

イナ 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

- ・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

- ・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



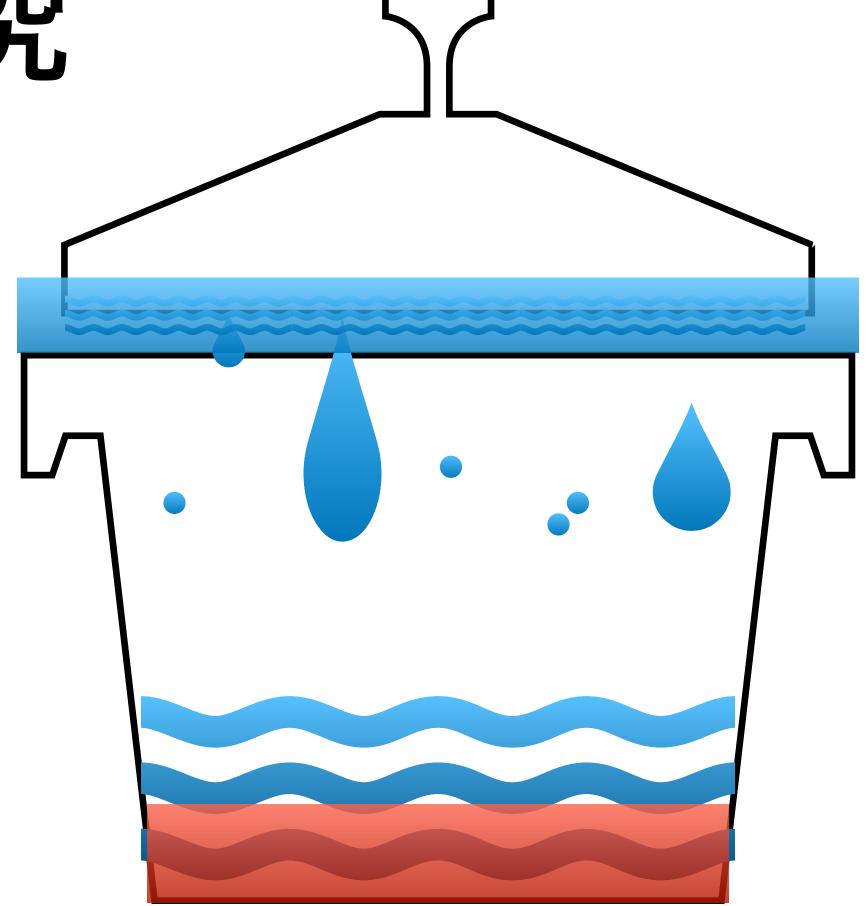
壁の濡れ性が誘起する,重力と熱流をかけた流体系のダイナミクスの変化

- ・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

茨城大学 Ibaraki University

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.

•
$$N = 1250$$

•
$$T_{\rm L} = 0.41$$

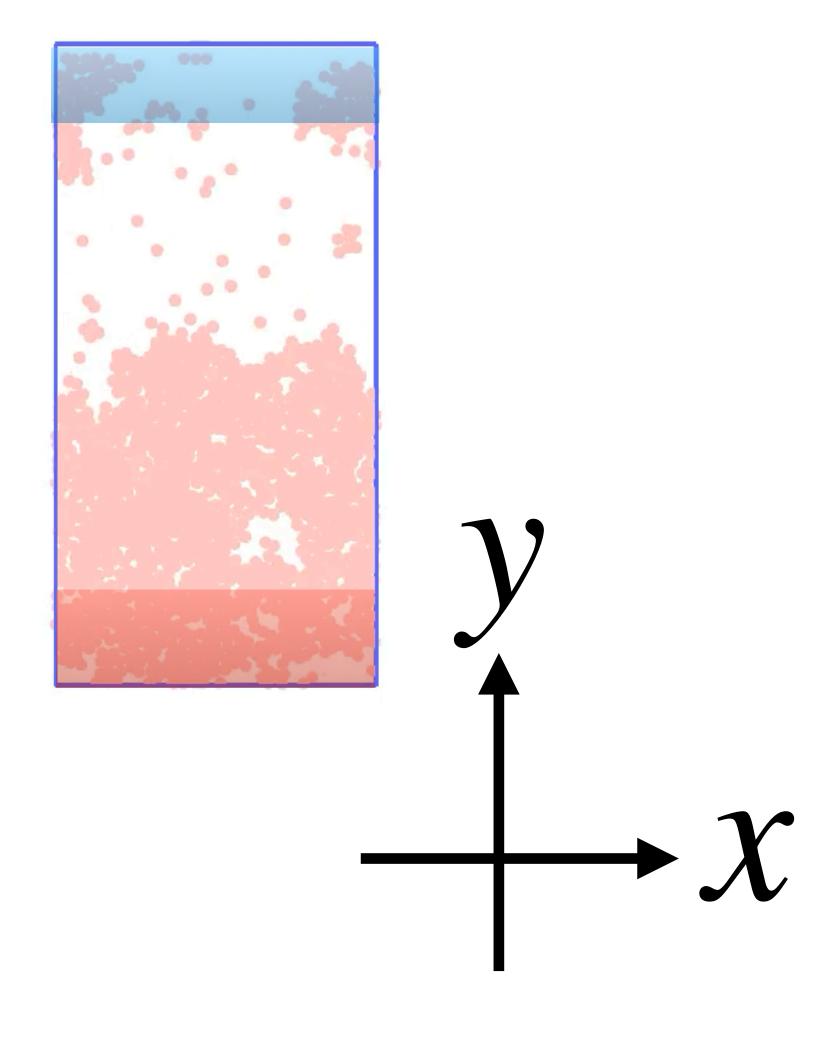
•
$$L_y = 80$$

•
$$L_y = 80$$
 • $T_{\rm H} = 0.45$

•
$$L_x: L_y = 1:2$$

•
$$L_x: L_y = 1:2$$
 • $mg = 4.0 \times 10^{-4}$

$$\chi \equiv \frac{k_{\rm B}(T_{\rm H} - T_{\rm L})}{mgL_y} \simeq 1$$





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

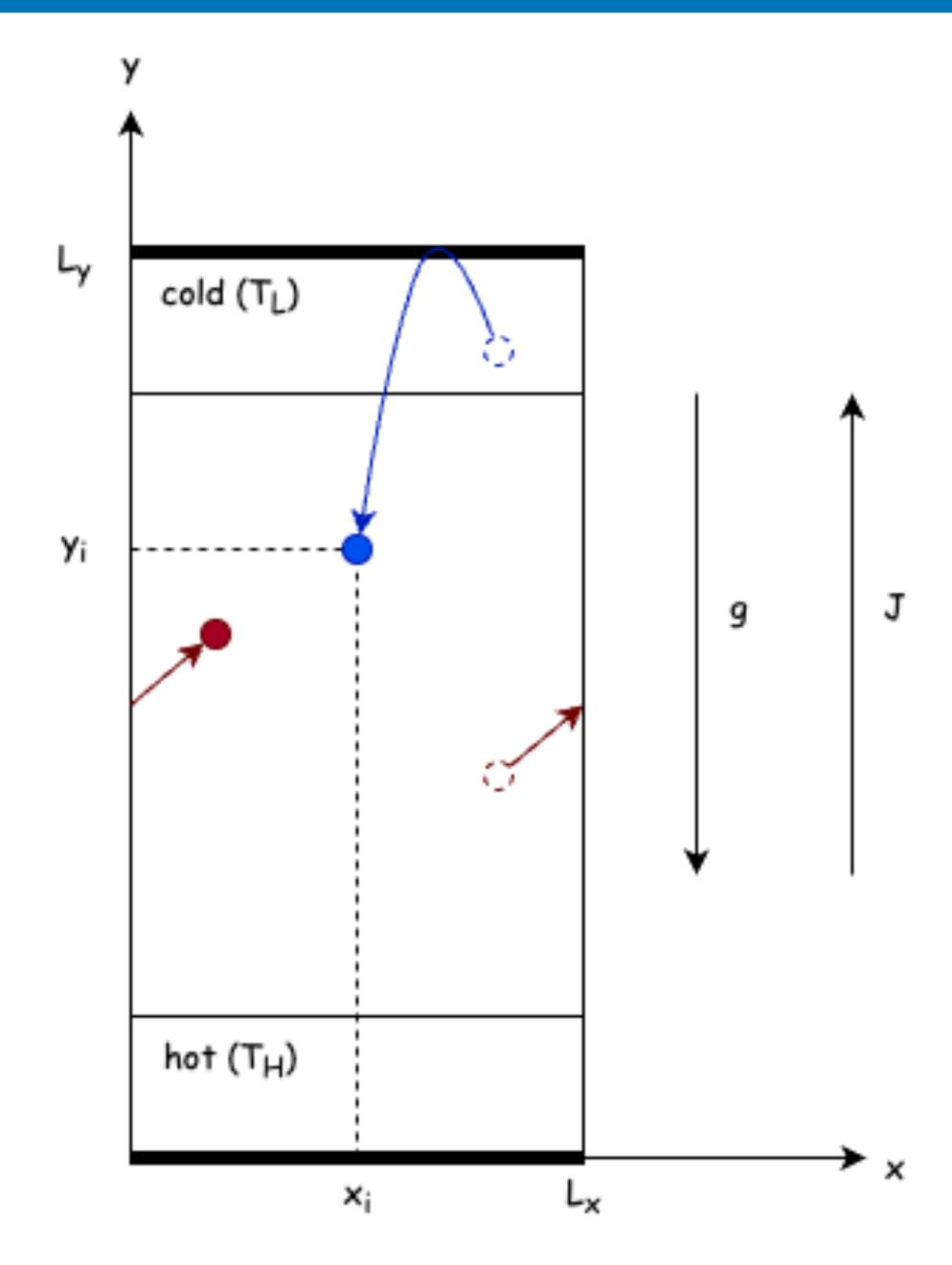
- ・背景と先行研究
- ・系の設定
 - 図解
 - 熱流
 - ・ 粒子-粒子間の相互作用
- ・ハミルトニアン
 - 結論
 - ・壁ポテンシャル

- ・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



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.

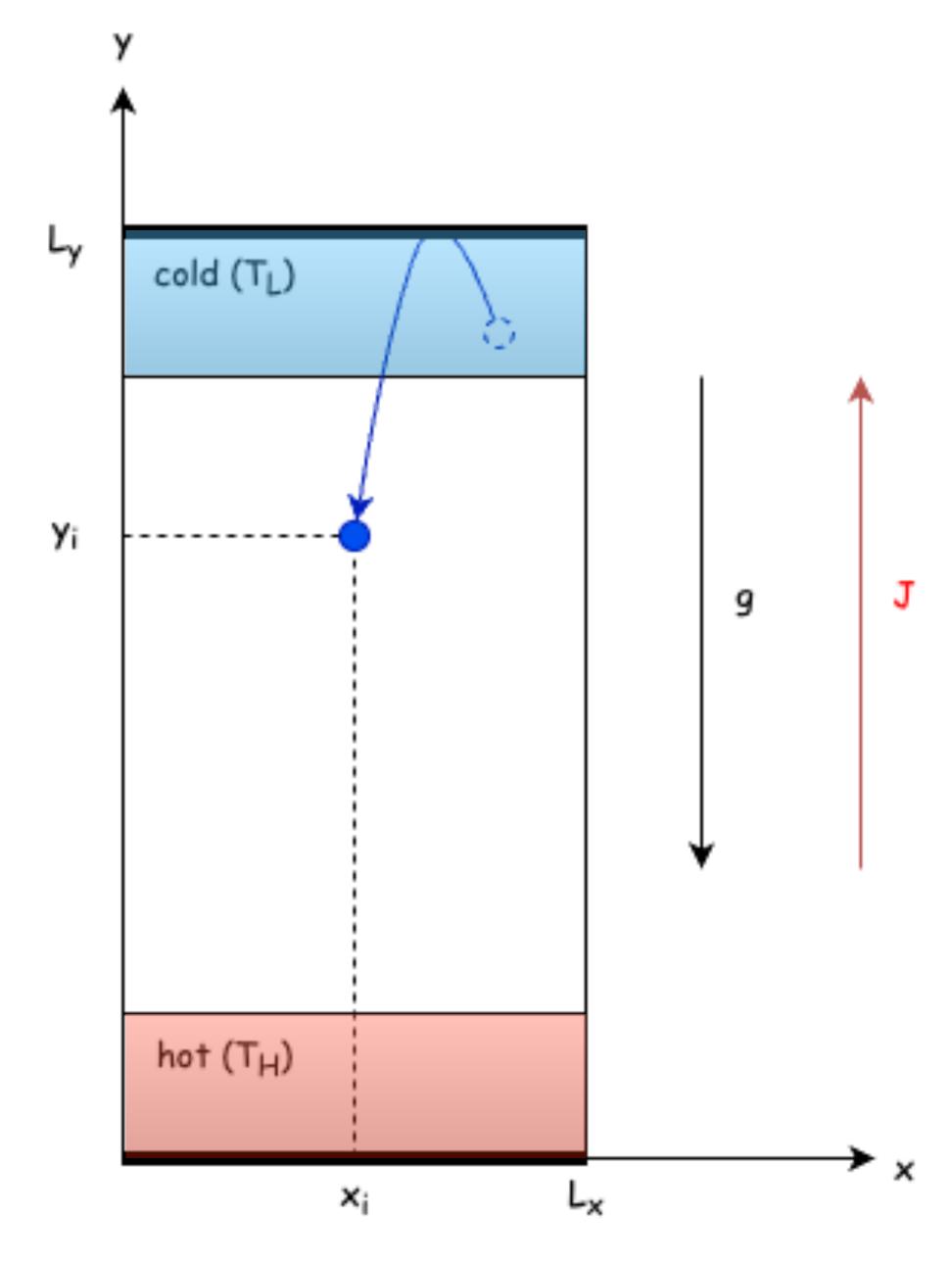


熱流

・ランジュバン方程式

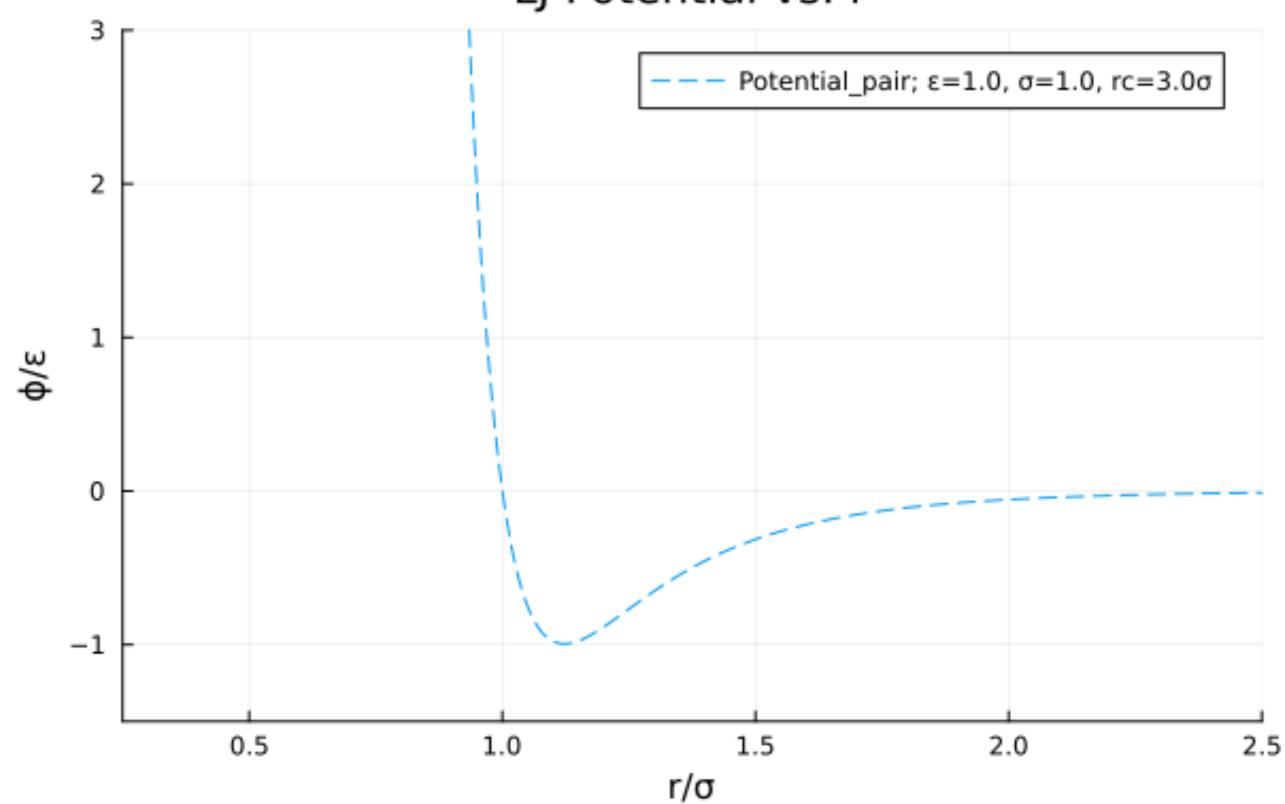
$$\dot{\boldsymbol{r}}_{i} = \frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{p}_{i}}
\dot{\boldsymbol{p}}_{i} = -\frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{r}_{i}} - \gamma \dot{\boldsymbol{r}}_{i} + \sqrt{2\gamma k_{\mathrm{B}} T_{\nu}} \boldsymbol{\xi}_{i}(t)
\langle \boldsymbol{\xi}_{i}^{a}(t) \rangle = 0
\langle \boldsymbol{\xi}_{i}^{a}(t) \boldsymbol{\xi}_{j}^{b}(t') \rangle = \delta_{i,j} \delta_{a,b} \delta(t - t')$$

$$\gamma(y_i) = 1. \ T_{\nu}(y_i) = T_{\rm H}. \ (0 < y_i < 8\sigma)$$
 $\gamma(y_i) = 1. \ T_{\nu}(y_i) = T_{\rm L}. \ (L_y - 8\sigma < y_i < L_y)$
 $\gamma(y_i) = 0. \ (8\sigma < y_i < L_y - 8\sigma)$

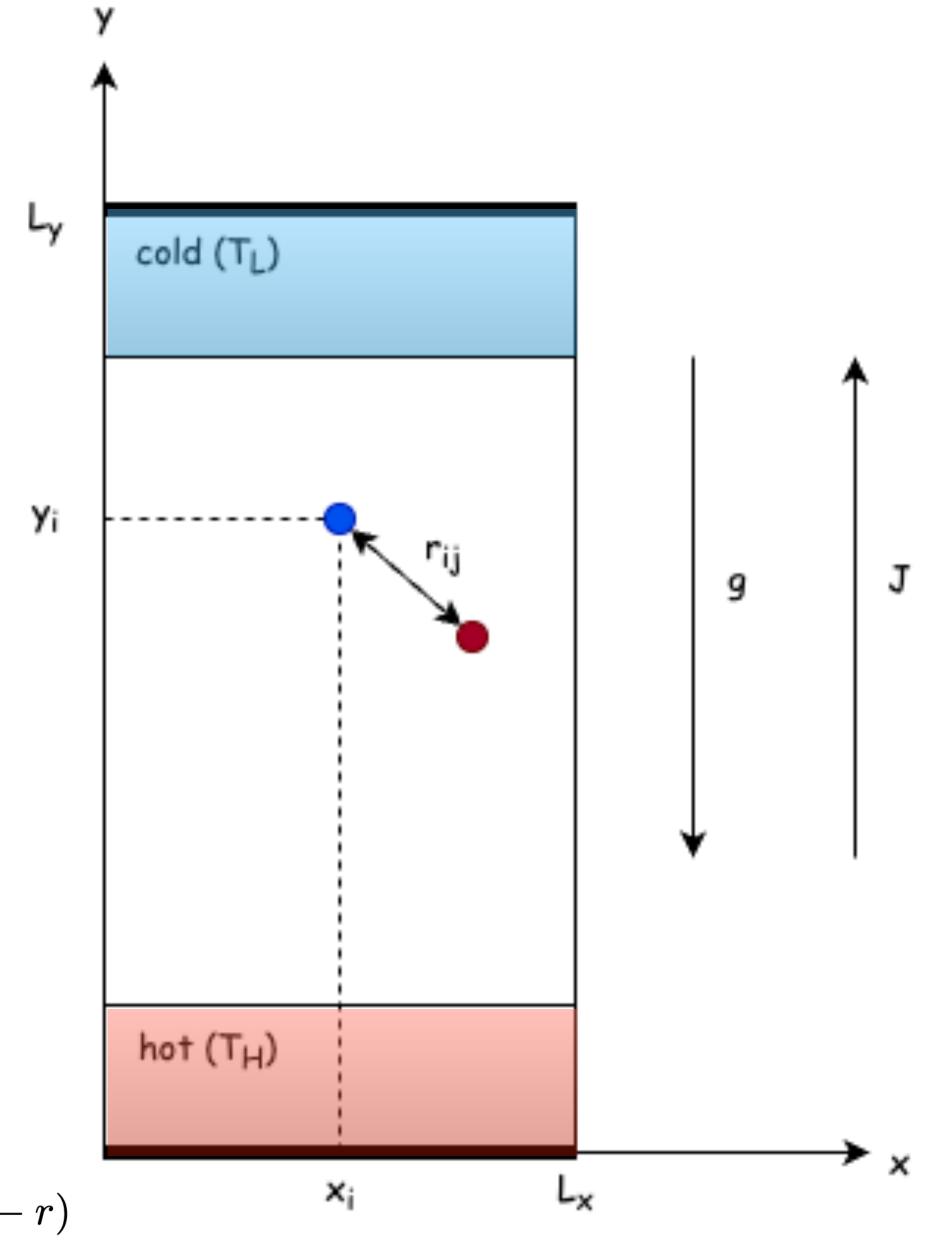


粒子-粒子間の相互作用



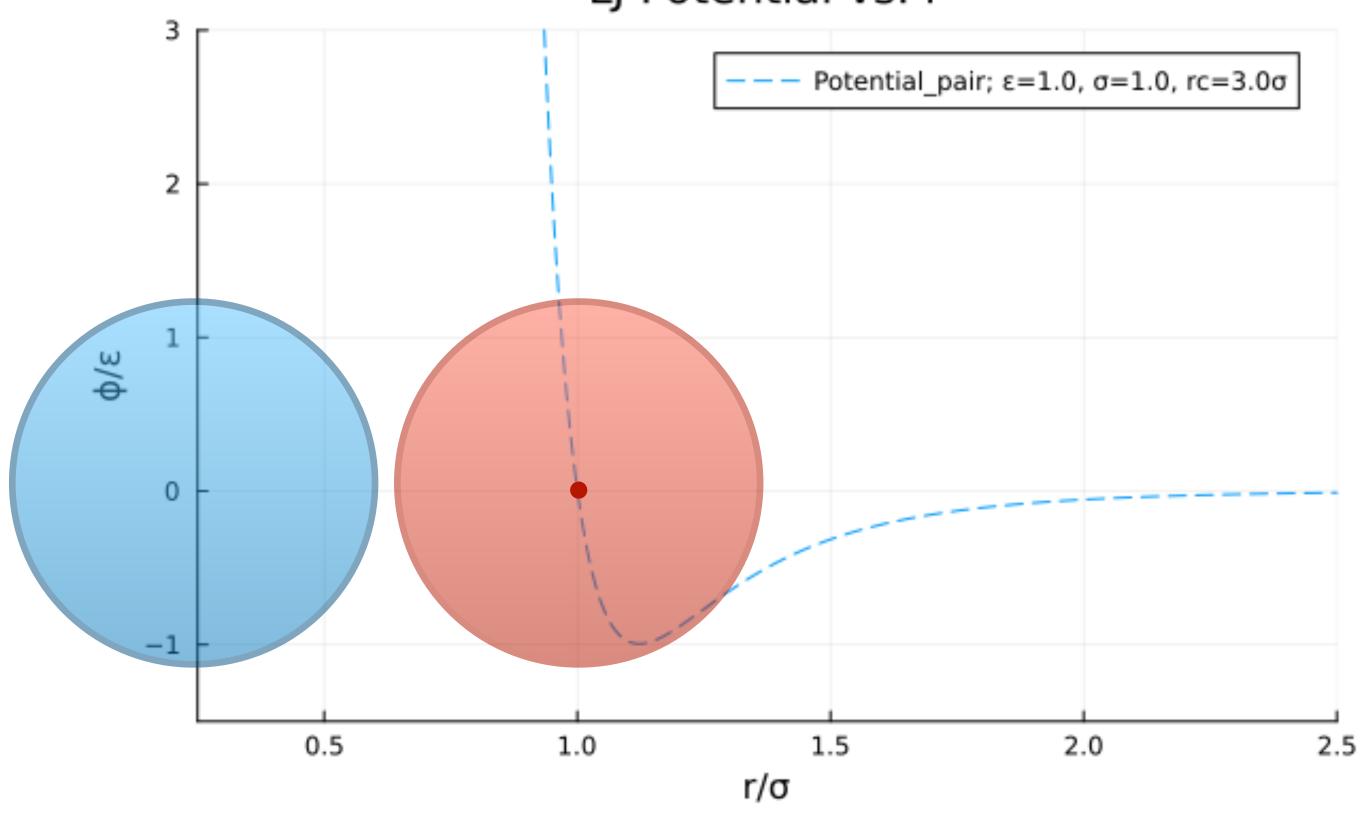


$$\tilde{\phi}_{\mathrm{LJ}}(r;arepsilon,\sigma,r_{\mathrm{cut}}) = \left\{4arepsilon \left[\left(rac{\sigma}{r}
ight)^{12} - \left(rac{\sigma}{r}
ight)^{6}
ight] - 4arepsilon \left[\left(rac{\sigma}{r_{\mathrm{cut}}}
ight)^{12} - \left(rac{\sigma}{r_{\mathrm{cut}}}
ight)^{6}
ight]
ight\} heta(r_{\mathrm{cut}}-r)$$

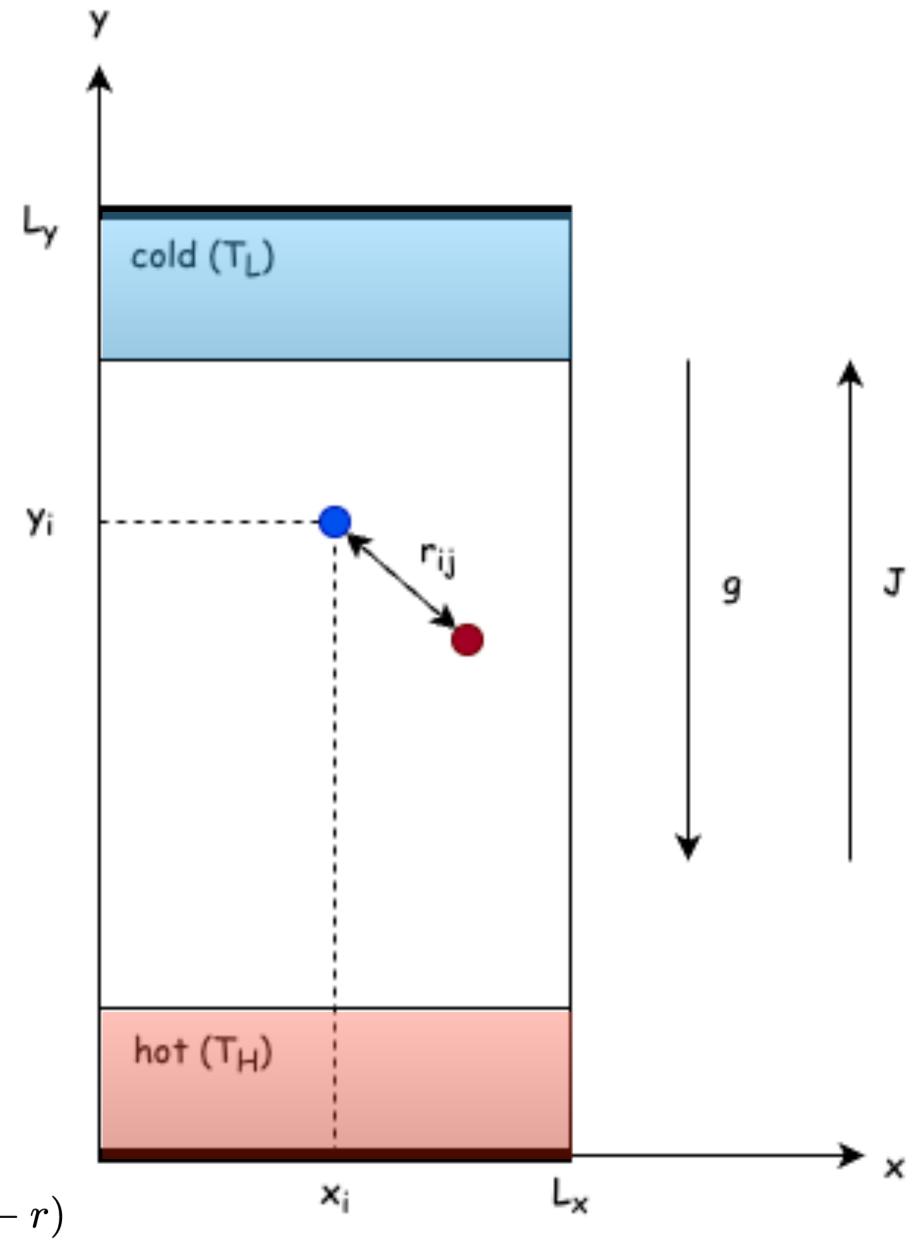


粒子-粒子間の相互作用



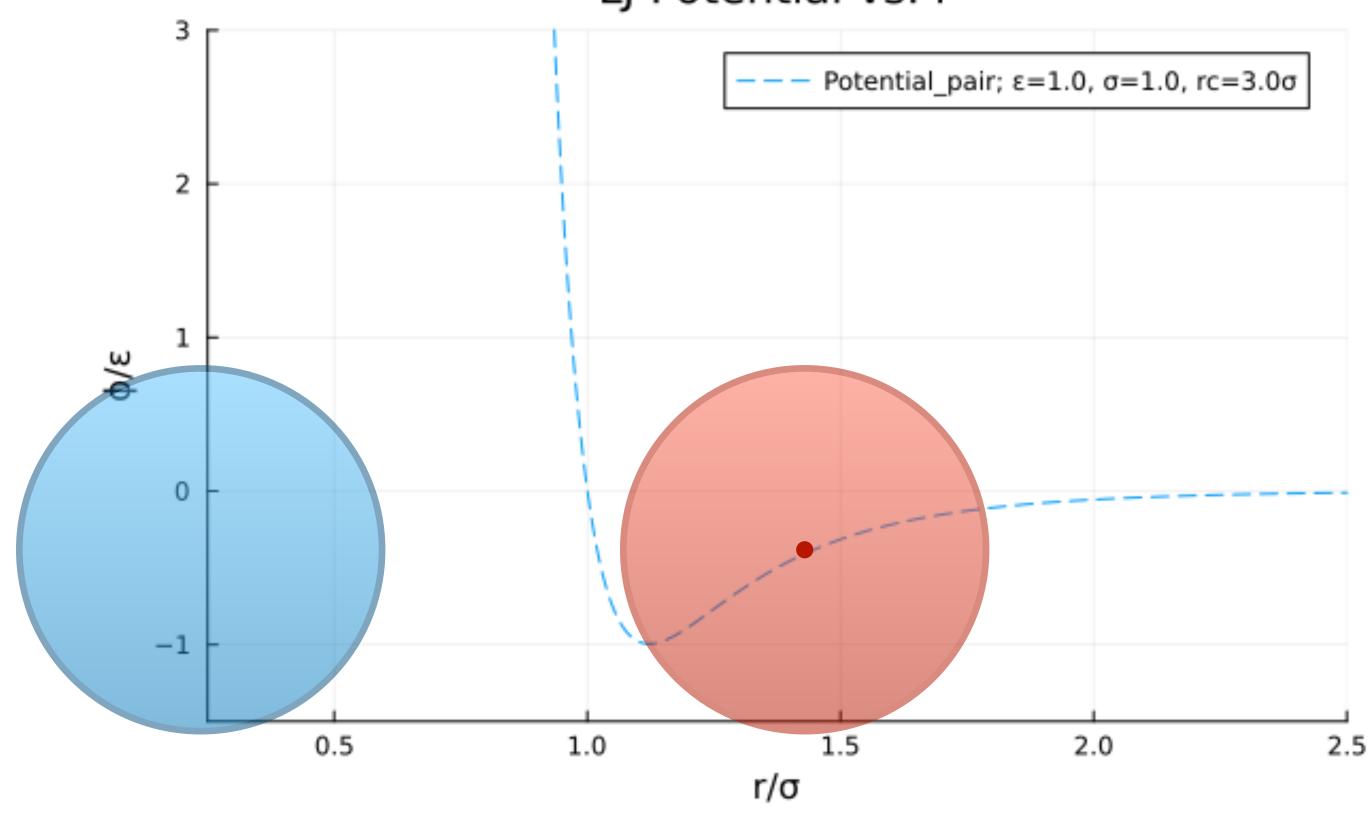


$$\tilde{\phi}_{\rm LJ}(r;\varepsilon,\sigma,r_{\rm cut}) = \left\{ 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^{6} \right] - 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r_{\rm cut}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{\rm cut}} \right)^{6} \right] \right\} \theta(r_{\rm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

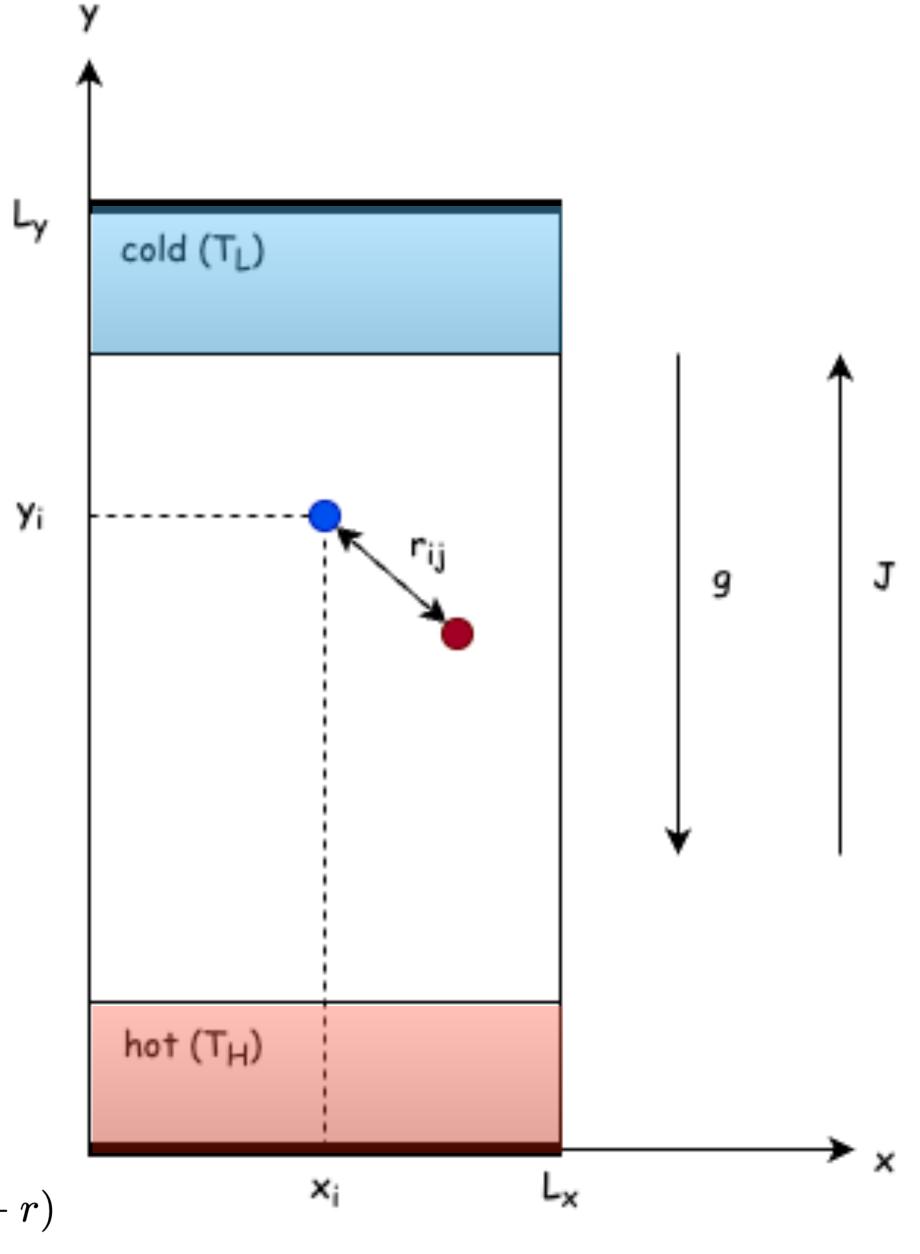


粒子-粒子間の相互作用





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

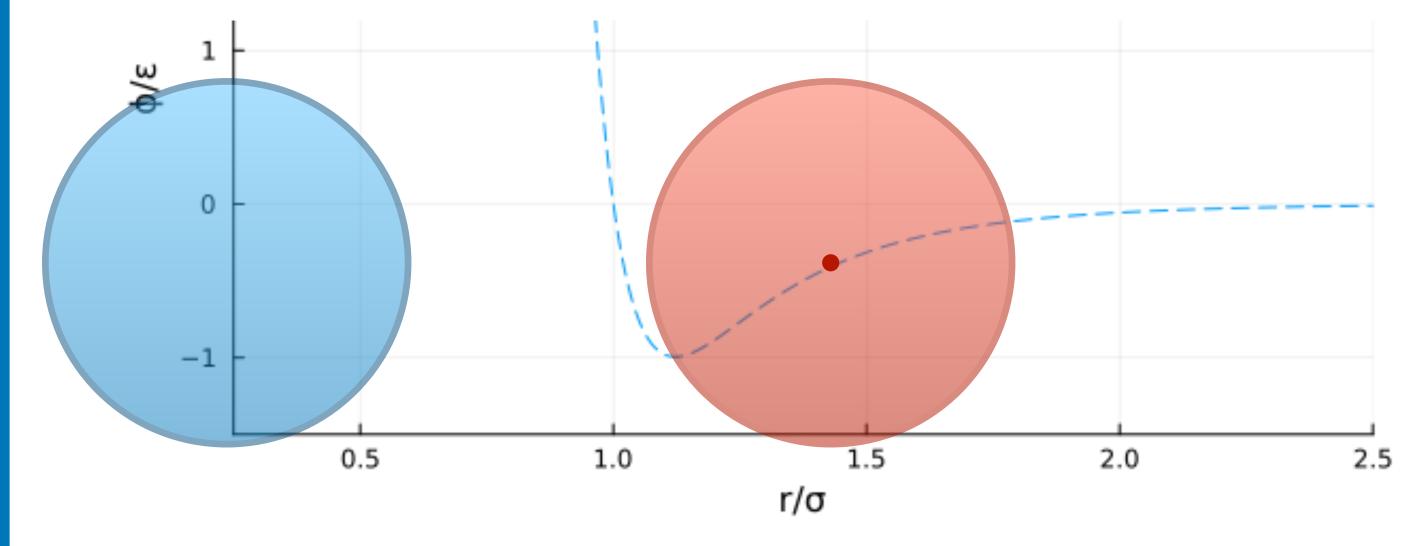




粒子-粒子間の相互作用

LJ-Potential vs. r

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



rcut 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

- ・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

$$H(\Gamma; g) = \sum_{i=1}^{N} \left[rac{oldsymbol{p}_{i}^{2}}{2m} + \sum_{j>i}^{N} ilde{\phi}_{\mathrm{LJ}}^{\mathrm{pair}}(r_{ij}) + mgy_{i} + V^{\mathrm{wall}}(y_{i})
ight]$$



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

$$H(\Gamma; g) = \sum_{i=1}^{N} \left[rac{oldsymbol{p}_i^2}{2m} + \sum_{j>i}^{N} ilde{\phi}_{ ext{LJ}}^{ ext{pair}}(r_{ij}) + mgy_i + V^{ ext{wall}}(oldsymbol{y_i})
ight]$$

茨城大学 Ibaraki University

ハミルトニアン

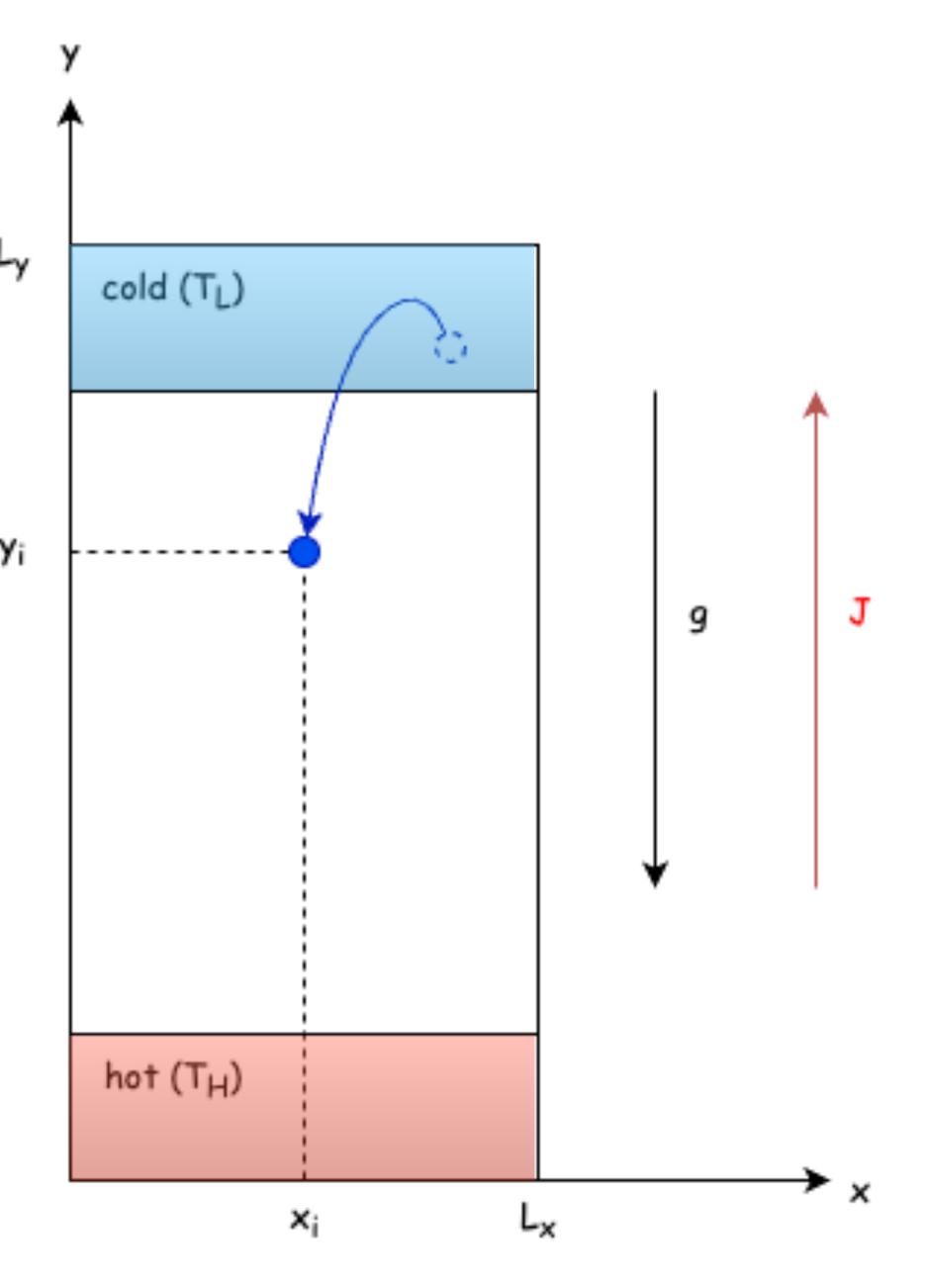
壁ポテンシャル

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

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



ハミルトニアン

壁ポテンシャル

上の壁

下の壁

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

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



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

茨城大学 Ibaraki University

実験と分析濡れ性

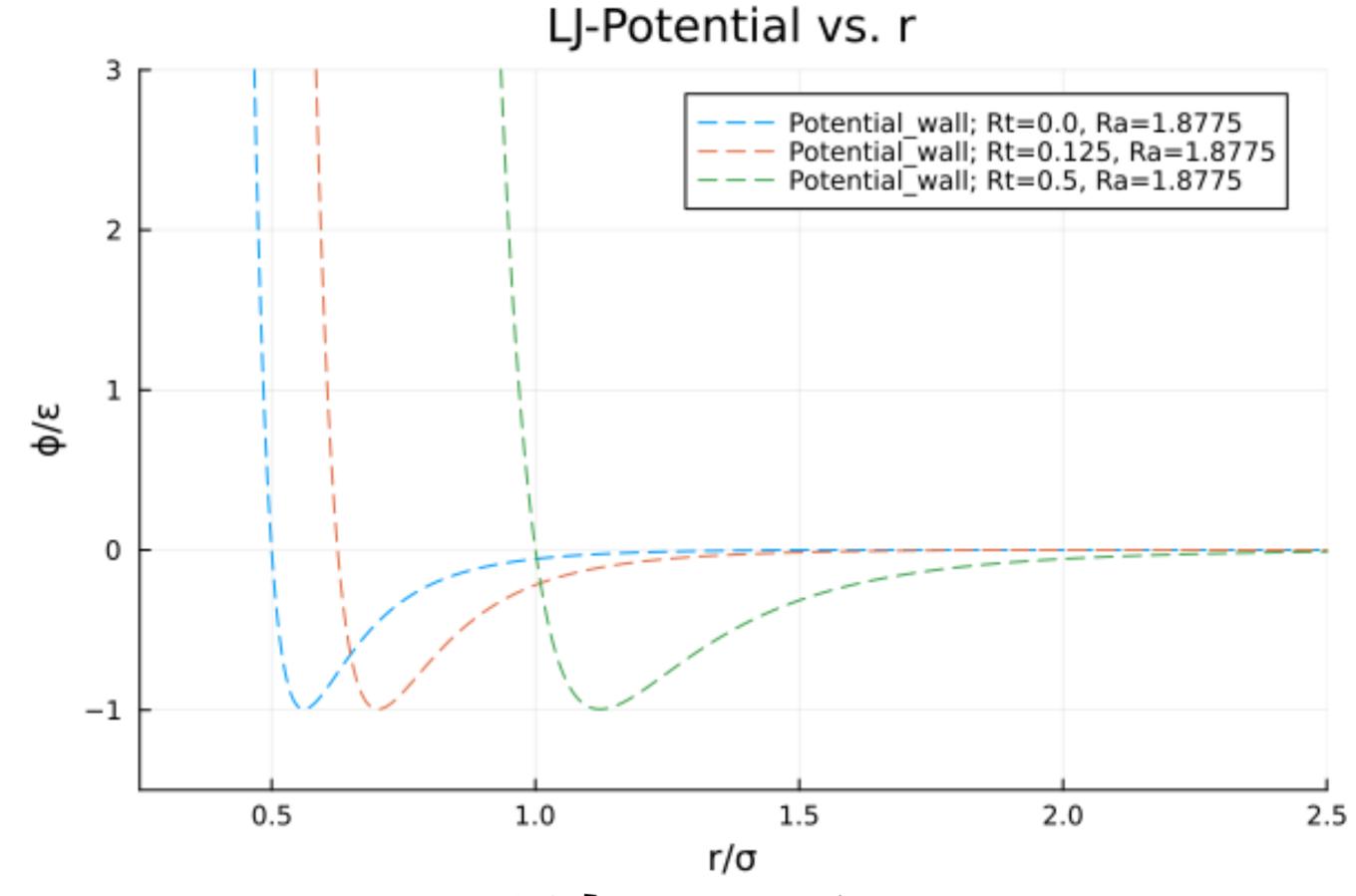
R_t:壁の厚み, R_a:引力幅

実験と分析濡れ性

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

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

$$r_{\rm cut}^{\rm wall} = (2^{1/6} + R_{\rm a}) \times \sigma^{\rm wall}$$



R_t:壁の厚み

$$0.0 \le R_t \le 0.5$$

濡れ性

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

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

$$r_{\rm cut}^{\rm wall} = (2^{1/6} + R_{\rm a}) \times \sigma^{\rm wall}$$

LJ-Potential vs. r Potential_wall; Rt=0.0, Ra=1.8775 Potential_wall; Rt=0.125, Ra=1.8775 Potential_wall; Rt=0.5, Ra=1.8775 0 -10.5 1.0 1.5 2.0 2.5 r/σ

R_t:壁の厚み

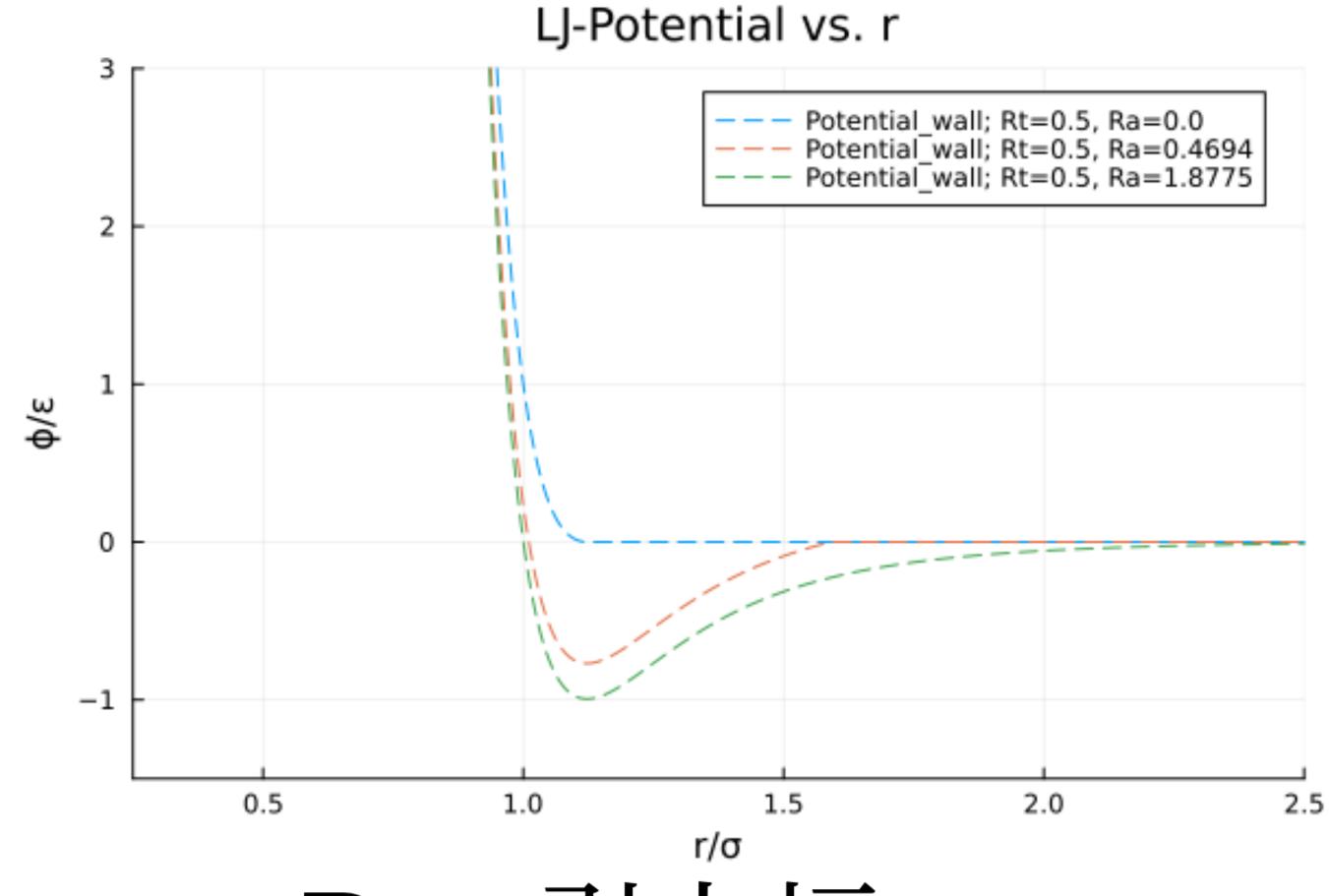
$$0.0 \le R_t \le 0.5$$

濡れ性

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

$$\sigma^{\text{wall}} = (0.5 + \text{R}_{\text{t}}) \times \sigma$$

$$r_{\rm cut}^{\rm wall} = (2^{1/6} + R_{\rm a}) \times \sigma^{\rm wal}$$



Ra:引力幅

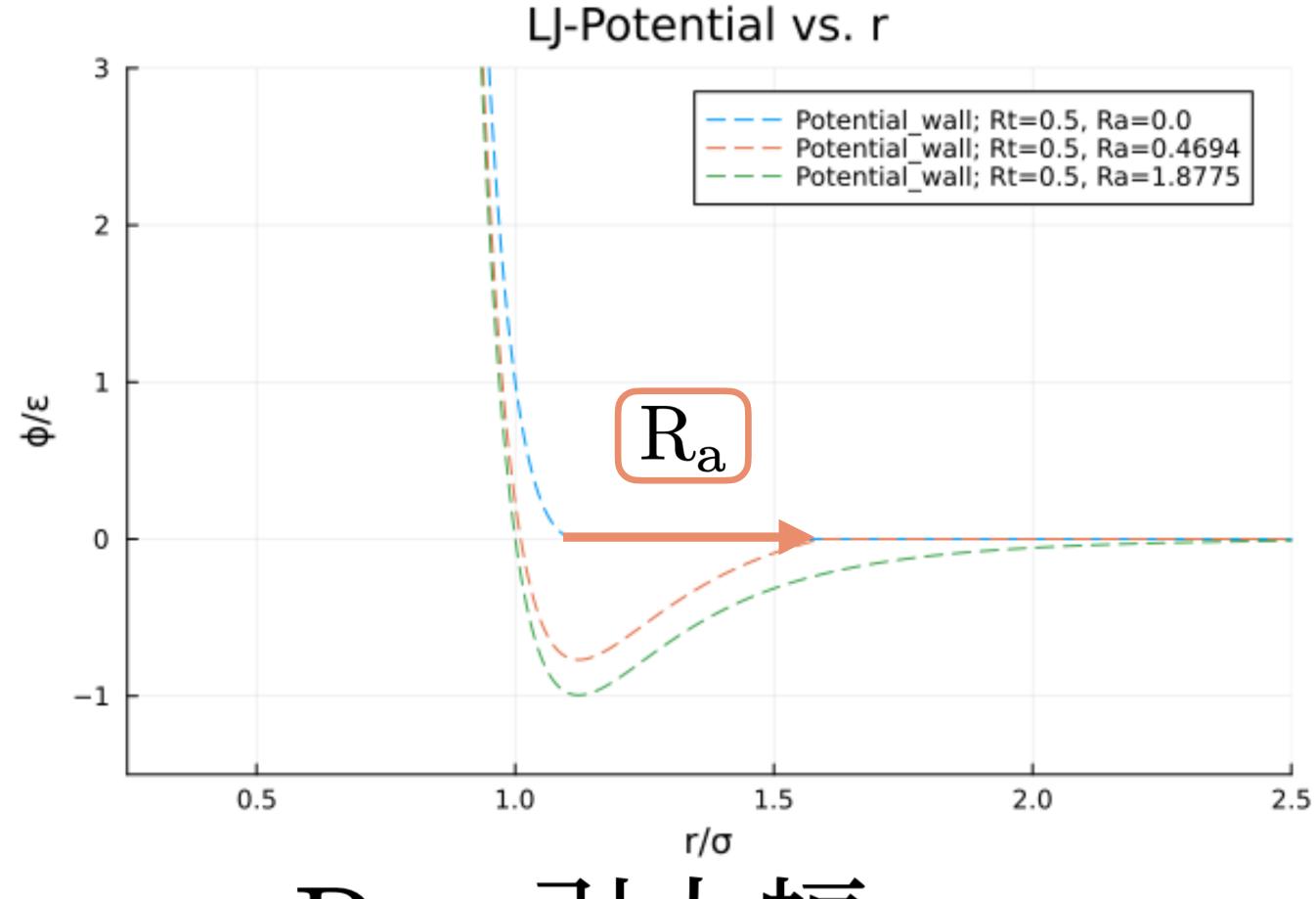
$$0.0 \le R_a \le 3.0 - 2^{1/6}$$

濡れ性

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

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

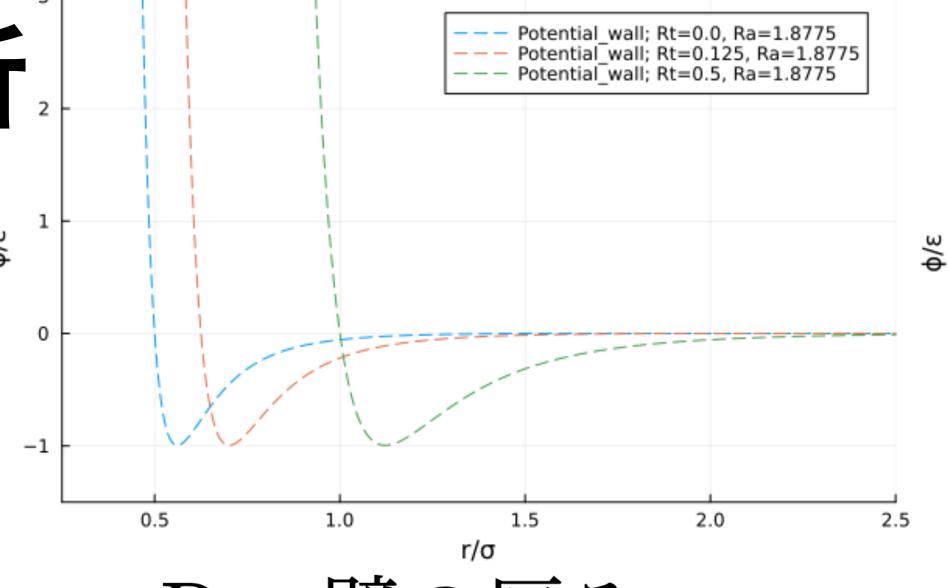
$$r_{\rm cut}^{\rm wall} = (2^{1/6} + R_{\rm a}) \times \sigma^{\rm wall}$$



Ra:引力幅

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

濡れ性



LJ-Potential vs. r

Rt:壁の厚み

$$0.0 \le R_{\rm t} \le 0.5$$

Ra:引力幅

1.0

-1

0.5

LJ-Potential vs. r

Potential_wall; Rt=0.5, Ra=0.0

Potential_wall; Rt=0.5, Ra=0.4694 Potential_wall; Rt=0.5, Ra=1.8775

2.0

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

1.5

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

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

$$r_{\rm cut}^{\rm wall} = (2^{1/6} + R_{\rm a}) \times \sigma^{\rm wall}$$

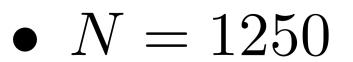
2.5



R_t:壁の厚み, R_a:引力幅

ABNITED TO BE ADEL ROOM OF BELOW DO BOTH TO THE STATE OF THE STATE OF

濡れ性



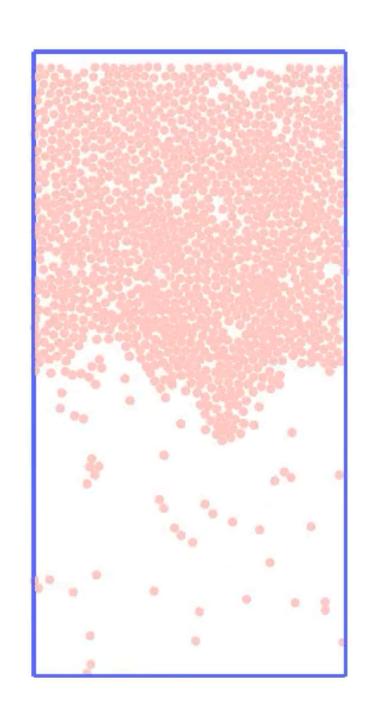
•
$$T_{\rm L} = 0.41$$

•
$$L_y = 80$$

•
$$T_{\rm H} = 0.45$$

•
$$L_x: L_y = 1:2$$

•
$$mg = 4.0 \times 10^{-4}$$



$$\chi \equiv \frac{k_{\rm B}(T_{\rm H} - T_{\rm L})}{mgL_y} \simeq 1$$

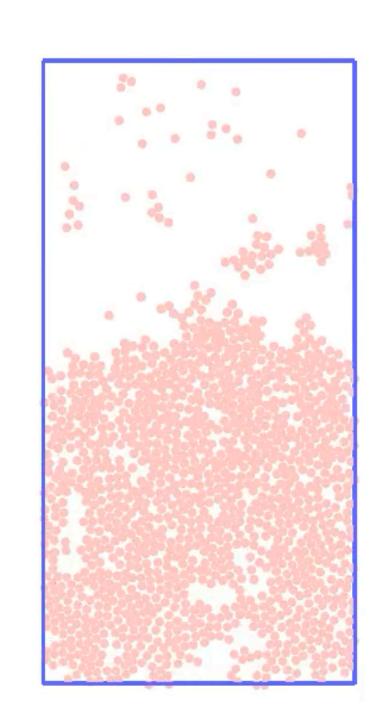
$$R_t = 0.5, R_a = 1.8775$$

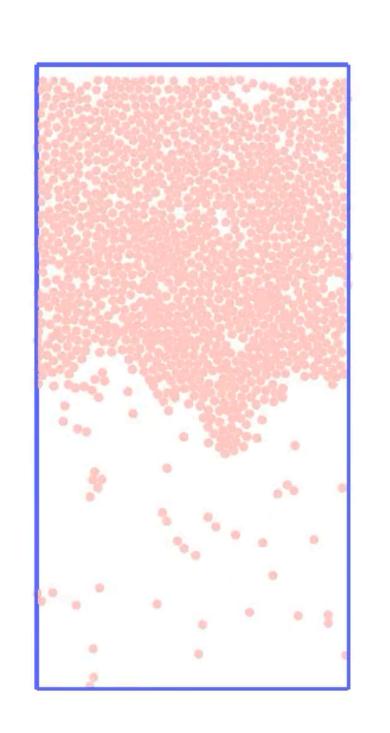


実験と分析濡れ性



ABINITATE STANDARD ROOM TO SEE TO A LO MARINING STANDARD





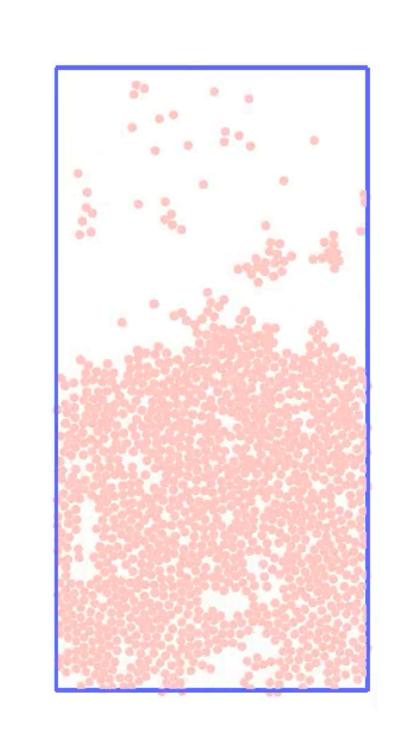
$$R_t = 0.0, R_a = 1.8775$$

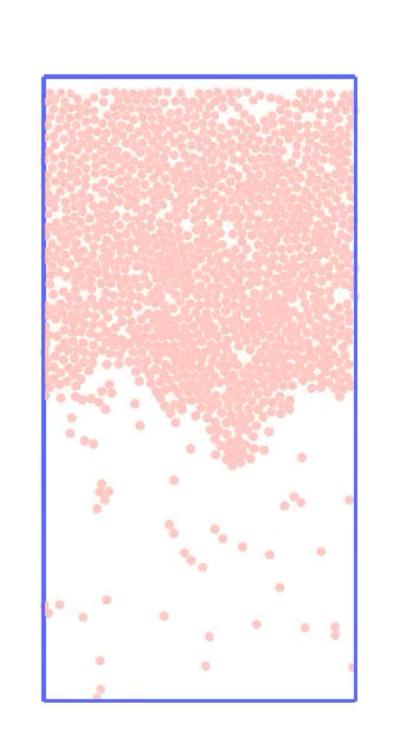
$$R_t = 0.5, R_a = 1.8775$$

茨城大学

実験と分析濡れ性

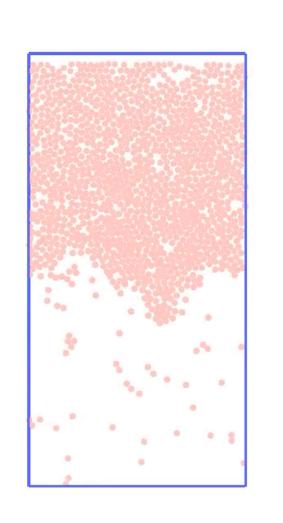
R_t:壁の厚み, R_a:引力幅

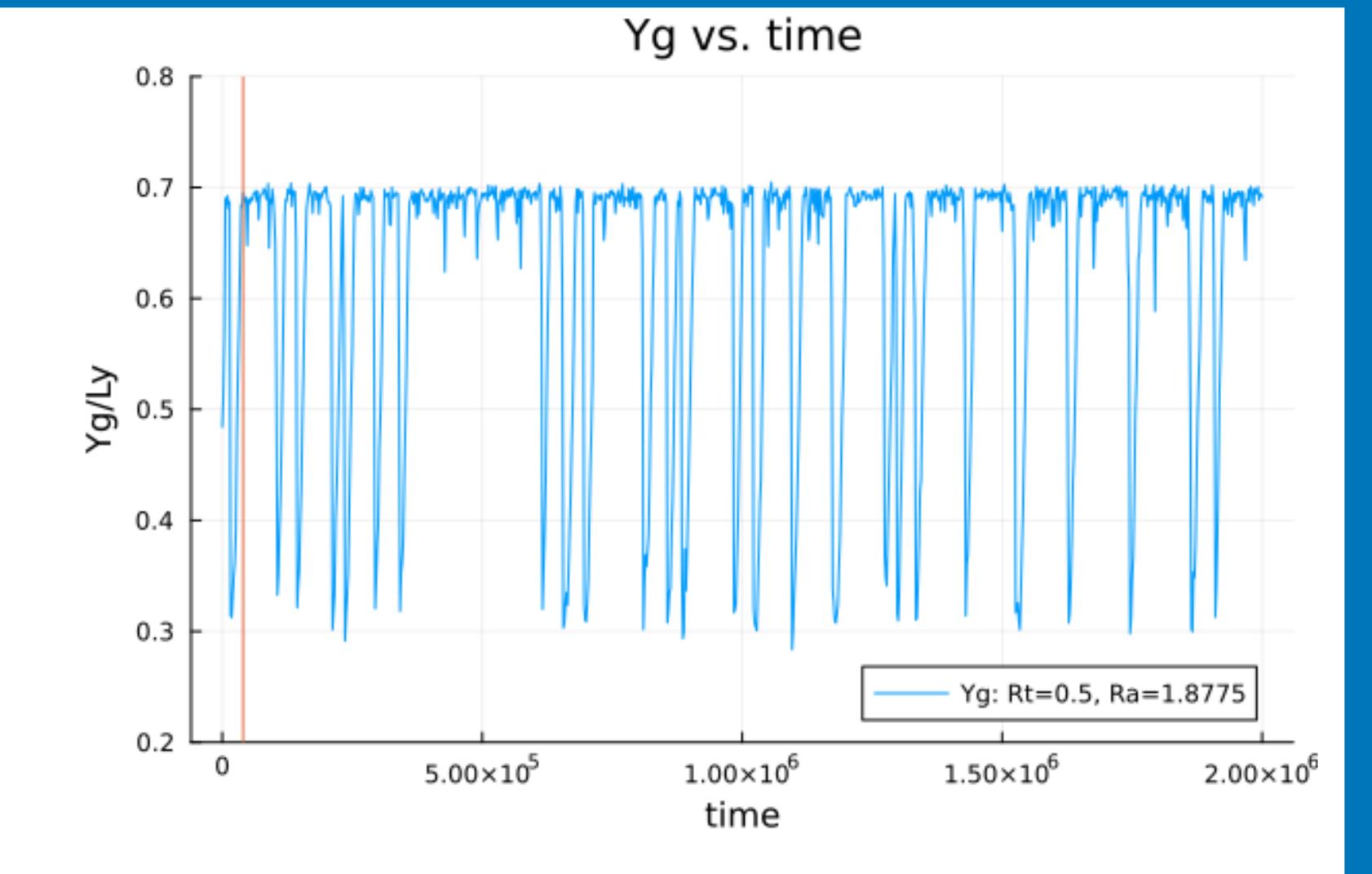




R_t = 0.0, R_a = 1.8775 R_t = 0.5, R_a = 1.8775 重心位置空間的なはらつき。

実験と分析重心位置

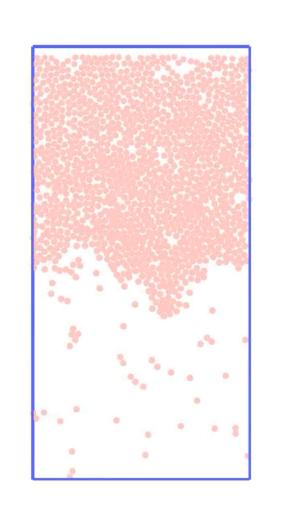


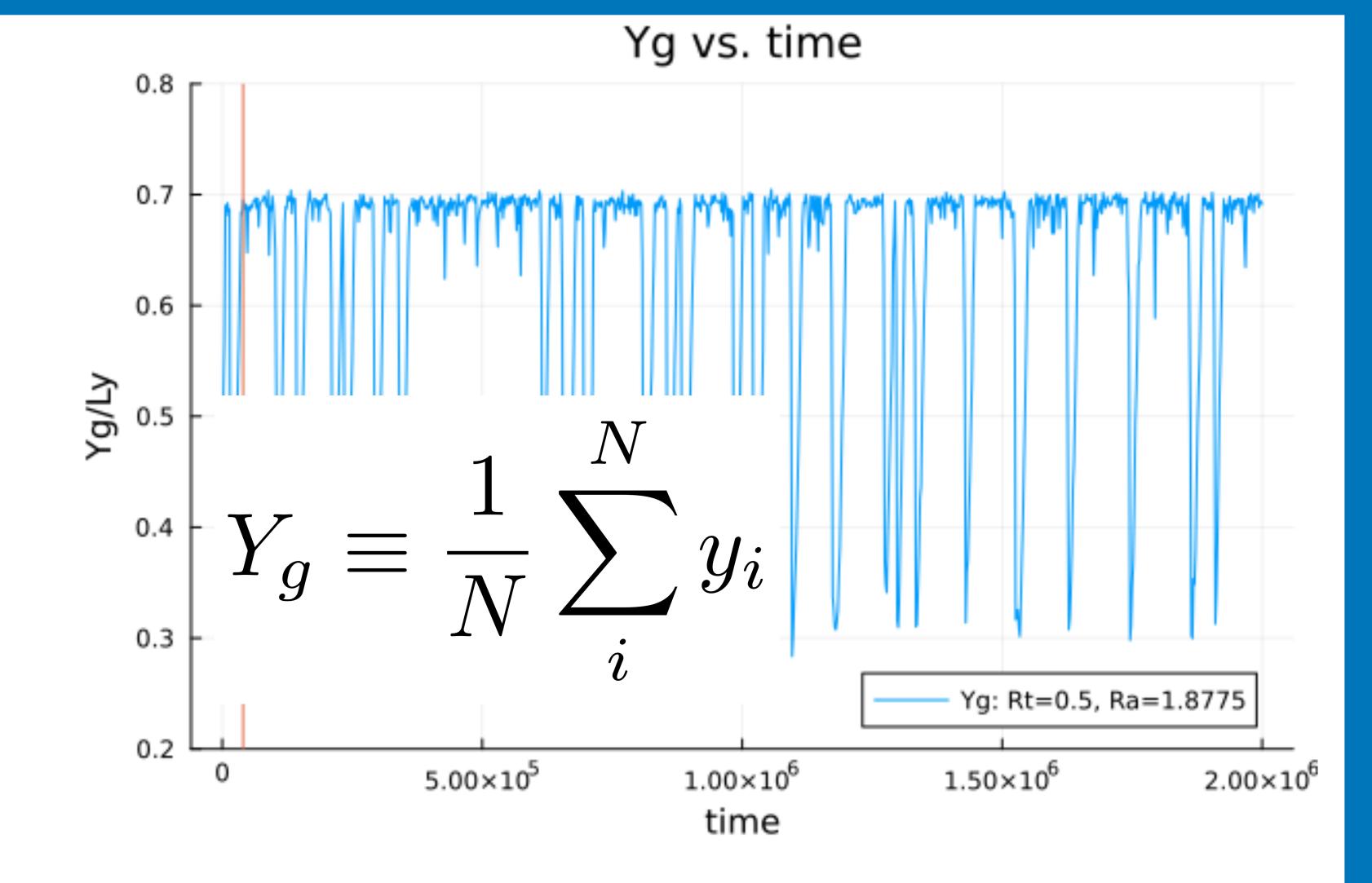


$$R_t = 0.5, R_a = 1.8775$$

R_t:壁の厚み, R_a:引力幅

実験と分析重心位置

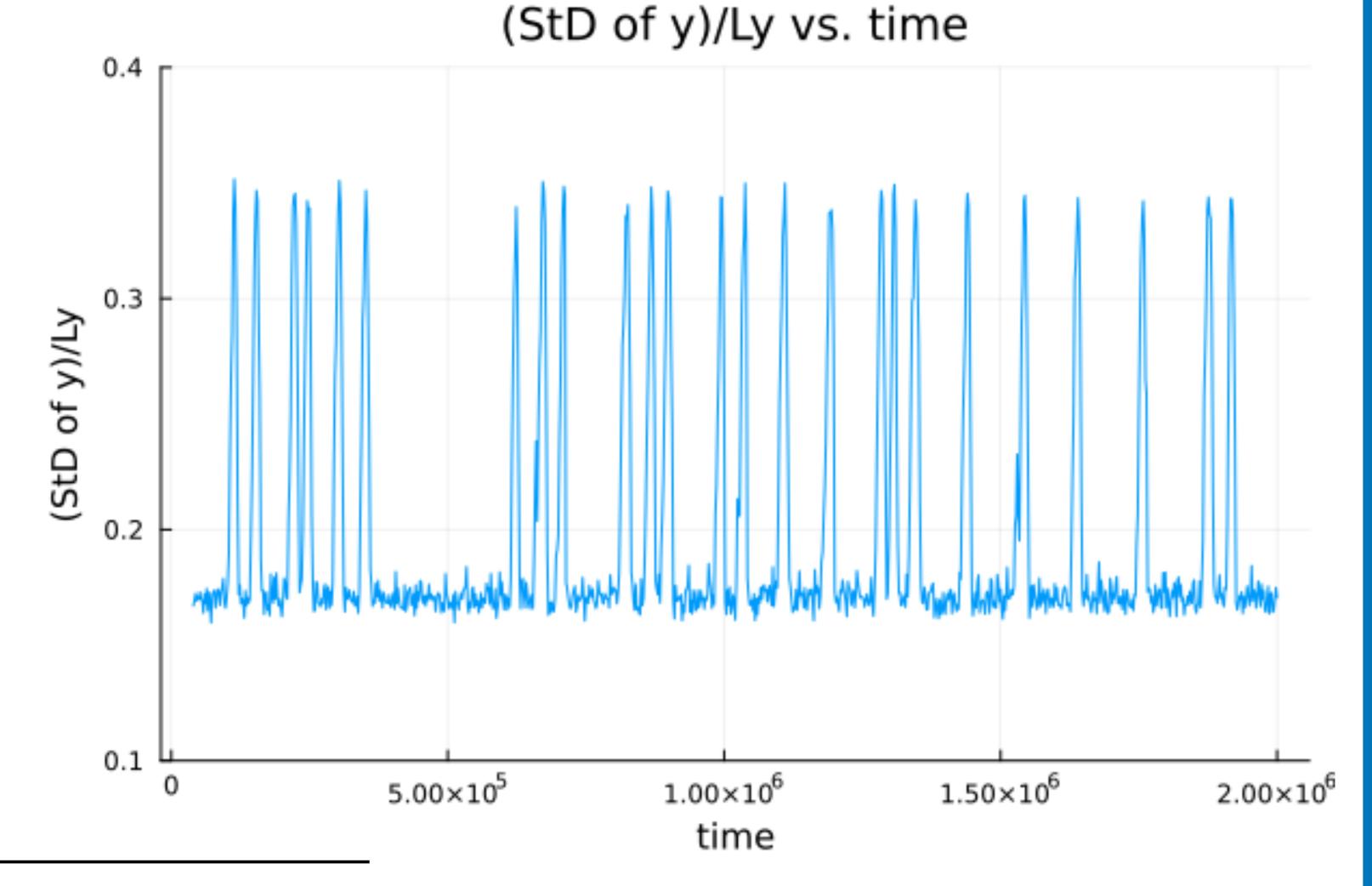




$$R_t = 0.5, R_a = 1.8775$$

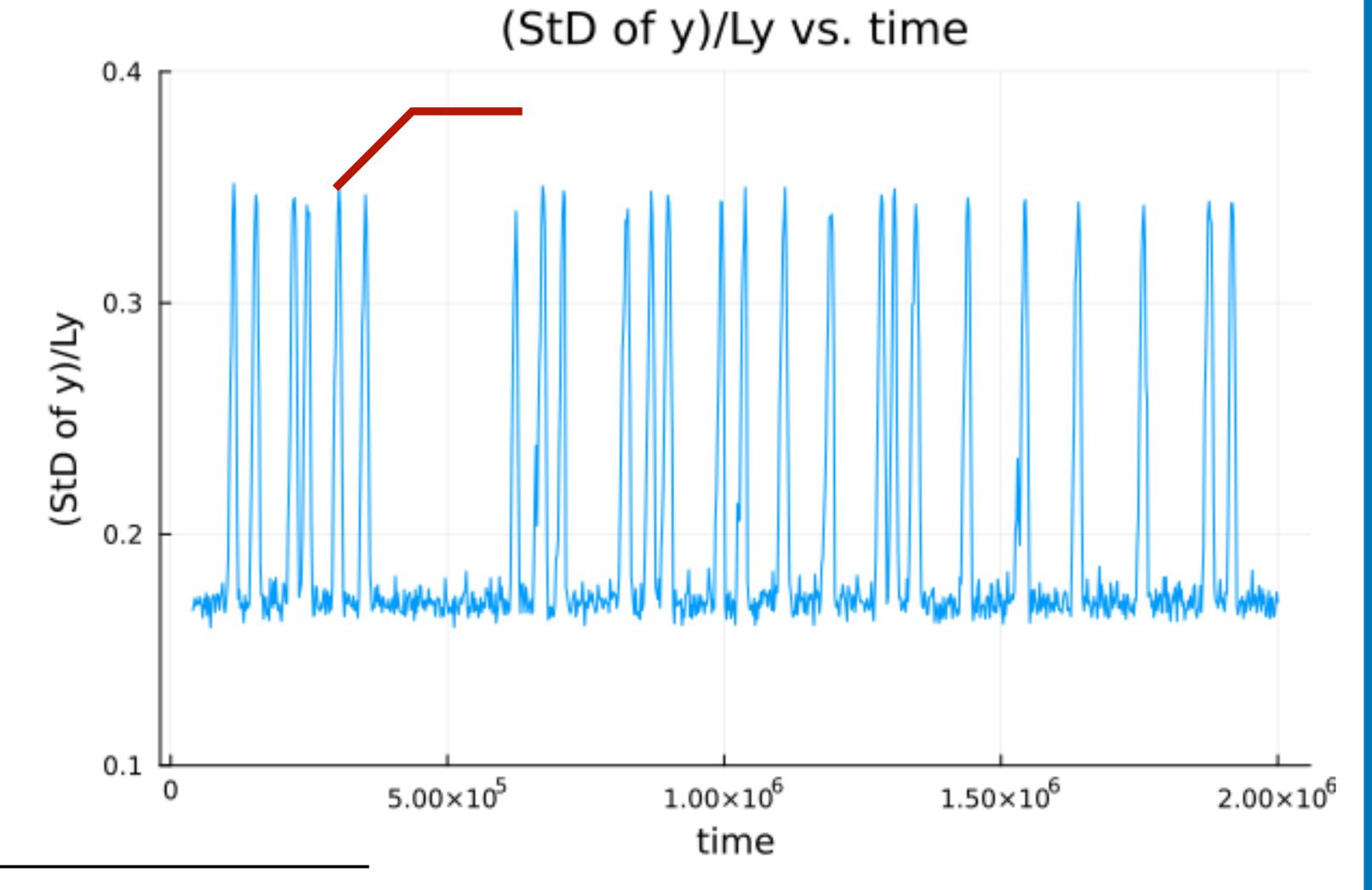
R_t:壁の厚み, R_a:引力幅

実験と分析空間なばらつき



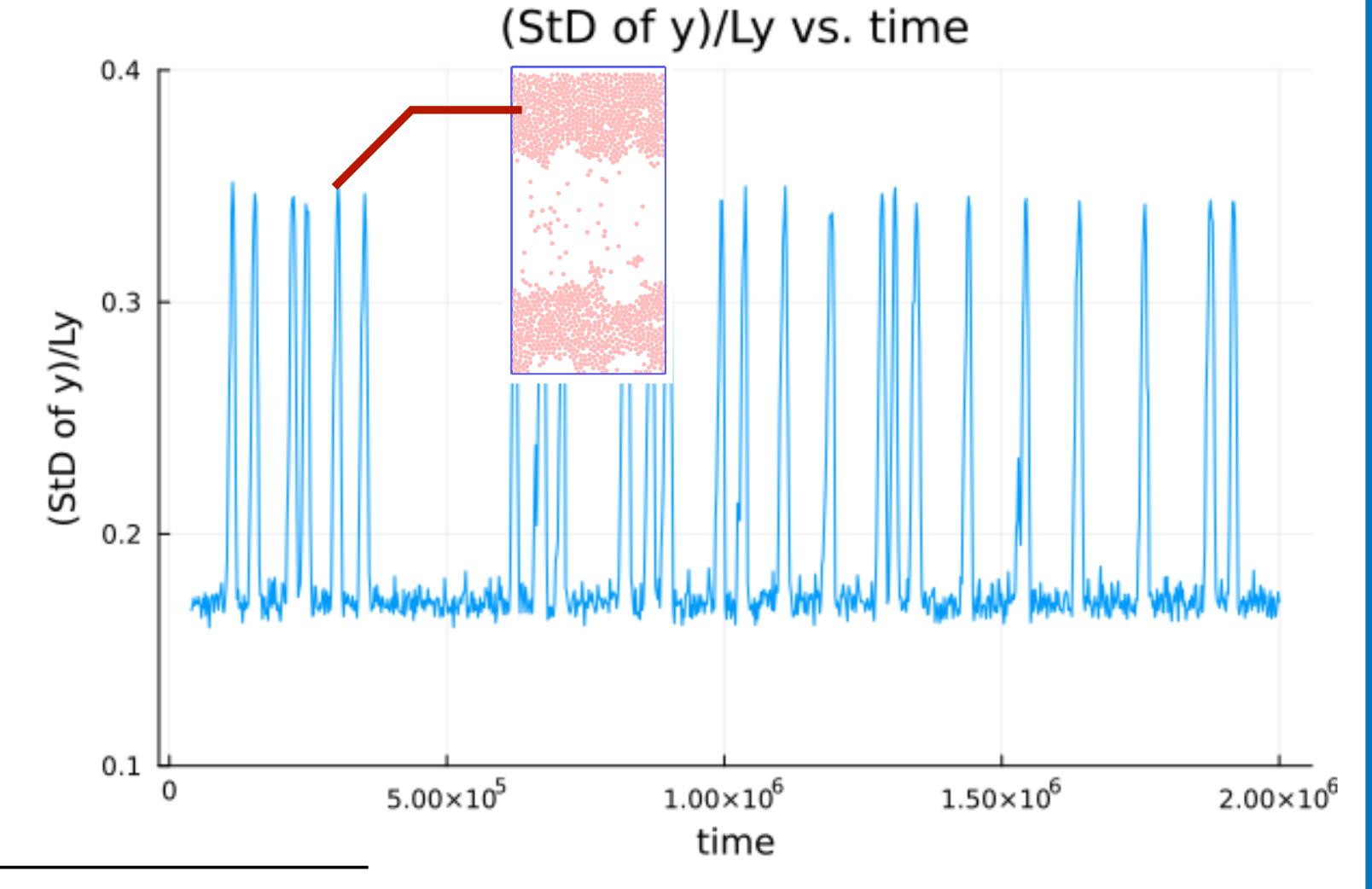
$$\sigma_y(t) = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} (y_i(t) - Y_g(t))^2}$$

実験と分析空間なばらつき



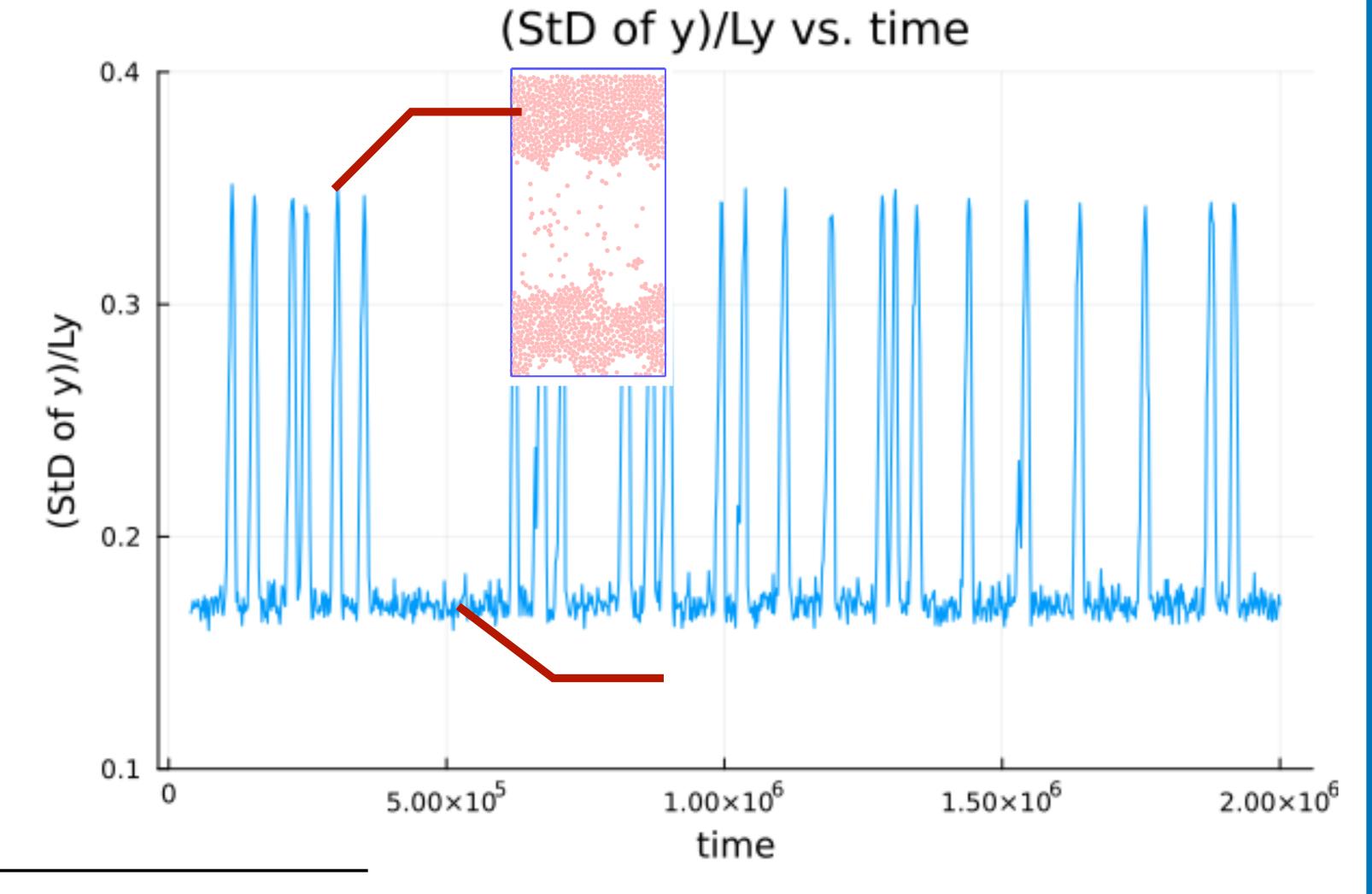
$$\sigma_y(t) = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} (y_i(t) - Y_g(t))^2}$$

実験と分析空間なばらつき



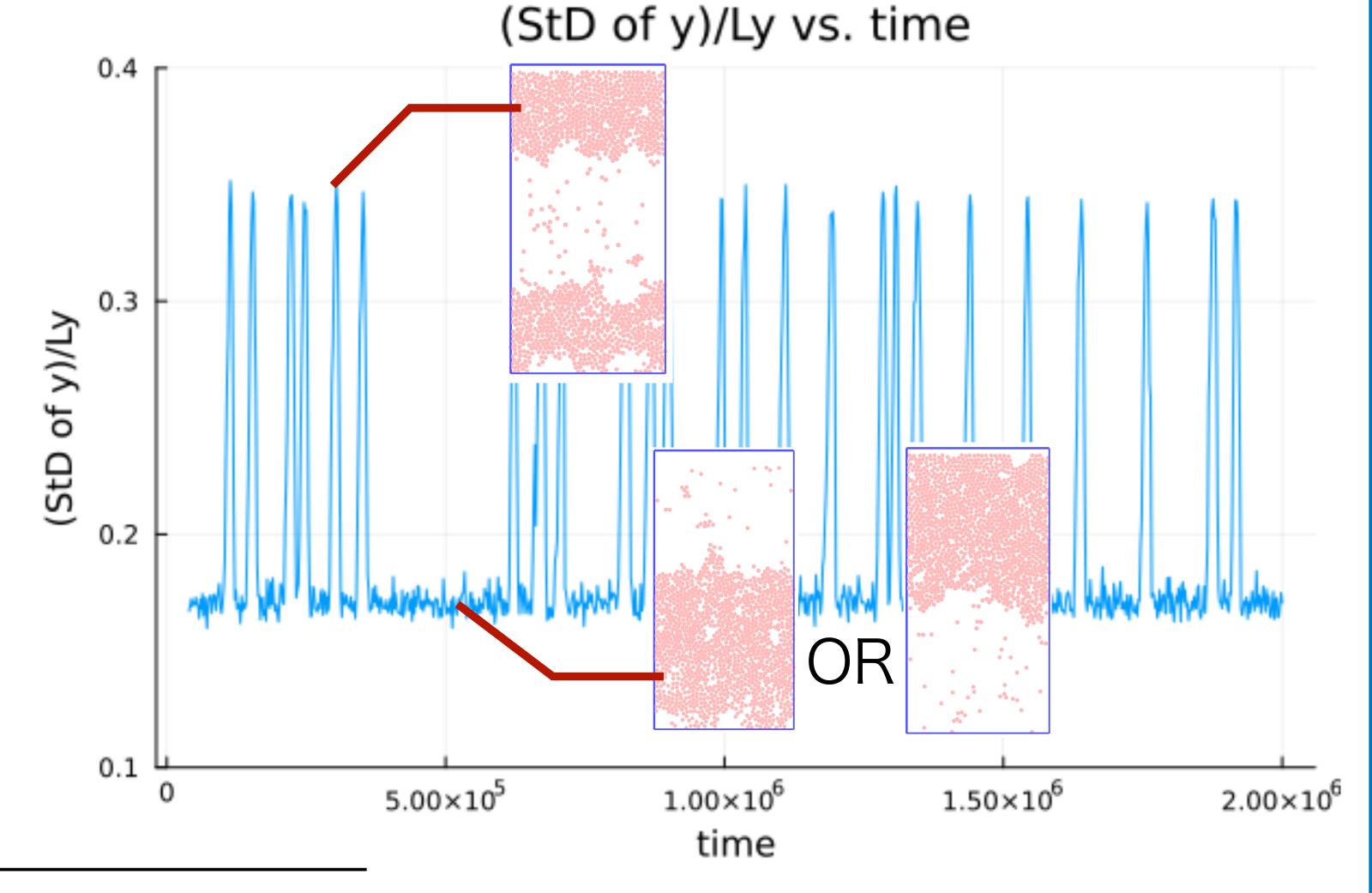
$$\sigma_y(t) = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} (y_i(t) - Y_g(t))^2}$$

実験と分析空間のはあった。



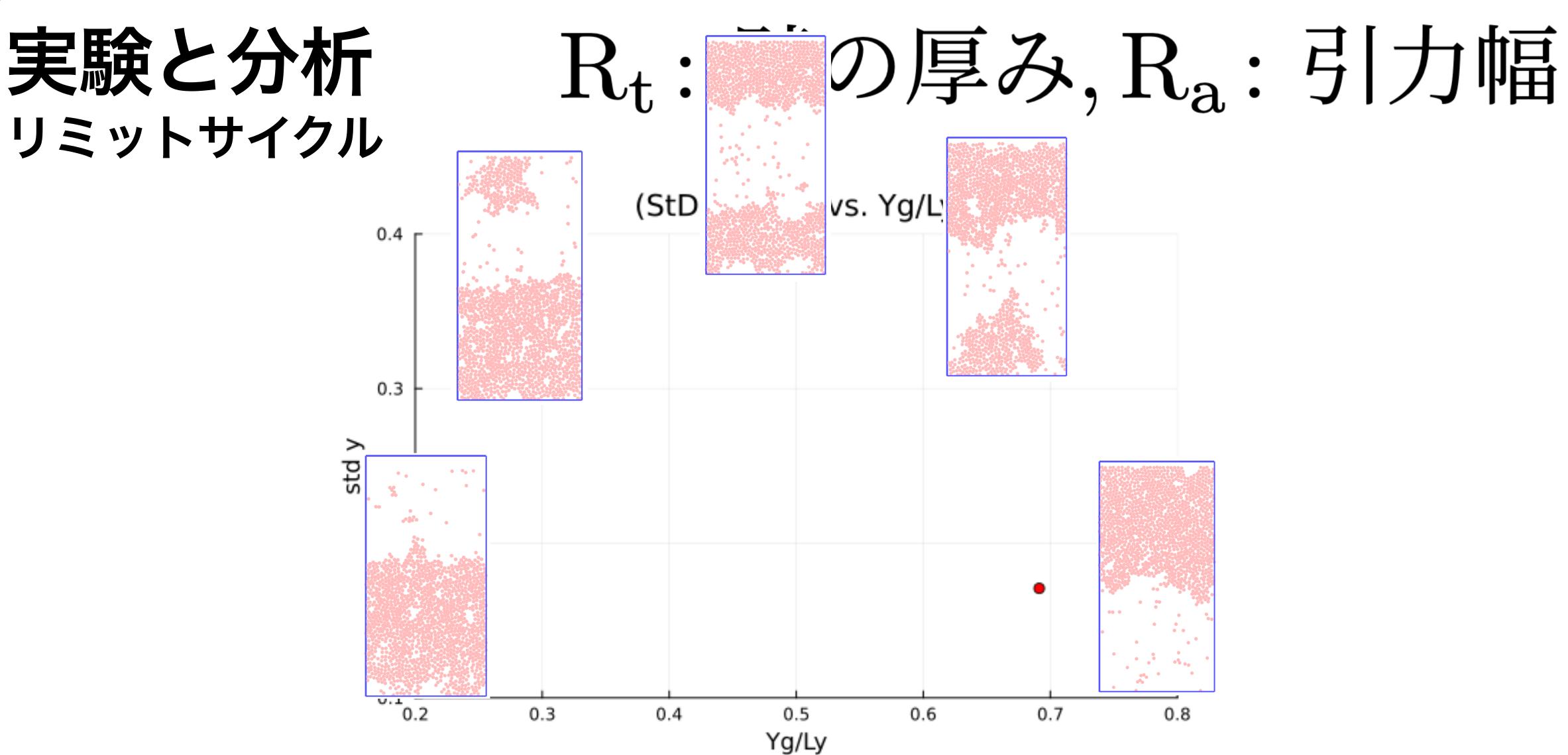
$$\sigma_y(t) = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} (y_i(t) - Y_g(t))^2}$$

実験と分析空間のはあった。



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

茨城大学 Ibaraki University

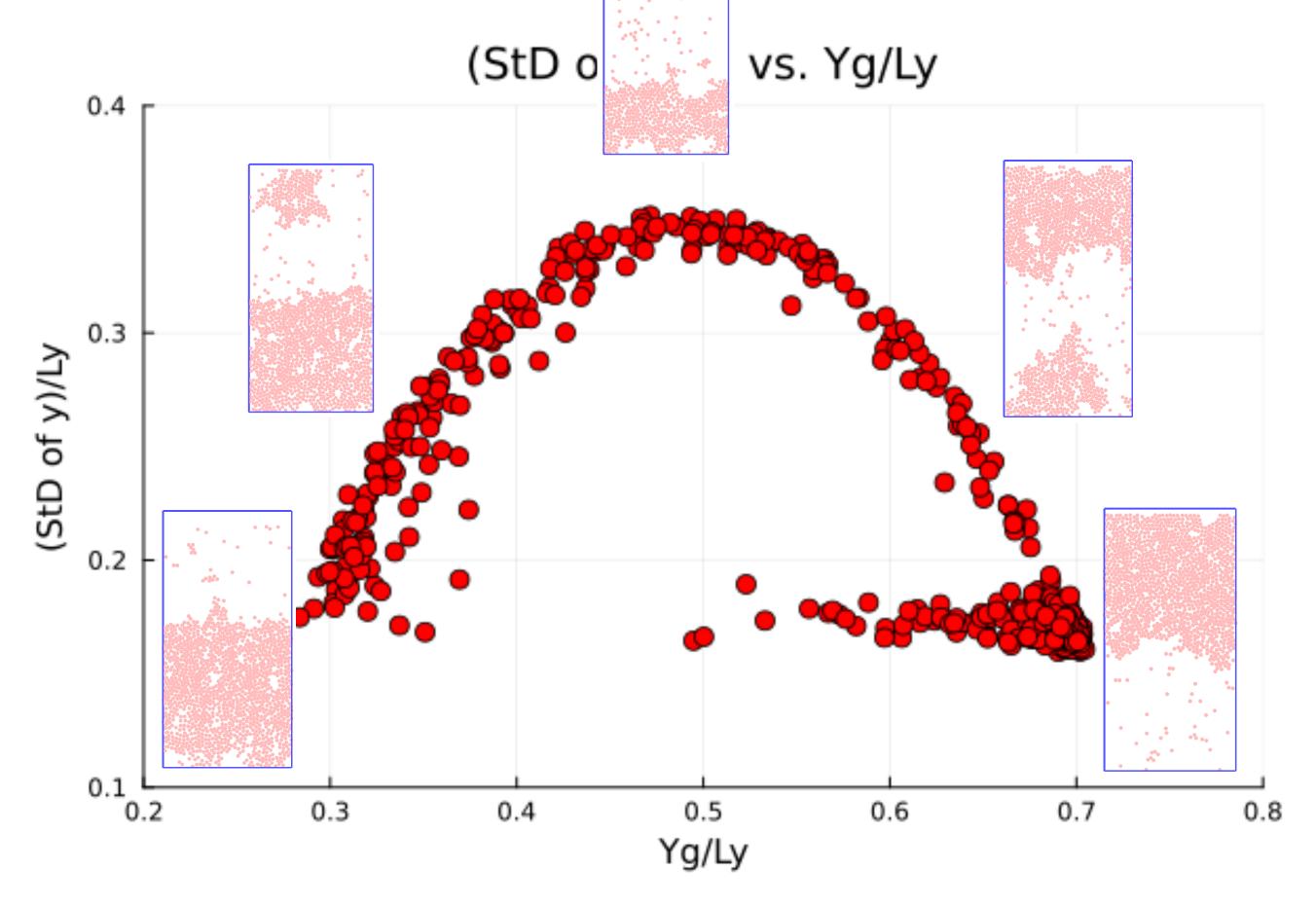


 $R_t = 0.5, R_a = 1.8775$

茨城大学 Ibaraki University

実験と分析リミットサイクル

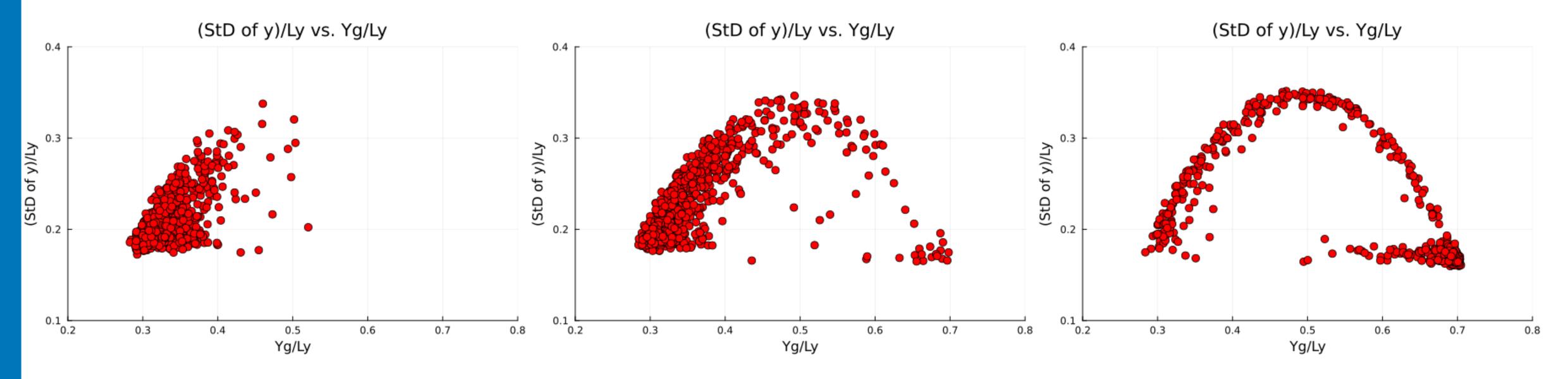
R_t:壁の厚み, R_a:引力幅



$$R_t = 0.5, R_a = 1.8775$$

茨城大学 Ibaraki University

実験と分析リミットサイクル



$$R_t = 0.0, R_a = 1.8775$$

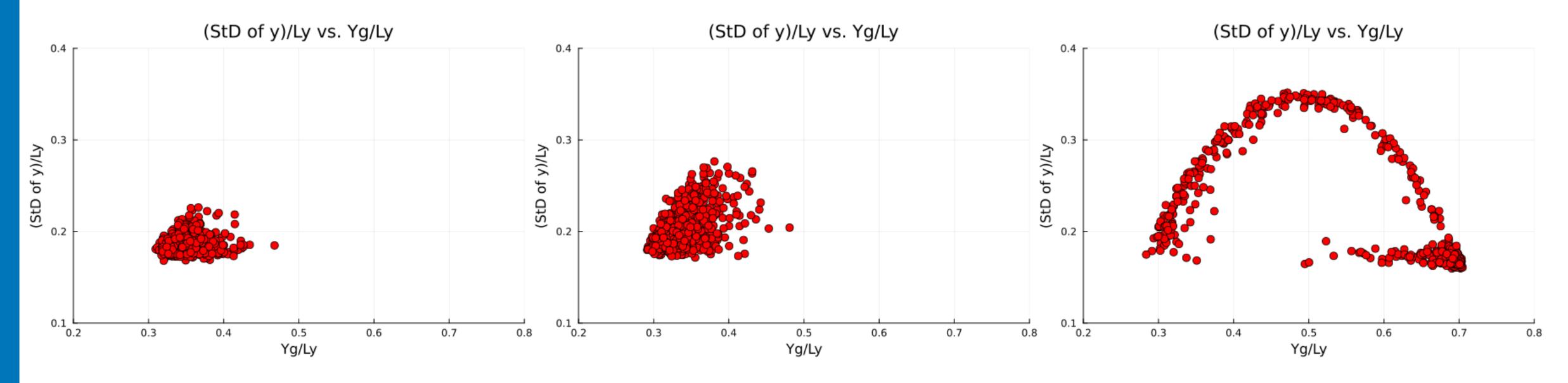
$$R_t = 0.125, R_a = 1.8775$$

$$R_t = 0.5, R_a = 1.8775$$



茨城大学 Ibaraki University

実験と分析リミットサイクル



$$R_t = 0.5, R_a = 0.0$$

$$R_t = 0.5, R_a = 0.4694$$

$$R_t = 0.5, R_a = 1.8775$$





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

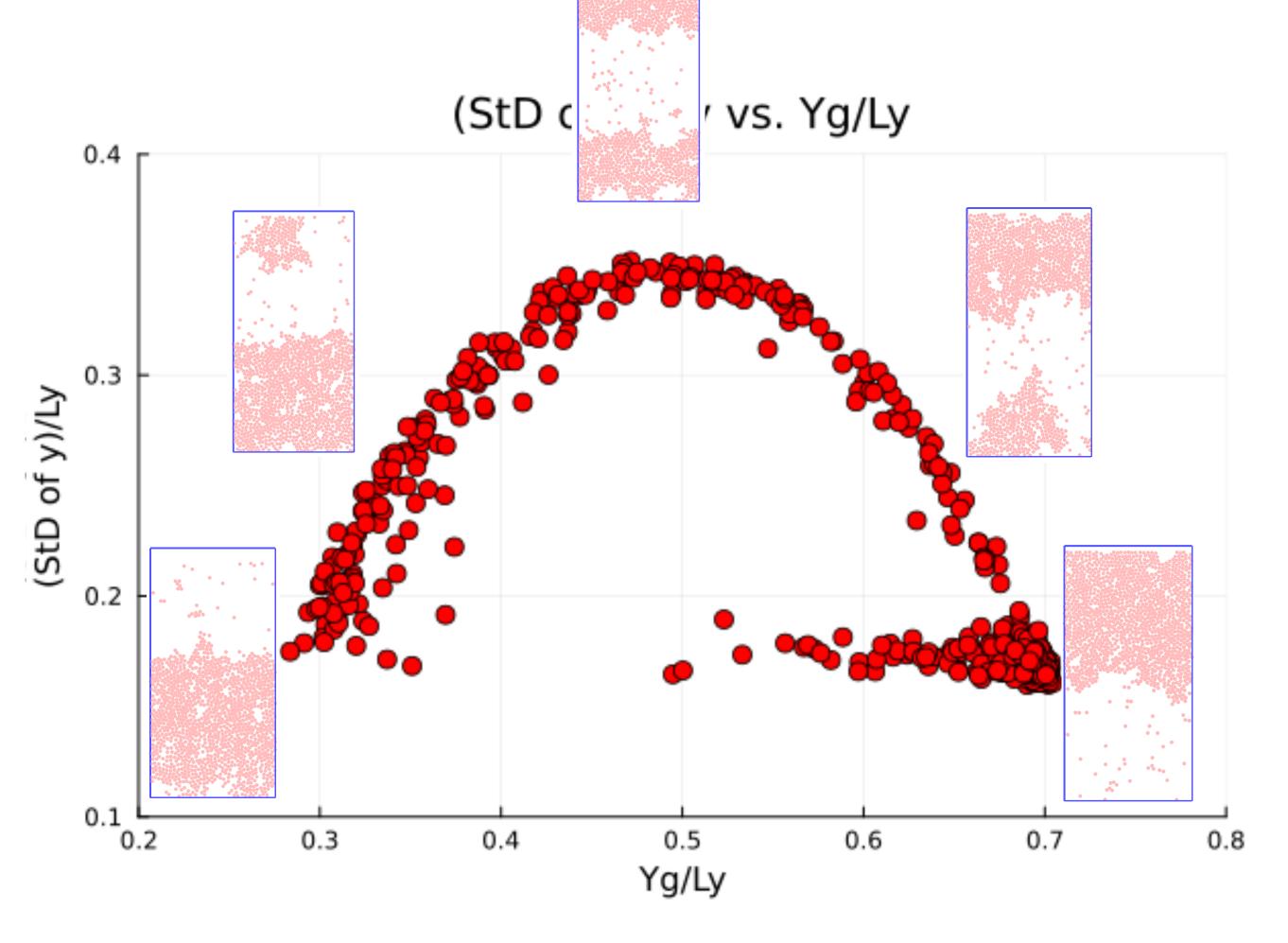
目次

- ・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

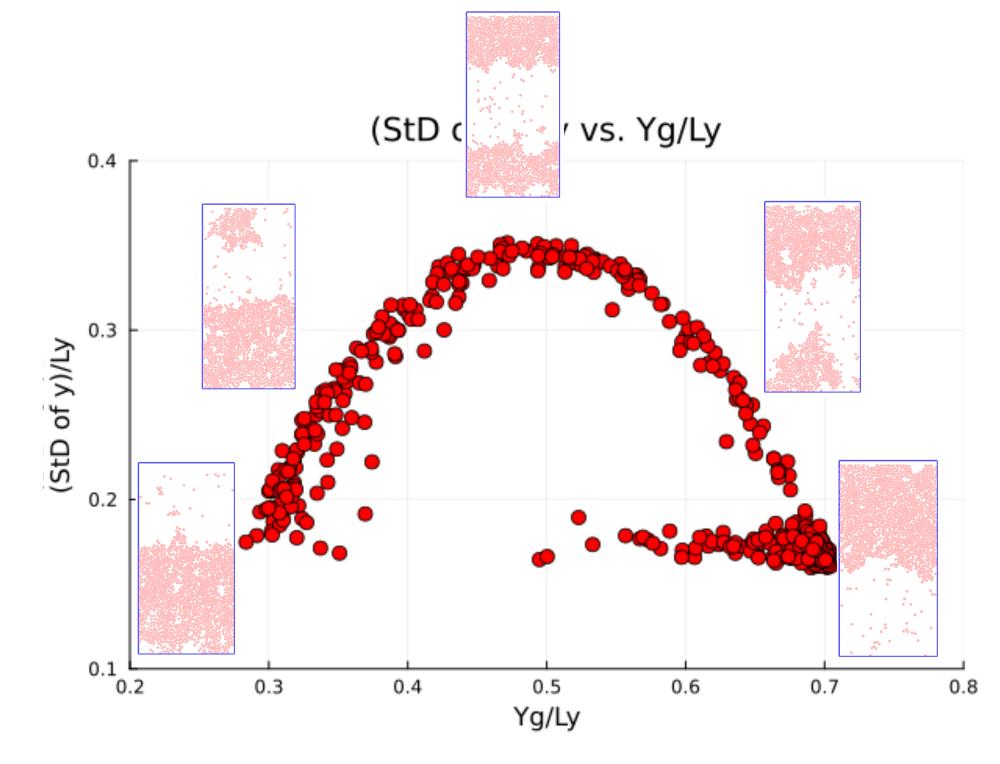
- ・実験と分析
 - 濡れ性
 - ・ パラメータ
 - 重心位置
 - ・空間的なばらつき
 - ・ リミットサイクル
- ・まとめ
- ・ 今後の展望



R_t:壁の厚み, R_a:引力幅

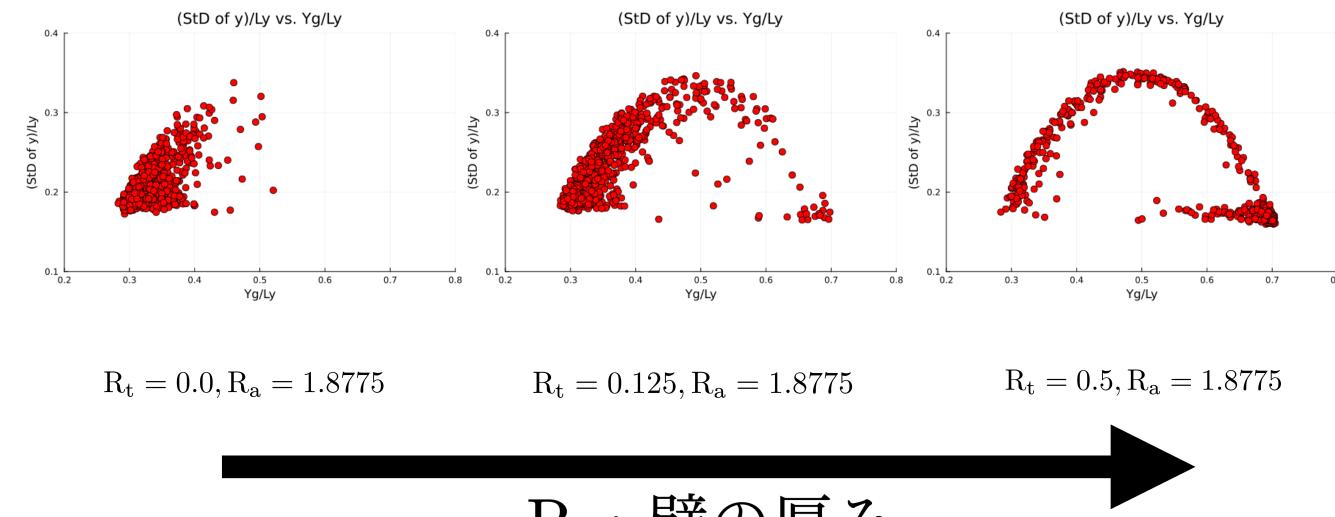


$$R_t = 0.5, R_a = 1.8775$$

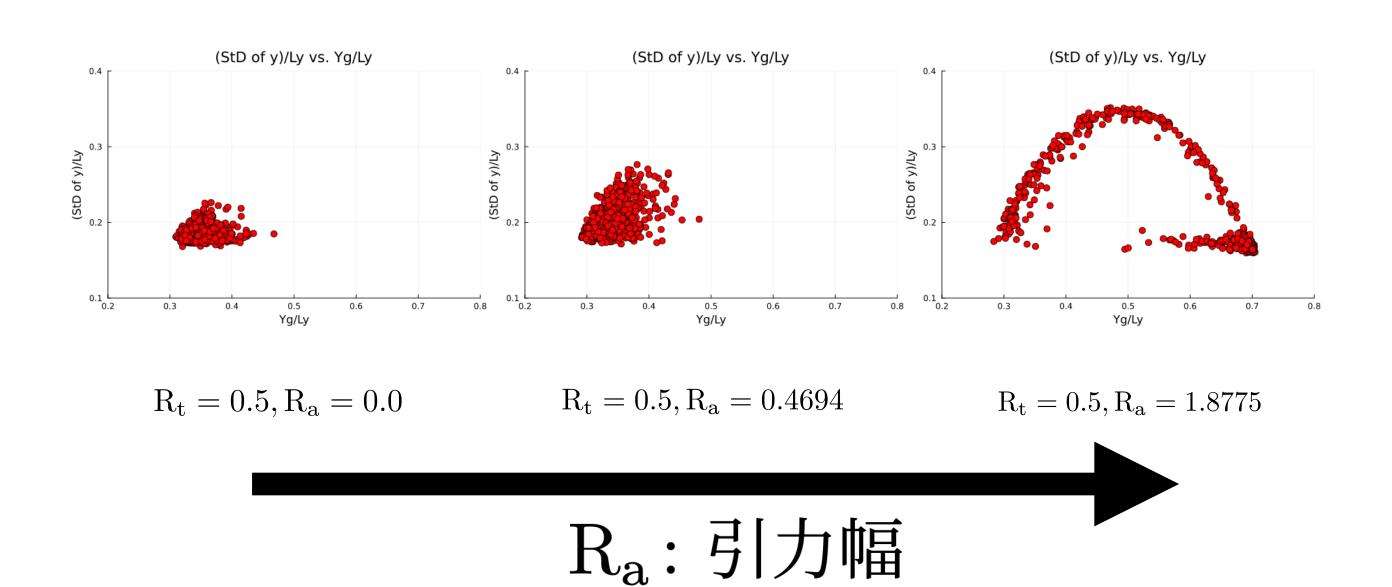


 $R_t = 0.5, R_a = 1.8775$

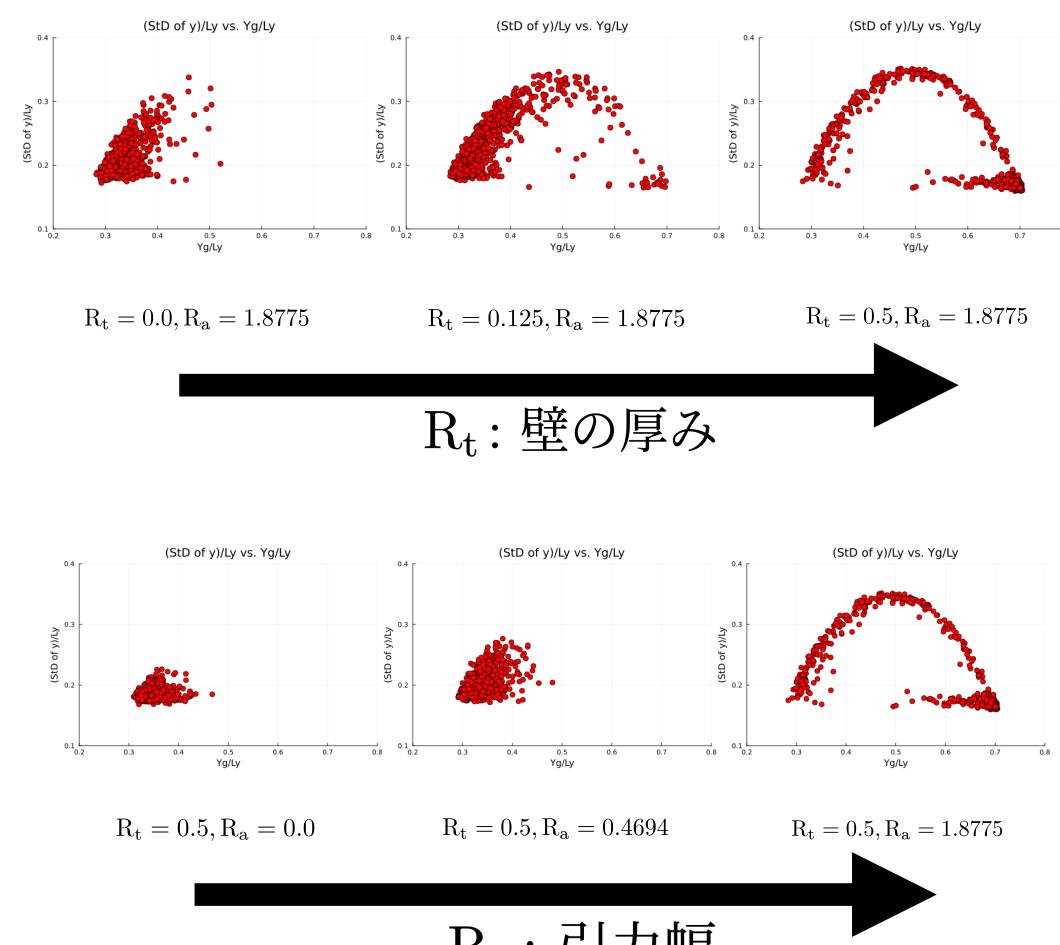
- ・流体系が液滴を形成しつつ、上壁に吸着しきるまでのスピードは、液体の落下のスピードよりもゆっくりであり、それは、流体系の重心位置と空間的なばらつきの半円のリミットサイクルからも見てとれる.
- ・サイクルが閉じているとき、非定常で周期的なダイナミクスは現れている.



R_t: 壁の厚み







Ra: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.



- ・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

で清聴 ありがとうございました



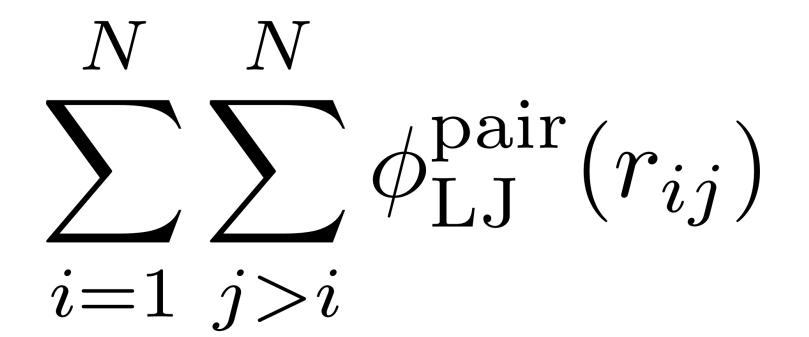
サブスライド 目次

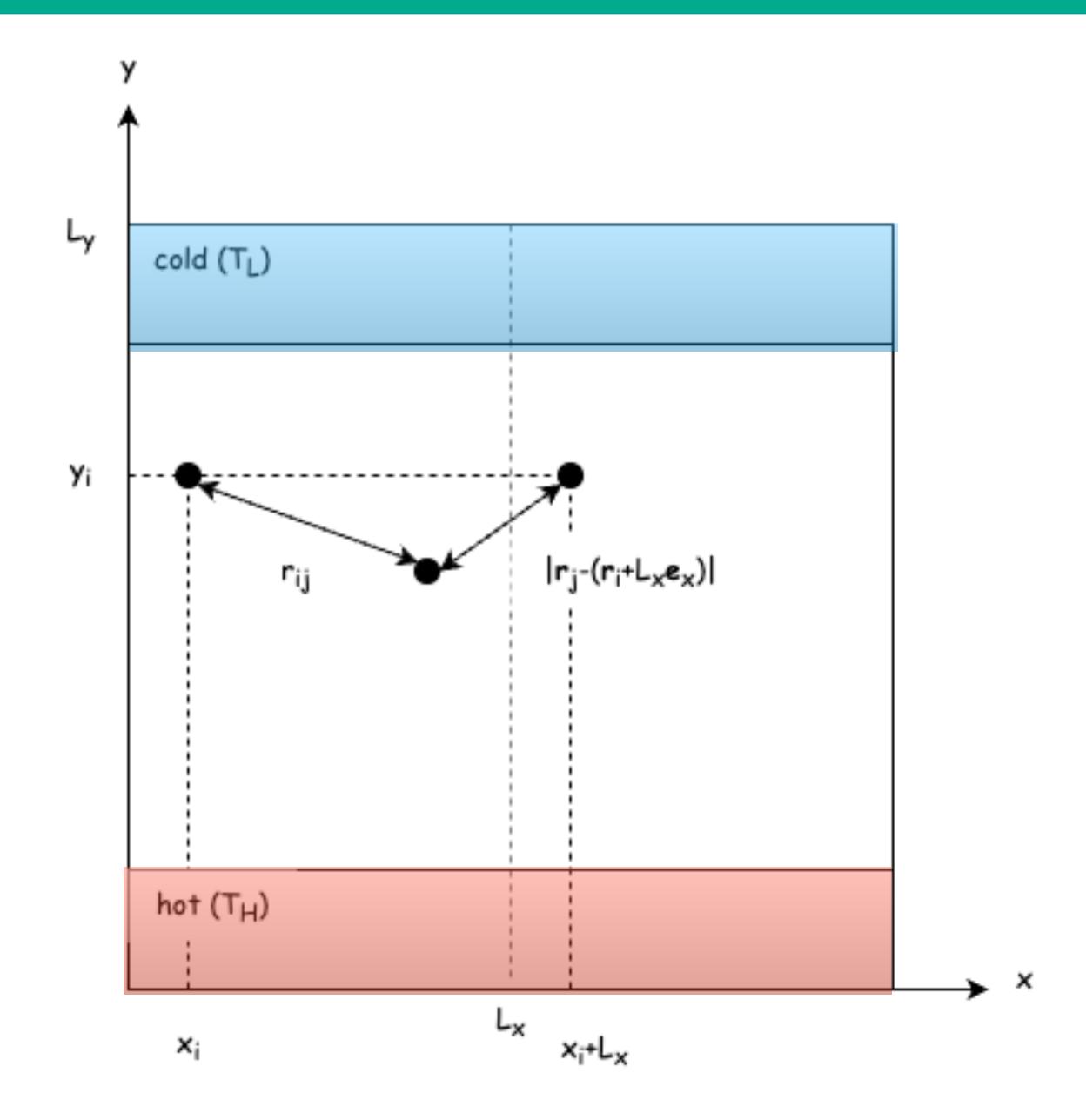
- 定常状態
- ・最近接イメージ規約
- 実現可能性



最近接イメージ規約

• 粒子間相互作用

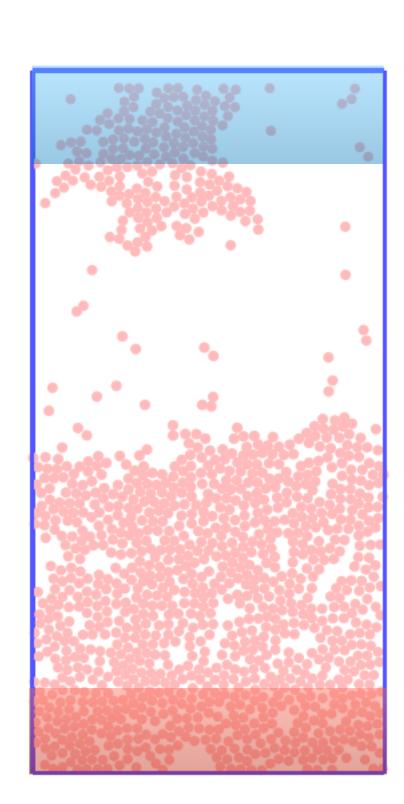






実現可能性

- ・ 2次元 Xe(キセノン)
- $g = 9.8 [m/s^2]$
- Ly = 4.718[cm]
- TH = $104.4[K] = -169[^{\circ}C]$
- $TL = 95.12[K] = -178[^{\circ}C]$





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.