

壁

の濡れ性が誘起する, 重力と熱流をかけた流体系のダイナミクスの変化

理学部理学科 物性理論グループ 中川研究室

B4 山本 凜

壁の濡れ性が誘起する, 重力と熱流をかけた流体系のダイナミクスの変化

目次

- 背景と先行研究
- 系の設定
- ハミルトニアン
- 実験と分析
- まとめ
- 今後の展望

壁の濡れ性が誘起する, 重力と熱流をかけた流体系のダイナミクスの変化

目次

- ・ 背景と先行研究
- ・ 系の設定
 - ・ 図解
 - ・ 熱流
 - ・ 粒子-粒子間の相互作用
- ・ ハミルトニアン
 - ・ 結論
 - ・ 壁ポテンシャル
- ・ 実験と分析
 - ・ 濡れ性
 - ・ パラメータ
 - ・ 重心位置
 - ・ 空間的なばらつき
 - ・ リミットサイクル
- ・ まとめ
- ・ 今後の展望

壁の濡れ性が誘起する, 重力と熱流をかけた流体系のダイナミクスの変化

目次

- ・ 背景と先行研究

- ・ 系の設定

- ・ 図解

- ・ 熱流

- ・ 粒子-粒子間の相互作用

- ・ ハミルトニアン

- ・ 結論

- ・ 壁ポテンシャル

- ・ 実験と分析

- ・ 濡れ性

- ・ パラメータ

- ・ 重心位置

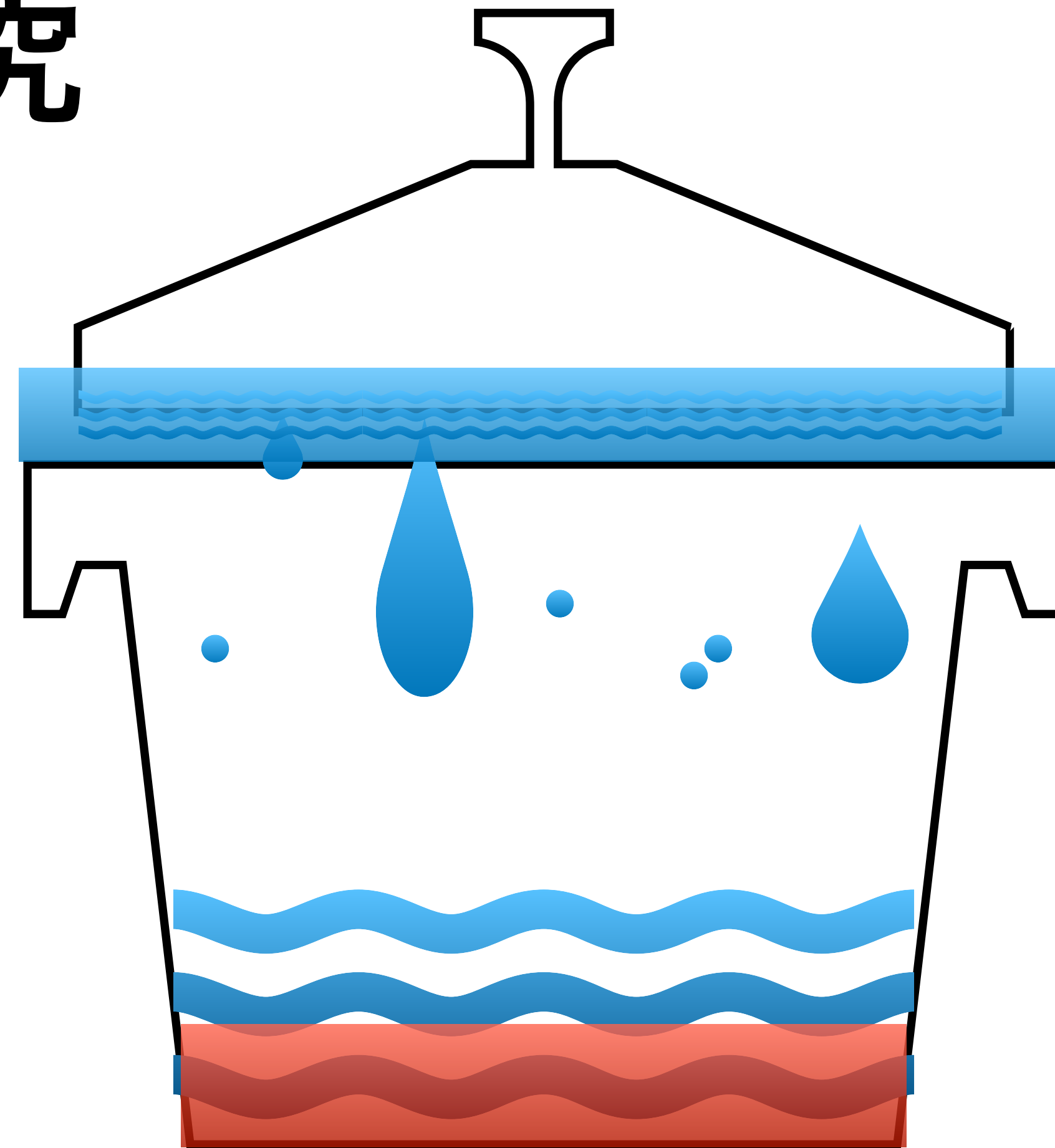
- ・ 空間的なばらつき

- ・ リミットサイクル

- ・ まとめ

- ・ 今後の展望

背景と先行研究



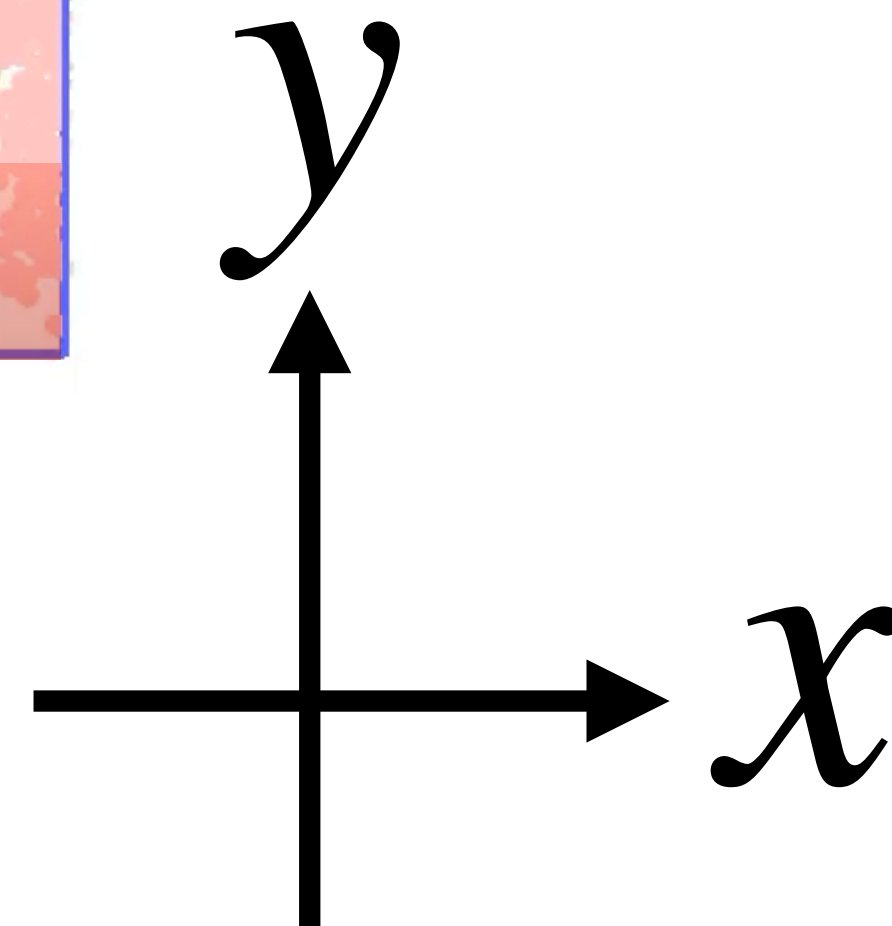
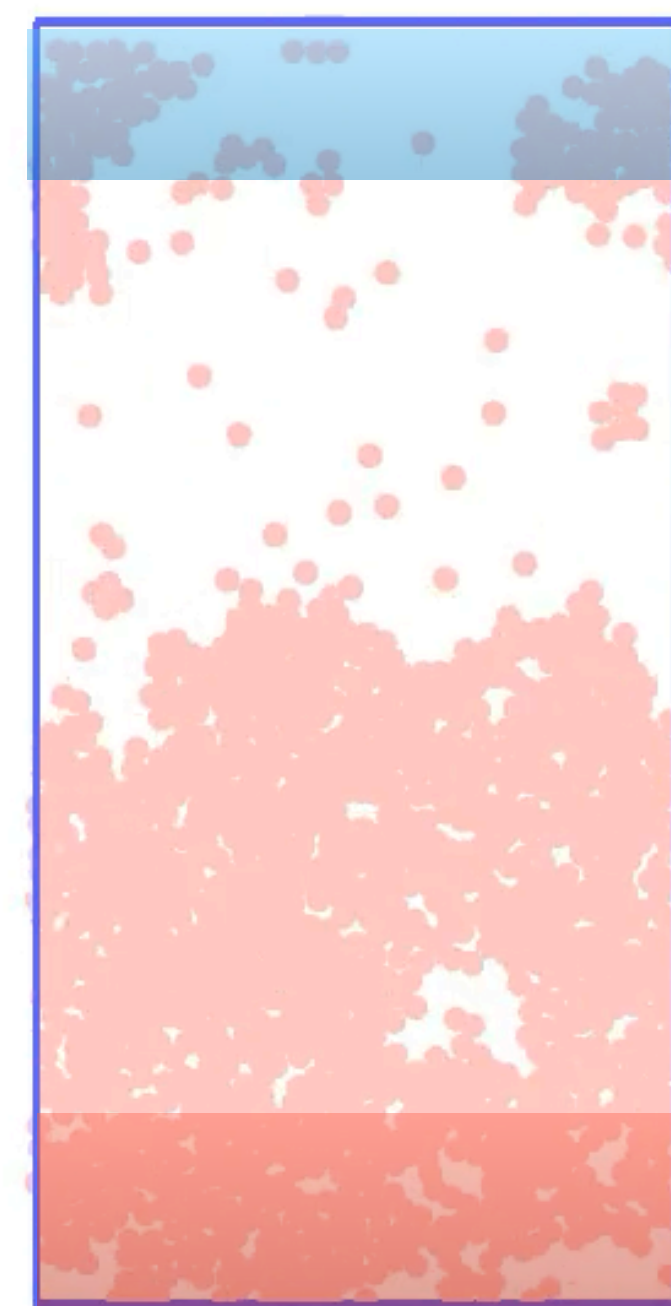
「液滴の形成→上壁に液体が吸着→落下」

背景と先行研究

- 「液滴の形成→上壁に液体が吸着→落下」という非定常の周期的なダイナミクスを繰り返す.

- $N = 1250$
- $T_L = 0.41$
- $L_y = 80$
- $T_H = 0.45$
- $L_x : L_y = 1 : 2$
- $mg = 4.0 \times 10^{-4}$

$$\chi \equiv \frac{k_B (T_H - T_L)}{mg L_y} \simeq 1$$



壁の濡れ性が誘起する, 重力と熱流をかけた流体系のダイナミクスの変化

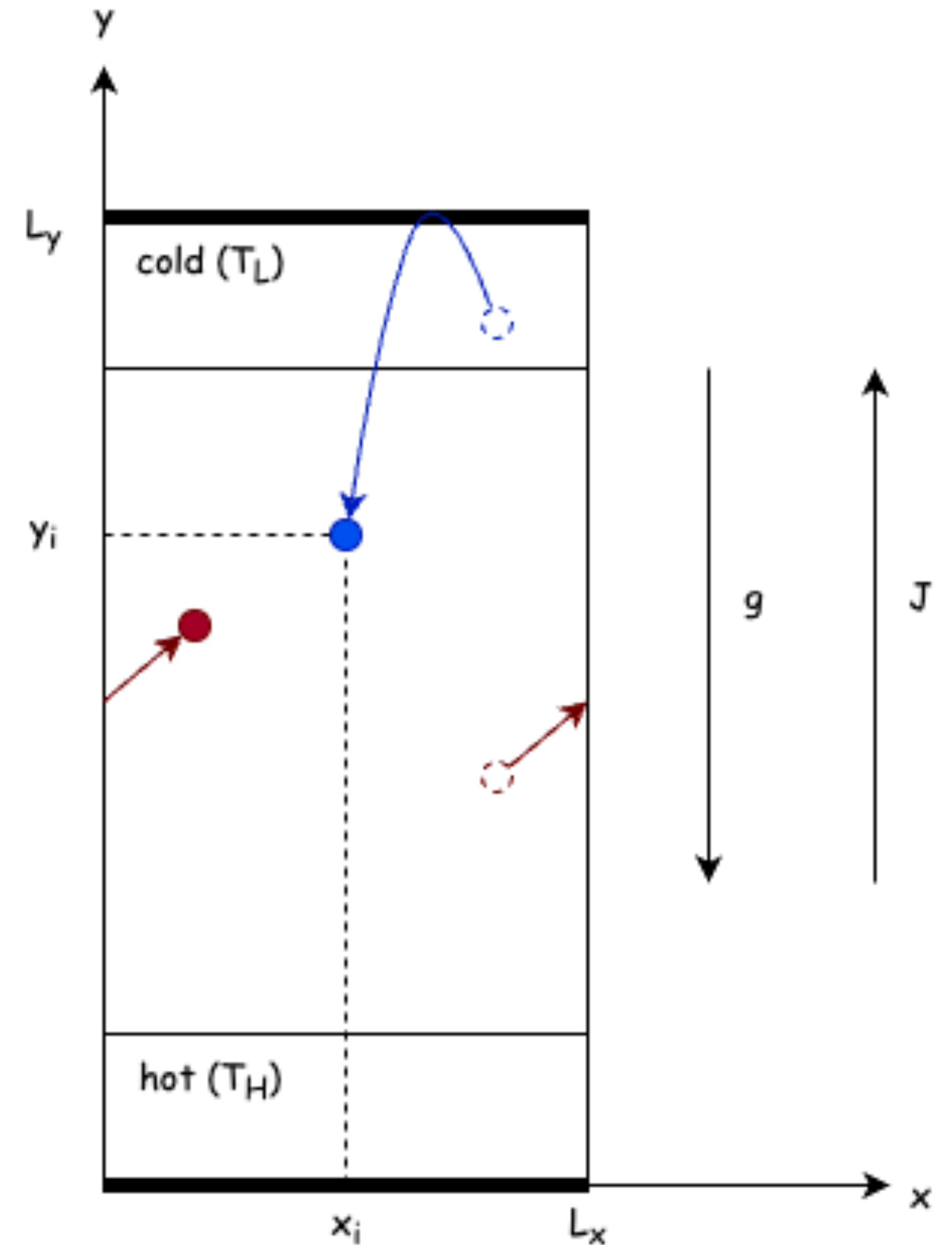
目次

- ・ 背景と先行研究
- ・ 系の設定
 - ・ 図解
 - ・ 熱流
 - ・ 粒子-粒子間の相互作用
- ・ ハミルトニアン
 - ・ 結論
 - ・ 壁ポテンシャル
- ・ 実験と分析
 - ・ 濡れ性
 - ・ パラメータ
 - ・ 重心位置
 - ・ 空間的なばらつき
 - ・ リミットサイクル
- ・ まとめ
- ・ 今後の展望

系の設定

図解

- 左右には**周期境界条件**.
- 上下には**壁**.
- 下向きに重力.
- 上向きに熱流.



系の設定

熱流

- ランジュバン方程式

$$\dot{\mathbf{r}}_i = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}_i}$$

$$\dot{\mathbf{p}}_i = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{r}_i} - \gamma \dot{\mathbf{r}}_i + \sqrt{2\gamma k_B T_\nu} \boldsymbol{\xi}_i(t)$$

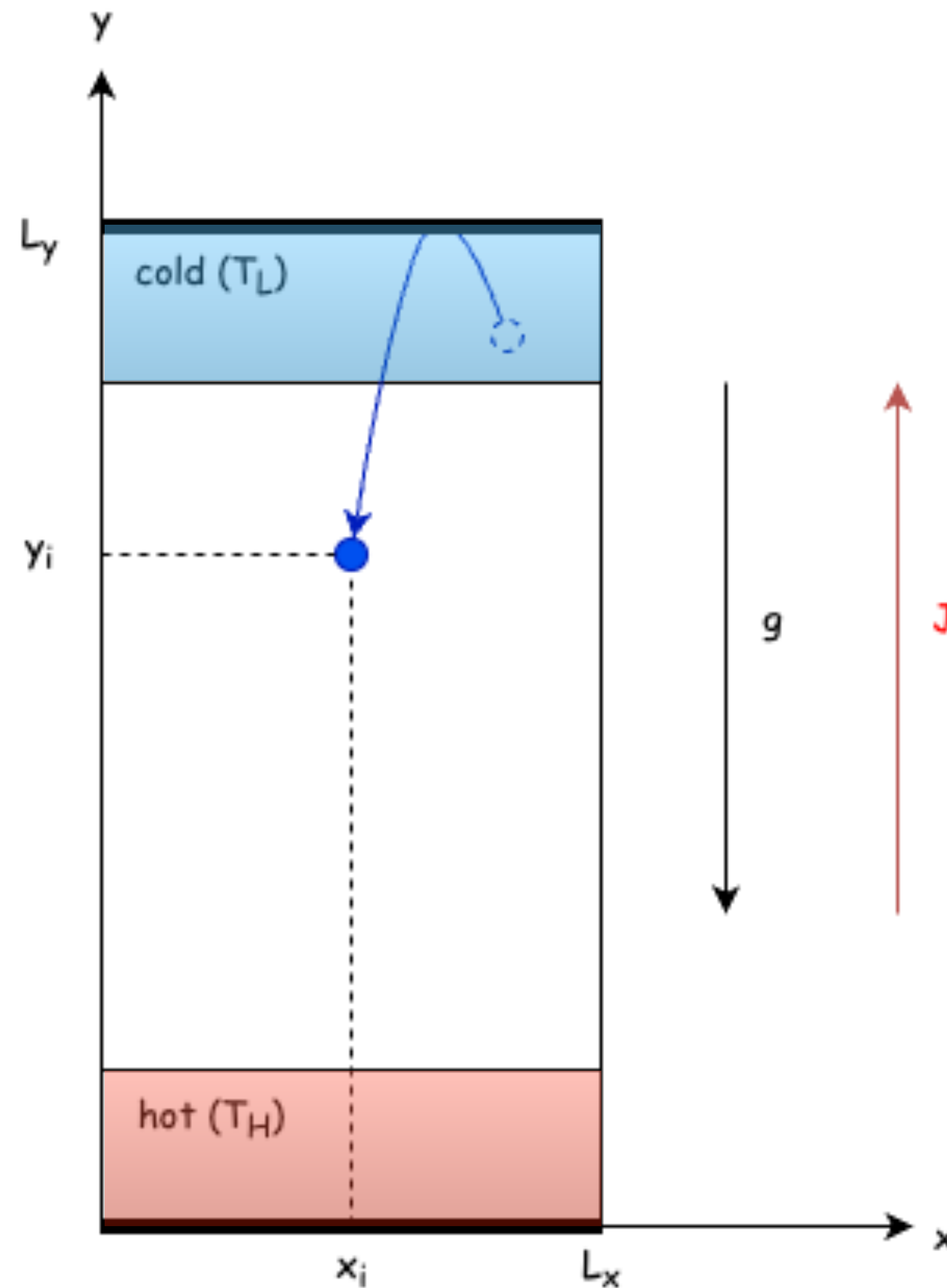
$$\langle \xi_i^a(t) \rangle = 0$$

$$\langle \xi_i^a(t) \xi_j^b(t') \rangle = \delta_{i,j} \delta_{a,b} \delta(t - t')$$

$$\gamma(y_i) = 1. \quad T_\nu(y_i) = T_H. \quad (0 < y_i < 8\sigma)$$

$$\gamma(y_i) = 1. \quad T_\nu(y_i) = T_L. \quad (L_y - 8\sigma < y_i < L_y)$$

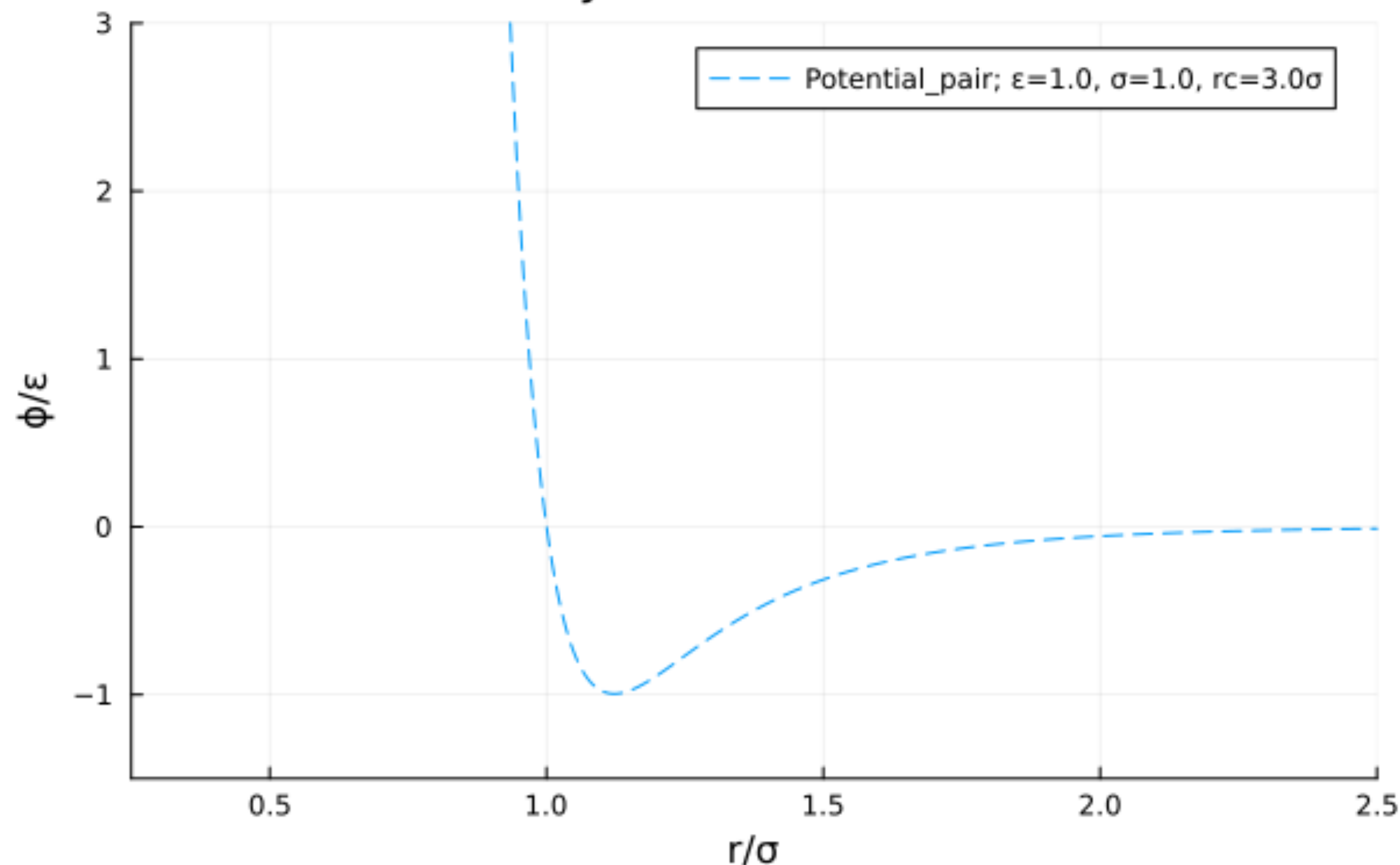
$$\gamma(y_i) = 0. \quad (8\sigma < y_i < L_y - 8\sigma)$$



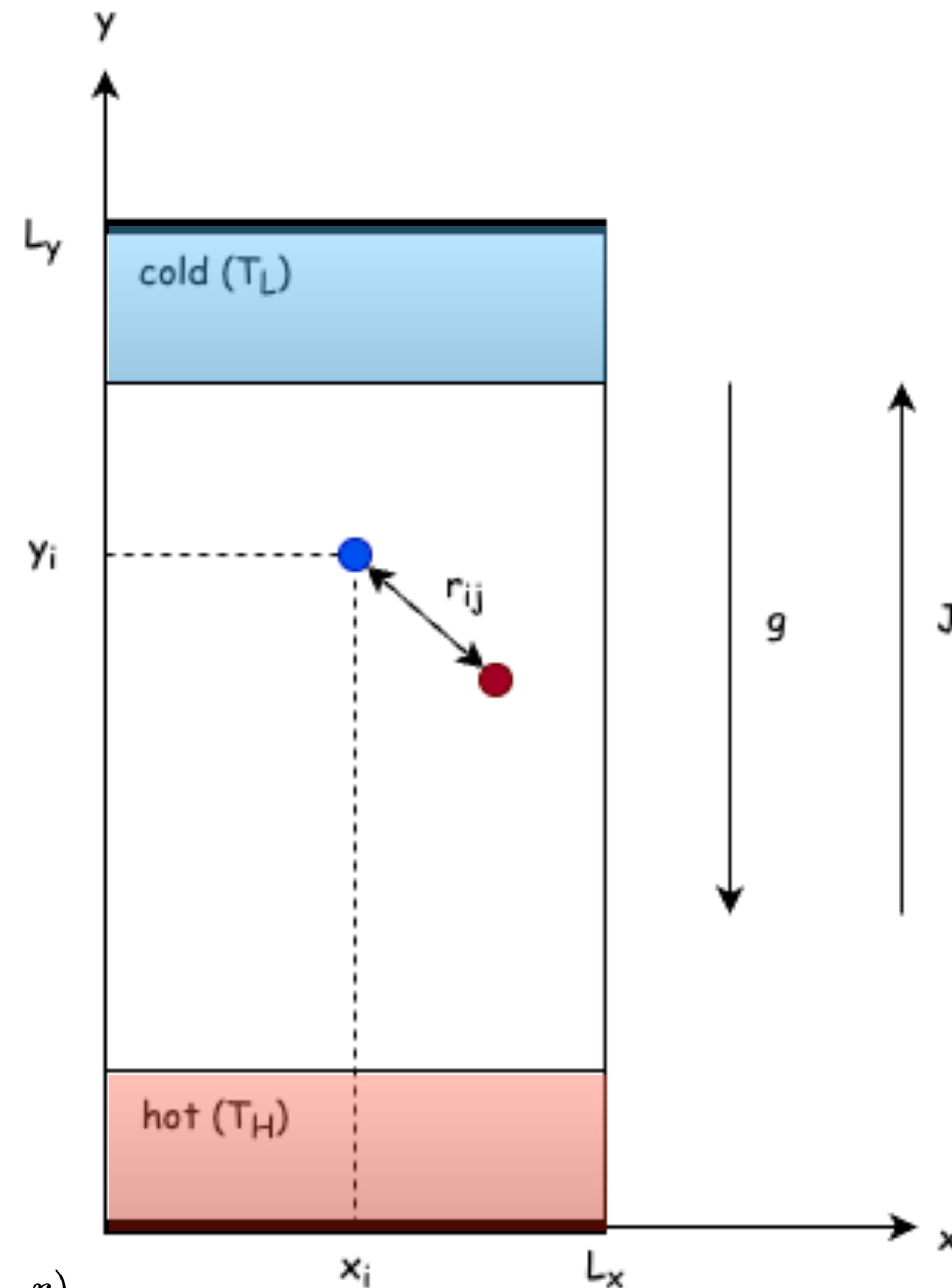
系の設定

粒子-粒子間の相互作用

LJ-Potential vs. r



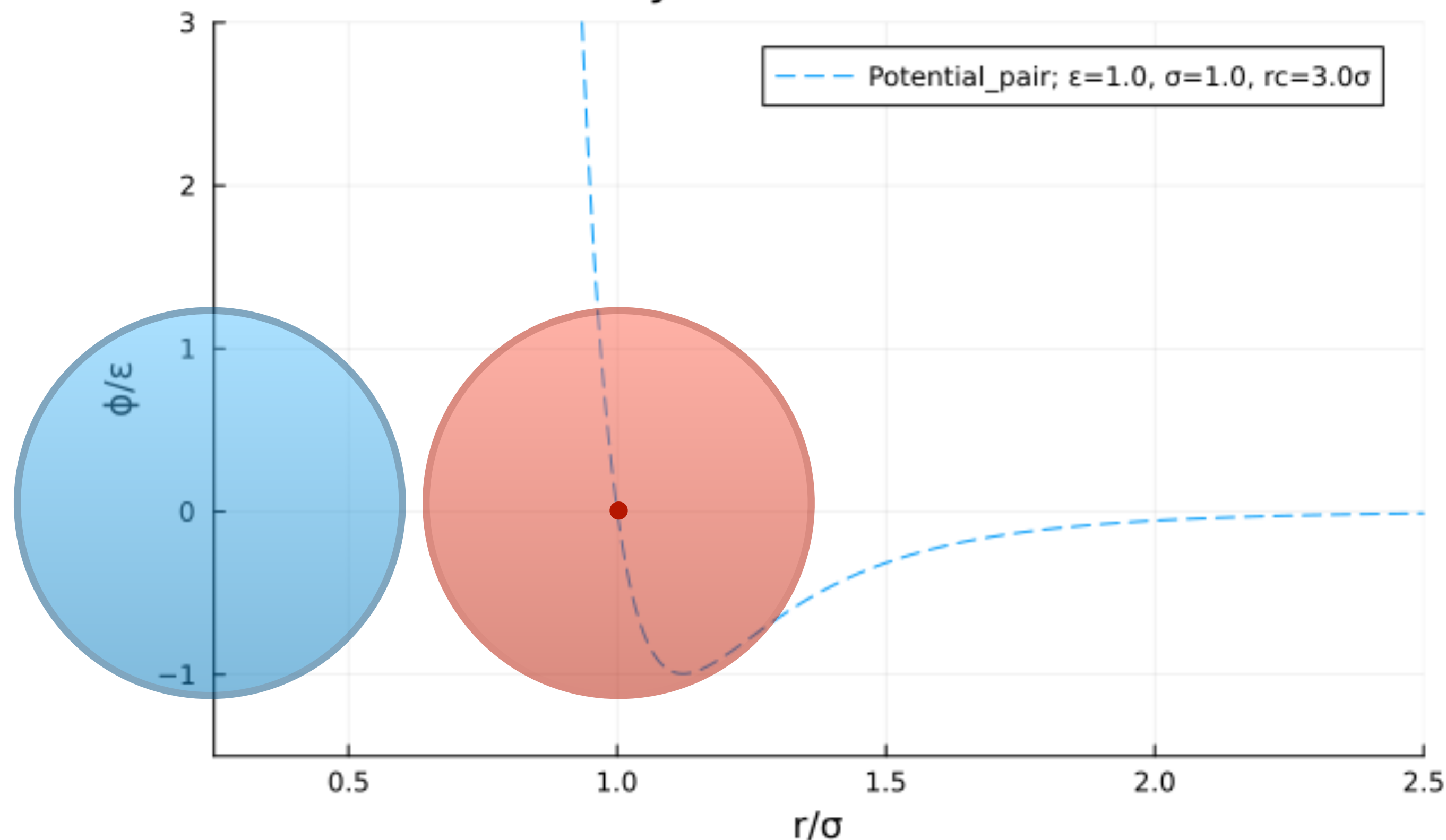
$$\tilde{\phi}_{\text{LJ}}(r; \epsilon, \sigma, r_{\text{cut}}) = \left\{ 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] - 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r_{\text{cut}}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{\text{cut}}} \right)^6 \right] \right\} \theta(r_{\text{cut}} - r)$$



系の設定

粒子-粒子間の相互作用

LJ-Potential vs. r

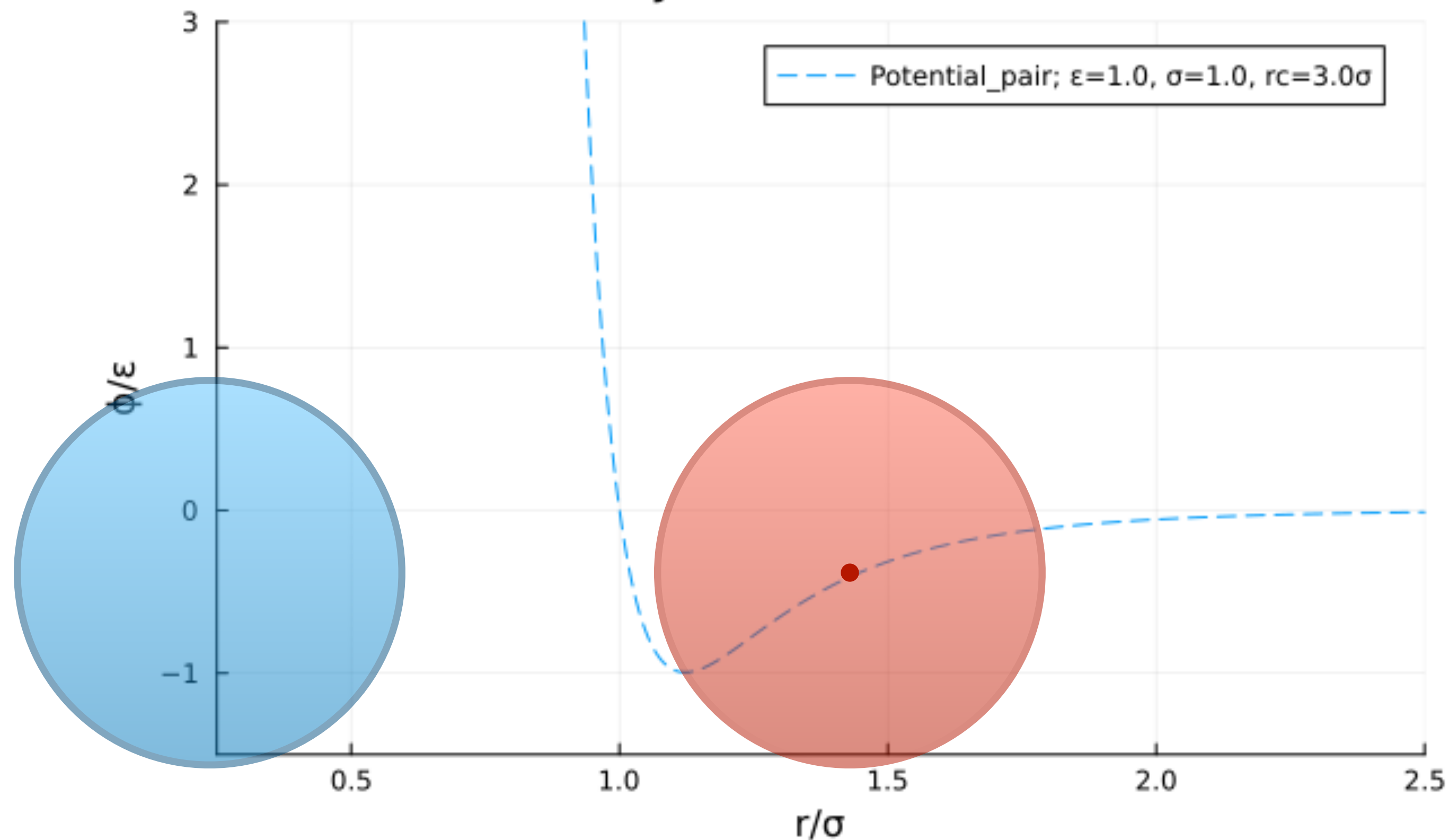


$$\tilde{\phi}_{LJ}(r; \epsilon, \sigma, r_{\text{cut}}) = \left\{ 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] - 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r_{\text{cut}}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{\text{cut}}} \right)^6 \right] \right\} \theta(r_{\text{cut}} - r)$$

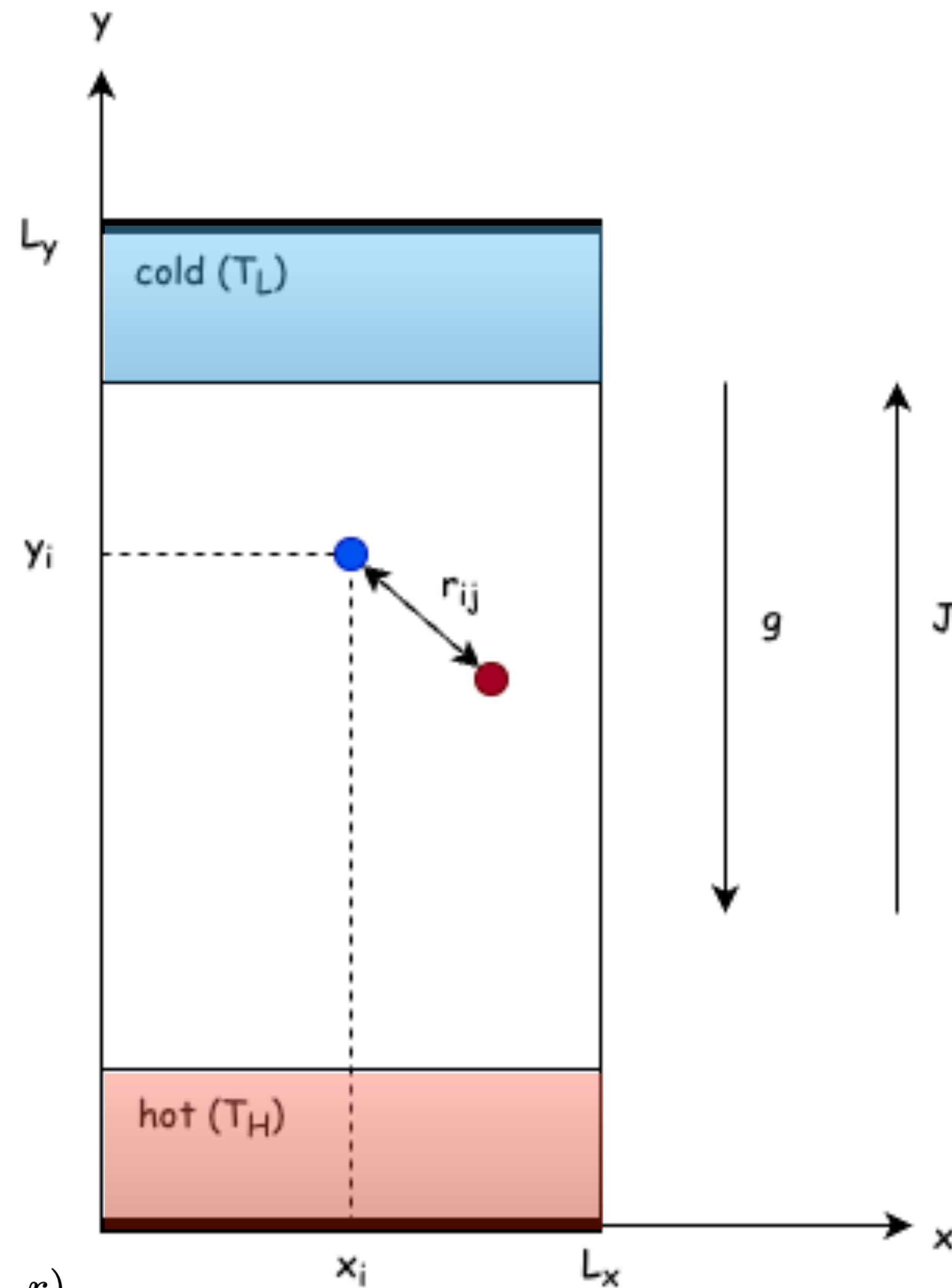
系の設定

粒子-粒子間の相互作用

LJ-Potential vs. r



$$\tilde{\phi}_{\text{LJ}}(r; \epsilon, \sigma, r_{\text{cut}}) = \left\{ 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] - 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r_{\text{cut}}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{\text{cut}}} \right)^6 \right] \right\} \theta(r_{\text{cut}} - r)$$

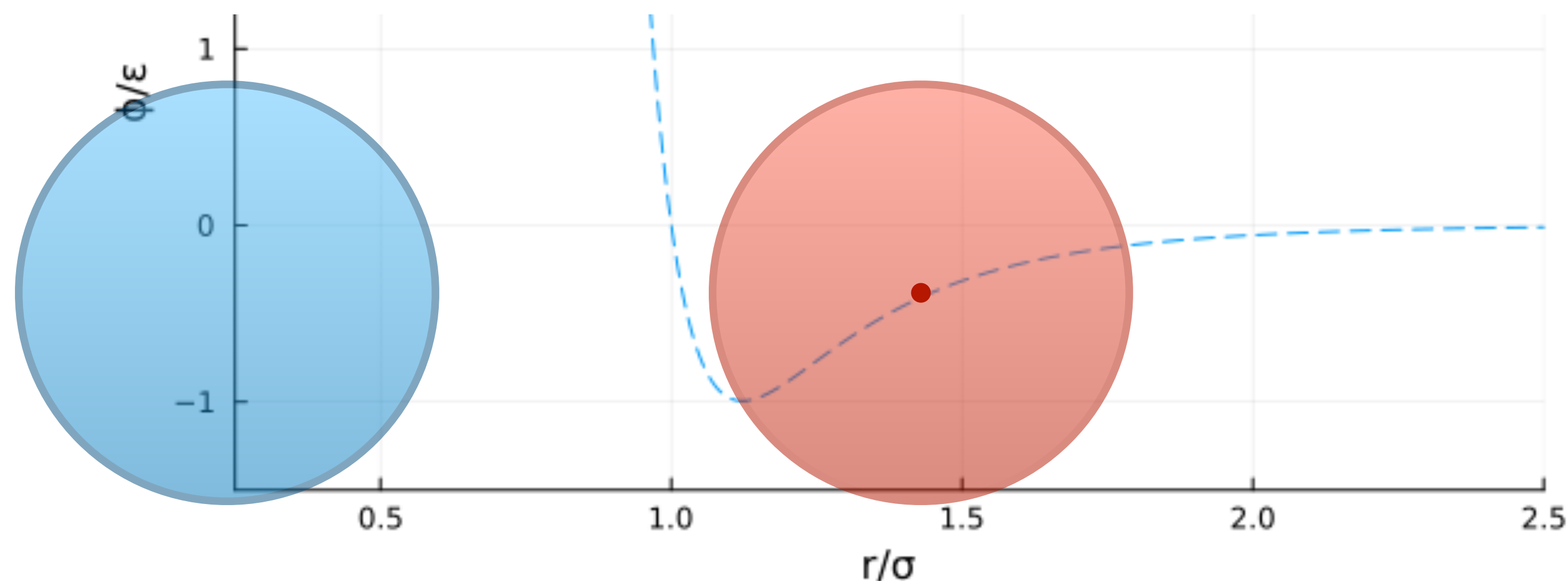


系の設定

粒子-粒子間の相互作用

LJ-Potential vs. r

$$\tilde{\phi}_{\text{LJ}}(r; \varepsilon, \sigma, r_{\text{cut}}) = \left\{ 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] - 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r_{\text{cut}}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{\text{cut}}} \right)^6 \right] \right\} \theta(r_{\text{cut}} - r)$$



r_{cut} カットオフ長

壁の濡れ性が誘起する, 重力と熱流をかけた流体系のダイナミクスの変化

目次

- ・ 背景と先行研究
- ・ 系の設定
 - ・ 図解
 - ・ 熱流
 - ・ 粒子-粒子間の相互作用
- ・ ハミルトニアン
 - ・ 結論
 - ・ 壁ポテンシャル
- ・ 実験と分析
 - ・ 濡れ性
 - ・ パラメータ
 - ・ 重心位置
 - ・ 空間的なばらつき
 - ・ リミットサイクル
- ・ まとめ
- ・ 今後の展望

ハミルトニアン

結論

- ・ 第1項: 運動エネルギー
- ・ 第2項: 粒子間相互作用
- ・ 第3項: 重力ポテンシャル
- ・ 第4項: 壁ポテンシャル

$$H(\Gamma; g) = \sum_{i=1}^N \left[\frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + \sum_{j>i}^N \tilde{\phi}_{\text{LJ}}^{\text{pair}}(r_{ij}) + mgy_i + V^{\text{wall}}(y_i) \right]$$

ハミルトニアン

結論

- 第1項: 運動エネルギー
- 第2項: 粒子間相互作用
- 第3項: 重力ポテンシャル
- 第4項: 壁ポテンシャル

$$H(\Gamma; g) = \sum_{i=1}^N \left[\frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + \sum_{j>i}^N \tilde{\phi}_{\text{LJ}}^{\text{pair}}(r_{ij}) + mgy_i + V^{\text{wall}}(y_i) \right]$$

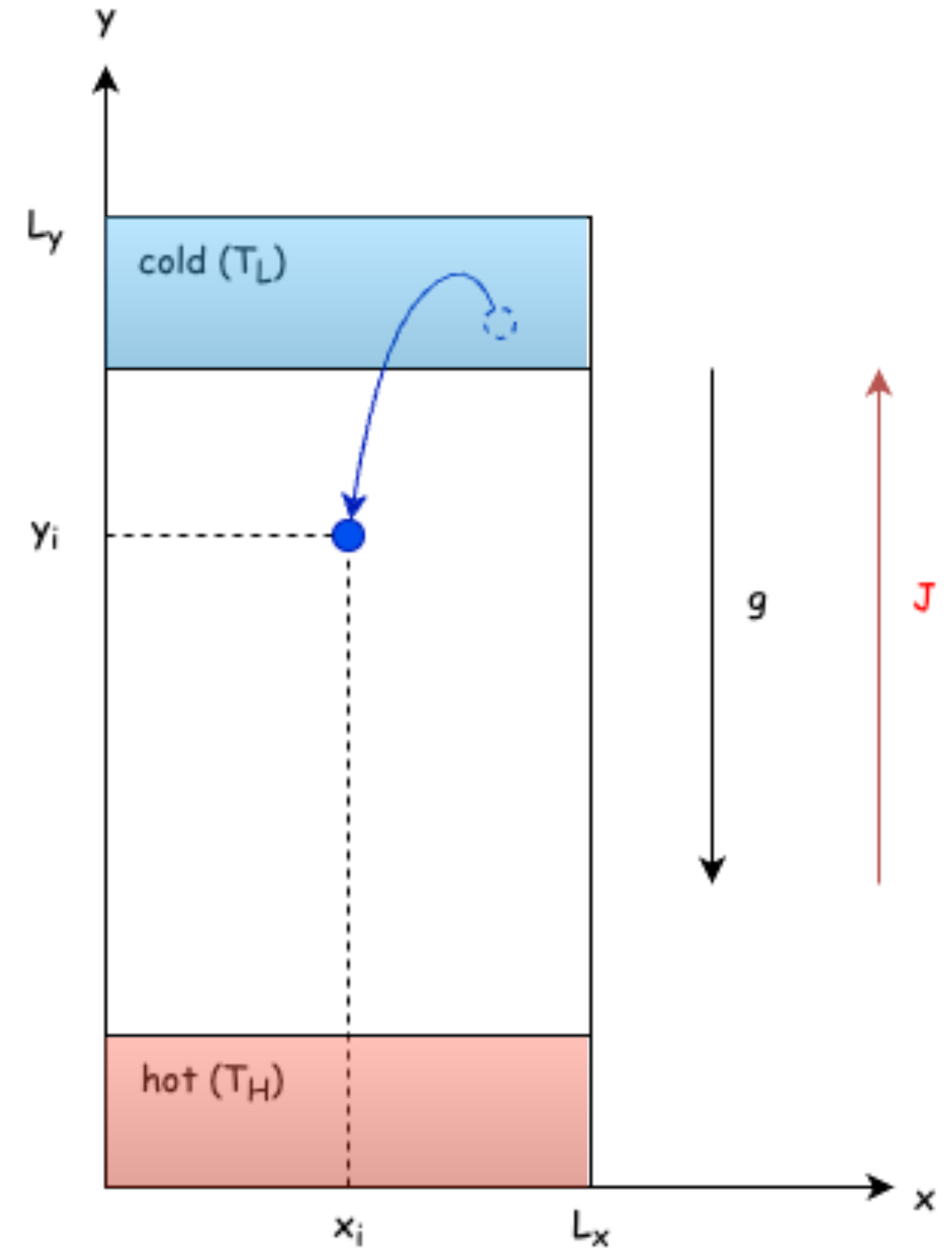
ハミルトニアン 壁ポテンシャル

上の壁

$$V^{\text{wall}}(y; L_y) = \tilde{\phi}_{\text{LJ}}(L_y - y; \varepsilon^{\text{wall}}, \sigma^{\text{wall}}, r_{\text{cut}}^{\text{wall}})$$

下の壁

$$+ \tilde{\phi}_{\text{LJ}}(y; \varepsilon^{\text{wall}}, \sigma^{\text{wall}}, r_{\text{cut}}^{\text{wall}})$$



ハミルトニアン 壁ポテンシャル

上の壁

下の壁

$$V^{\text{wall}}(y; L_y) = \tilde{\phi}_{\text{LJ}}(L_y - y; \varepsilon^{\text{wall}}, \sigma^{\text{wall}}, r_{\text{cut}}^{\text{wall}}) + \tilde{\phi}_{\text{LJ}}(y; \varepsilon^{\text{wall}}, \sigma^{\text{wall}}, r_{\text{cut}}^{\text{wall}})$$

$$\tilde{\phi}_{\text{LJ}}(r; \varepsilon, \sigma, r_{\text{cut}}) = \left\{ 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] - 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r_{\text{cut}}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{\text{cut}}} \right)^6 \right] \right\} \theta(r_{\text{cut}} - r)$$

壁の濡れ性が誘起する, 重力と熱流をかけた流体系のダイナミクスの変化

目次

- ・ 背景と先行研究
- ・ 系の設定
 - ・ 図解
 - ・ 熱流
 - ・ 粒子-粒子間の相互作用
- ・ ハミルトニアン
 - ・ 結論
 - ・ 壁ポテンシャル
- ・ 実験と分析
 - ・ 濡れ性
 - ・ パラメータ
 - ・ 重心位置
 - ・ 空間的なばらつき
 - ・ リミットサイクル
- ・ まとめ
- ・ 今後の展望

実験と分析

濡れ性

R_t : 壁の厚み, R_a : 引力幅

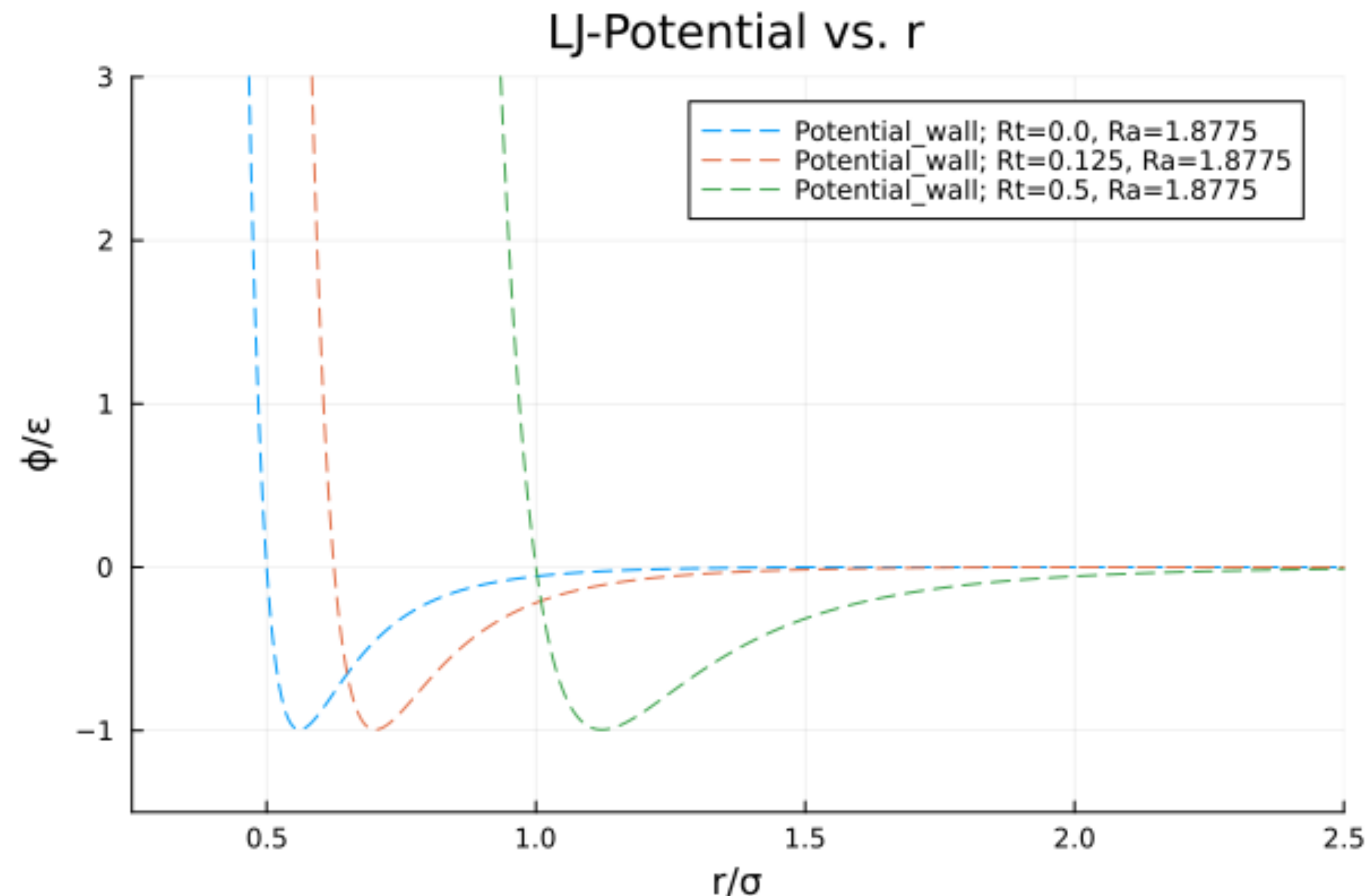
実験と分析

濡れ性

$$\varepsilon^{\text{wall}} = \varepsilon$$

$$\sigma^{\text{wall}} = (0.5 + R_t) \times \sigma$$

$$r_{\text{cut}}^{\text{wall}} = (2^{1/6} + R_a) \times \sigma^{\text{wall}}$$

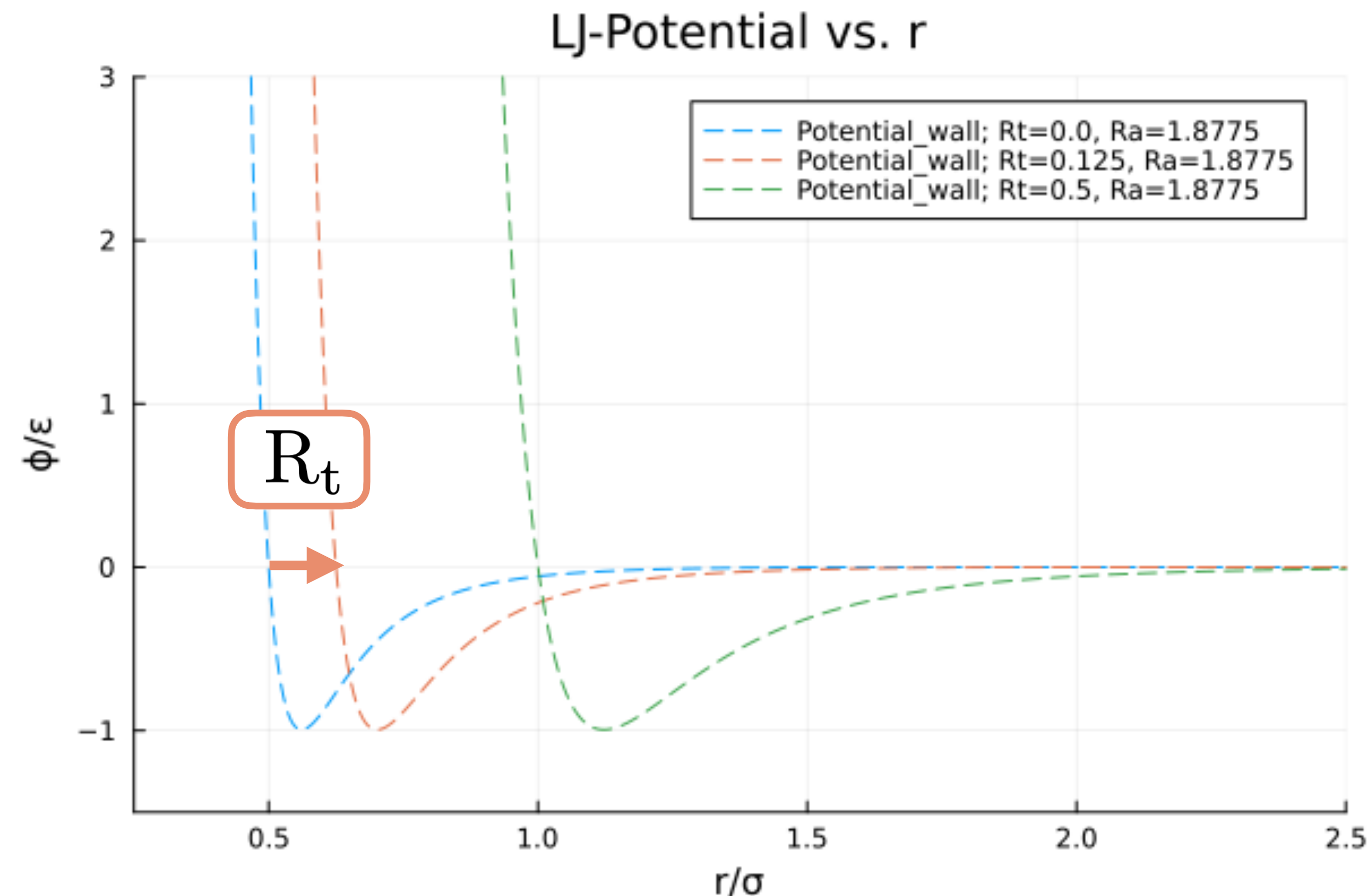


R_t : 壁の厚み

$$0.0 \leq R_t \leq 0.5$$

実験と分析

濡れ性



$$\varepsilon^{\text{wall}} = \varepsilon$$

$$\sigma^{\text{wall}} = (0.5 + R_t) \times \sigma$$

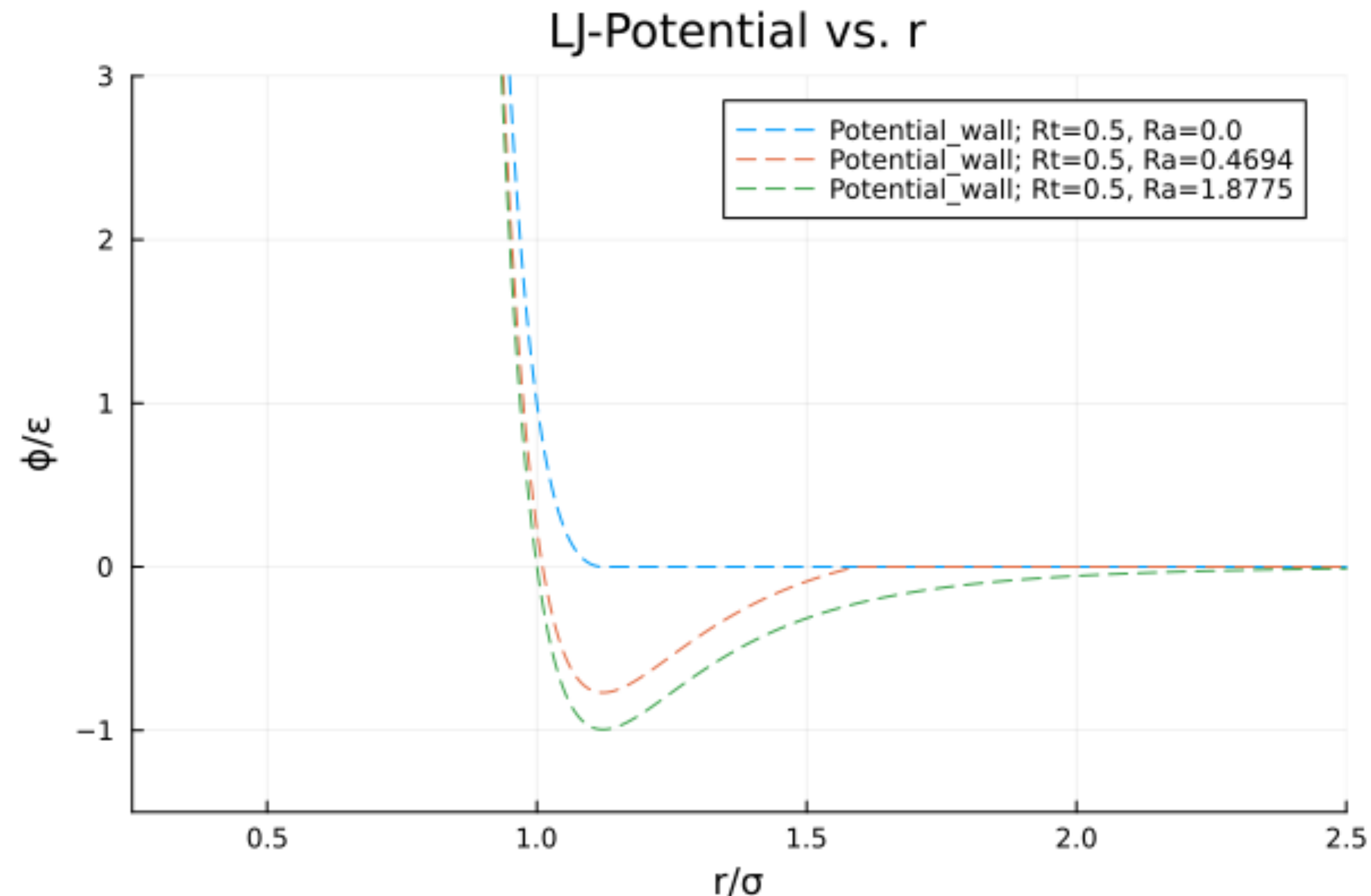
$$r_{\text{cut}}^{\text{wall}} = (2^{1/6} + R_a) \times \sigma^{\text{wall}}$$

R_t : 壁の厚み

$$0.0 \leq R_t \leq 0.5$$

実験と分析

濡れ性



$$\varepsilon^{\text{wall}} = \varepsilon$$

$$\sigma^{\text{wall}} = (0.5 + R_t) \times \sigma$$

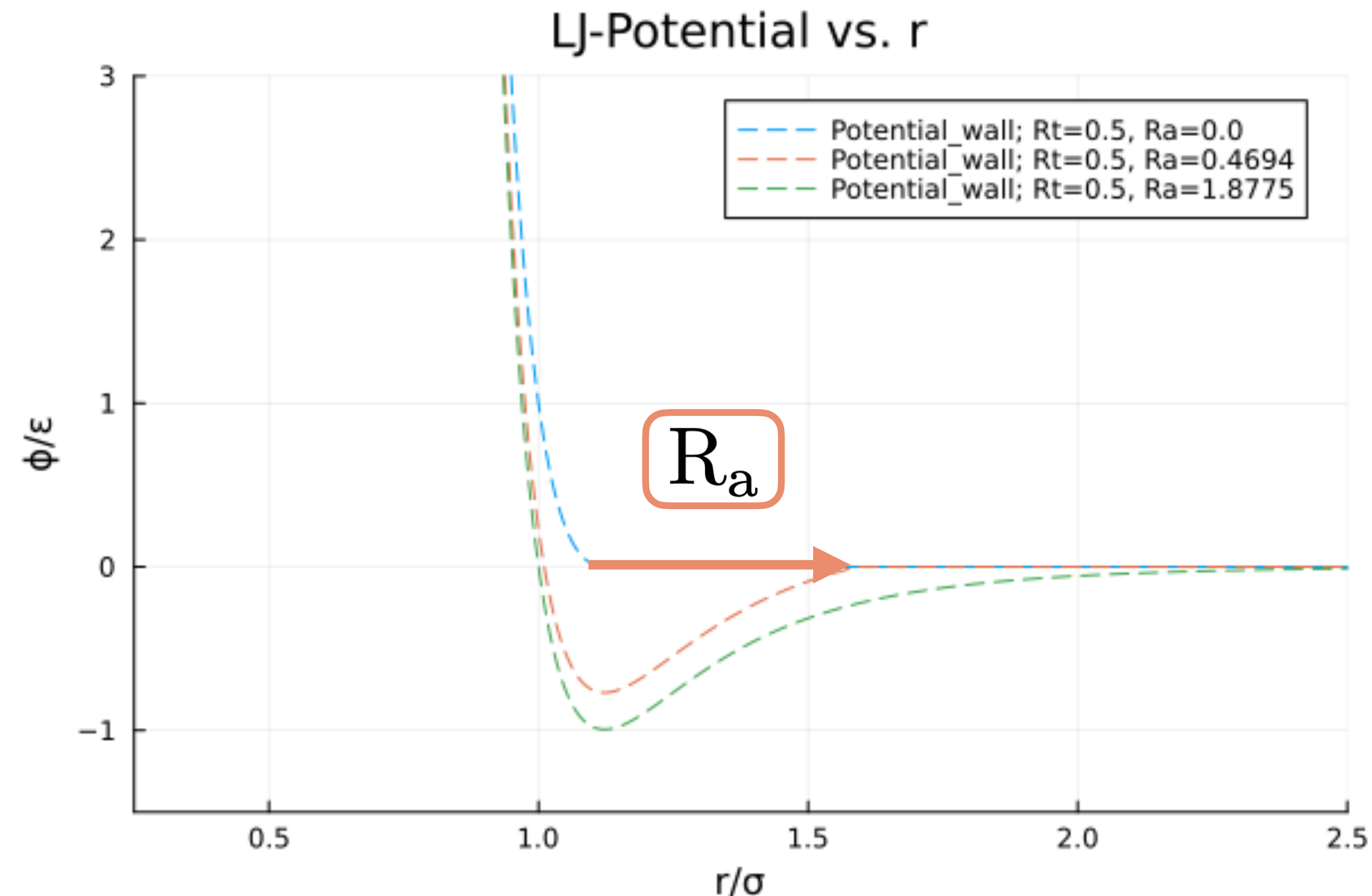
$$r_{\text{cut}}^{\text{wall}} = (2^{1/6} + R_a) \times \sigma^{\text{wall}}$$

R_a : 引力幅

$$0.0 \leq R_a \leq 3.0 - 2^{1/6}$$

実験と分析

濡れ性



$$\varepsilon^{\text{wall}} = \varepsilon$$

$$\sigma^{\text{wall}} = (0.5 + R_t) \times \sigma$$

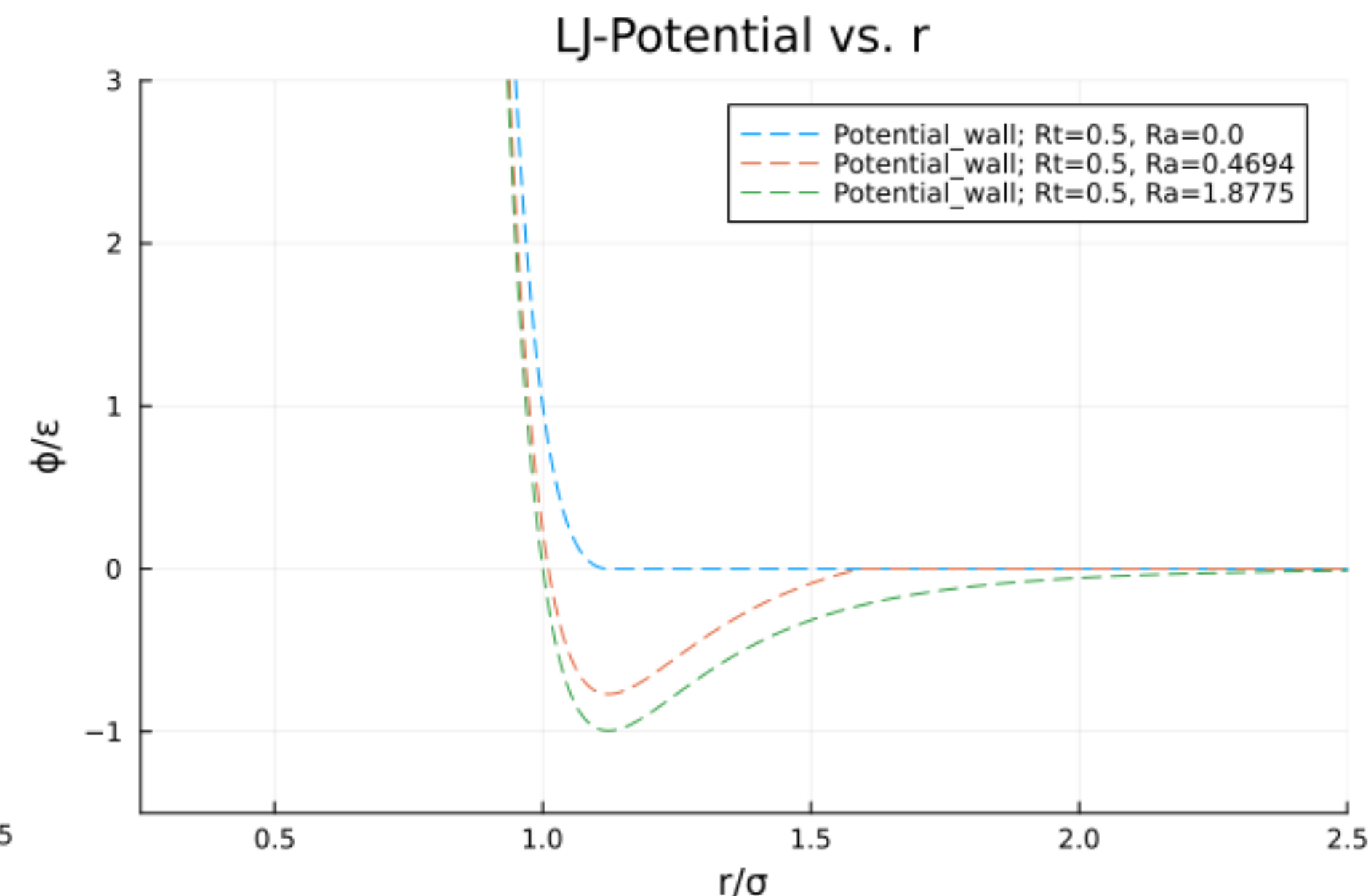
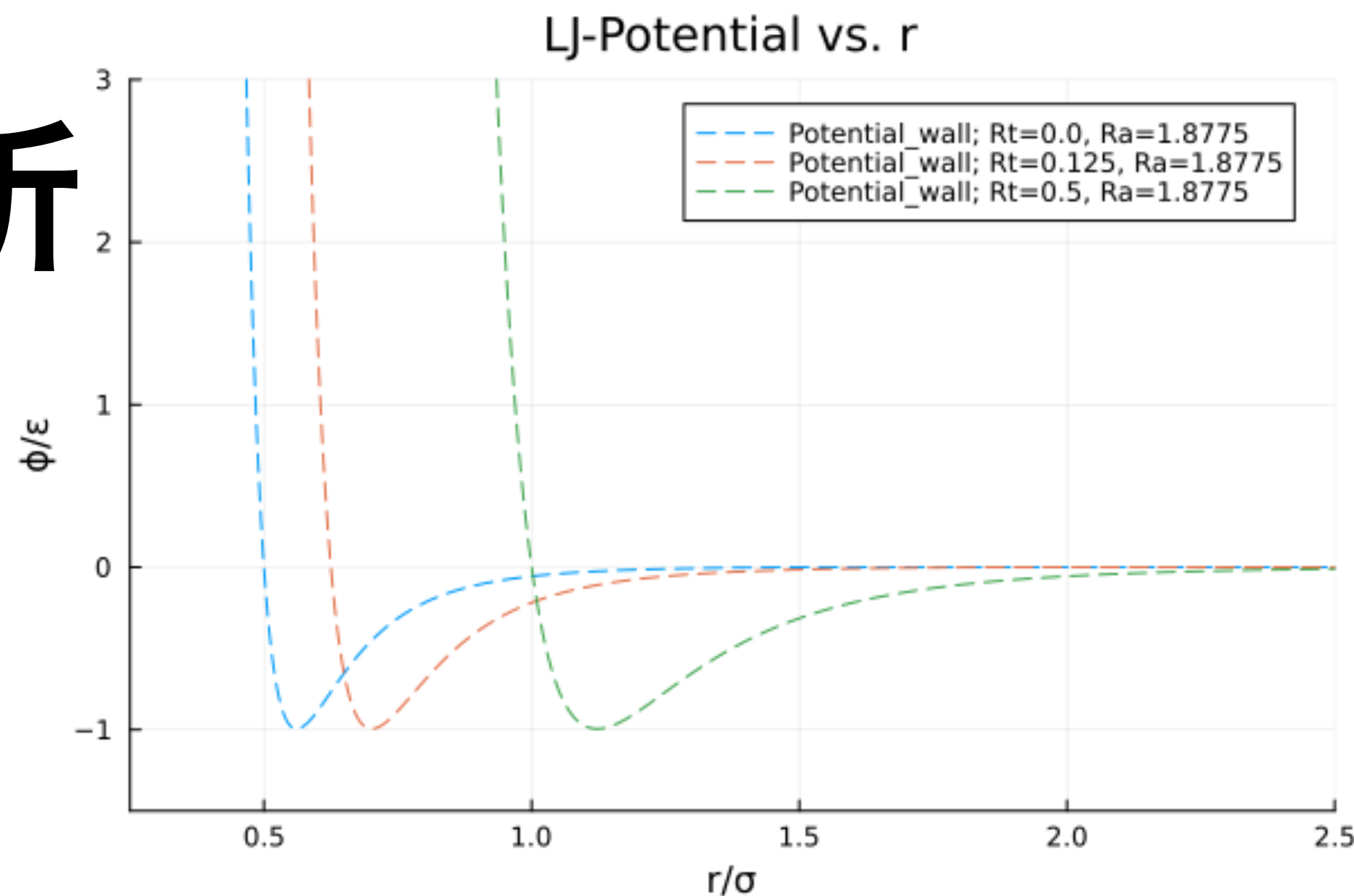
$$r_{\text{cut}}^{\text{wall}} = (2^{1/6} + R_a) \times \sigma^{\text{wall}}$$

R_a : 引力幅

$$0.0 \leq R_a \leq 3.0 - 2^{1/6}$$

実験と分析

濡れ性



R_t : 壁の厚み

$$0.0 \leq R_t \leq 0.5$$

$$\epsilon^{\text{wall}} = \epsilon$$

$$\sigma^{\text{wall}} = (0.5 + R_t) \times \sigma$$

$$r_{\text{cut}}^{\text{wall}} = (2^{1/6} + R_a) \times \sigma^{\text{wall}}$$

R_a : 引力幅

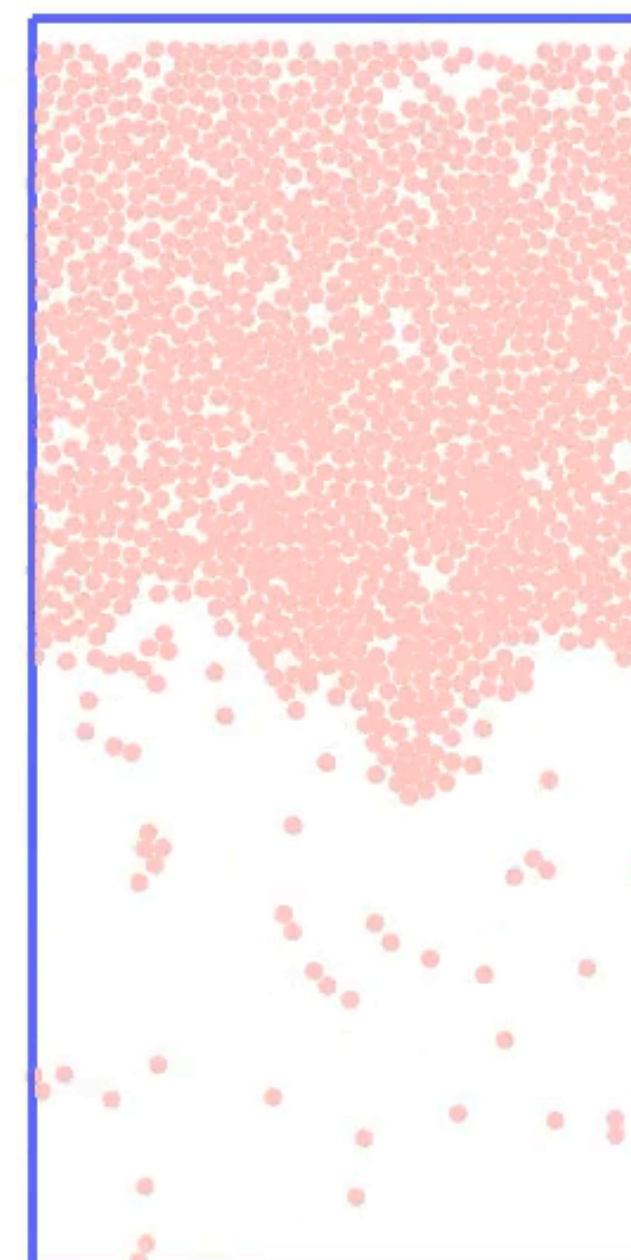
$$0.0 \leq R_a \leq 3.0 - 2^{1/6}$$

実験と分析

濡れ性

R_t : 壁の厚み, R_a : 引力幅

- $N = 1250$
- $L_y = 80$
- $L_x : L_y = 1 : 2$
- $T_L = 0.41$
- $T_H = 0.45$
- $mg = 4.0 \times 10^{-4}$



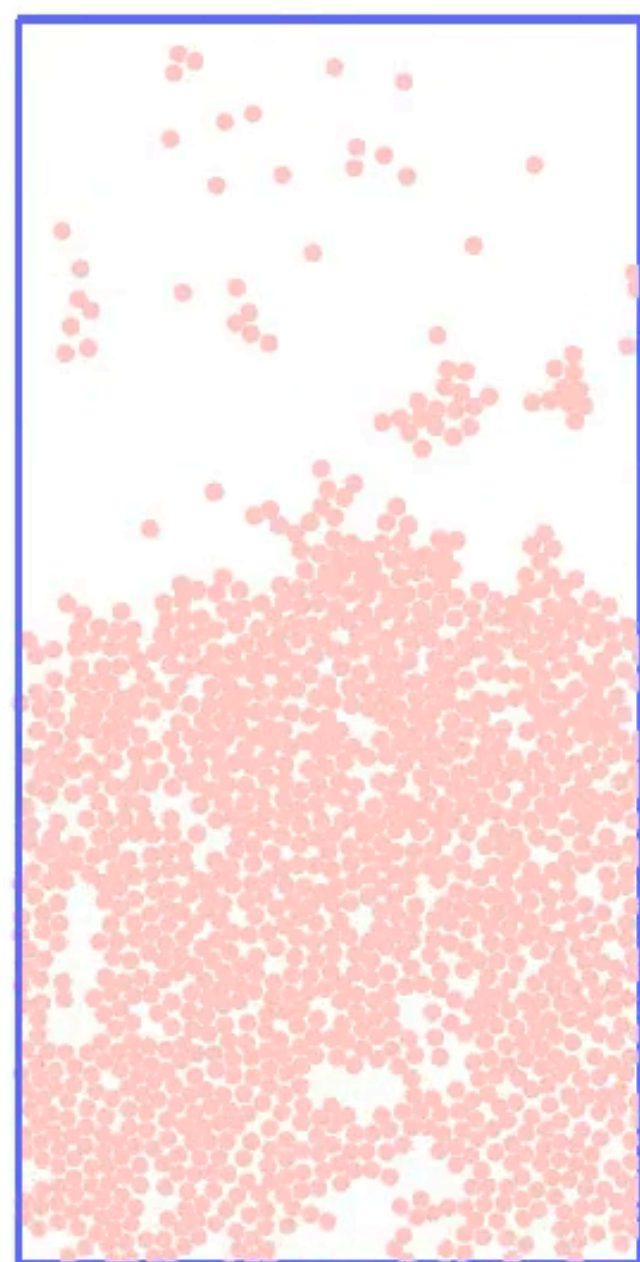
$$\chi \equiv \frac{k_B(T_H - T_L)}{mgL_y} \simeq 1$$

$$R_t = 0.5, R_a = 1.8775$$

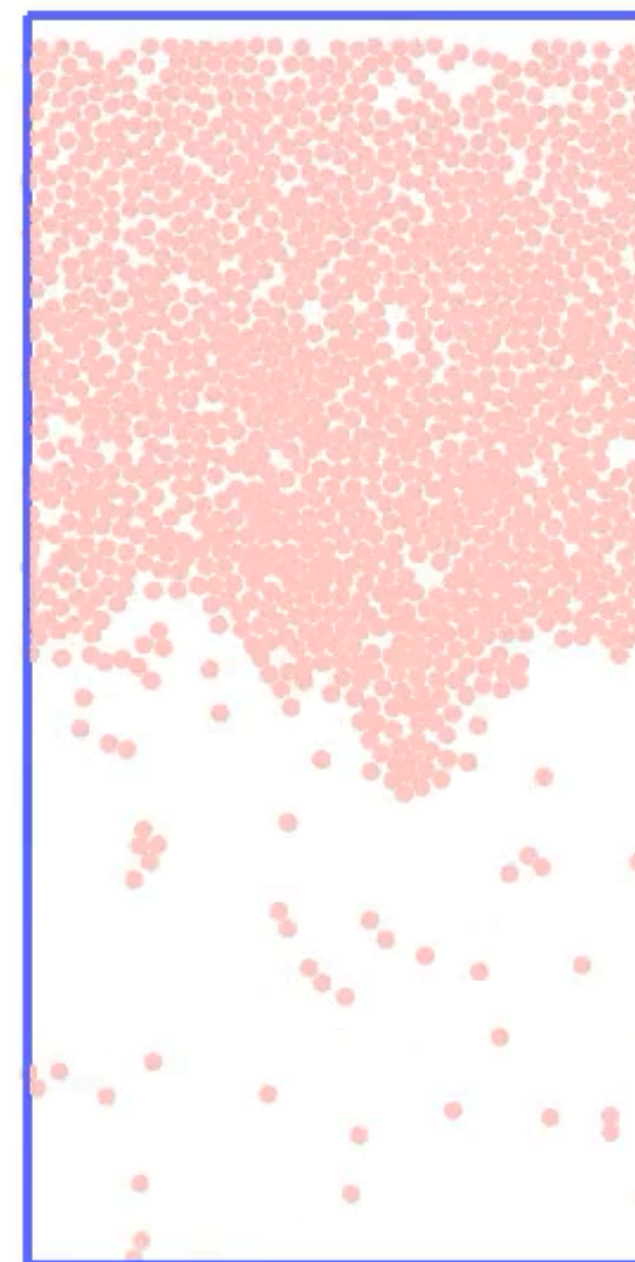
実験と分析

濡れ性

R_t : 壁の厚み, R_a : 引力幅



$$R_t = 0.0, R_a = 1.8775$$

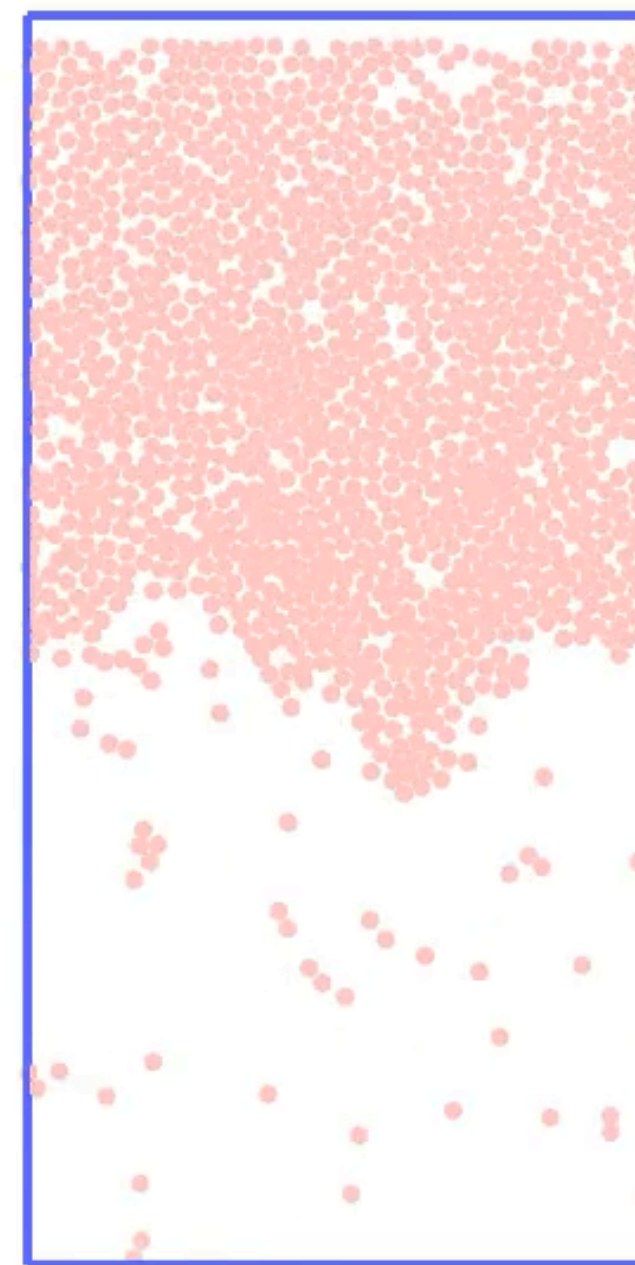
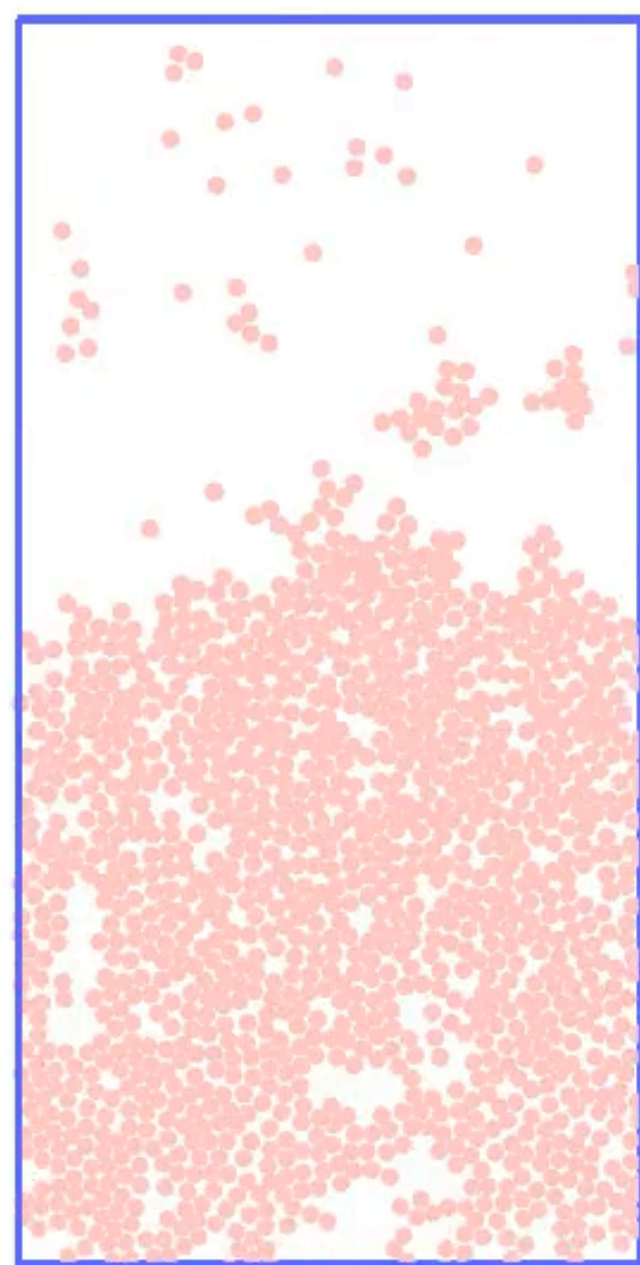


$$R_t = 0.5, R_a = 1.8775$$

実験と分析

濡れ性

R_t : 壁の厚み, R_a : 引力幅



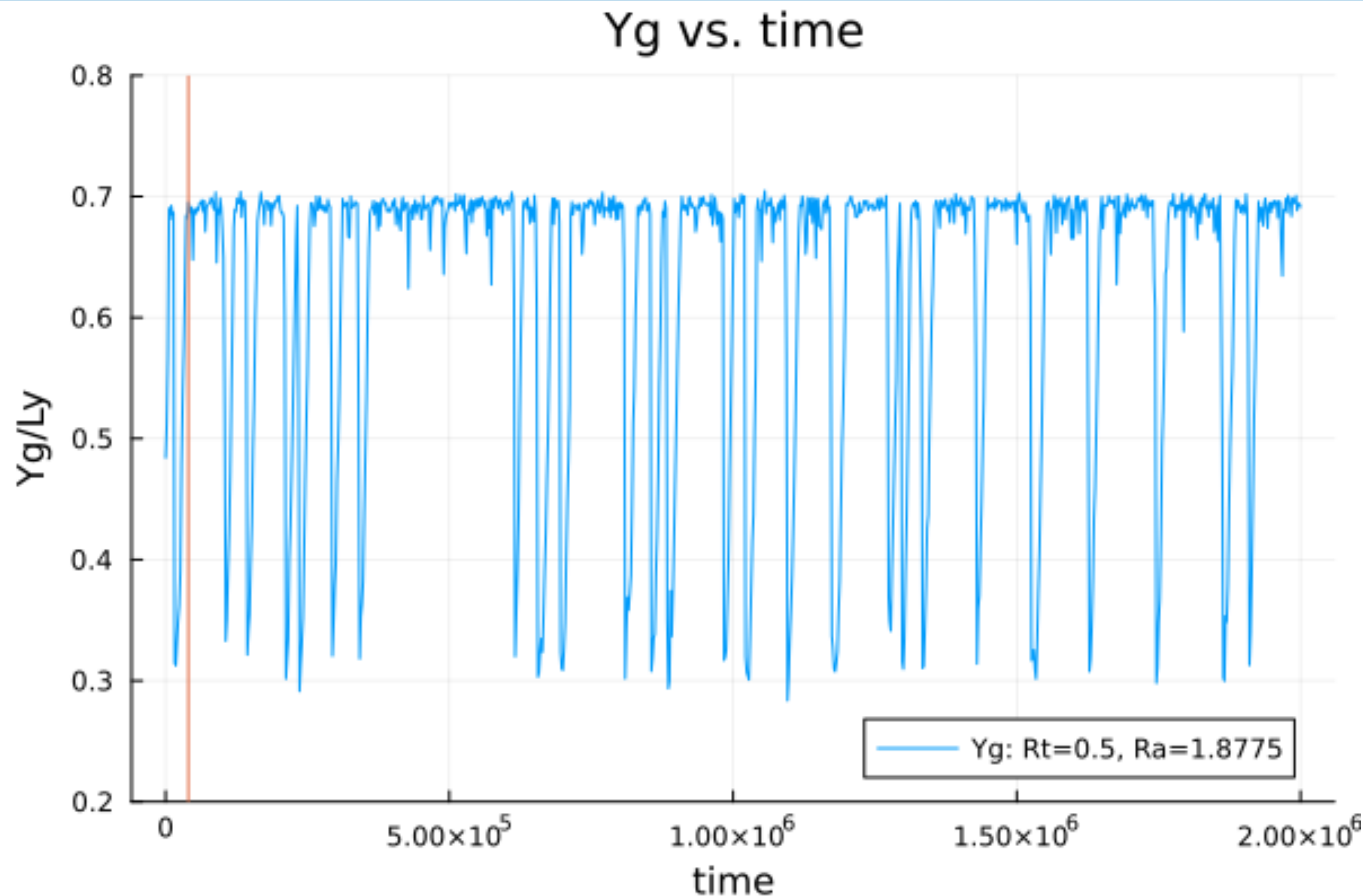
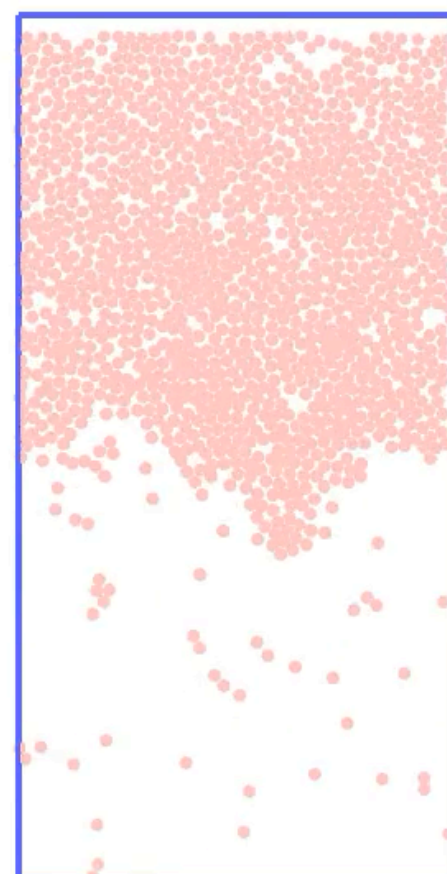
$$R_t = 0.0, R_a = 1.8775$$

$$R_t = 0.5, R_a = 1.8775$$

重心位置空間的なばらつき

実験と分析

重心位置

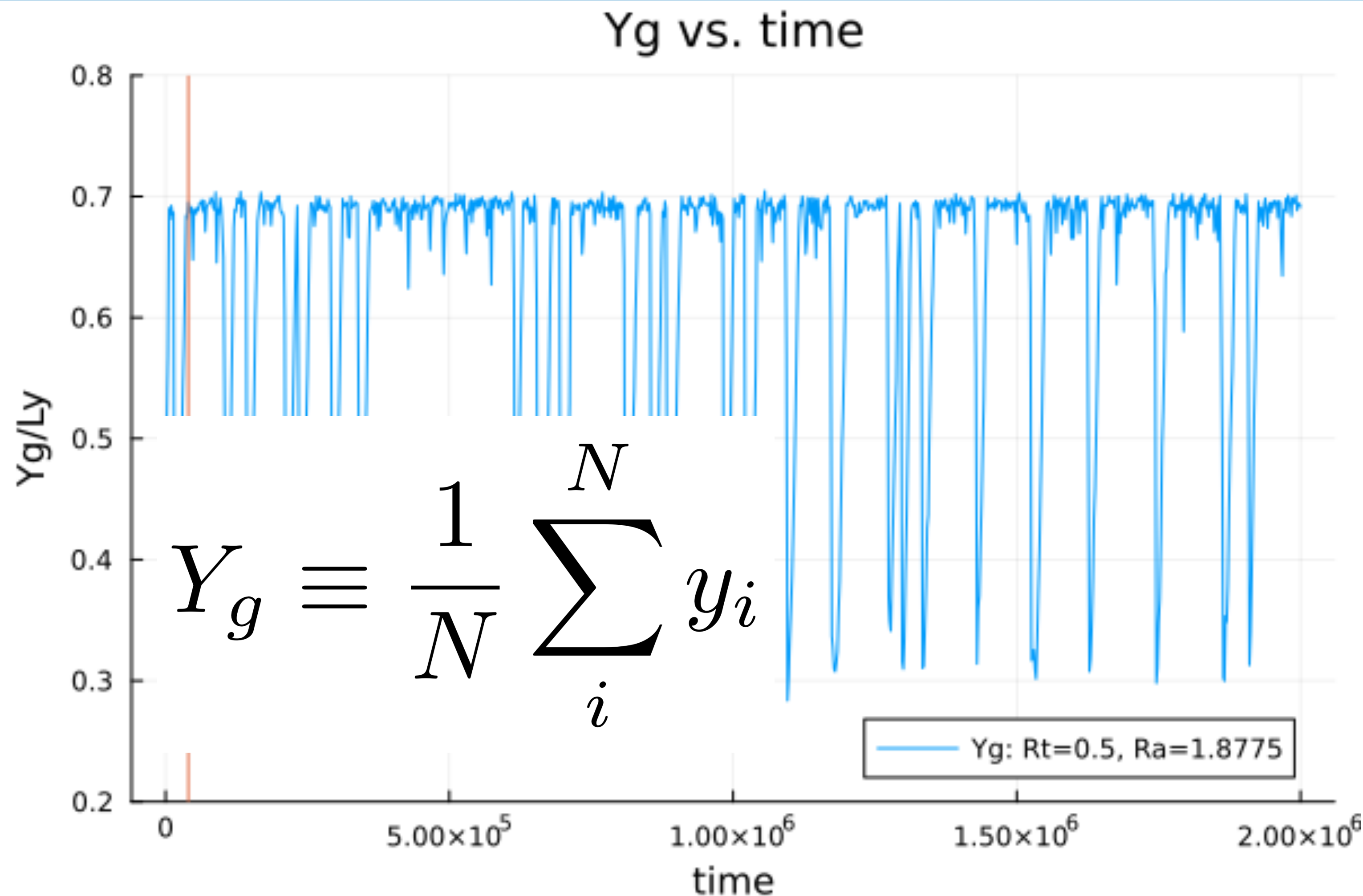
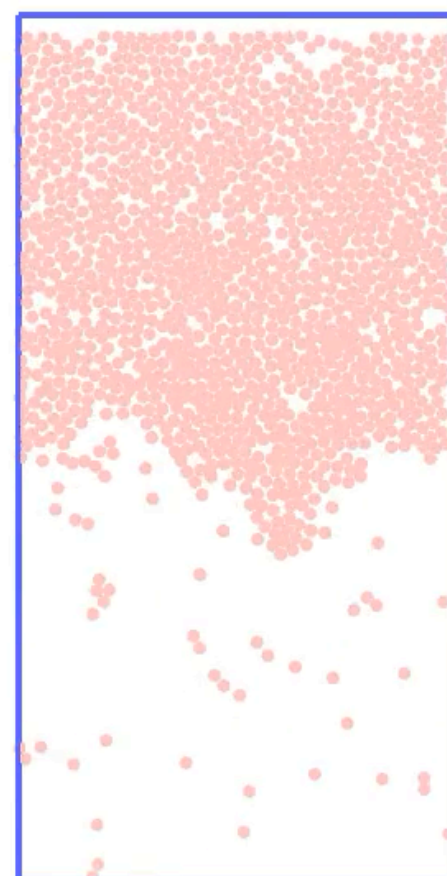


$$R_t = 0.5, R_a = 1.8775$$

R_t : 壁の厚み, R_a : 引力幅

実験と分析

重心位置

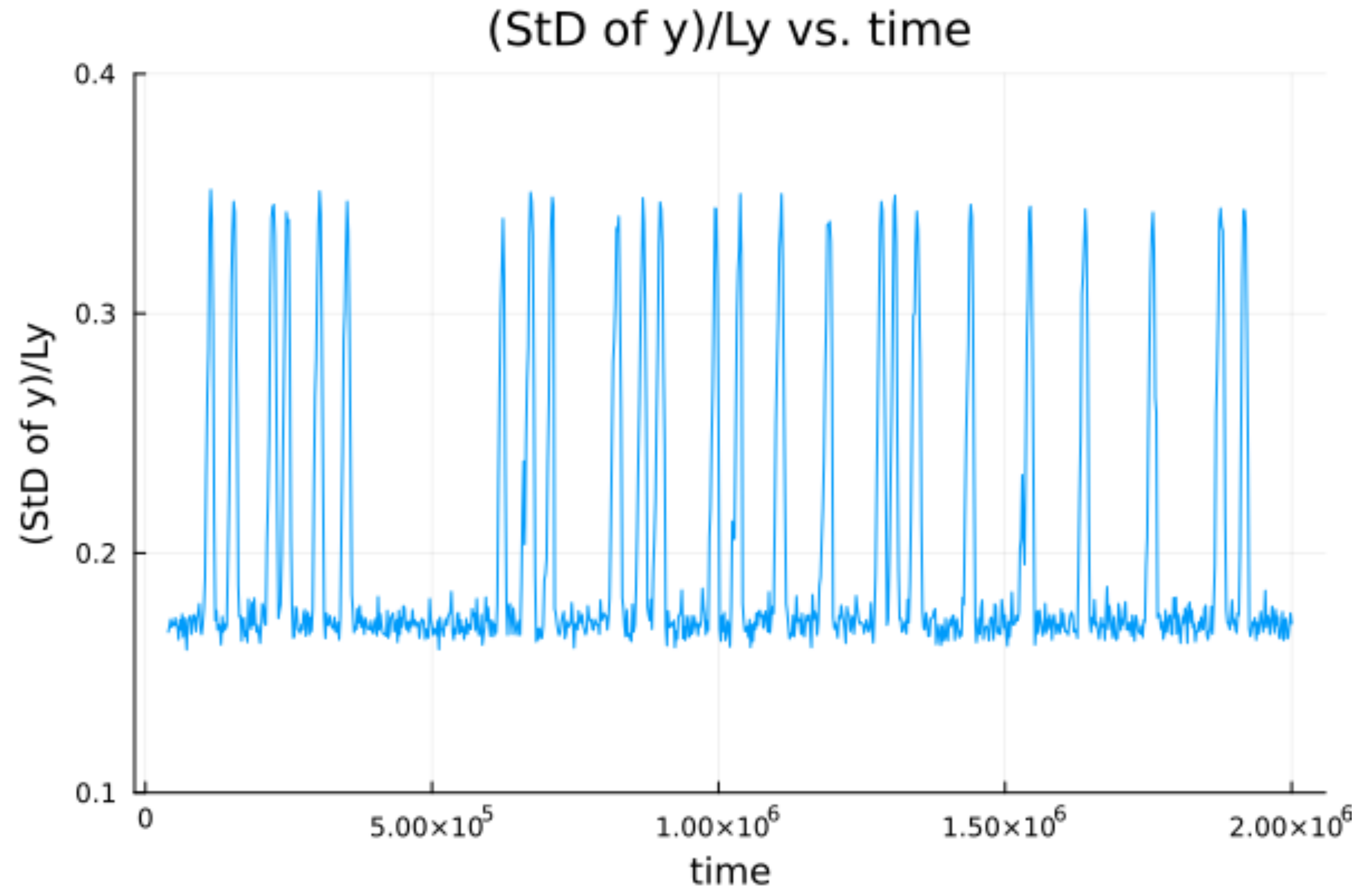


$$R_t = 0.5, R_a = 1.8775$$

R_t : 壁の厚み, R_a : 引力幅

実験と分析

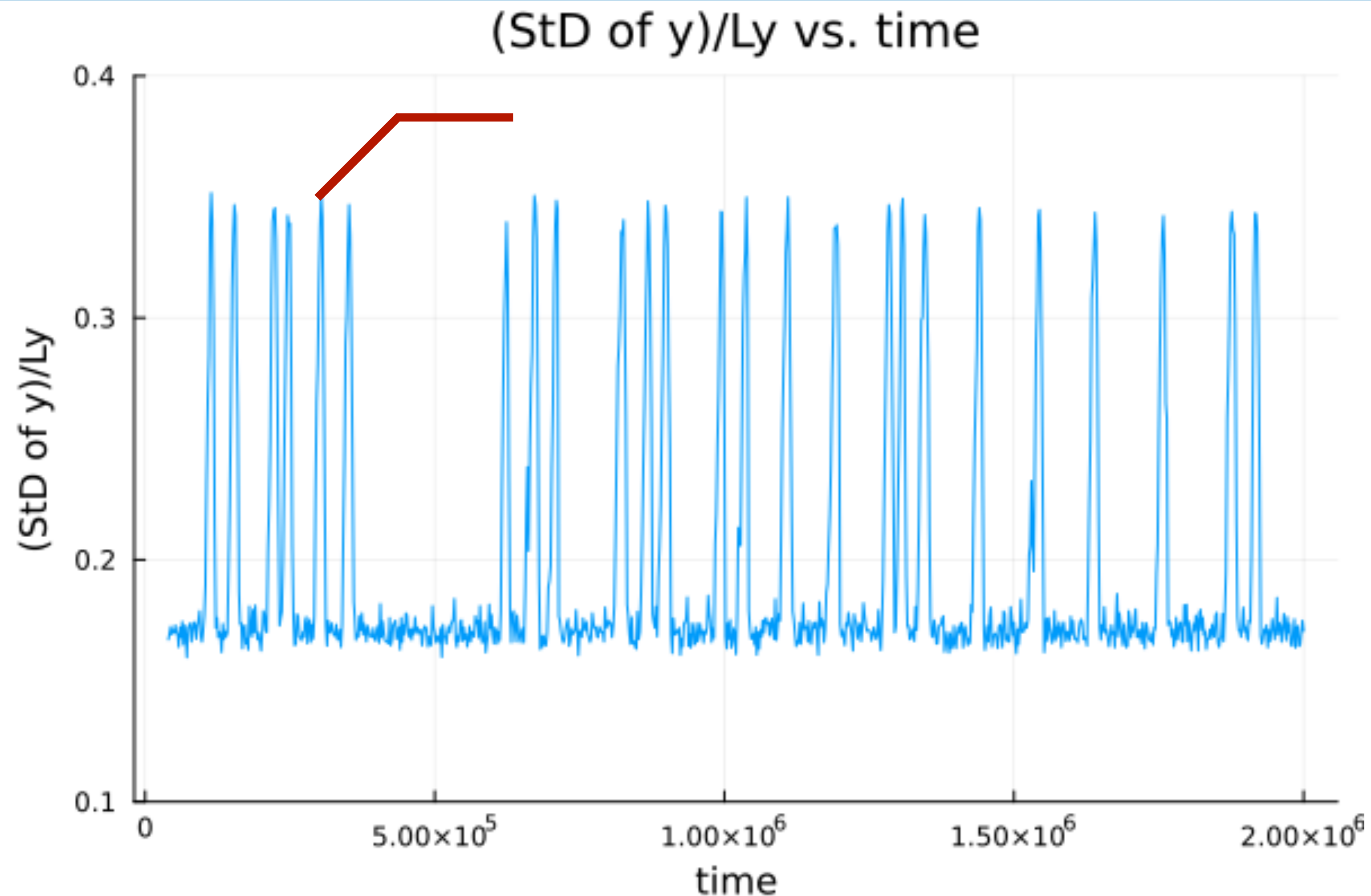
空間的なばらつき



$$\sigma_y(t) = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (y_i(t) - Y_g(t))^2}$$

実験と分析

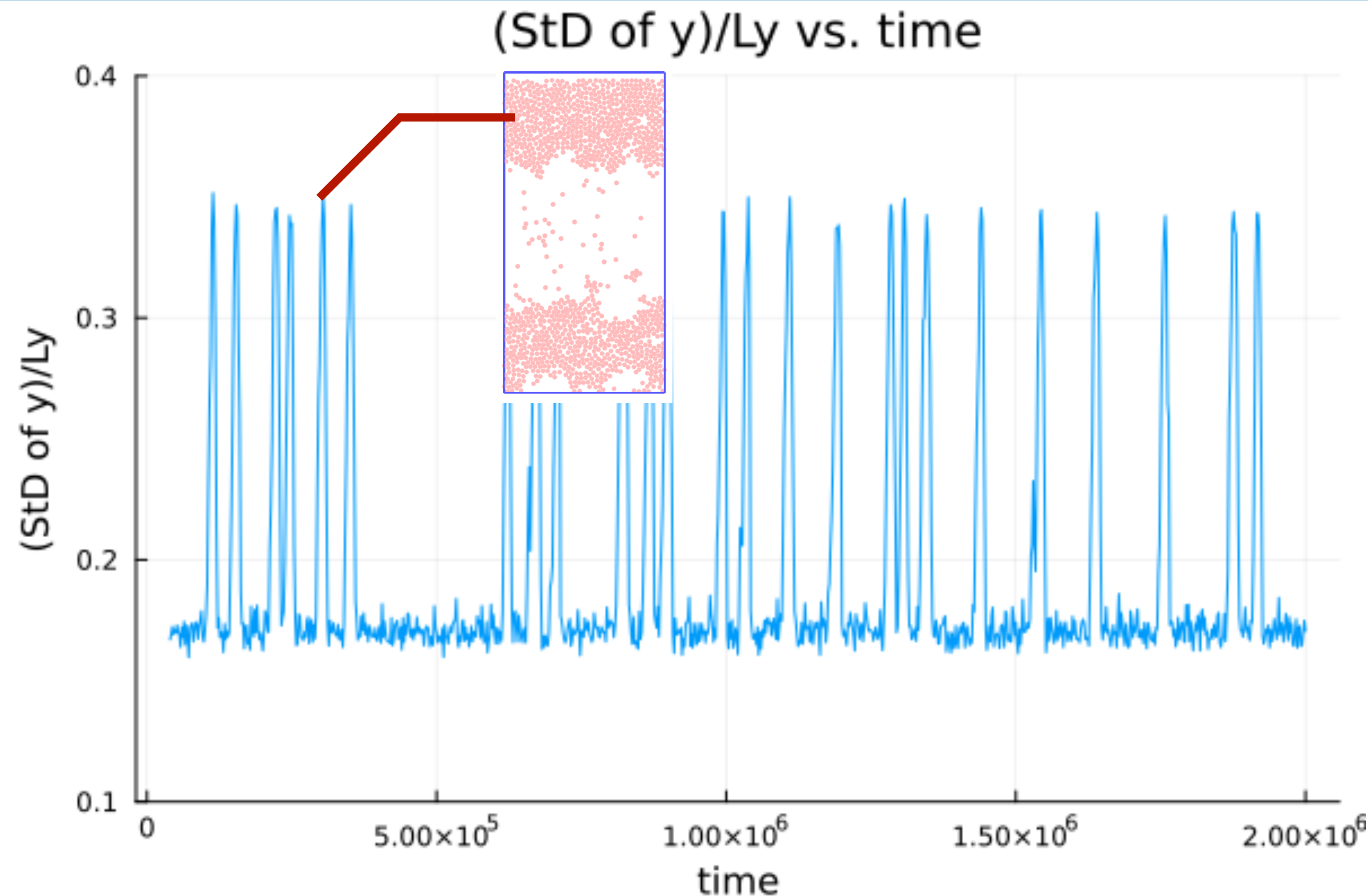
空間的なばらつき



$$\sigma_y(t) = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (y_i(t) - Y_g(t))^2}$$

実験と分析

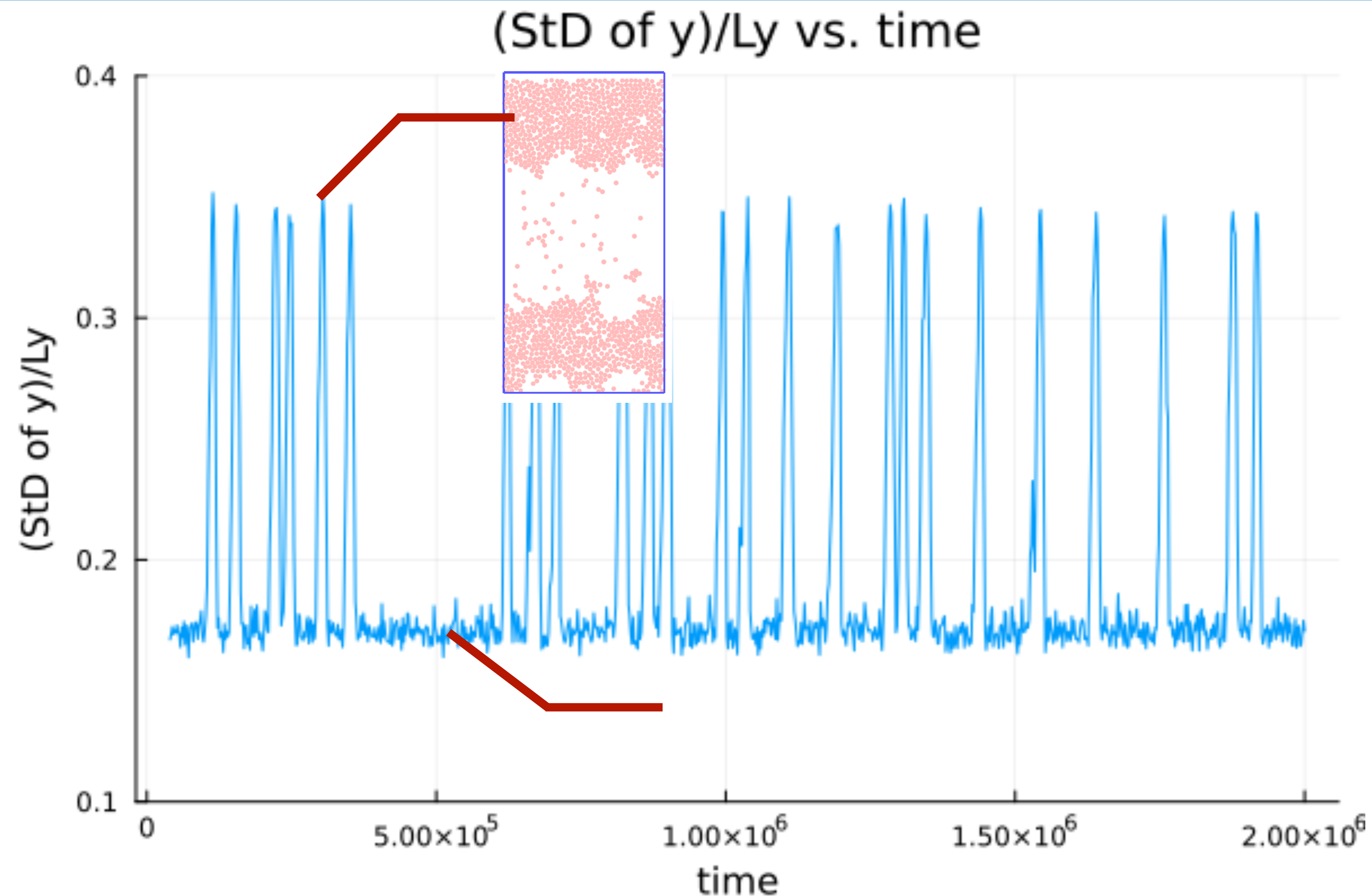
空間的なばらつき



$$\sigma_y(t) = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (y_i(t) - Y_g(t))^2}$$

実験と分析

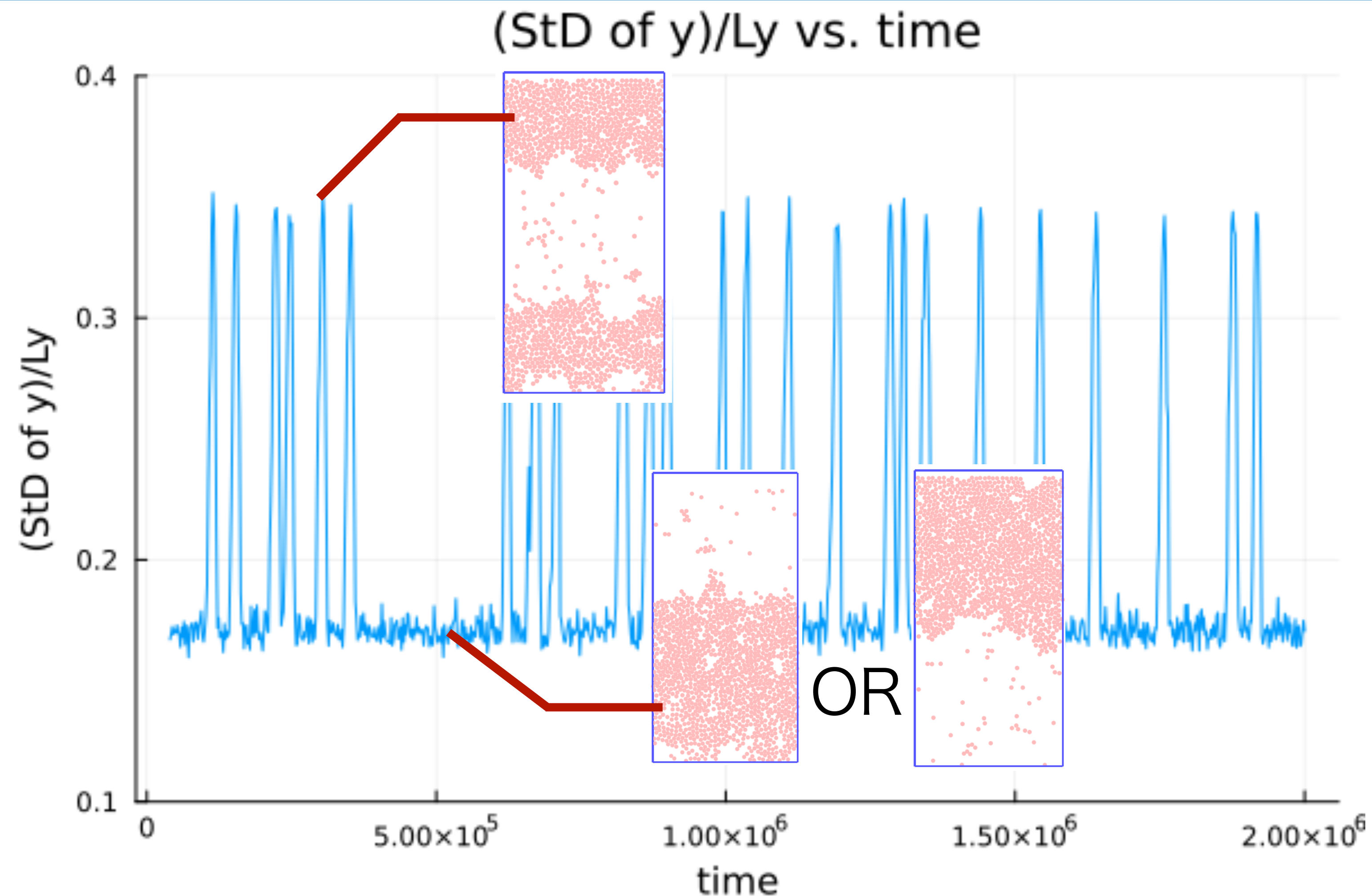
空間的なばらつき



$$\sigma_y(t) = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (y_i(t) - Y_g(t))^2}$$

実験と分析

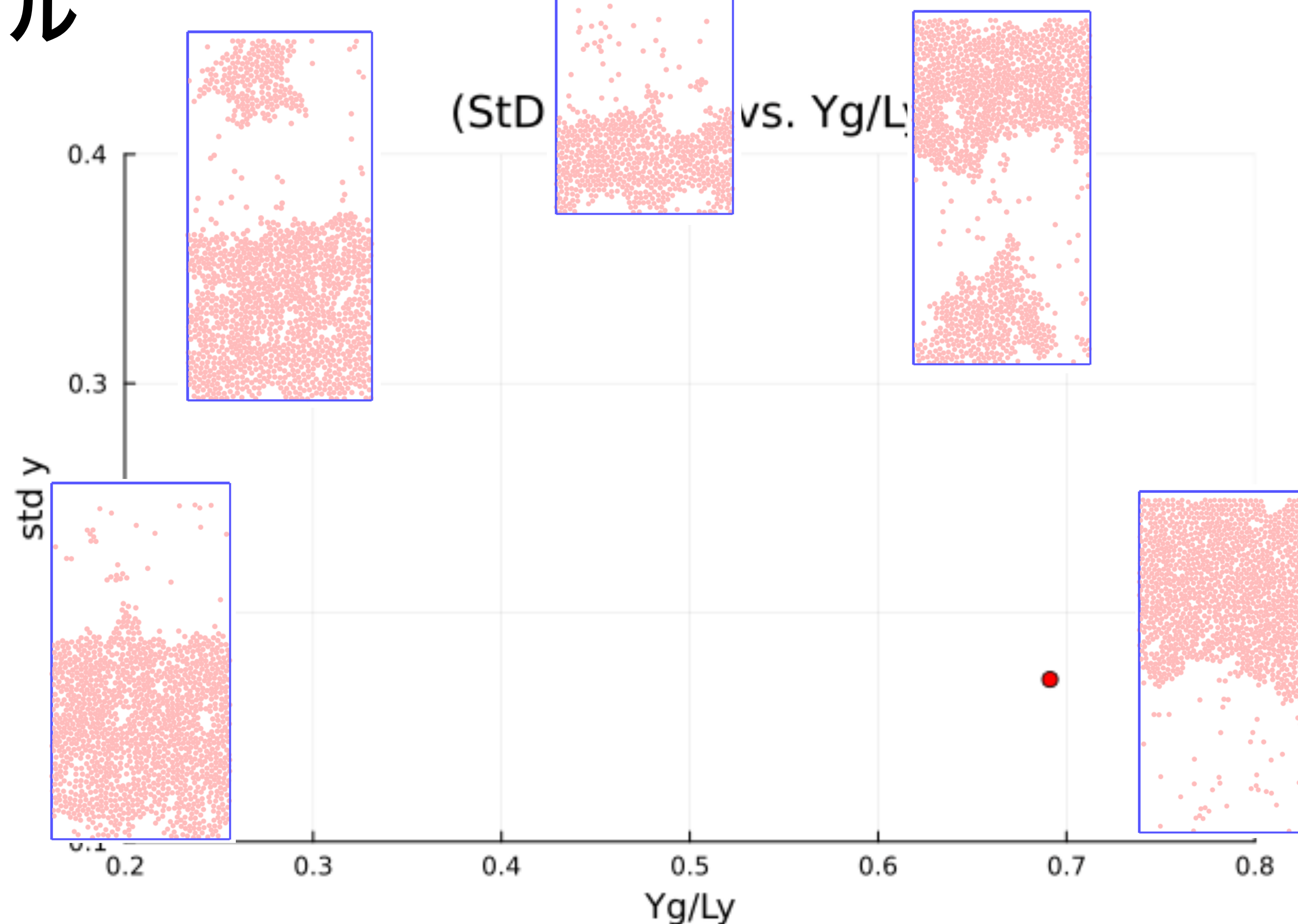
空間的なばらつき



$$\sigma_y(t) = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (y_i(t) - Y_g(t))^2}$$

実験と分析 リミットサイクル

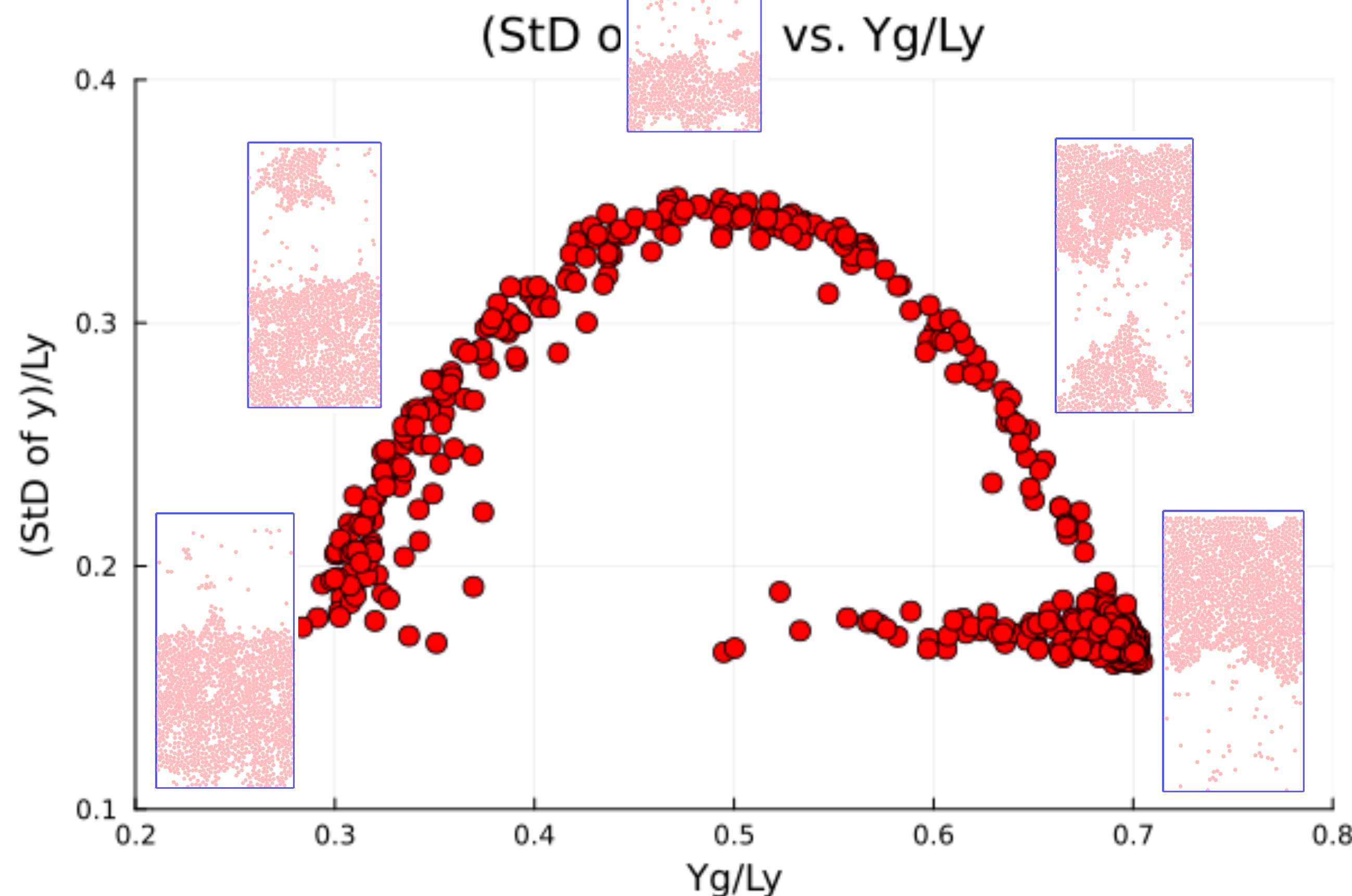
R_t : 膜の厚み, R_a : 引力幅



$$R_t = 0.5, R_a = 1.8775$$

実験と分析 リミットサイクル

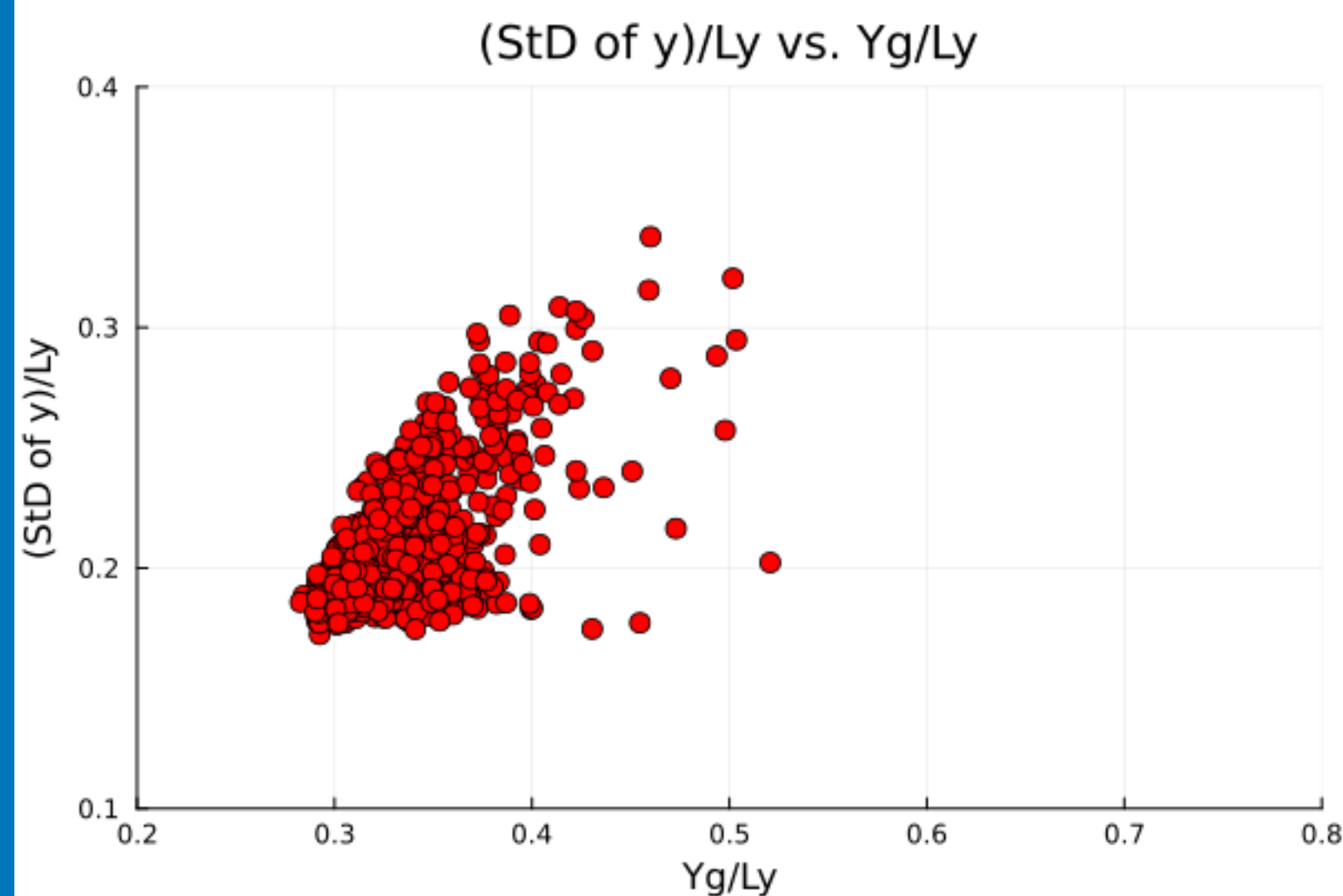
R_t : 壁の厚み, R_a : 引力幅



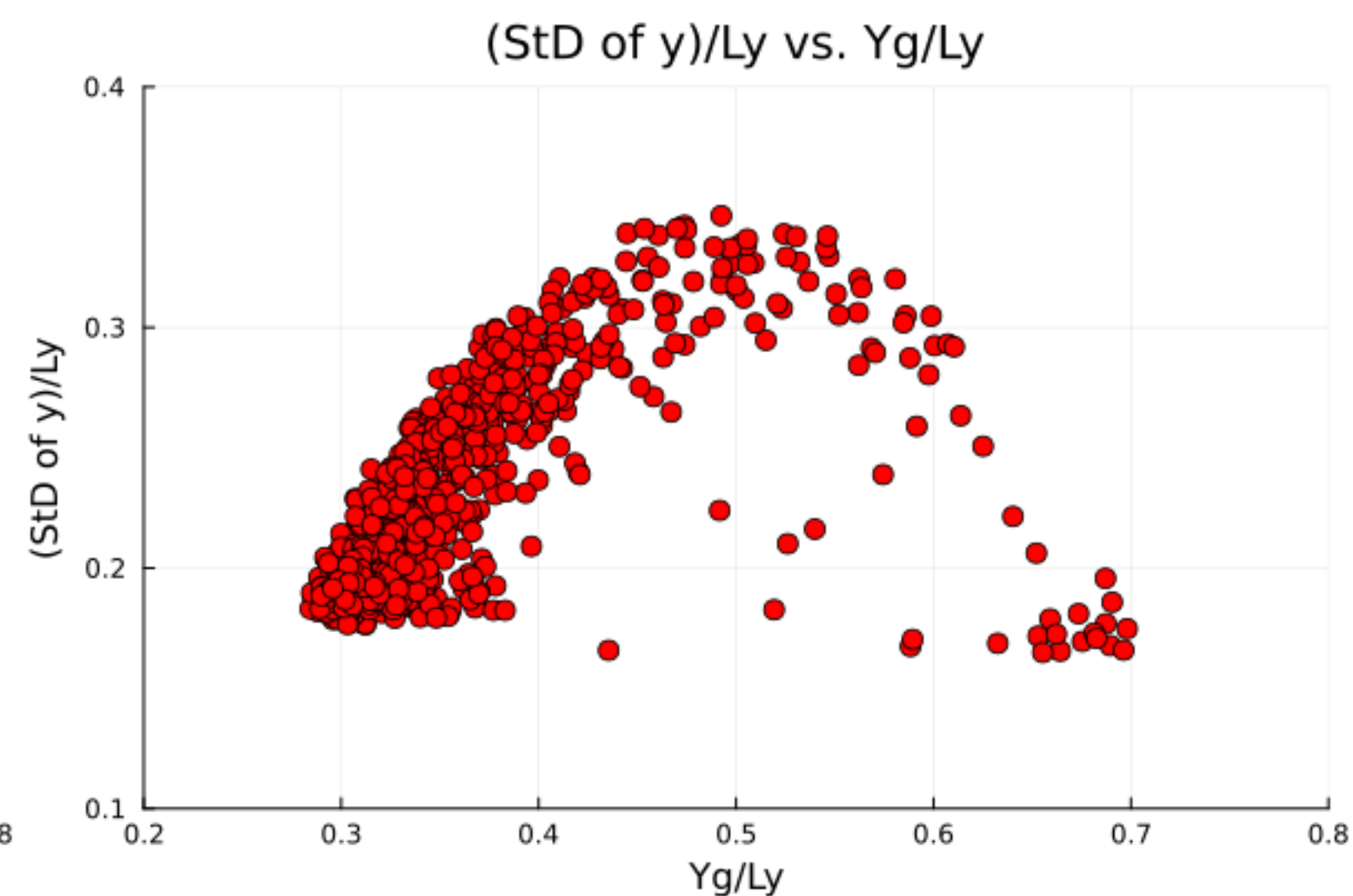
$$R_t = 0.5, R_a = 1.8775$$

実験と分析

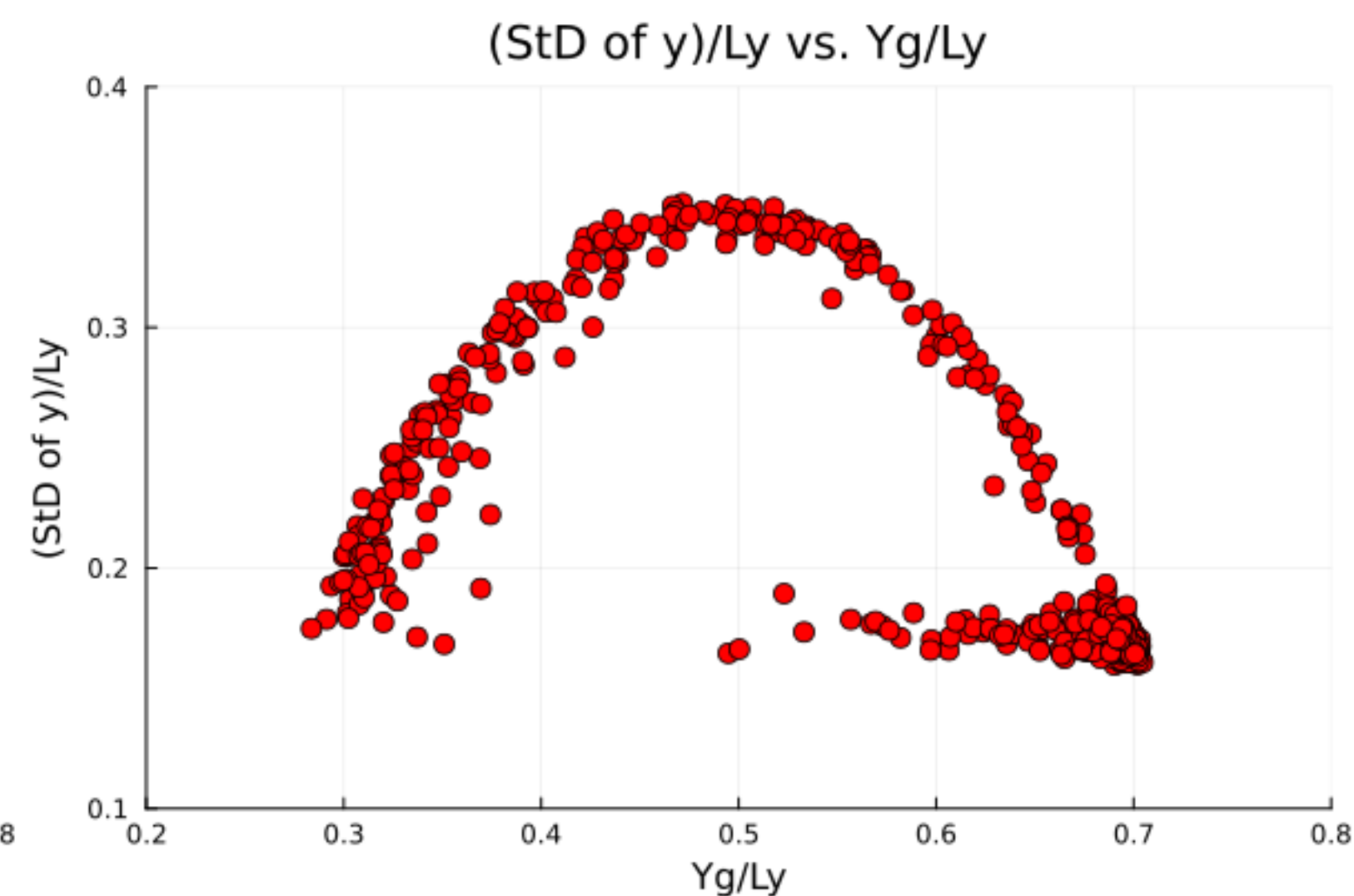
リミットサイクル



$$R_t = 0.0, R_a = 1.8775$$



$$R_t = 0.125, R_a = 1.8775$$



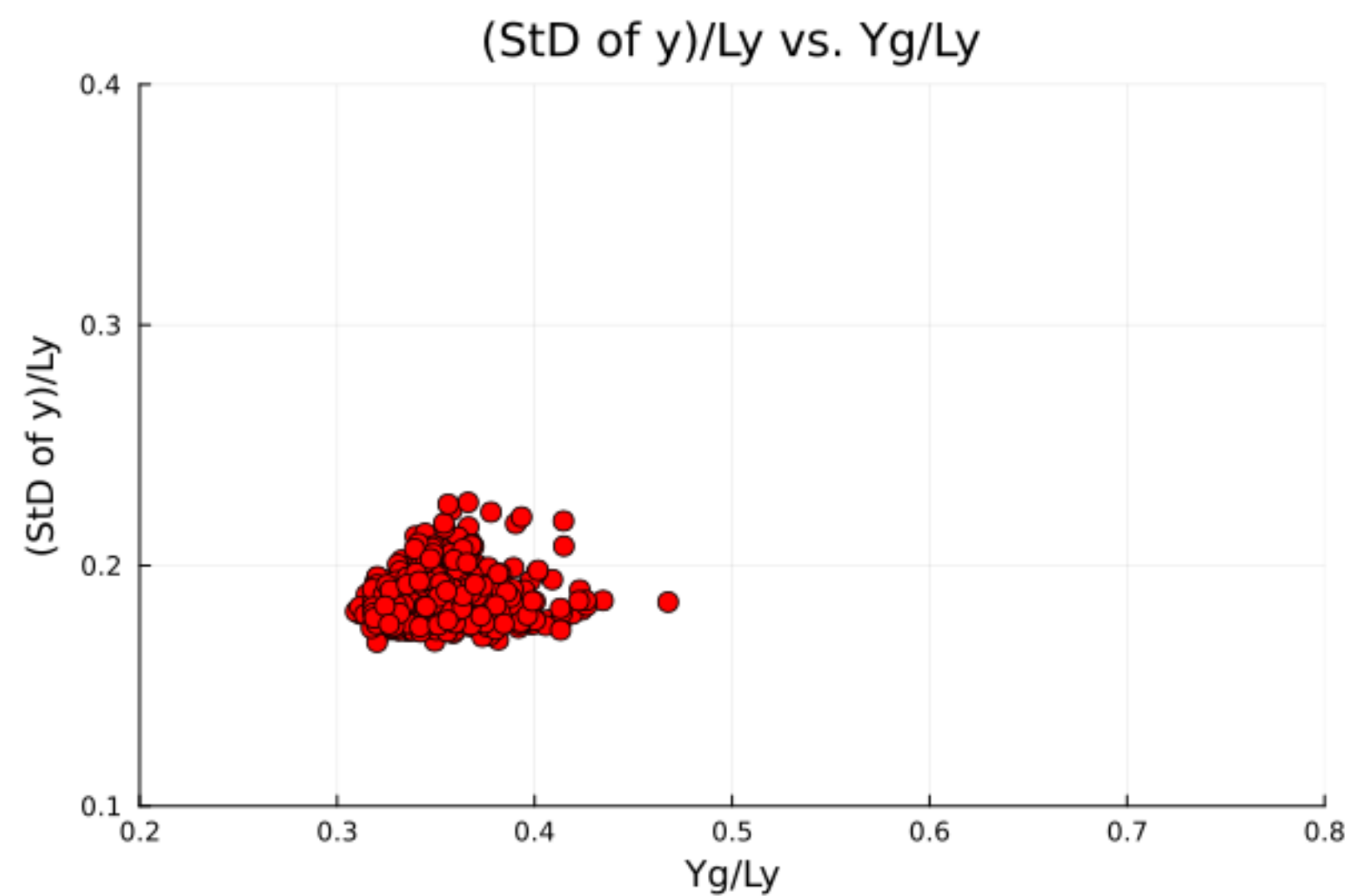
$$R_t = 0.5, R_a = 1.8775$$



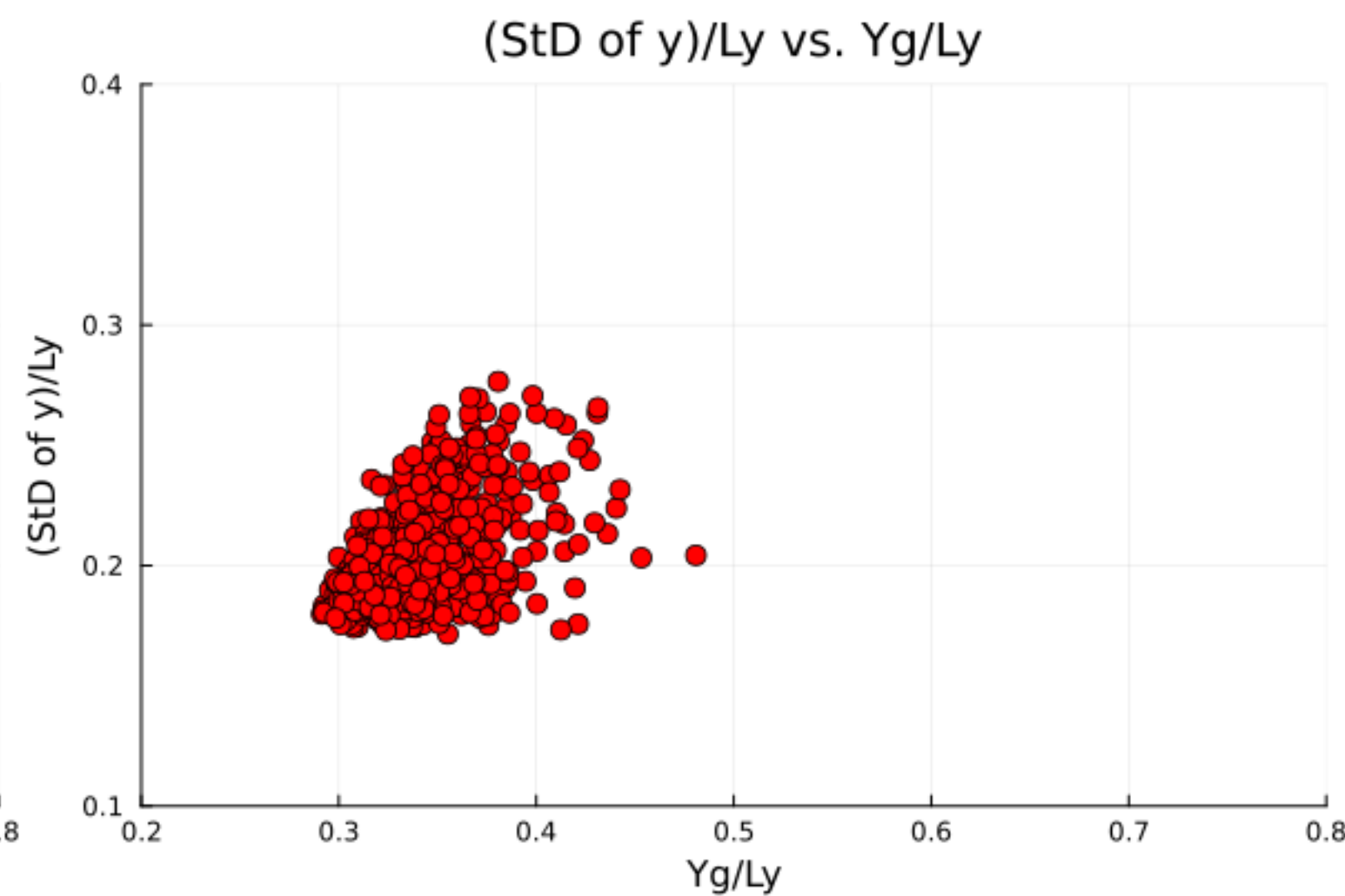
R_t : 壁の厚み

実験と分析

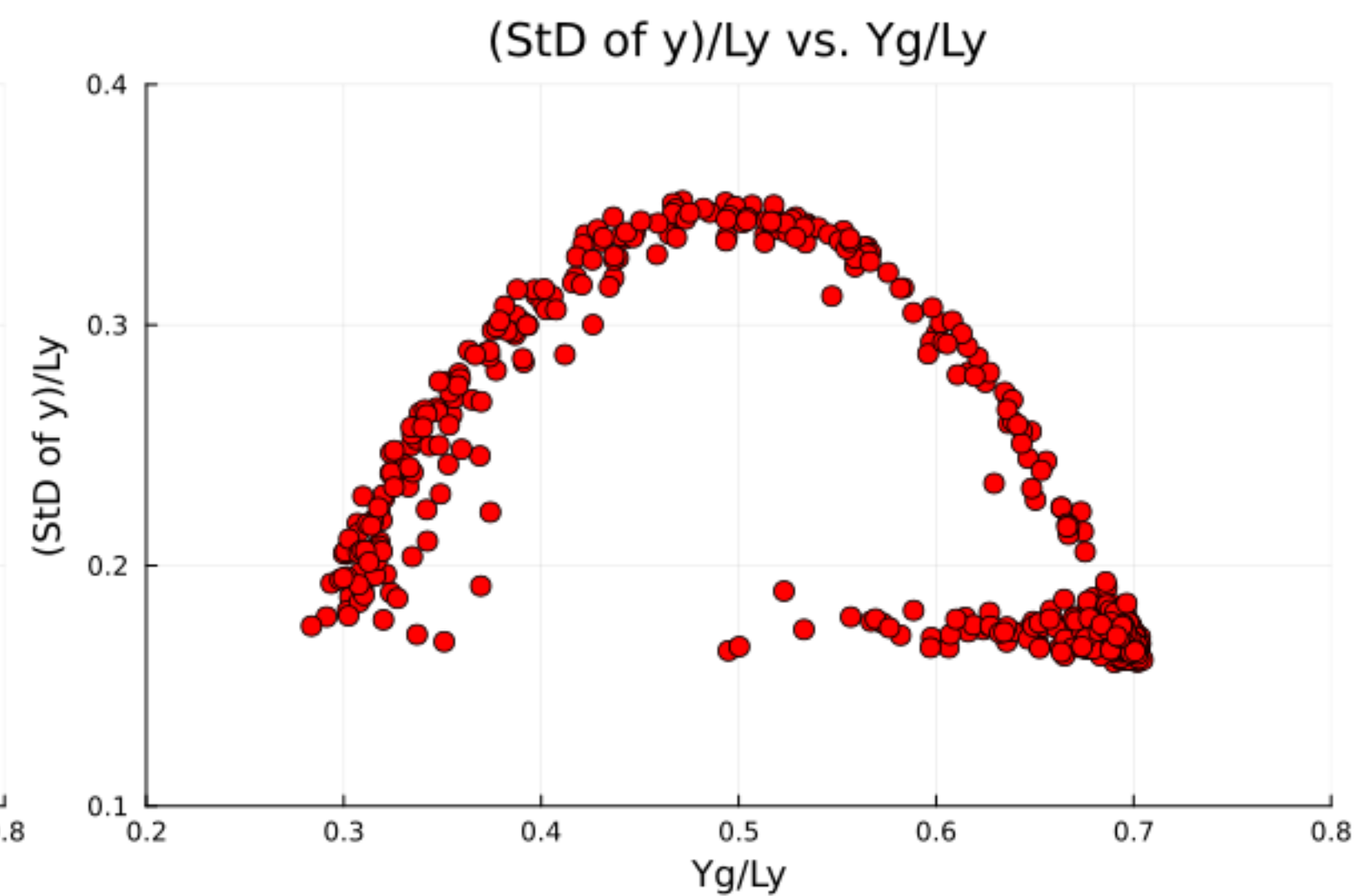
リミットサイクル



$$R_t = 0.5, R_a = 0.0$$



$$R_t = 0.5, R_a = 0.4694$$



$$R_t = 0.5, R_a = 1.8775$$



R_a : 引力幅

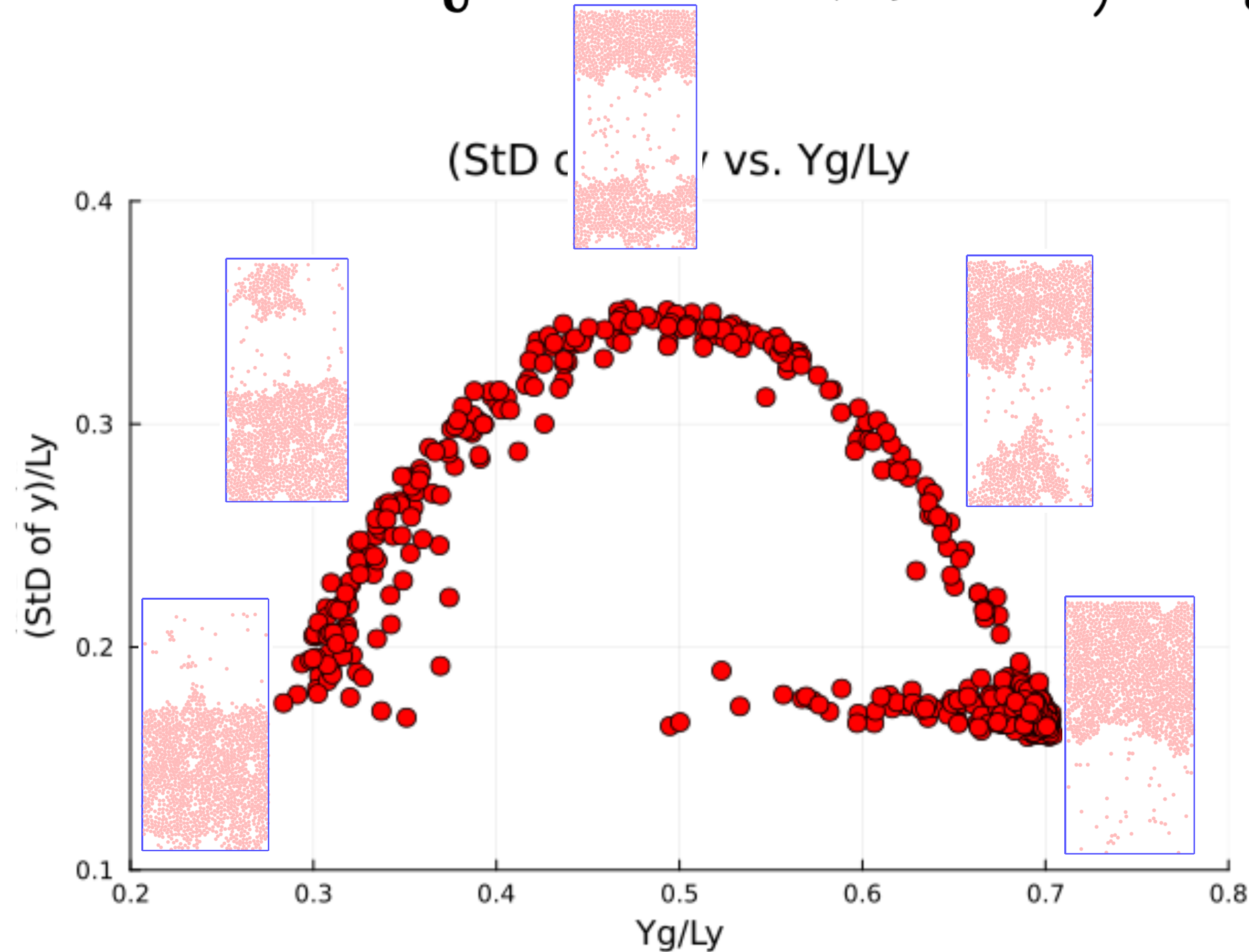
壁の濡れ性が誘起する, 重力と熱流をかけた流体系のダイナミクスの変化

目次

- ・ 背景と先行研究
- ・ 系の設定
 - ・ 図解
 - ・ 熱流
 - ・ 粒子-粒子間の相互作用
- ・ ハミルトニアン
 - ・ 結論
 - ・ 壁ポテンシャル
- ・ 実験と分析
 - ・ 濡れ性
 - ・ パラメータ
 - ・ 重心位置
 - ・ 空間的なばらつき
 - ・ リミットサイクル
- ・ まとめ
- ・ 今後の展望

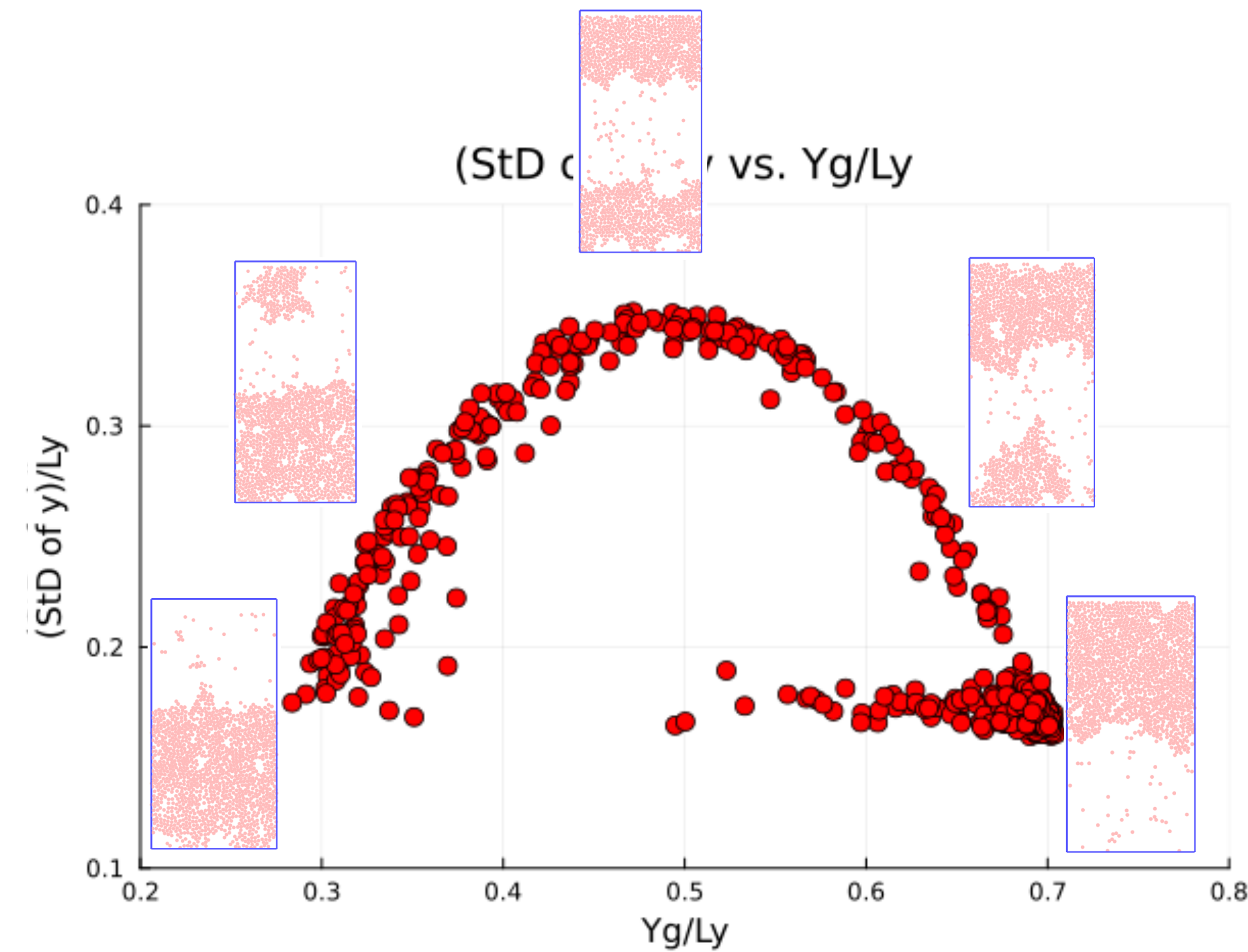
まとめ

R_t : 壁の厚み, R_a : 引力幅



$$R_t = 0.5, R_a = 1.8775$$

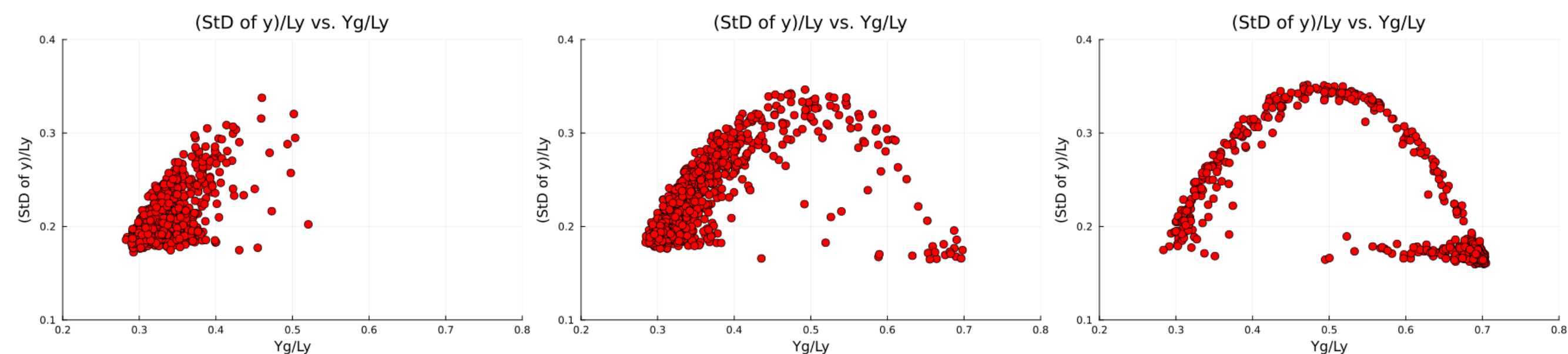
まとめ



$$R_t = 0.5, R_a = 1.8775$$

- 流体系が液滴を形成しつつ、上壁に吸着しきるまでのスピードは、液体の落下のスピードよりもゆっくりであり、それは、流体系の重心位置と空間的なばらつきの半円のリミットサイクルからも見てとれる。
- サイクルが閉じているとき、非定常で周期的なダイナミクスは現れている。

まとめ



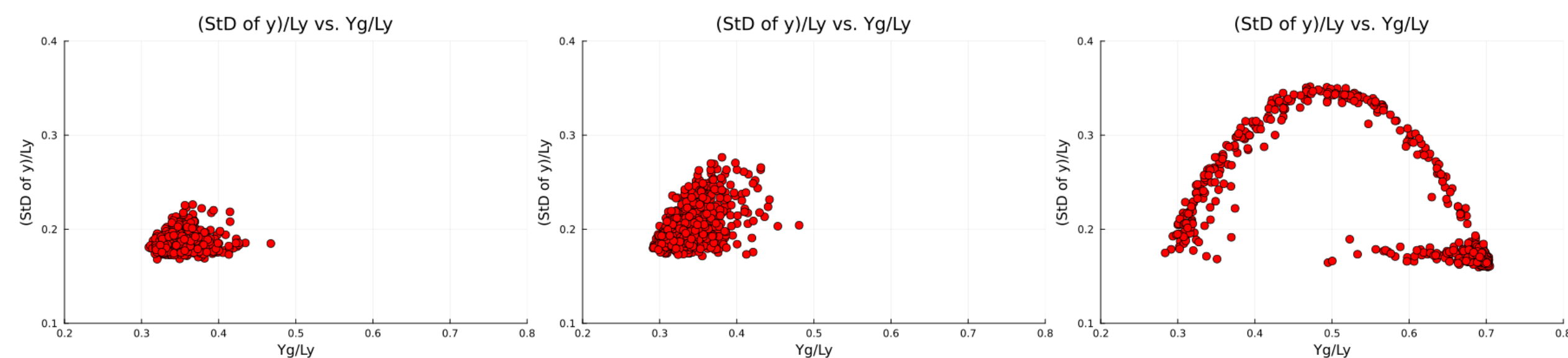
$$R_t = 0.0, R_a = 1.8775$$

$$R_t = 0.125, R_a = 1.8775$$

$$R_t = 0.5, R_a = 1.8775$$



R_t : 壁の厚み



$$R_t = 0.5, R_a = 0.0$$

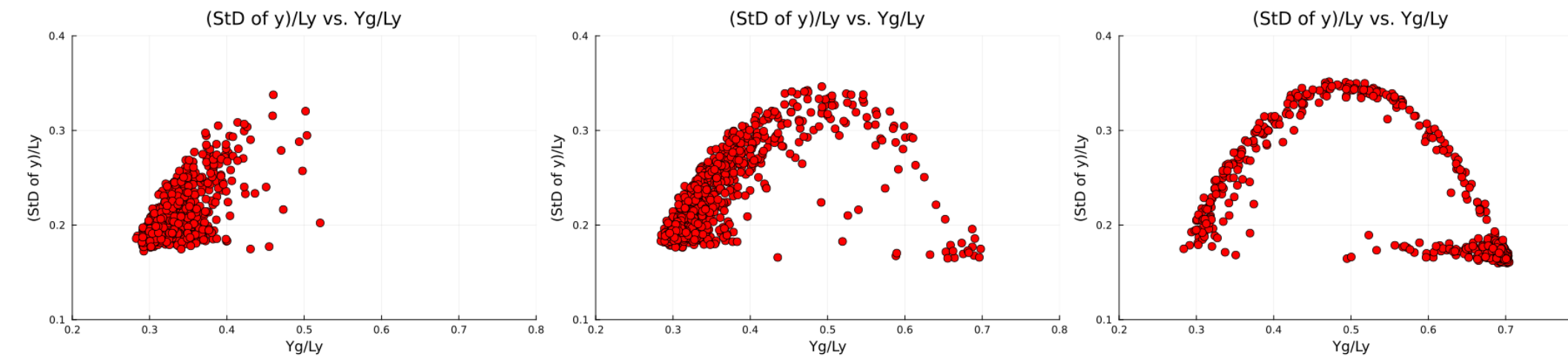
$$R_t = 0.5, R_a = 0.4694$$

$$R_t = 0.5, R_a = 1.8775$$



R_a : 引力幅

まとめ

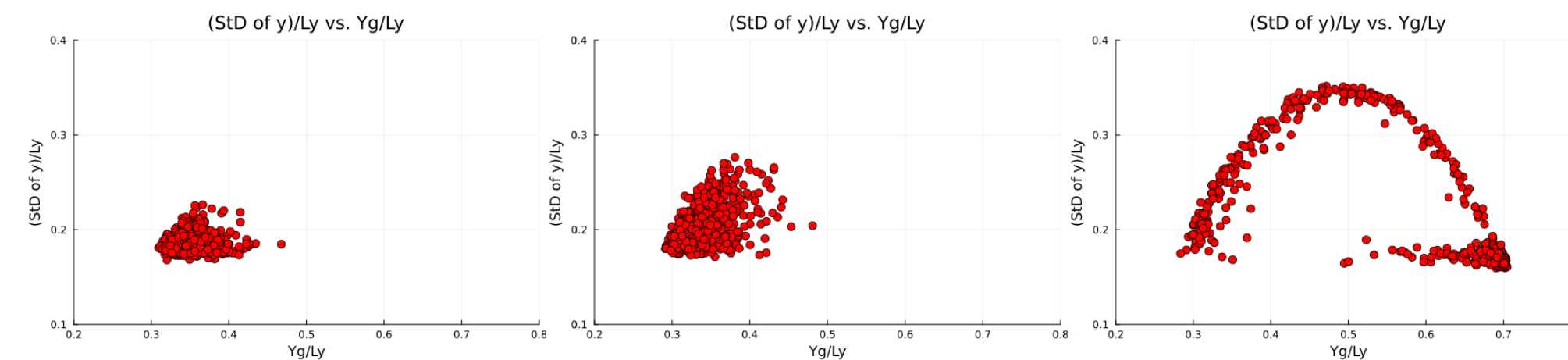


$$R_t = 0.0, R_a = 1.8775$$

$$R_t = 0.125, R_a = 1.8775$$

$$R_t = 0.5, R_a = 1.8775$$

R_t : 壁の厚み



$$R_t = 0.5, R_a = 0.0$$

$$R_t = 0.5, R_a = 0.4694$$

$$R_t = 0.5, R_a = 1.8775$$

R_a : 引力幅

- 壁ポテンシャルの濡れ性を強くすると, サイクルははっきりと現れ, それは, 流体系の重心位置のダイナミクスが激しくなっていることを意味する.

まとめ

- 流体系が液滴を形成しつつ, 上壁に吸着しきるまでのスピードは, 液体の落下のスピードよりもゆっくりであり, それは, 流体系の重心位置と空間的なばらつきの半円のリミットサイクルからも見てとれる.
 - サイクルが閉じているとき, 非定常で周期的なダイナミクスは現れている.
-
- 壁ポテンシャルの濡れ性を強くすると, サイクルははっきりと現れ, それは, 流体系の重心位置のダイナミクスが激しくなっていることを意味する.

今後の展望

- 系のシステムサイズを大きくする.
1250粒子(今ここ)→5000粒子, 20000粒子…
- 熱流だけをかけた系と比べることで, スケールサイズが原因の揺らぎがどの程度占めるのかを考察する.
- ポテンシャルの深さ: ε^{wall} についてのパラメータも設定して実験をする.

謝辞

ご清聴

ありがとうございました

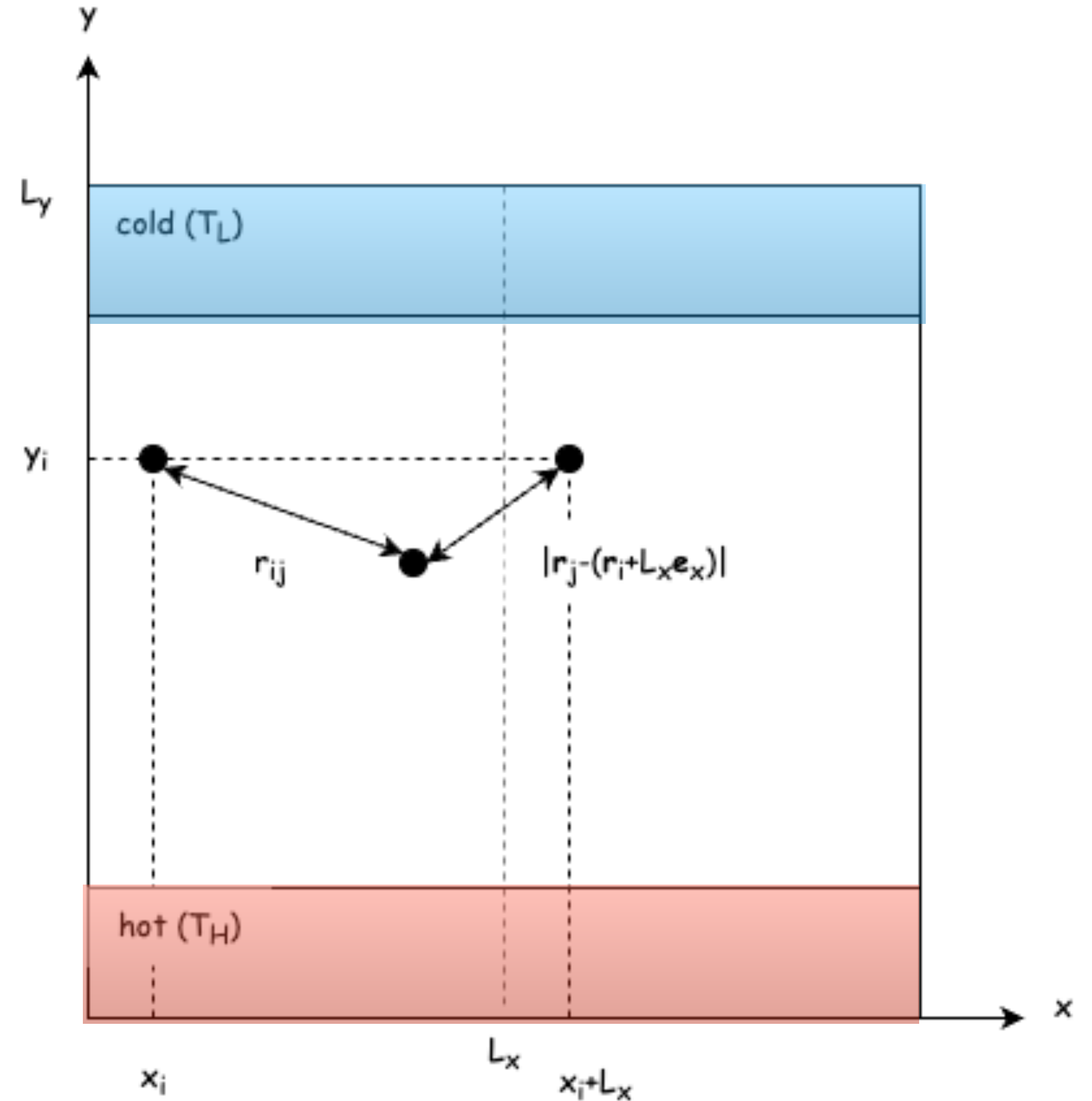
サブスライド 目次

- ・ 定常状態
- ・ 最近接イメージ規約
- ・ 実現可能性

最近接イメージ規約

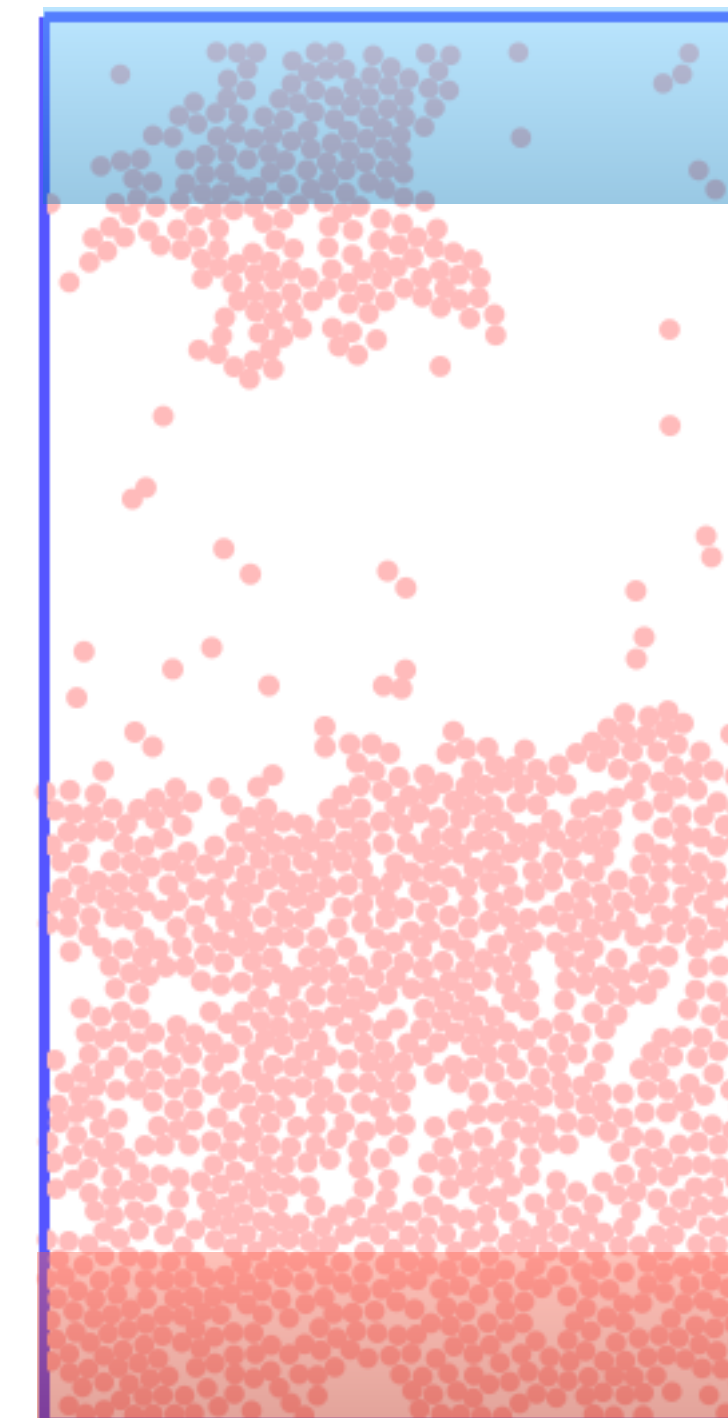
- 粒子間相互作用

$$\sum_{i=1}^N \sum_{j>i}^N \phi_{\text{LJ}}^{\text{pair}}(r_{ij})$$



実現可能性

- 2次元 Xe(キセノン)
- $g = 9.8 \text{ [m/s}^2\text{]}$
- $L_y = 4.718\text{[cm]}$
- $T_H = 104.4\text{[K]} = -169\text{[}^\circ\text{C]}$
- $T_L = 95.12\text{[K]} = -178\text{[}^\circ\text{C]}$



定常状態

- ・ 定常状態になる時間を探る.
- ・ 重力と熱流をかけるタイミングをずらした系と比較して, 定常状態になるまでの時間を考えたい.