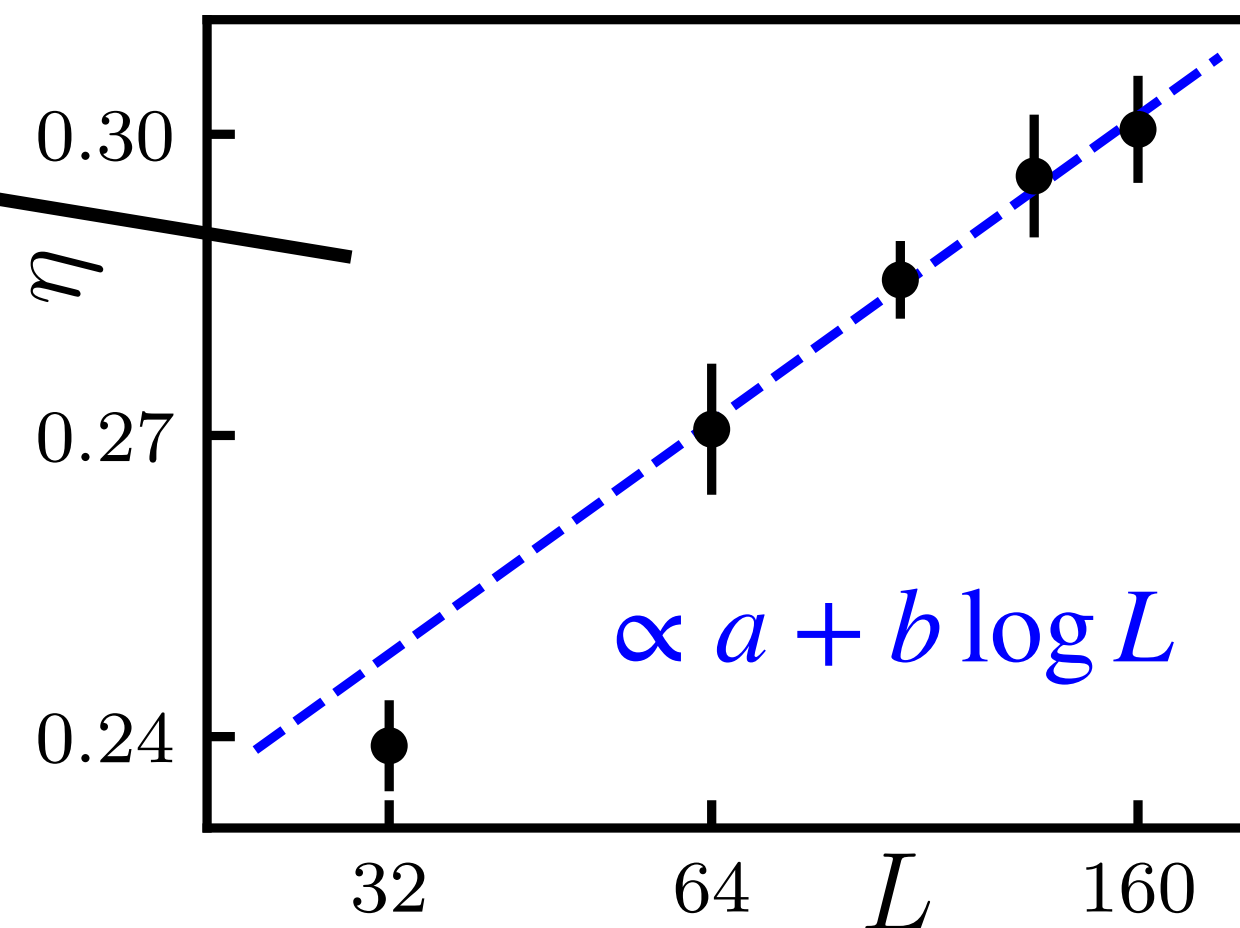
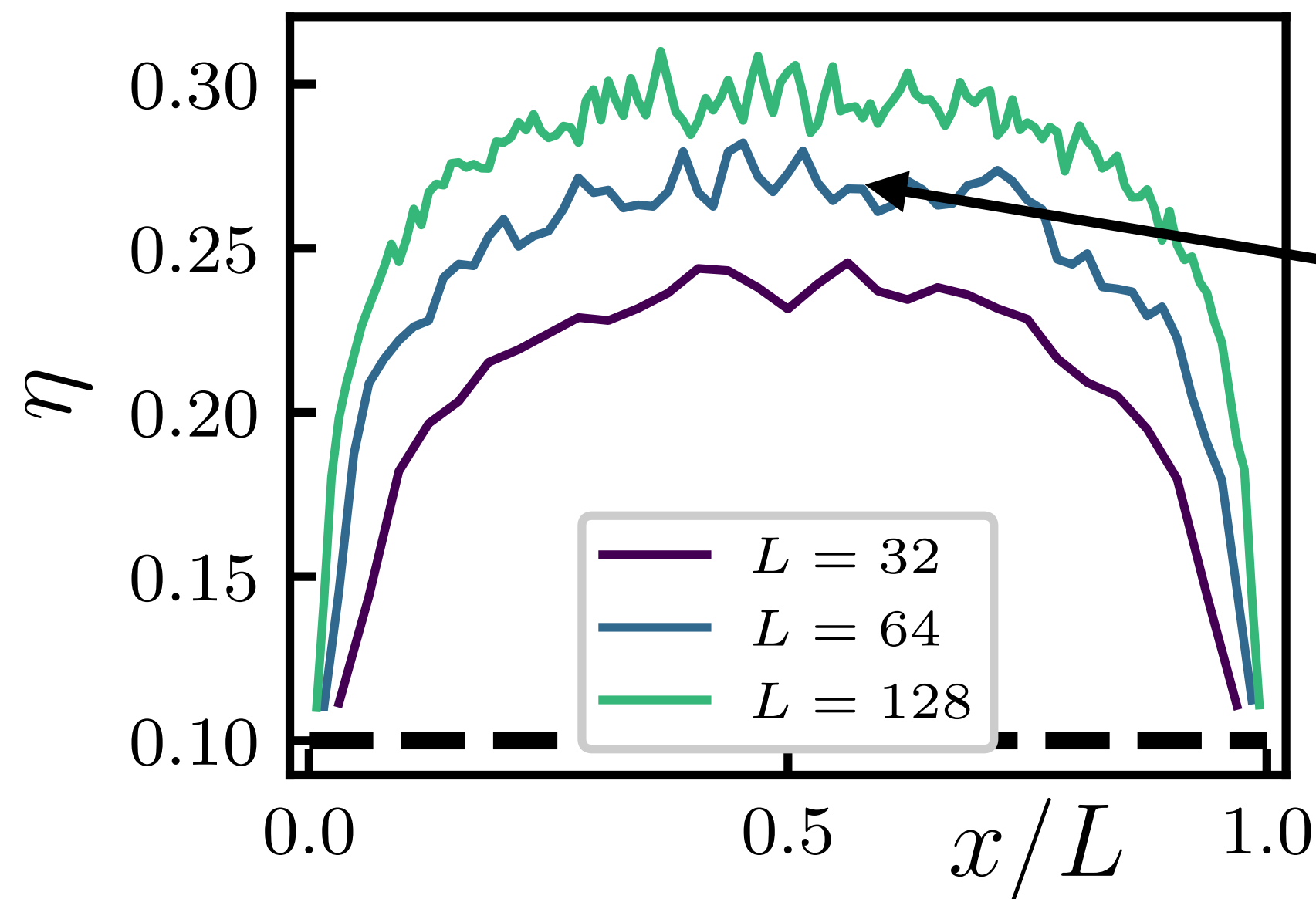
D. Forster, D. R. Nelson, and M. I. Stephen, Phys. Rev. A 16, 732 (1977) K. Yokota, M. Itami, and S. Sasa, Phys. Rev. Research 8, 013234 (2026)

$$\eta = \frac{\langle \sigma_{xy} \rangle}{\partial_x \langle v_y \rangle} = \eta_0 - \rho_0 \frac{\langle v_x v_y \rangle}{\partial_x \langle v_y \rangle}$$

$$\int_{2\pi/L} \frac{d^2 \mathbf{k}}{(2\pi)^2} \frac{1}{|\mathbf{k}|^2} \sim \log L$$

繰り込まれた粘性係数

繰り込み補正



2次元揺らぐ流体における揺らぎの効果はシステムサイズを大きくしていくと、無限に増大する

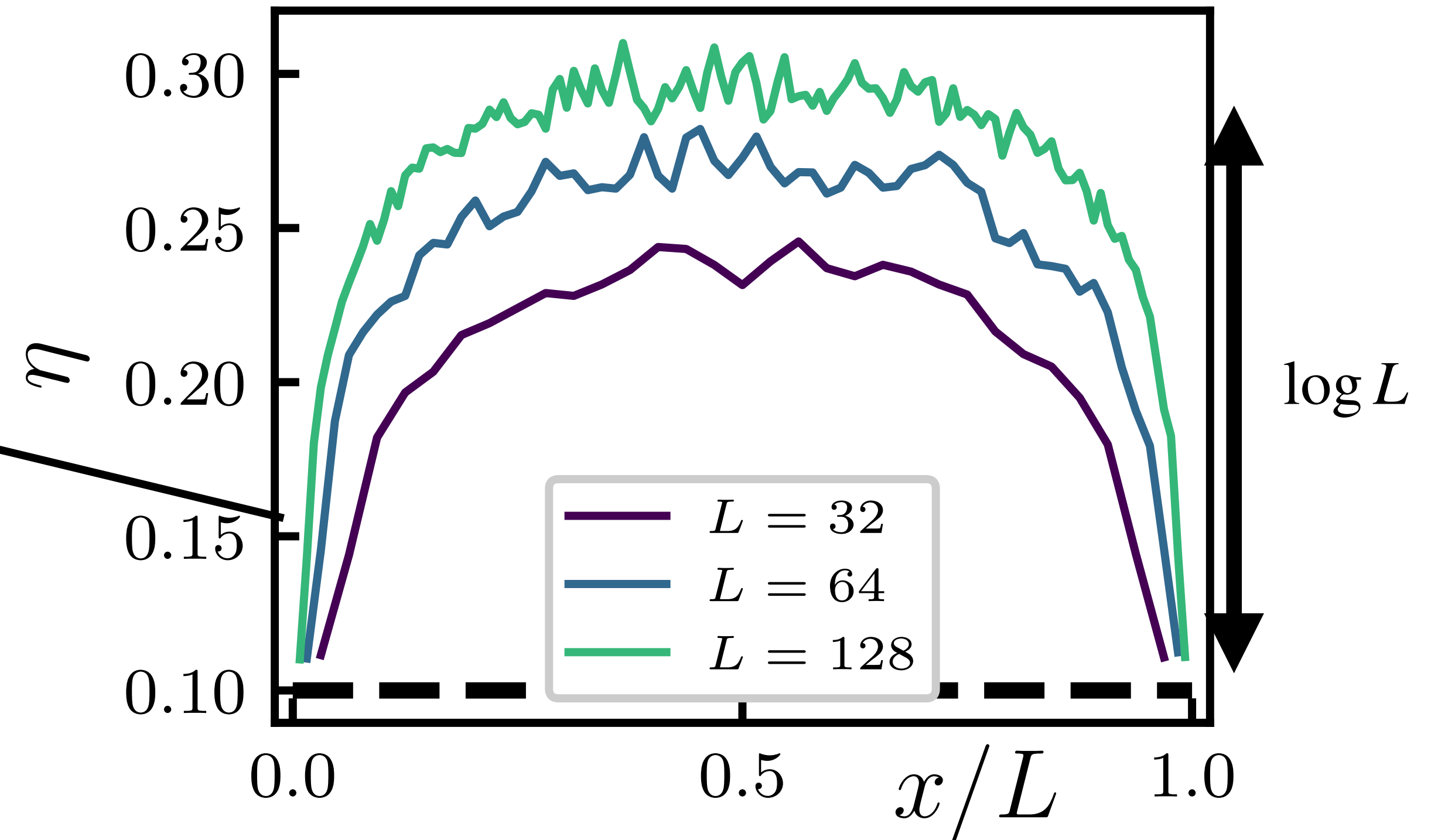
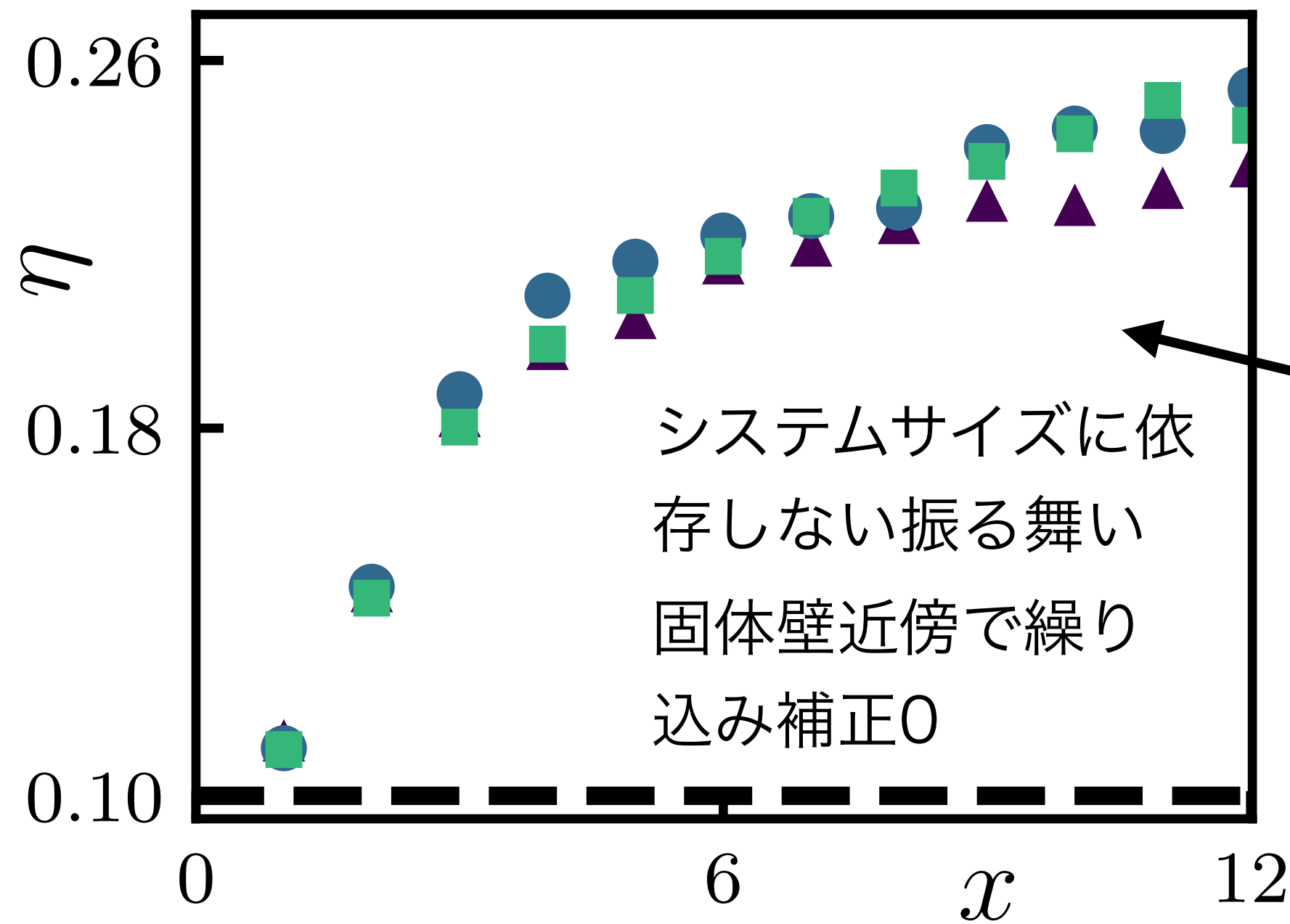
絶対に無視できない!

もし揺らぐ流体記述が妥当ならば、従来の流体力学による予言は2次元系では失敗する

# 壁での揺らぎ抑制：観測結果

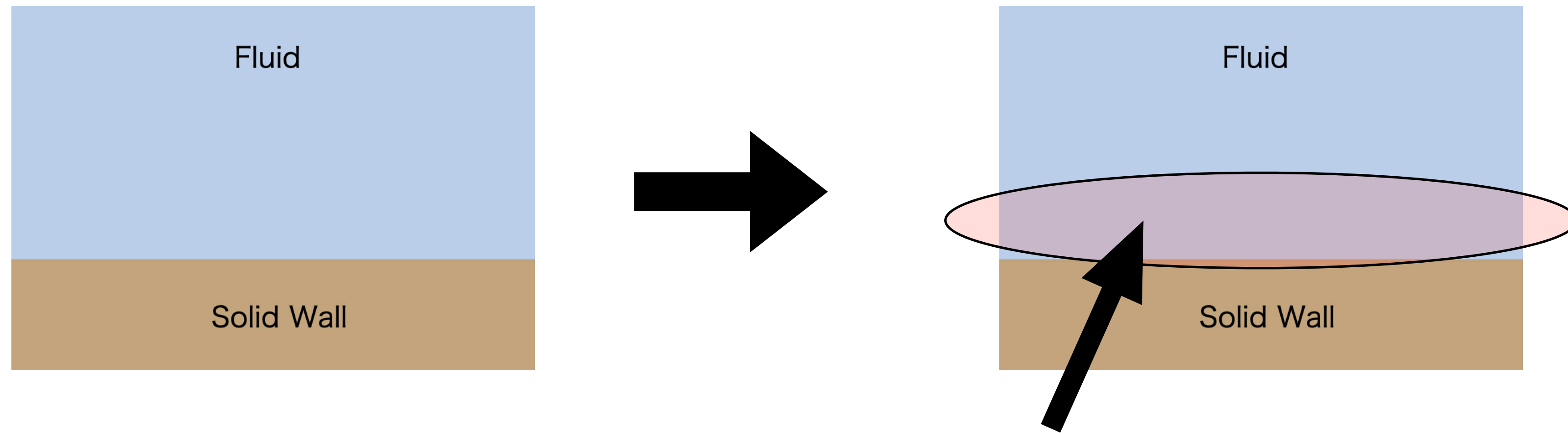
$$\eta = \frac{\langle \sigma_{xy} \rangle}{\partial_x \langle v_y \rangle} = \eta_0 - \rho_0 \frac{\langle v_x v_y \rangle}{\partial_x \langle v_y \rangle}$$

繰り込み補正



2次元系では、壁の近くでの粘性係数とバルクでの粘性係数の違いが無限に大きくなるため、この存在を導くことができる揺らぐ流体力学による記述が必須となる

# 壁での揺らぎ抑制：メカニズム



## No-slip境界条件

壁に触れている流体の速度は壁と厳密に一致する

= 壁直上で流体揺らぎが禁止される

流体揺らぎが強く抑制

揺らぐに由来する粘性係数の繰り込み補正も0に漸近

# ノート：3次元流体

Lutsko and Dufty, Phys. Rev. A **32**, 1229 (1985)

$$\eta = \frac{\langle \sigma_{xy} \rangle}{\partial_x \langle v_y \rangle} = \eta_0 - \rho_0 \frac{\langle v_x v_y \rangle}{\partial_x \langle v_y \rangle} \longleftarrow \int_{2\pi/L} \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \frac{1}{|k|^2} \sim C + \frac{1}{L}$$

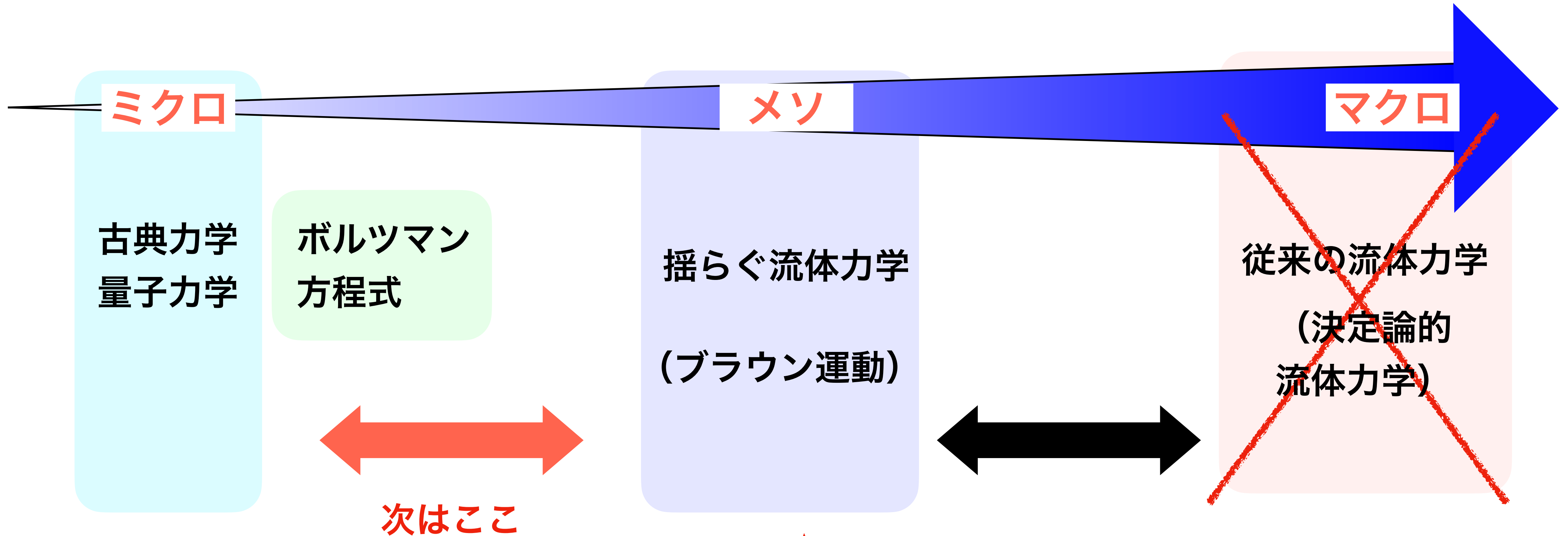
繰り込まれた粘性係数

繰り込み補正

- ▶ 3次元流体でも揺らぐ流体力学を考えると、繰り込み補正はいつでも存在する
- ▶ 2次元流体と違って、繰り込み補正はマクロ極限で有限値に収束し、この有限値は現実の流体で極端に小さい値と考えられている。

それゆえ、3次元流体では熱揺らぎの効果は十分に小さくなるので、多くの場合、わざわざ揺らぐ流体力学を考える必要はなく、決定論的流体で十分である

# ここまででわかったこと



2次元系では揺らぎの寄与は無限大に大きくなることを示した。

# 分子動力学シミュレーションの設定

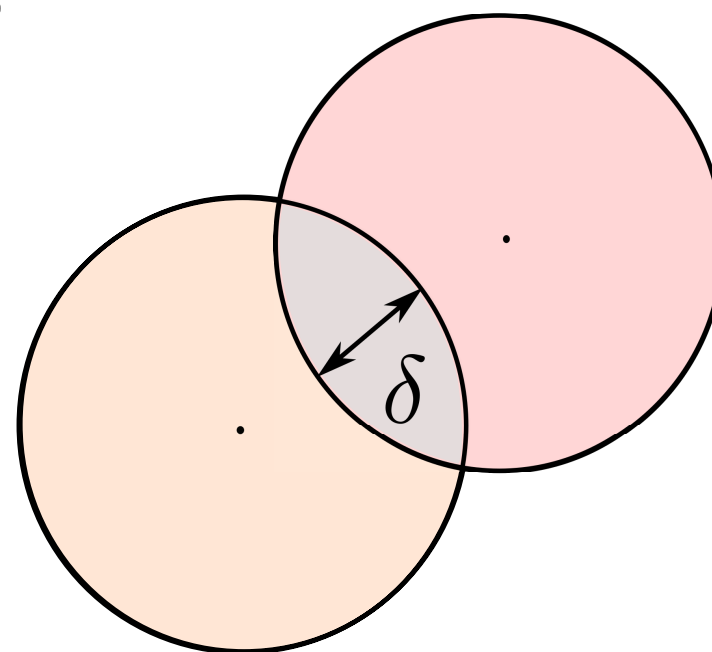
## ▷ ハミルトンの運動方程式 (古典力学)

$$\frac{d\mathbf{r}_i}{dt} = \frac{\mathbf{p}_i}{m} \quad \frac{d\mathbf{p}_i}{dt} = -\frac{\partial V}{\partial \mathbf{r}_i}$$

## ▷ 単純な反発ポテンシャルを採用する

$$V(r) = 10\delta^2 \quad \text{for } \delta > 0$$

$$V(r) = 0 \quad \text{for } \delta < 0$$



(粒子は重なった分、反発する)

## MDシミュレーションの単位系

粒子直径  $\sigma$

粒子質量  $m$

熱速度  $v_{th} := \sqrt{k_B T / m}$

(or 微視的時間スケール  $\tau = \sigma / v_{th}$ )

# 固体壁の実装

▶ MDシミュレーションでは固体壁も粒子によって形作られる

1. 固体粒子はオンサイトポテンシャルによってトラップする

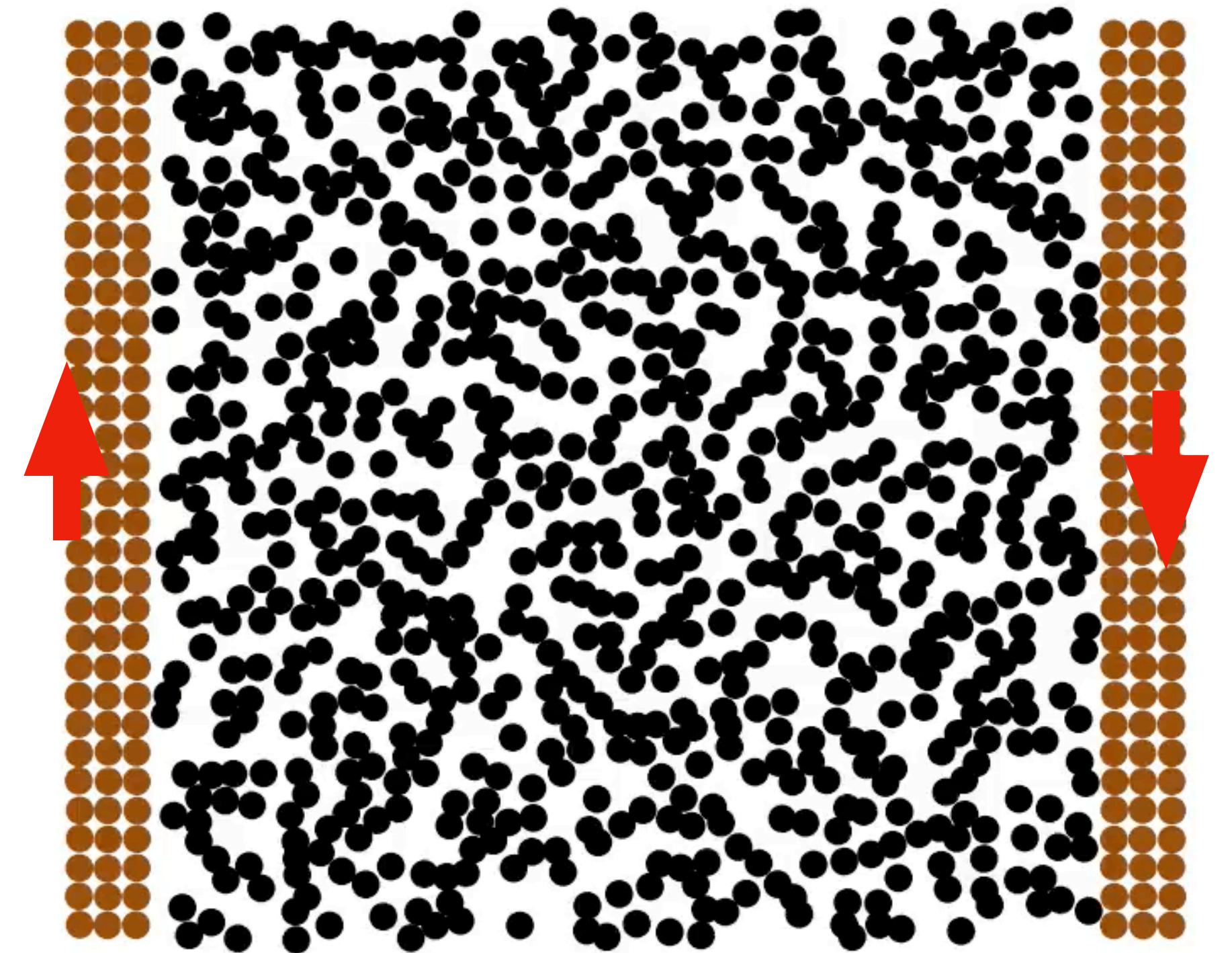
$$V_{\text{onsite}}(\mathbf{q}) = V_0 \left[ \sin(2\pi q_x) + \sin(2\pi q_y) \right] \quad V_0 = 50$$

2. 固体粒子はランジュバン熱浴によって熱化する

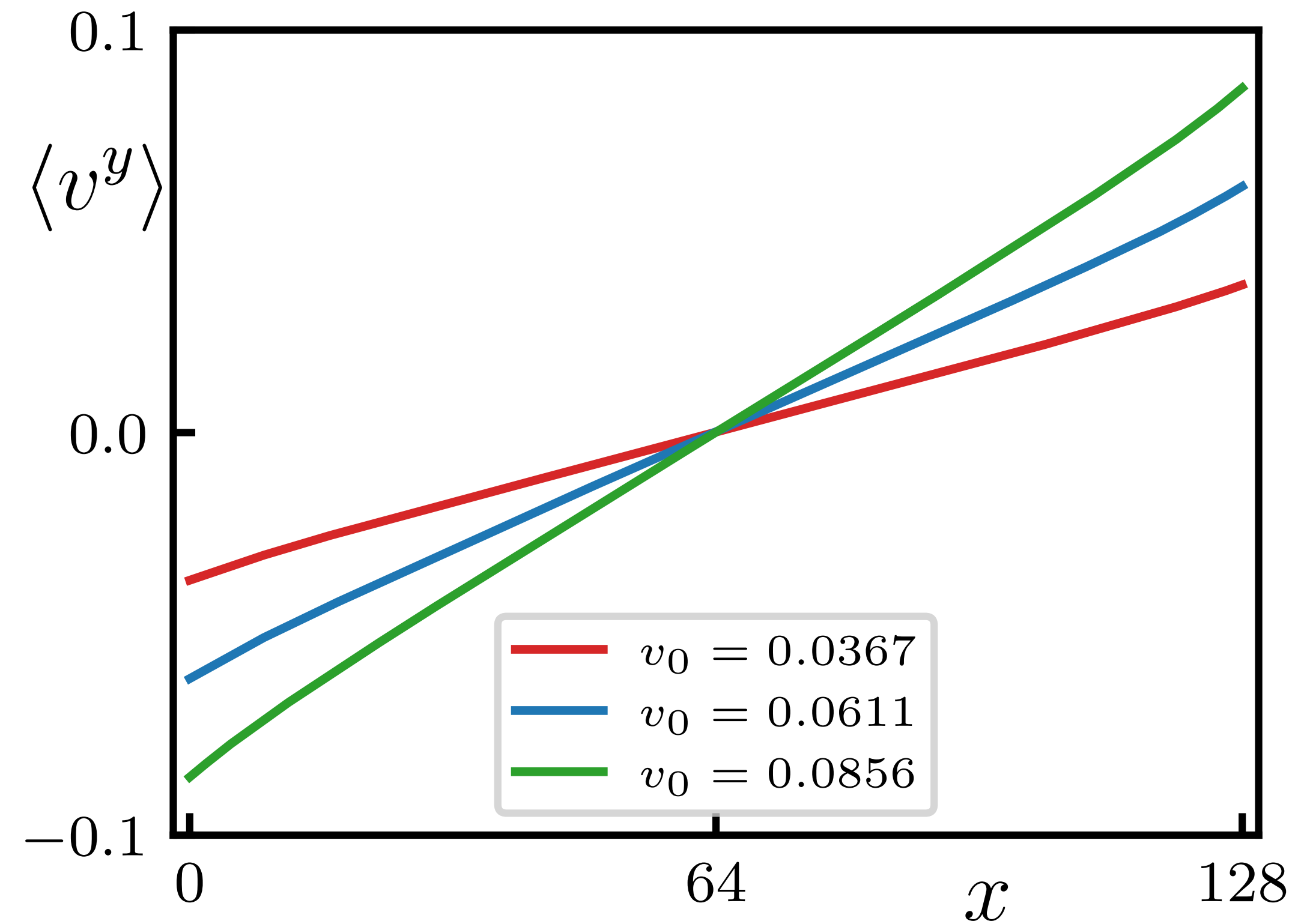
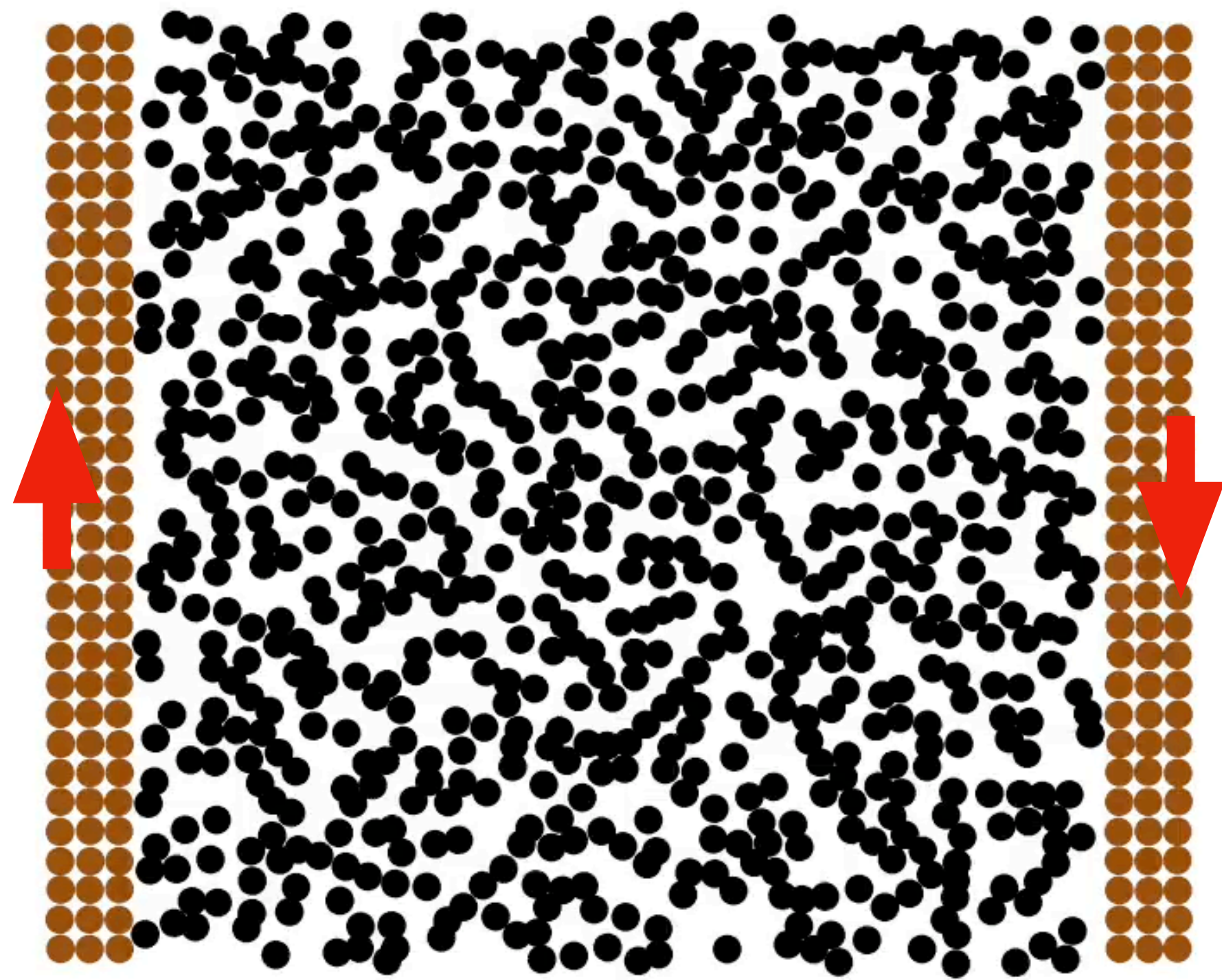
$$\frac{d\mathbf{q}_j}{dt} = \frac{\mathbf{p}_j^w}{m}$$
$$\frac{d\mathbf{p}_j^w}{dt} = -\frac{\partial V_{\text{onsite}}(\mathbf{q}_j - v_0 t \mathbf{e}_x)}{\partial \mathbf{q}_j} - \sum_{i=1}^N \frac{\partial V_{\text{wf}}(|\mathbf{r}_i - \mathbf{q}_j|)}{\partial \mathbf{q}_j} - \gamma \mathbf{p}_j^w + \xi_j(t)$$

3. 流体粒子にはランジュバン熱浴はつけない

4. 壁の動きはオンサイトポテンシャルごと固体粒子を動かすことで実現する

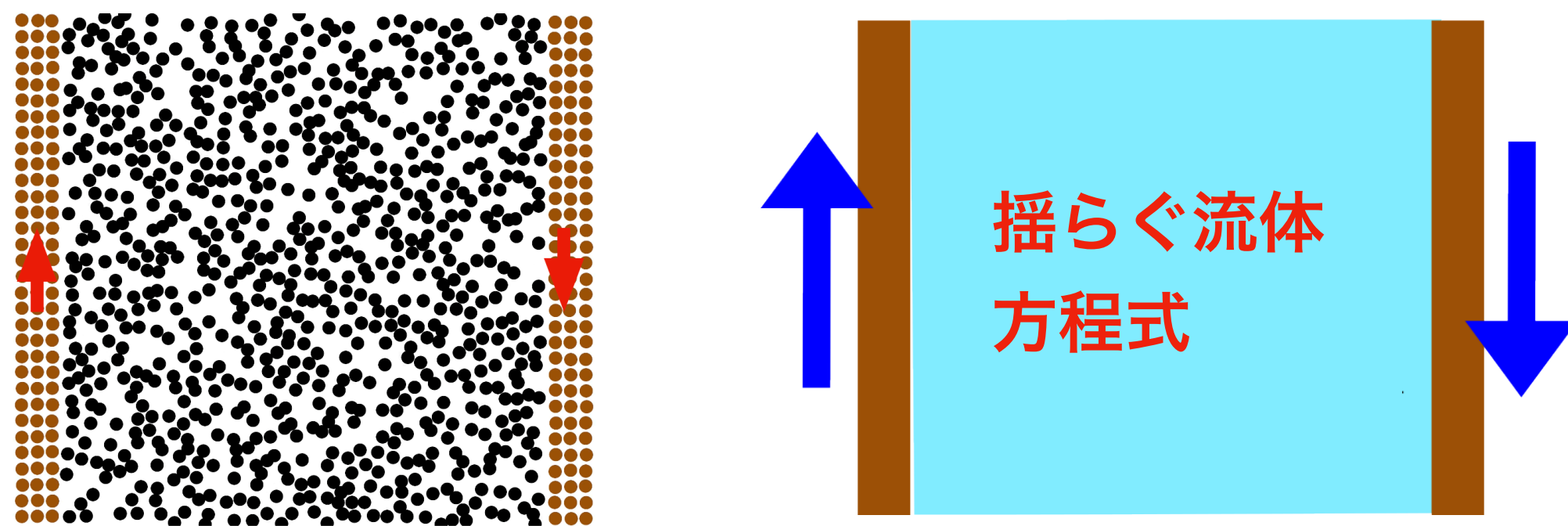


# MDシミュレーションでの速度プロファイル



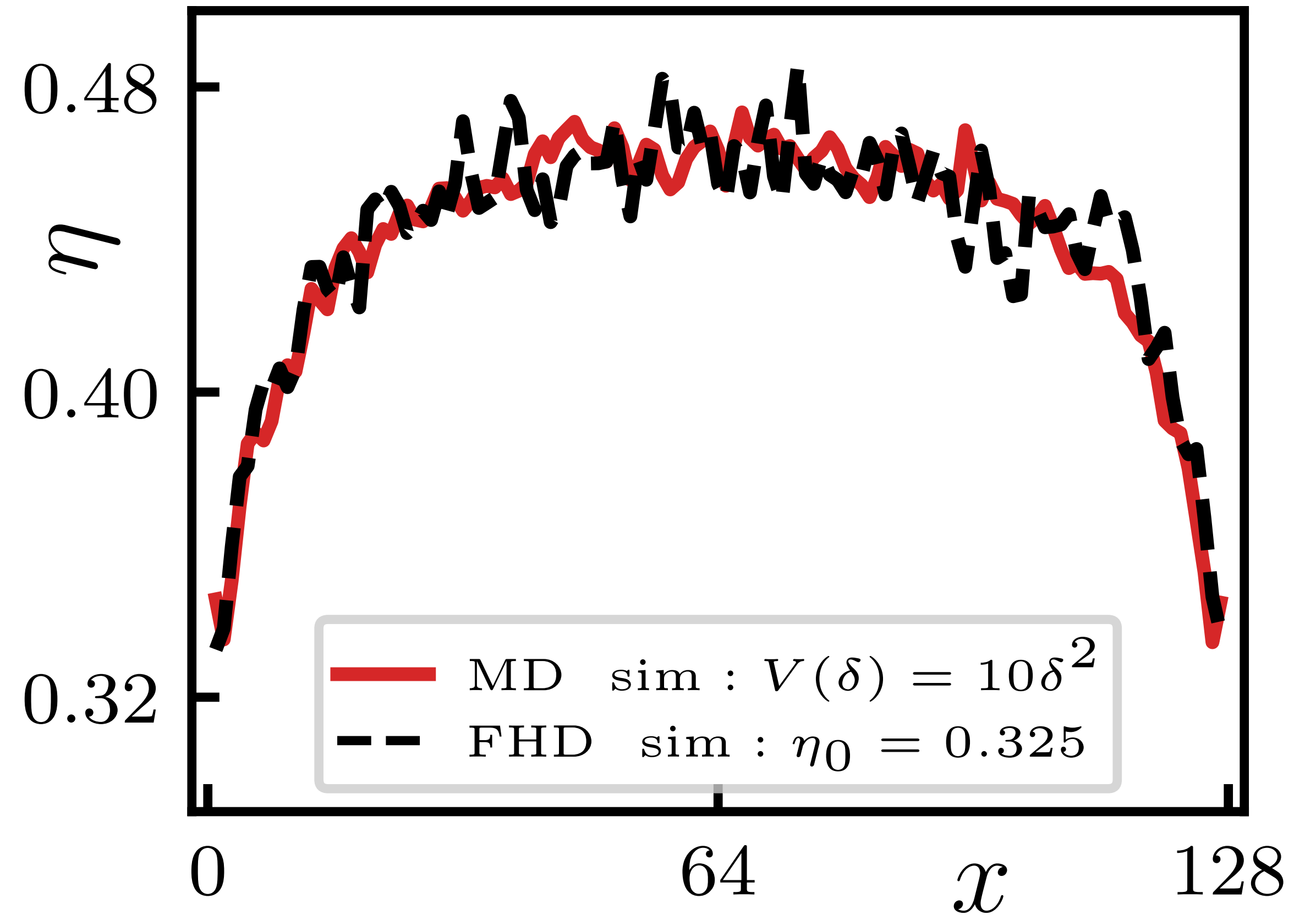
分子動力学シミュレーションでは、速度場やせん断応力を観測できる

# MDシミュレーションと揺らぐ流体力学の比較

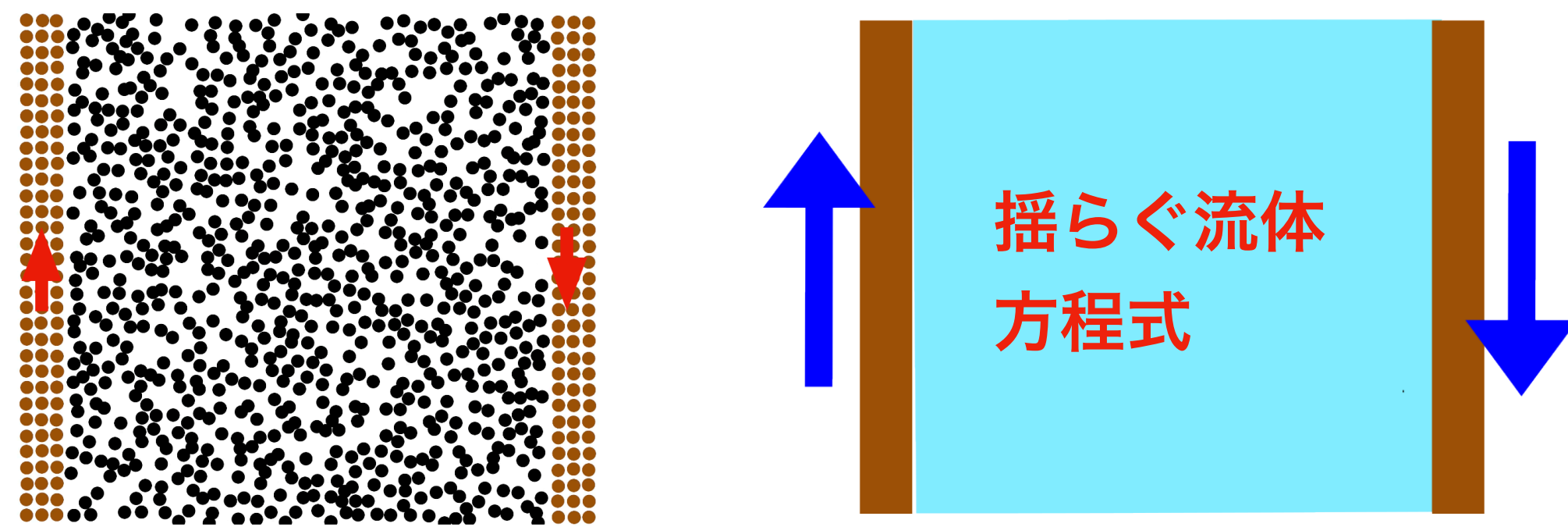


$\eta_0$ をパラメータとしてフィッティング

1. MDシミュレーションでも固体壁近傍で粘性係数の繰り込み補正は小さくなる
2. MDシミュレーションで得られた繰り込まれた粘性係数の空間プロファイルは揺らぐ流体力学によって高精度にフィッティングできる



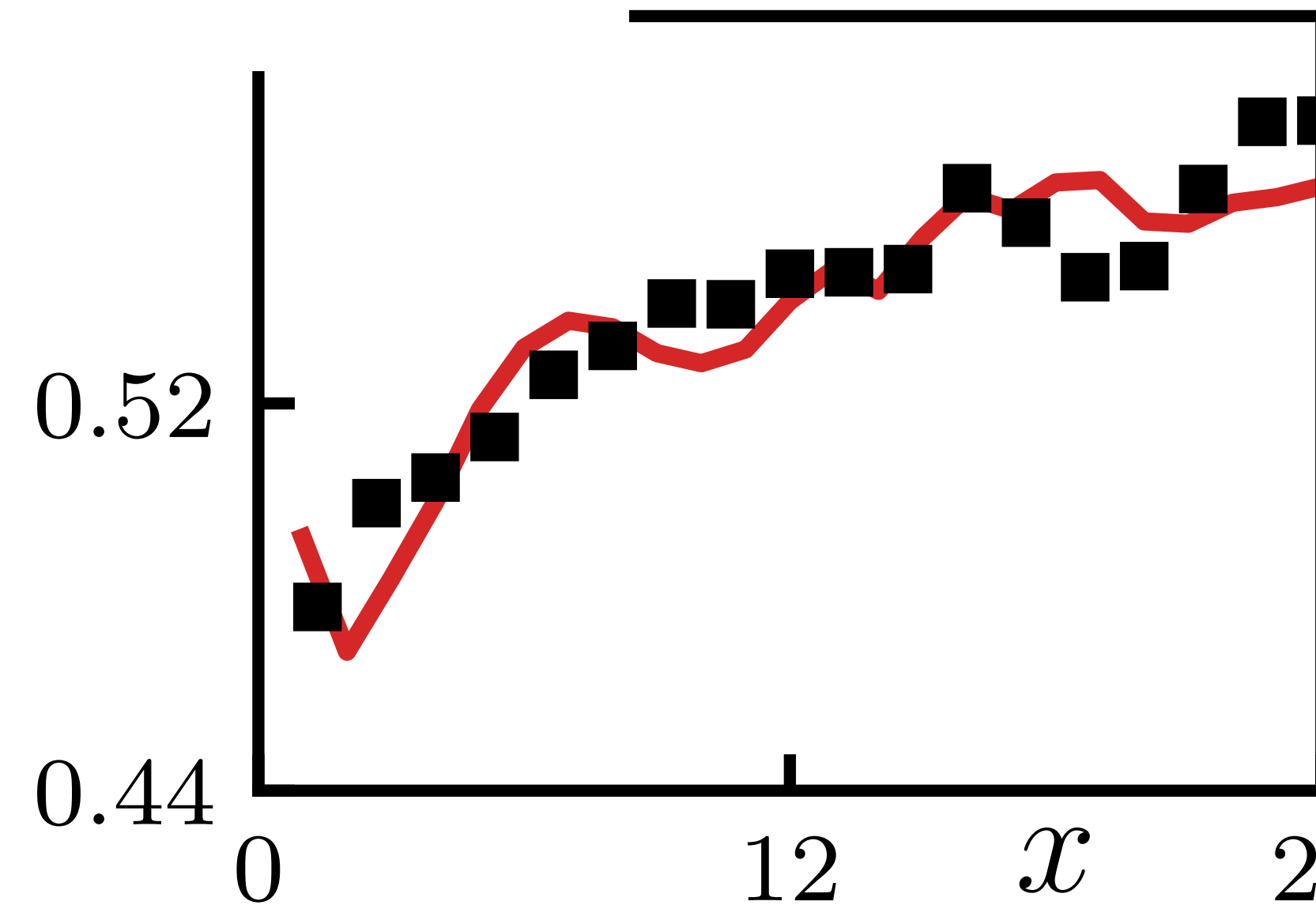
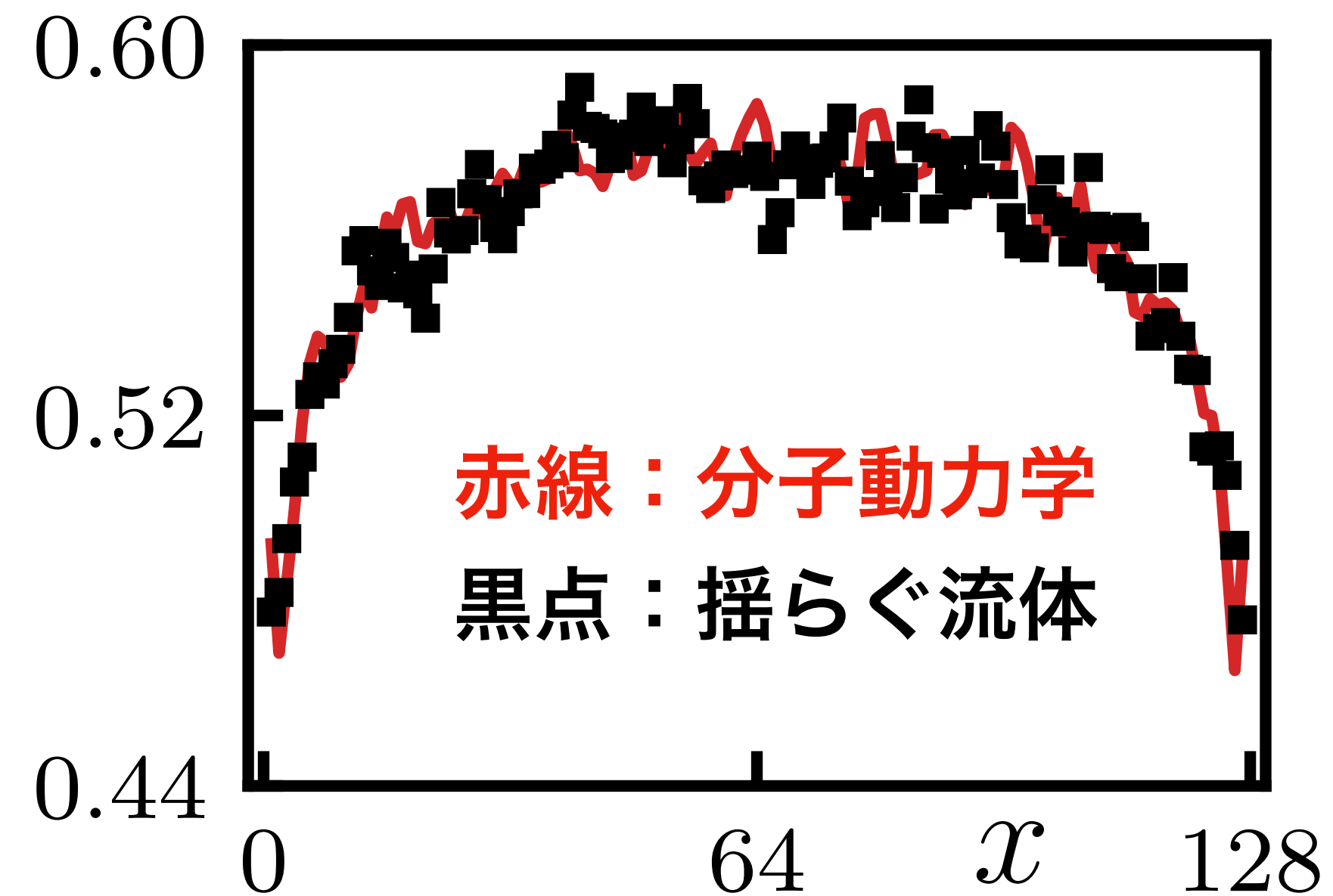
# MDシミュレーションと揺らぐ流体力学の比較



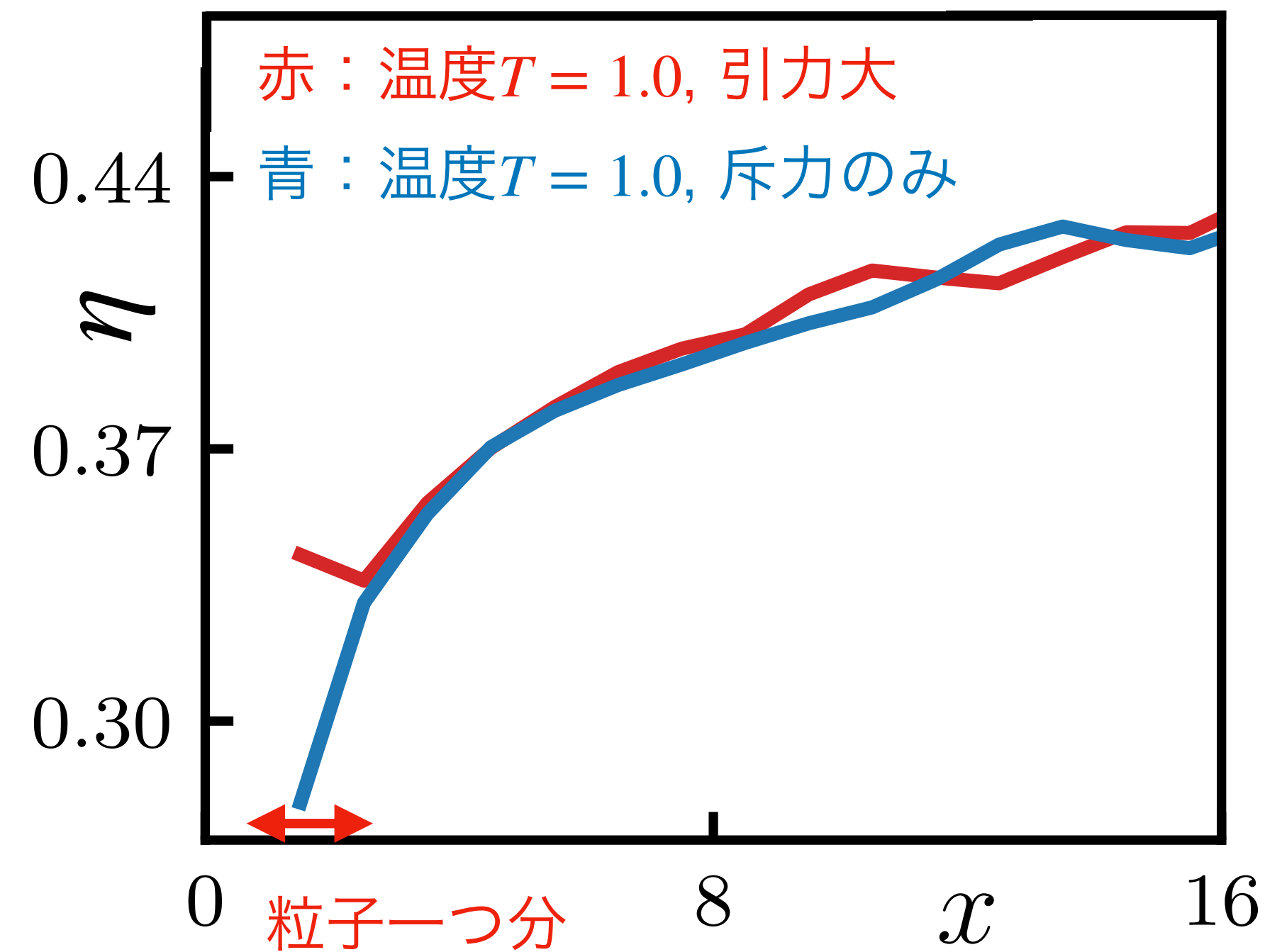
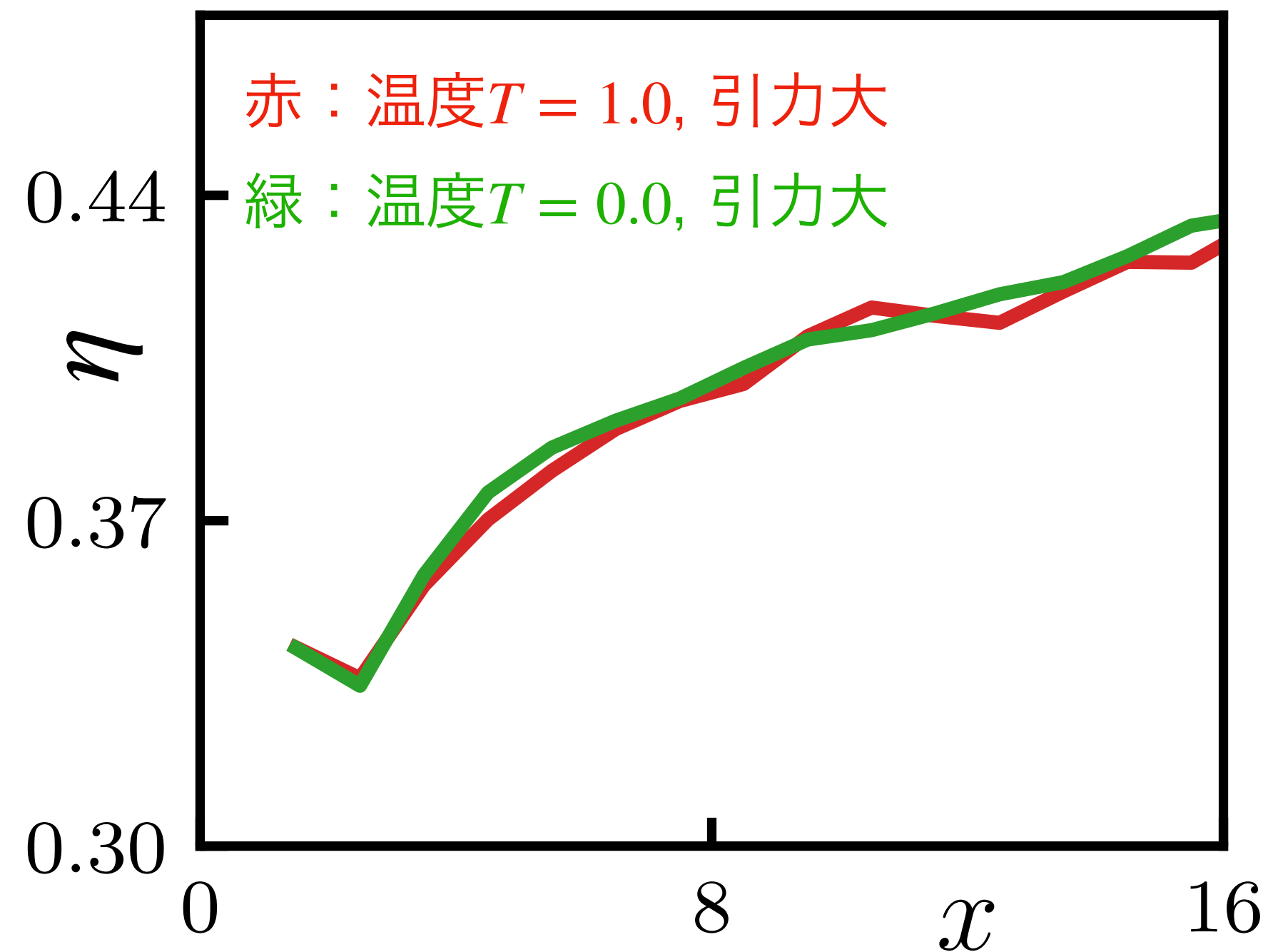
$\eta_0$ をパラメータとしてフィッティング

1. MDシミュレーションでも固体壁近傍で粘性係数の繰り込み補正は小さくなる
2. MDシミュレーションで得られた繰り込まれた粘性係数の空間プロファイルは揺らぐ流体力学によって高精度にフィッティングできる

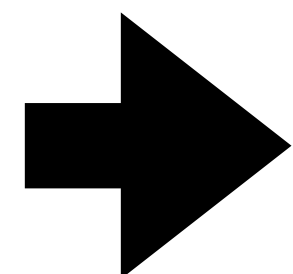
我々の系では、揺らぐ流体記述は粒子のサイズと同程度のスケールまで成り立つ  
(ただし、今回の我々の平均自由行程は粒子数子分)



# MDシミュレーション：壁のミクロな性質依存性

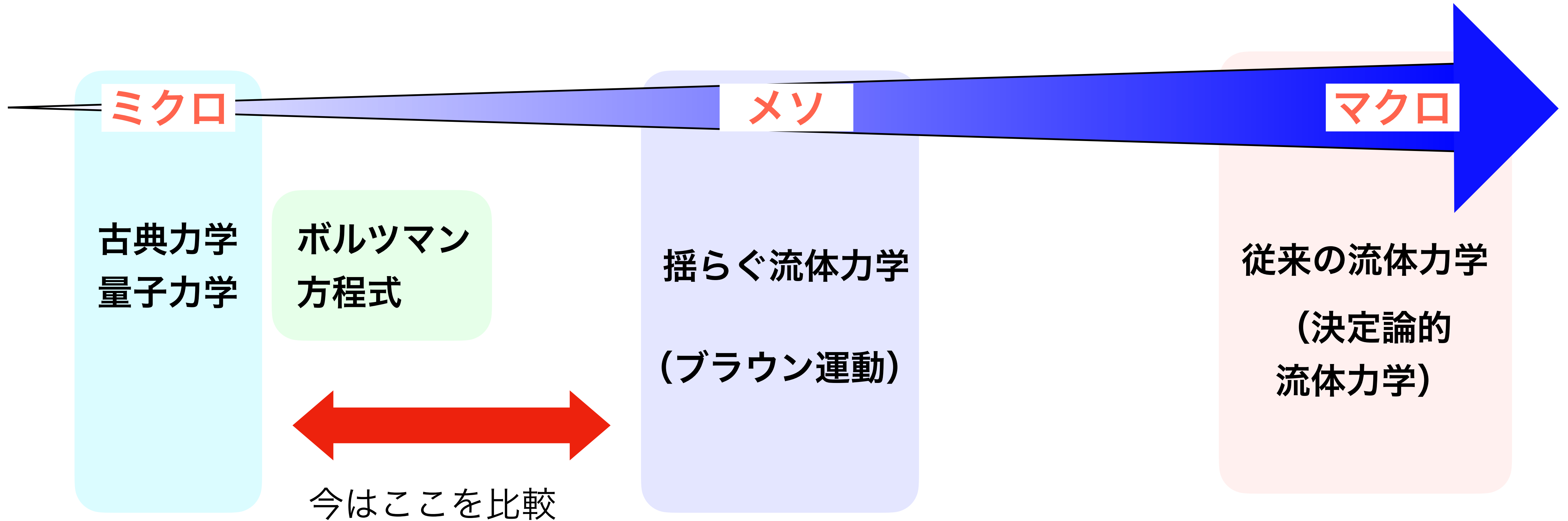


壁の近傍の振る舞いが壁のミクロな性質によらない



壁の近傍まで流体記述が可能であることを強く示唆

# ここまででわかったこと



揺らぐ流体力学は2次元流体の記述に対して妥当であり、従来の流体力学による予言は2次元系では失敗する。

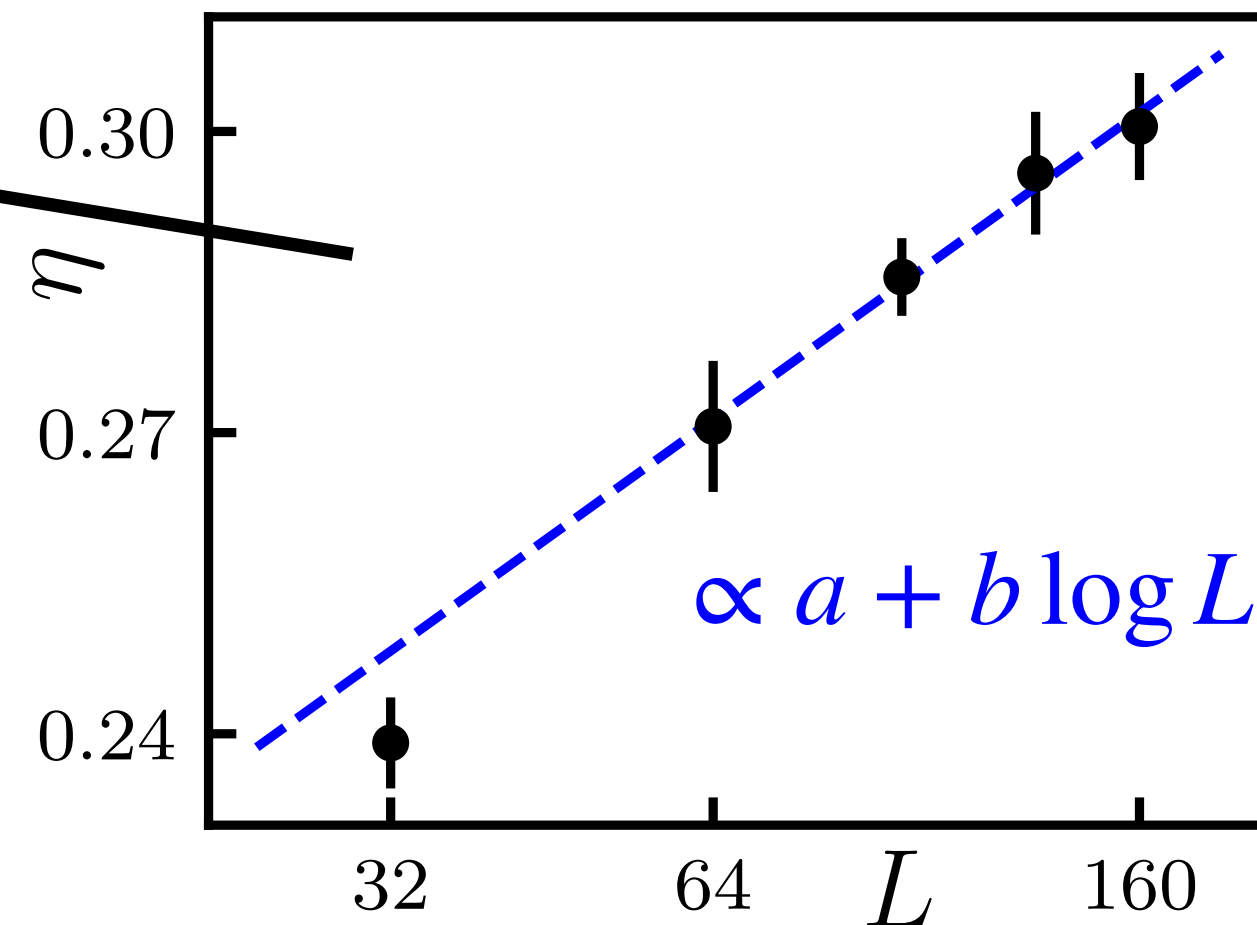
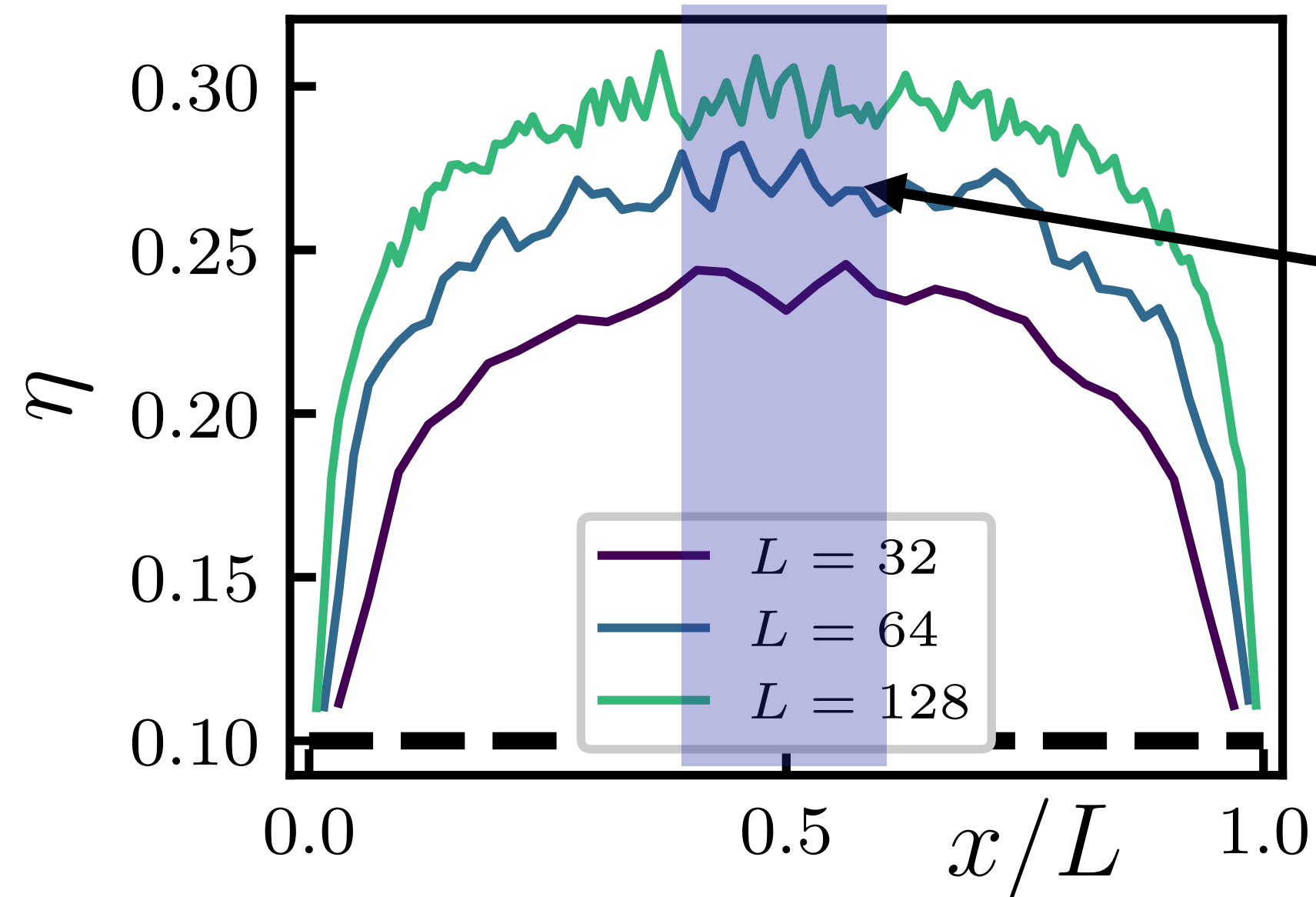
特に、揺らぐ流体力学は壁近傍とバルクで振る舞い両方を取り扱うことができる

# 議論：2次元流体における粘性係数

# 2次元流体に対して、粘性係数をどう定義するか？

これまでは、バルク領域の流体の研究が主だった

$$\eta = \frac{\langle \sigma_{xy} \rangle}{\partial_x \langle v_y \rangle} = \eta_0 - \rho_0 \frac{\langle v_x v_y \rangle}{\partial_x \langle v_y \rangle}$$



2次元流体に対して、システムサイズに依存しない、かつ実験的に観測可能な粘性係数を定義できるか？



言い換えると

揺らぐ流体力学 (非圧縮)

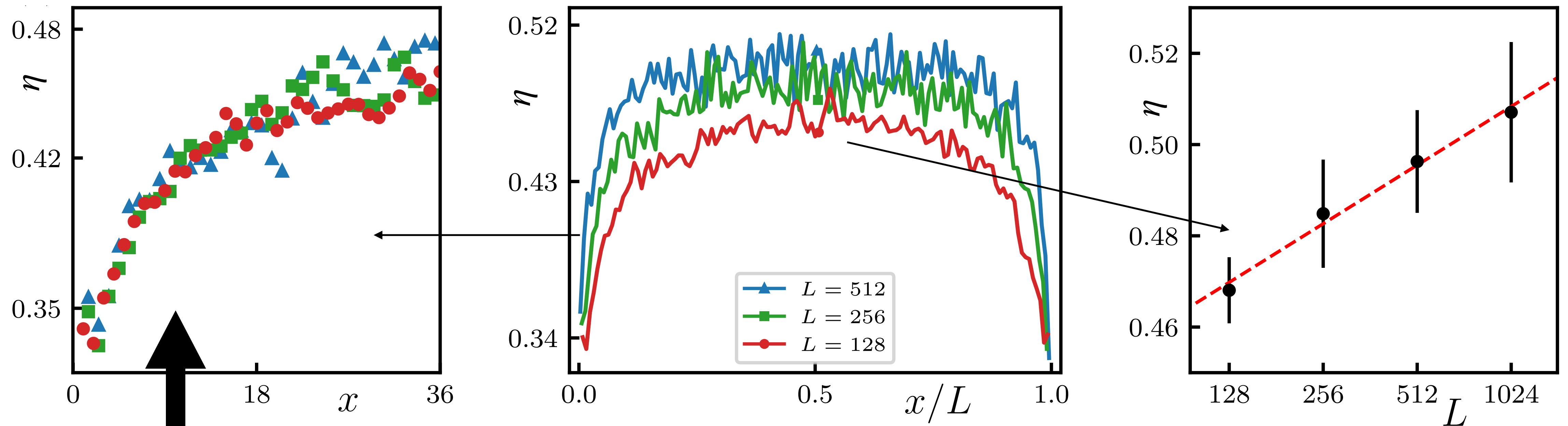
$$\rho_0 \left[ \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} \right] = -\nabla p + \eta_0 \nabla^2 \mathbf{v} - \nabla \cdot \mathbf{\Pi}^{\text{ran}}$$

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$$

揺らぐ流体力学のパラメータである $\eta_0$ は単独で物理現象に現れるか？

# MDシミュレーション：システムサイズ依存性

壁際で観測される繰り込まれた粘性係数こそ、繰り込み補正を含まない $\eta_0$ なのでは？



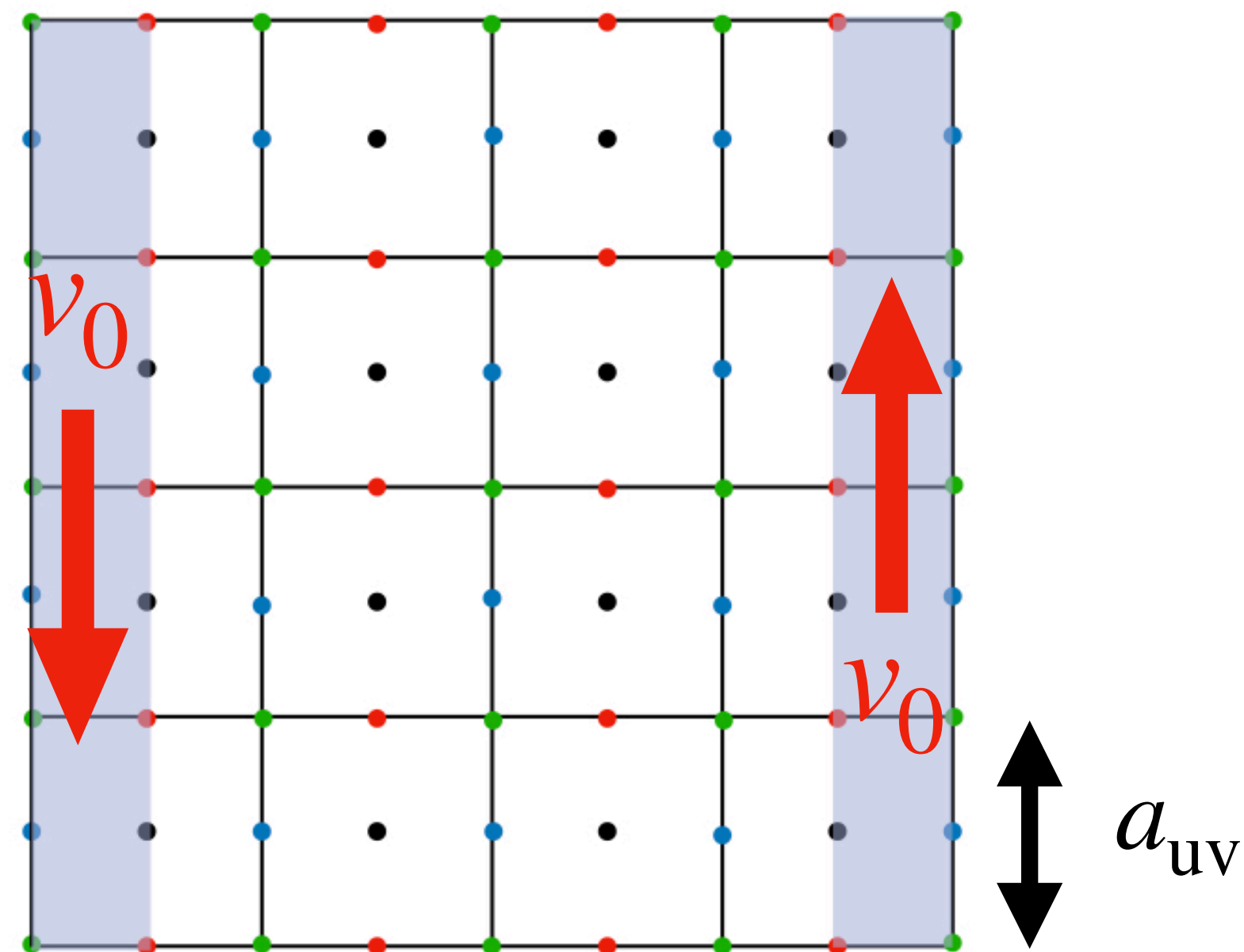
MDシミュレーションでも、壁近傍の振る舞いはシステムサイズに依存しない

(より厳密な議論は揺らぐ流体記述のUVカットオフ長を考慮する必要  
があるが、新しいアプローチを提供する)

## まとめ

- ▶ 2次元揺らぐ流体力学を用いてクエット流を解析することで、従来の決定論的流体力学では2次元流体を正確に記述できないことを示した。
- ▶ MDシミュレーションによって、固体壁近傍まで揺らぐ流体力学は流体現象を高精度に記述することを示した。
- ▶ 壁際での流体挙動を調べることで、粘性係数の繰り込みに対する新しい理解を提供する
- ▶ 3次元系では、繰り込み補正が十分に小さくなるので、従来の決定論的流体力学で十分であるが、メソスケール記述として揺らぐ流体力学自体はいつでも成り立っている。

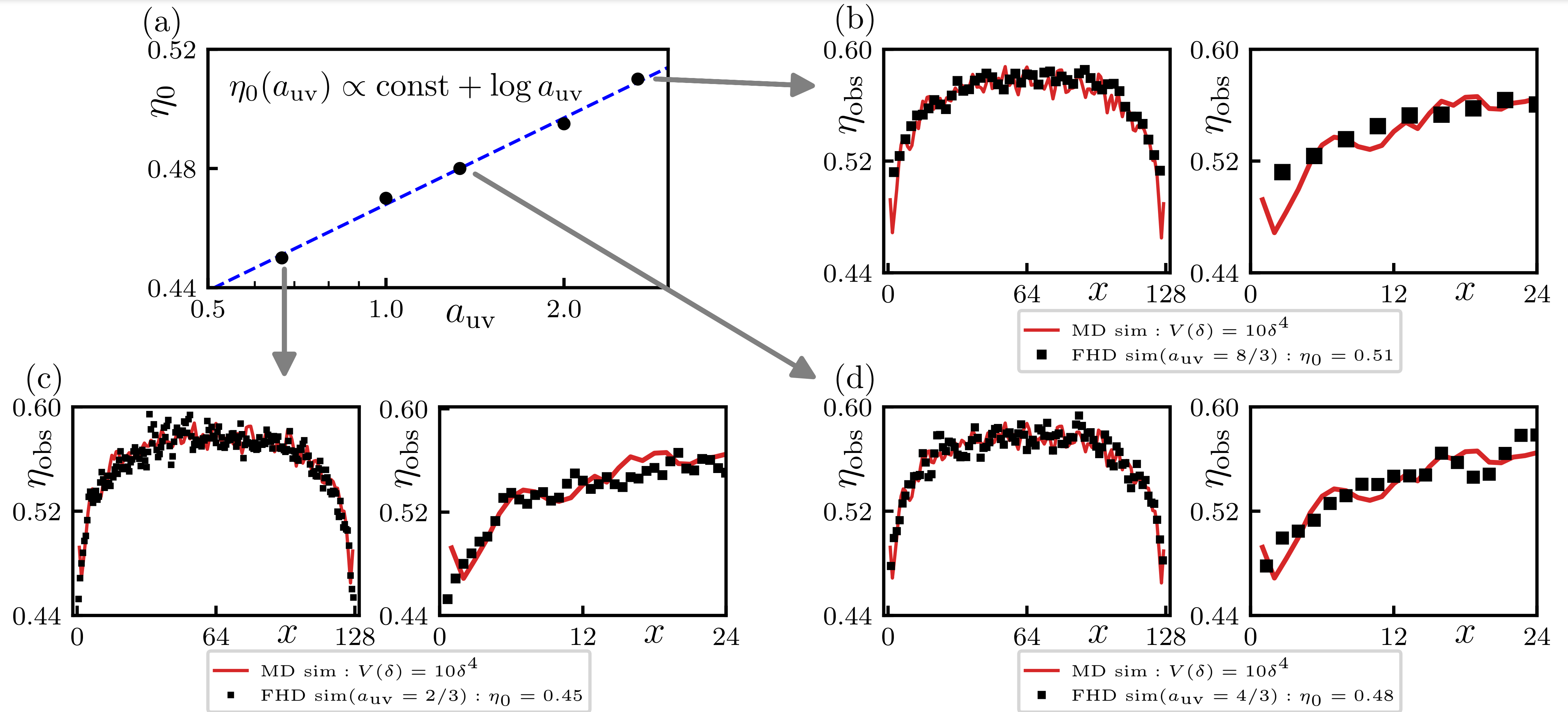
# 揺らぐ流体記述の解像度



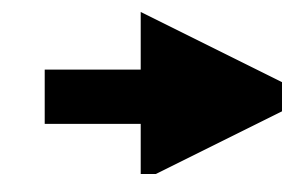
今回は揺らぐ流体方程式を数値的に解くために  
実空間離散化を採用

実空間離散化のメッシュサイズ $a_{uv}$ が導入される

# “Running” viscosity

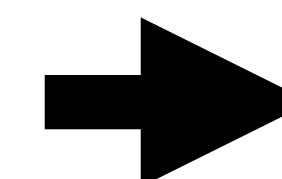


$a_{uv}$ を固定して、揺らぐ流体方程式のパラメータ $\eta_0$ を観測する



“running” viscosity

$a_{uv}$ の限界として、粒子の直径 $\sigma$ とすると…



“bare” viscosity