数理解析研究所講究録
326巻 1978年 97-108

流体中のゆらぎとStokes近似の抵抗則

名大・工　　金田行雄

§1. はじめに

本稿では非圧縮性粘性流体中の粒子に働く抵抗を求める二つの方法の関係について述べる。一つは(A)純粋に流体力学的な巨視的方法，一つは(B)流体中の熱的ゆらぎの相関を用いる微視的方法である。

(A)　巨視的方法

流体力学では非圧縮性粘性流体中を定低速度 $\mathbb{u}$ で動く粒子に働く抵抗 $\mathbb{F}$ は，たとえば，孤立球形剛体粒子の場合

$$\mathbb{F} = -\zeta\,\mathbb{u} \qquad (1,1)$$

で与えられ，ζ あるいは幾何学的条件が違うもっと一般の場合の抵抗係数は Stokes 方程式と連続の式（二つまとめて，($\mathcal{S}$) と略記）

$$\rho\frac{\partial v_i}{\partial t} = \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j}\ , \quad e_{ii}=0 \qquad (\mathcal{S})$$

$$\sigma_{ij} = -p\delta_{ij} + 2\mu e_{ij} \quad , \quad e_{ij} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i}\right)$$

（ここで，記号は慣用のものであり，ここでと同様以後，繰り返される指数 $i, j, \cdots$ の和の記号は省く。），あるいは非定常効果が無視できる場合，次の（連続の式も含めて，仮に，（steady-S）あるいは（s-S）と略記 ）

$$0 = \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} \quad , \quad e_{ii} = 0 \qquad (s-S)$$

を適当な境界条件のもとに解き，原理的には計算できる。ただし，ここで低レイノルズ数近似を用いてある。孤立剛体球の半径が a のとき，ζ は有名な Stokes の法則 $\zeta_H(s-S) = 6\pi\mu a$ で与えられる。添字 $_H(s-S)$ は式（s-S）による Hydrodynamical に求められる値という意味である。

（B） 微視的方法

一方，分子論的立場では (1.1) の $F = -\zeta u$ において ζ は

$$\zeta \rightarrow \zeta_c = \frac{1}{3kT}\lim_{\epsilon\to 0}\int_0^\infty dt\, e^{-\epsilon t}\langle f_i(0) f_i(t)\rangle \qquad (1.2)$$

で与えられる。（たとえば文献[1]参照） ここで，k はボルツマン定数，$\langle\ \rangle$ は温度 T での熱平衡における平均を表わし，f はまわりの流体が静止粒子に及ぼす全体の力である。 一般にこの f を求めるのは容易ではないが，Zwanzig[1]

は流体中のゆらぎに対する Landau & Lifshitz[2] の考えを用いて次のように近似した。すなわち，まわりの流体は Stokes 方程式に熱的なストレスのゆらぎをも考慮した次の（連続の式も含めて，仮に Stokes Langevin eq. と呼び（S′−L）と略記）

$$\rho \frac{\partial v_i'}{\partial t} = \frac{\partial \tau_{ij}'}{\partial x_j} , \quad e_{ii}' = 0 \qquad (S'-L)$$

$$\tau_{ij}' = \sigma_{ij}' + S_{ij}' , \quad \sigma_{ij}' = -p'\delta_{ij} + 2\mu e_{ij}'$$

を満たすとした。ここで（A）におけるのと同様，流体は非圧縮性であるとし，低レイノルズ数近似を用いてある。また以下 σ_{ij}' における粘性率 μ は（S）の場合と同じであるとする。S_{ij}' は統計的な量でその平均は 0 で，相関は

$$\langle S_{ik}'(x_1,t_1) S_{lm}'(x_2,t_2)\rangle = 2kT\mu \left[\delta_{il}\delta_{km} + \delta_{im}\delta_{kl} - \frac{2}{3}\delta_{ik}\delta_{lm} \right] \times \delta(x_1-x_2)\,\delta(t_1-t_2) \qquad (1,3)$$

で与えられる。（流体は非圧縮性であるとして，(1.3)ではある圧縮性に関係する項を省いてある。）

原理的には S_{ij}' が与えられれば適当な境界条件のもとに（S′−L）を解き，速度場や粒子表面上のストレスの分布

を求め，粒子に働く全体の力が計算できる。

Zwanzig[1] は（S－L）を解く代りに次の（連続の式も含めて，仮に steady-Stokes-Langevin eq. と呼び（s－S－L）と略記）

$$0=\frac{\partial \tau'_{ij}}{\partial x_j} \quad , \quad e'_{ii}=0 \qquad (s-S-L)$$

をもとに，実際，孤立剛体球の場合，ζ が

$$\zeta_C(s-S-L)=\zeta_H(s-S) \qquad (1,4)$$

となることを示した。添字 $_C(s-S-L)$ は式（s－S－L）から求まる力の相関を用いる方法による，という意味である。

また，Deutch & Oppenheim[3] は Zwanzig と類似の方法で多粒子系の場合，二粒子間の距離 R_{12} と粒子の大きさ a の比 a/R_{12} による展開の低次の段階で巨視的方法と相関を用いる方法の同等性を示した。（$a/R_{12}\ll 1$ なら良い近似）

本稿では，多粒子系の場合も含むもっと一般的な幾何学的条件下で（1．4）の自然な一般化である関係式（2．5）が剛体粒子系について成り立つことを §2．で述べる。§3．では流体粒子系について述べる。また式（S－L）の第一式の左辺を無視してよいか疑問に思われるので，§4 では（S－L）から得られる結果と（s－S－L）から得られる結果の関

事について述べる。

§2. 剛体粒子系

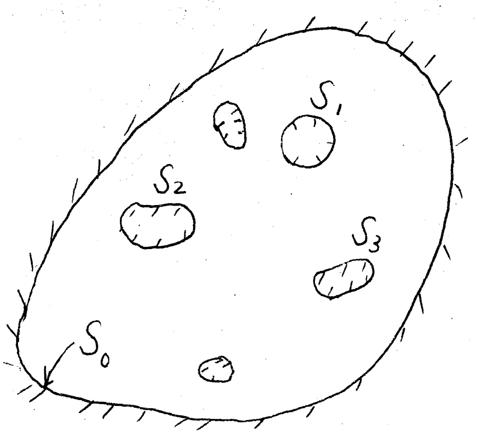
抵抗係数を求める(A)の$(S-S')$を用いる方法と(B)の$(S-S'-L)$を用いる方法の同等性をみるには Lorentz の相反定理(たとえば,文献[4].[5] 参照)に類似の次の(2.1)および(2.3)を用いると便利である。

いま,V_f を任意の流体部分,Sをこれを囲む閉曲面,$(p, \boldsymbol{v})$,$(p', \boldsymbol{v}')$ を各々 V_f 内で$(S-S')$,$(S-S'-L)$を満たす場とすると

$$\int_S v_i \tau'_{ij} n_j \, dS - \int_S v'_i \sigma_{ij} n_j \, dS = -\int_{V_f} e_{ij} S'_{ij} \, dV \qquad (2.1)$$

が成り立つ。 ここで n_i はS上の単位内法線である。(2.1)を示すには $e_{ij}\tau'_{ij} - e'_{ij}\sigma_{ij} = e_{ij}S'_{ij}$ を V_f で積分し,Gauss の定理を用いれば良い。

(2.1)の一つの系として次の(2.3)が導かれる。 すなわち,いま剛体粒子系を考え,$S = S_0 + \sum_{\alpha=1}^{N} S_\alpha$ であるとし(以下,S_α は粒子αの表面であるとし,流体は一番外側の静



止剛体閉曲面 S_0 に囲まれているとする。図参照），（p，v），（p'，v'）は各々（$\text{s}-S$），（$\text{s}-S-L$）および境界条件

$$\left.\begin{array}{l} v^g = U^g + \Omega^g \times (r - r^g) \quad \text{on } S_g, \quad v^g = 0 \quad \text{on } S - S_g \\ v' = 0 \quad \text{on } S \end{array}\right\} \qquad (2.2)$$

を満たすとき，（p'，v'）の場により粒子 g に働く力 f^g，r^g のまわりのトルク t_i^g に対して

$$U_i^g f_i^g + \Omega_i^g t_i^g \equiv X_i R_i^g = -\int_{V_f} e_{ij}^g S'_{ij} \, dV \qquad (2.3)$$

が成り立つ。ここで g についての和はとっていない。また X_i^g，R_i^g は各々6成分のベクトルで $\{X_i^g\} \leftrightarrow (U^g, \Omega^g)$，$\{R_i^g\} \leftrightarrow (f^g, t^g)$ である。（2.3）のような公式は（p'，v'）の場を完全に具体的に解かなくても，（p^g，v^g）の情報から R_i^g が求まるという意味で便利であり，実際，似た利用例として Ho & Leal[5] の例がある。（液体粒子系の場合の類似の公式については§3.を参照）

さて，前述のように $S = S_0 + \sum_{\alpha=1}^{N} S_\alpha$ とし，（p，v）が（$\text{s}-S$）と境界条件 S_α（$\alpha=1\sim N$）上で $v^\alpha = U^\alpha + \Omega^\alpha \times (r - r^\alpha)$，$S_0$ 上で $v=0$ を満たすとき，この（p，v）の場によって粒子 α が受ける力を F^α と r^α のまわりのトルク T^α は（$\text{s}-S$）の線形性から明らかなように，適当な行列

A～Eを用いて

$$\left.\begin{aligned} F_i^\alpha &= -\sum_{\beta,j} A_{ij}^{\alpha\beta} U_j^\beta - \sum_{\beta,j} B_{ij}^{\alpha\beta} \Omega_j^\beta \\ T_i^\alpha &= -\sum_{\beta,j} C_{ij}^{\alpha\beta} U_j^\beta - \sum_{\beta,j} D_{ij}^{\alpha\beta} \Omega_j^\beta \end{aligned}\right\} \quad (2.4)$$

あるいは $J_i^\alpha = -\sum_{\beta,j} E_{ij}^{\alpha\beta} X_j^\beta$, ただし $E^{\alpha\beta} \longleftrightarrow \begin{pmatrix} A^{\alpha\beta} & B^{\alpha\beta} \\ C^{\alpha\beta} & D^{\alpha\beta} \end{pmatrix}$

と表わされる。ここで$\{J_i^\alpha\}$, $\{X_i^\alpha\}$は各々6成分のベクトルで $\{J_i^\alpha\} \leftrightarrow (\mathbb{F}^\alpha, \mathbb{T}^\alpha)$, $\{X_i^\alpha\} \leftrightarrow (\mathbb{U}^\alpha, \mathbb{\Omega}^\alpha)$ である。

以上のことから

$$\frac{1}{kT} \lim_{\epsilon \to 0} \int_0^\infty dt\, e^{-\epsilon t} \langle R_i^p(0) R_j^q(t) \rangle = E_{ij}^{pq} \qquad (2.5)$$

が示される。(2.5)は(2.3)から

$$X_i^p X_j^q \langle R_i^p(0) R_j^q(t) \rangle = \left\langle \int_{V_f} dV\, e_{kl}^p S'_{kl}(0) \times \int_{V_f} dV\, e_{mn}^q S'_{mn}(t) \right\rangle$$

$$= \iint_{V_f} dx_1 dx_2\, e_{kl}^p e_{mn}^q \langle S'_{kl}(x_1, 0) S'_{mn}(x_2, t) \rangle$$

$$= 2kT\mu\,\delta(t) \int_{V_f} dV\, \frac{\partial v_i^p}{\partial x_j}\, 2 e_{ij}^q \qquad (\text{”}(1.3)\text{を使う})$$

$$= -2kT\delta(t) \int_{S_p} dS\, v_i^p \sigma_{ij}^q n_j = \delta(t)\, 2kT X_i^p E_{ij}^{pq} X_j^q$$

において X_i^p, X_j^q を任意にとれることから導かれる。(こ

こでは p, q の和はとっていない） 式（2.5）の右辺 E_{ij}^{pq} は（$s-S'$）を解いて純粋に流体力学的に得られる量であり，左辺は熱的ゆらぎによる力の相関に関連する量である。（式（1.2）参照）

なお，（2.5）（2.6）から明らかに抵抗係数の対称性（たとえば文献[4]参照），$E_{ij}^{\alpha\alpha}=E_{ji}^{\alpha\alpha}$，$A_{ij}^{\alpha\alpha}=A_{ji}^{\alpha\alpha}$，$B_{ij}^{\alpha\alpha}=C^{\alpha\alpha}$ 等が示される。

§3．液体粒子系

§2．では粒子 α を剛体であるとしたが，ここでは α 内は粘性率 $\bar{\mu}_\alpha$ の非圧縮粘性液体であると粒子 α 内の物理量には $\overline{v}^\alpha$ のように $\bar{}$ をつけて表わす。また §2．と同様に $\bar{\mu}_\alpha$ は（$s-S'$），（S'），（$s-S'-L$），（$S'-L$）で同じとし，S_0 は静止剛体面とする。

この場合，式（2.1）は同一種類の液体（流体）内に V_f をとる限りそのまま成り立つ。境界条件として（2.2）の代りに

接線応力連続
$$\left.\begin{aligned}(\sigma_{ij}n_j)_{/\!/}&=(\overline{\sigma_{ij}^{q}}^{\alpha}n_j)_{/\!/}\\(\tau'_{ij}n_j)_{/\!/}&=(\overline{\tau'_{ij}}^{\alpha}n_j)_{/\!/}\end{aligned}\right\}\ \text{on } S_\alpha \quad \alpha=1\sim N$$

速度連続
$$v_{/\!/}=\overline{v_{/\!/}^{q}}^{\alpha},\quad v'_{/\!/}=\overline{v'_{/\!/}}^{\alpha}\quad \text{on } S_\alpha,\ \alpha=1\sim N$$

$$\boldsymbol{v}^{g}\cdot\boldsymbol{n}=\overline{\boldsymbol{v}^{g}}^{g}\cdot\boldsymbol{n}-(\boldsymbol{U}^{g}+\boldsymbol{\Omega}^{g}\times(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}^{g}))\cdot\boldsymbol{n}\quad \text{on } S'_g$$

$$\boldsymbol{v}^{g}\cdot\boldsymbol{n}=\overline{\boldsymbol{v}^{g}}^{\alpha}\cdot\boldsymbol{n}=0\quad \text{on } S'=S'_\alpha\ (\alpha\neq g,\ \alpha=1\sim N)$$

$$\boldsymbol{v}'\cdot\boldsymbol{n}=\overline{\boldsymbol{v}'}^{\alpha}\cdot\boldsymbol{n}=0\quad \text{on } S'=S'_\alpha\ (\alpha=1\sim N)$$

$$\boldsymbol{v}^{g}=\boldsymbol{v}'=0\quad \text{on } S_0$$

（ここで // は境界面に平行な成分を表わす）を与えると，式（2，3）の代りに

$$X_i^g R_i^g=-\int_{V_0} e_{ij}^g S_{ij}'\, dV \qquad (3.1)$$

が成り立つ。ここで右辺は一番外側の境界 S_0 に囲まれる，粒子内をも含む全領域 V_0 での積分を表わし，粒子内での一の記号等は省いてある。（厳密に書くと各粒子内の積分を分けて表現しないといけない）。（3，1）を示すには（2，1）を使って（3，1）の右辺が

$$\int_{S_g} v_i^g(\tau_{ij}'-\overline{\tau_{ij}}^g)n_j\,dS'=\int_{S_g}(v_i^g)_\perp\{(\tau_{ij}'n_j)_\perp-(\overline{\tau_{ij}}^g n_j)_\perp\}\,dS'$$

に等しくなり，また

$$\int_{S_g} n_i(\tau_{em}' n_e n_m-\overline{\tau_{em}'}^g n_e n_m)\,dS'=\int_{S_g}\tau_{ie}' n_e\,dS'$$

となることなどに注意すれば良い。

式（2，4）に対応する式は明らかであり，（2，5）と同様の関係がこの場合にも成り立つことが示される。それをみ

るには

$$\int_{V_0} e_{ij}^{p}\sigma_{ij}^{q}\,dV = -\int_{S_p}(v_i^{p})_{\perp}\{(\sigma_{ij}^{q}n_j)_{\perp}-(\overline{\sigma_{ij}^{q}}^{p}n_j)_{\perp}\}\,dS$$

や $$\int_{S_p} n_i(\sigma_{em}^{q}n_e n_m-\overline{\sigma_{em}^{q}}^{p}n_e n_m)\,dS = \int_{S_p}\sigma_{ie}^{q}n_e\,dS$$

などに注意すれば良い。 ここで V_0 の体積積分は (3.1) のと同じ意味であり，⊥は面に垂直な成分を表わす。

§4. (s−S−L) と (S−L)

ここでは粒子に働く力やトルクの相関を (s−S−L) で求めたものと (S−L) で求めたものの関係について述べる。

いま，$y\equiv(\tilde{p}',\tilde{v}')$, $z\equiv(p',v')$ を各々 (S−L), (s−S−L) を満たし，ある同一の境界条件を満たす場とすると（以下，添字等は略する），解の存在等の仮定のもとに，適当なグリーン函数 G と K を用いて（意味のない圧力の定数項を無視して）

$$y(x,t) = \int_{-\infty}^{t}dt'\int dx'\,G(x,x',t-t')\frac{\partial}{\partial x'}S'(x',t')$$

$$z(x,t) = \int dx'\,K(x,x')\frac{\partial}{\partial x'}S'(x',t)$$

と書け，(S−L) と (s−S−L) の関係から

$$K(x, x') = \int_{-\infty}^{0} dt' \, G(x, x', -t')$$

が成り立つ。 積分の収束性についての仮定のもとに，これらの関係や

$$\int_{0}^{\infty} dt \int_{\infty}^{0} ds \, G_1(t-s) G_2(0-s) = \int_{-\infty}^{0} dp \int_{\infty}^{p} dq \, G_1(-q) G_2(p)$$

を使えば，§2の（2.5）に対応して

$$\frac{1}{kT} \lim_{\epsilon \to 0} \int_{0}^{\infty} dt \, e^{-\epsilon t} \langle \tilde{R}_i^p(0) \tilde{R}_j^q(t) + \tilde{R}_i^p(t) \tilde{R}_j^q(0) \rangle / 2 \qquad (4.1)$$

$$= \frac{1}{kT} \lim_{\epsilon \to 0} \int_{0}^{\infty} dt \, e^{-\epsilon t} \langle R_i^p(0) R_j^q(t) + R_i^p(t) R_j^q(0) \rangle / 2 \qquad (4.2)$$

$$= \frac{1}{kT} \lim_{\epsilon \to 0} \int_{0}^{\infty} dt \, e^{-\epsilon t} \langle R_i^p(0) R_j^q(t) \rangle = E_{ij}^{pq}$$

が示される。（§3の場合も同様）。 $\tilde{R}$，R は各々（S-L），（s-S-L）によって求まる力やトルクである。 すなわち，$\langle \tilde{R}_i^p(t) R_j^q(0) \rangle = \langle \tilde{R}_i^p(0) \tilde{R}_j^q(t) \rangle$ が成り立つ，あるいは，相関を（4.1）や（4.2）のように対称化したものである限り，（S-L）を用いても（s-S-L）を用いても，相関を用いる方法は純粋に流体力学的な方法と同じ抵抗係数を与えることが示される。

文献

[1] R. M. Zwanzig, J. Res. Natl. Bur. Std. B68, 143(1964).

[2] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, Fluid Mechnics (Pergamon, 1959).

[3] J. M. Deutch and I. Oppenheim, J. Chem. Phys. 54, 3547(1971).

[4] J. Happel and H. Brenner, Low Reynolds Number Hydrodynamics(Prentice-Hall, 1965).

[5] B. P. Ho and L. G. Leal. J. Fluid Mech. 65, 365(1974).