

学士学位論文
重力と熱流をかけた流体のダイナミクスと壁の
濡れ性

茨城大学理学部理学科物理学コース
20S2305Y
山本 凜

最終更新日: 2024 年 3 月 21 日
2023 年度 (令和 5 年度)

目次

第 1 章	数値実験の結果	2
1.1	重力と熱流を同時にかける	2
1.2	重力を先にかけて、熱流を後からかける	7
1.3	重力のみをかける	10
1.4	熱流のみをかける	11
1.5	重力と熱流を同時にかける（時間 10 倍）	13
1.6	重力を先にかけて、熱流を後からかける（時間 10 倍）	15
参考文献		18

第 1 章

数値実験の結果

この章では、行ったシミュレーションの設定についてそれぞれ説明をして、その結果得た各系の重心位置の推移を示す。

以下のように、 R_a と R_t を少しづつ変えた系を設定して、25 種類の系でそれぞれシミュレーションをした。

	$R_a : 0.0$	$R_a : 0.4693$	$R_a : 0.9387$	$R_a : 1.408$	$R_a : 1.877$
$R_t : 0.0$	a	b	c	d	e
$R_t : 0.125$	f	g	h	i	j
$R_t : 0.25$	k	l	m	n	o
$R_t : 0.375$	p	q	r	s	t
$R_t : 0.5$	u	v	w	x	y

1.1 重力と熱流を同時にかける

まずは、重力と熱流を同じタイミングでかけたシミュレーションを用意した。粒子数については 1250 個と少なめではあるが、他のパラメータについては先行研究 [1] を参考にした。

- $N = 1250$
- $\rho\sigma^2 = 0.4$
- $L_x/\sigma \simeq 39.5$
- $L_y/\sigma \simeq 79.0$
- $k_B T/\varepsilon = 0.43$
- $k_B \Delta T/\varepsilon = 0.04$

- $mg\sigma/\varepsilon \simeq 4.0 \times 10^{-4}$
- $t_f \sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 2.0 \times 10^5$

図 1.1 で定常状態 ($t \sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 2.0 \times 10^5$) 時点でのスナップショットを見る.

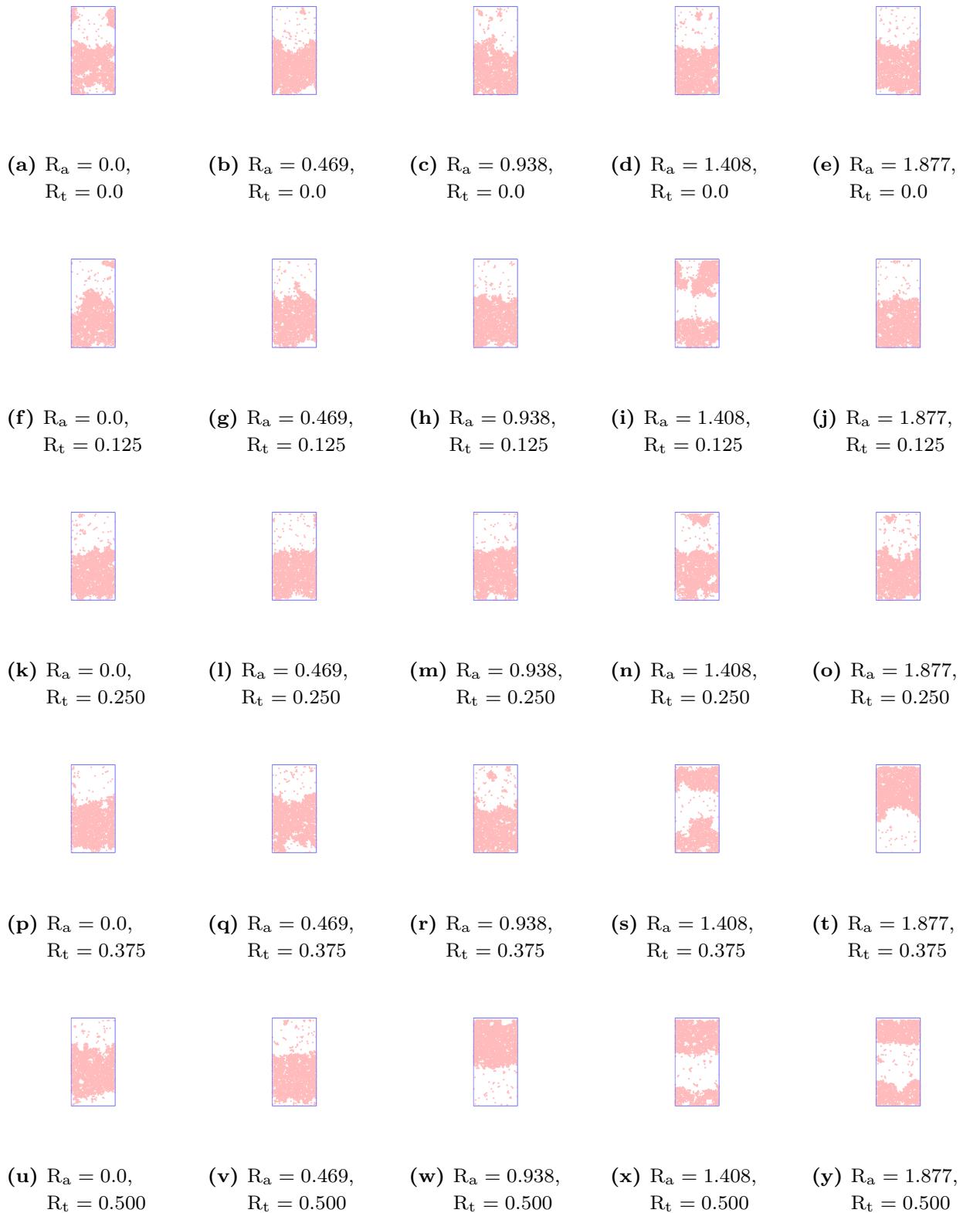


図 1.1: $t\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 2.0 \times 10^5$ のスナップショット. リンク先の動画は $t\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 200$ ごとに描画.

スナップショットだけではダイナミクスがわからないので、次に図 1.3 で重心位置 Y_g (式 (1.1.0.1)) を使って、時間変化の様子を見る。

$$Y_g \equiv \bar{y}_i = \frac{1}{N} \sum_i^N y_i \quad (1.1.0.1)$$

重心位置 Y_g を、系の y 幅を用いて $0 \sim 1$ にスケーリングして、時系列プロットしている。

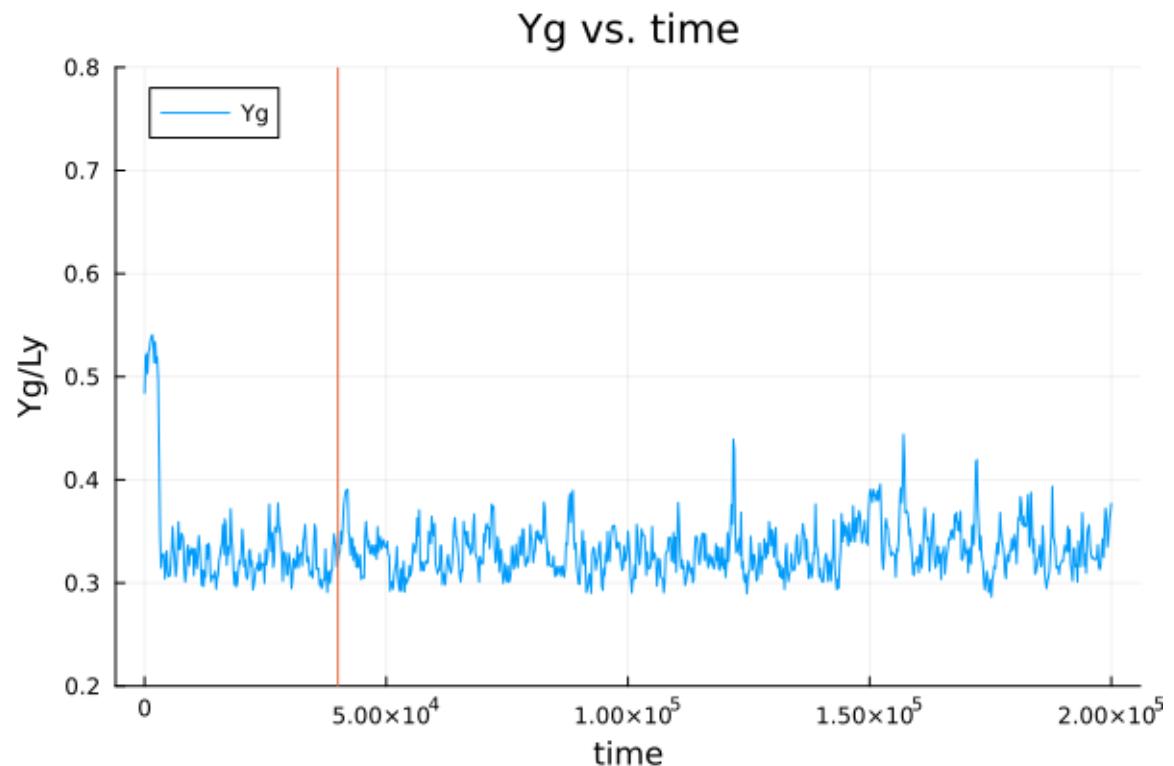


図 1.2: $R_a = 0.0, R_t = 0.0$

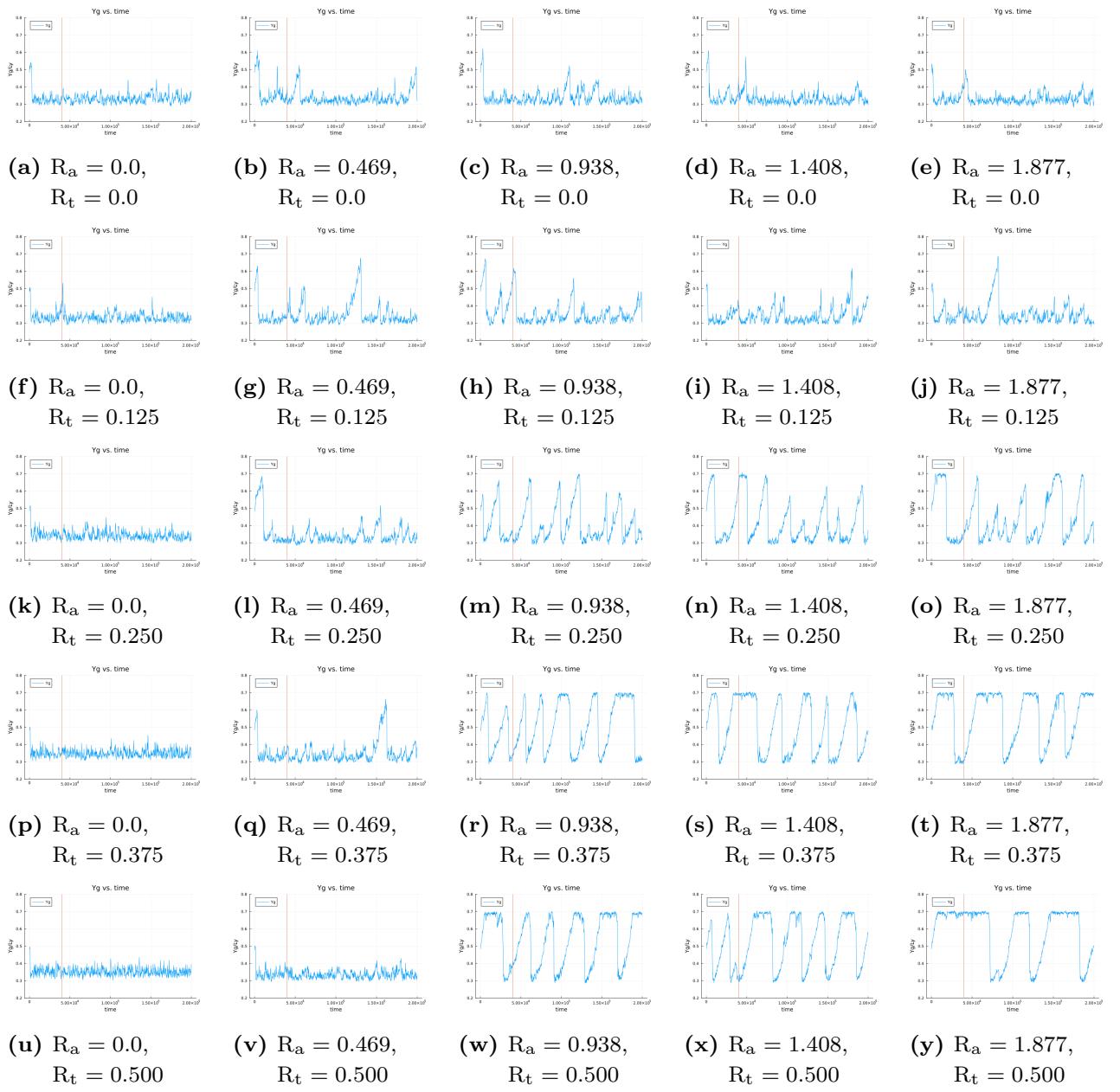


図 1.3: $t_i = 0, t_f = 2.0 \times 10^5, dt\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 0.005, t\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 200$ ごとにプロット.

図 1.3 では、初期条件から $t_f\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 2.0 \times 10^5$ までの時間変化をプロットしており、赤い線の時刻あたりで定常状態に到達していると判断した。図 1.3 を見ると、引力幅 $R_a = 0.0$ の時は、ある定常状態のまわりのランダムなゆらぎが観測されているが、 $R_a \geq 0.938, R_t \geq 0.25$ の時は決してランダムとは言えない。周期的なダイナミクスが発生していることが見てとれる。しかし、

1.2 重力を先にかけて、熱流を後からかける

初期条件が異なる場合にダイナミクスが変化するかを調べるために、重力と熱流をかけるタイミングをずらしたシミュレーションを設定した。まず、 $t\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 2.0 \times 10^5$ の時点まで重力のみをかけて、粒子集団が落ちきってから熱流をかける。

- $N = 1250$
- $\rho\sigma^2 = 0.4$
- $L_x/\sigma \simeq 79.0$
- $L_y/\sigma \simeq 158.1$
- $k_B T/\varepsilon = 4.3$
- $k_B \Delta T/\varepsilon = 0.0$
- $mg\sigma/\varepsilon \simeq 2.0 \times 10^{-4}$

温度差のある熱浴をそれぞれ改めて以下のようにつけ、熱流をかけてシミュレーションを続ける。熱流をかけ始めてから、定常状態に至るまでの時間を 1.1 節と同様に $t\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 4.0 \times 10^4$ として、重力をかけ始めてから数えて $t\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 2.4 \times 10^5$ の時点で定常状態に到達していると考える。

- $\chi = k_B \Delta T / mgL_y = 1.265$
- $k_B \Delta T/\varepsilon = 0.04$
- $t_i \sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 2.4 \times 10^5$
- $t_f \sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 4.0 \times 10^5$

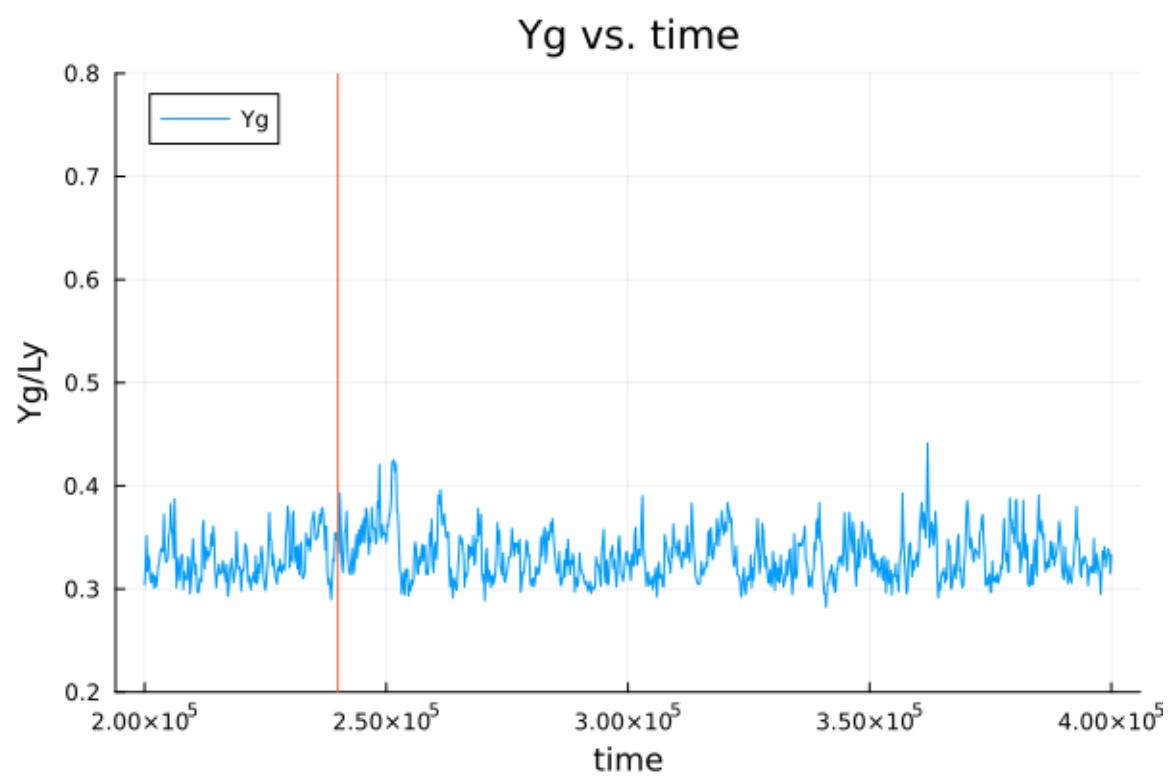


図 1.4: $R_a = 0.0, R_t = 0.0$

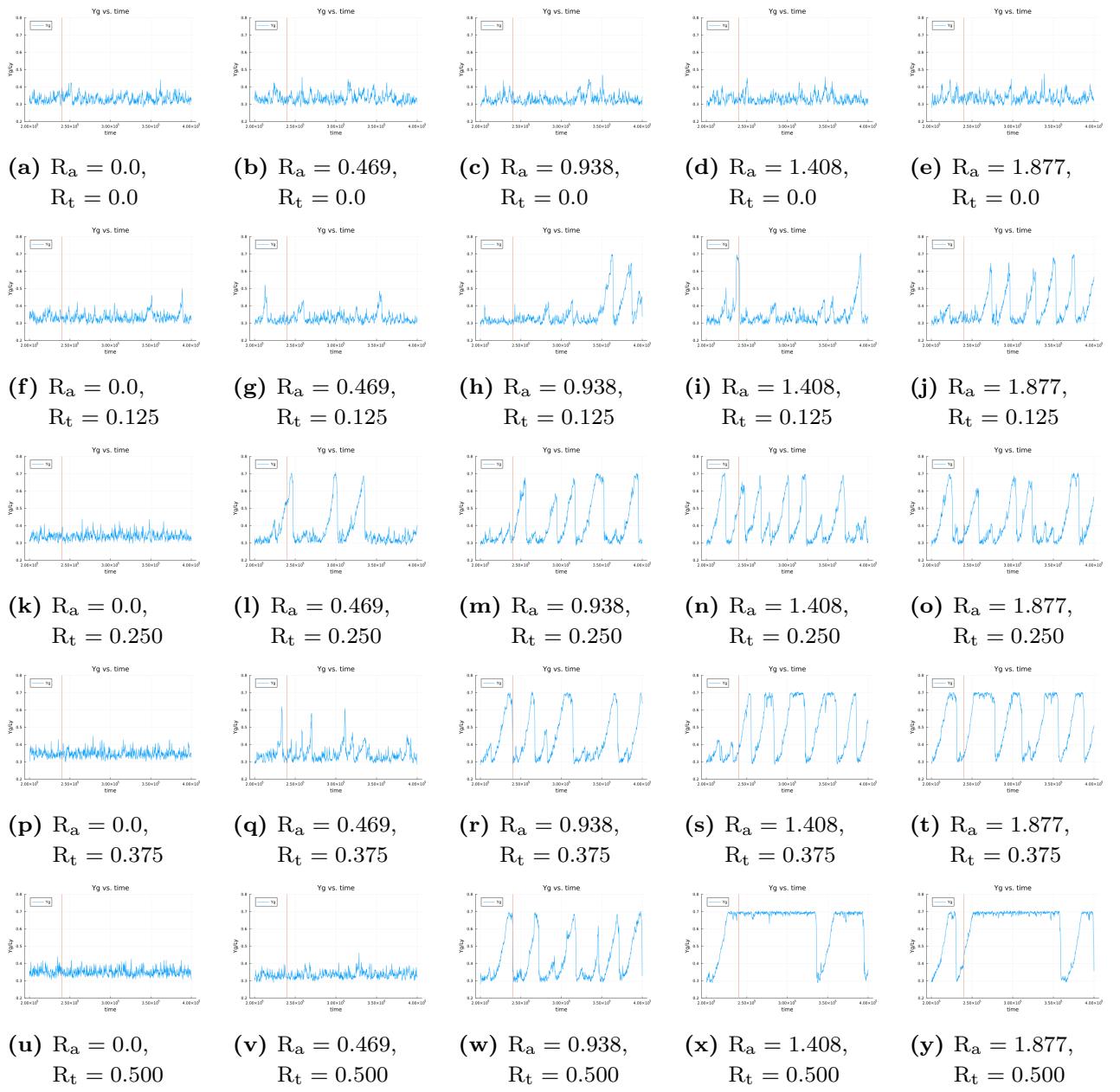


図 1.5: $t_i = 2.4 \times 10^5$, $t_f = 4.0 \times 10^5$, $dt\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 0.005$, $t\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 200$ ごとにプロット.

1.1 節と同様に、図 1.5 を見たとき、引力幅 $R_a = 0.0$ の時は、ある定常状態のまわりのランダムなゆらぎが観測されているが、 $R_a \geq 0.938$, $R_t \geq 0.25$ の時は決してランダムとは言えない。周期的なダイナミクスが発生していることが見てとれる。(x), (y) に注目すると、1.1 節でのそれと比べて、上壁に張りついている時間が長く見える。周期的なダイナミクスが発生しているのかどうか、1.6 節では、本節よりも長い時間をとって実験をする。

1.3 重力のみをかける

次に、重力のみをかけた系を考える。

- $N = 1250$
- $\rho\sigma^2 = 0.4$
- $L_x/\sigma \simeq 39.5$
- $L_y/\sigma \simeq 79.0$
- $k_B T/\varepsilon = 0.43$
- $k_B \Delta T/\varepsilon = 0.0$
- $mg\sigma/\varepsilon \simeq 4.0 \times 10^{-4}$
- $t_f \sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 2.0 \times 10^5$

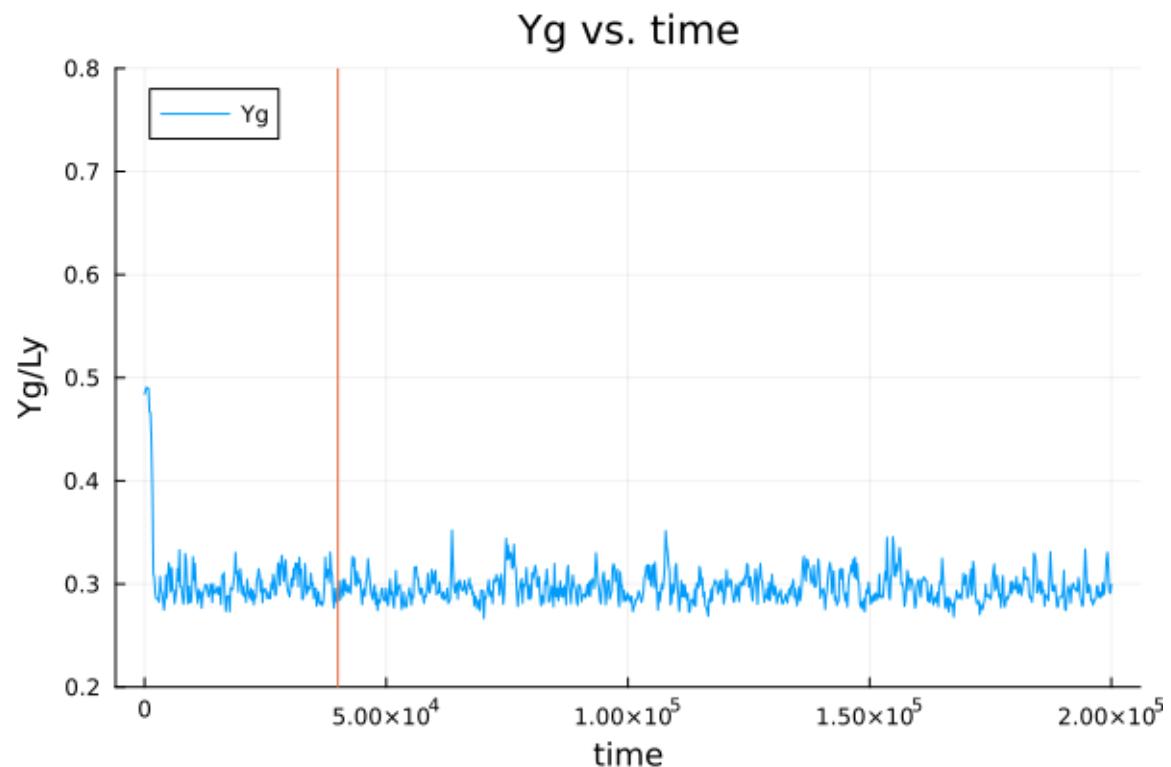


図 1.6: $R_a = 0.0, R_t = 0.0$

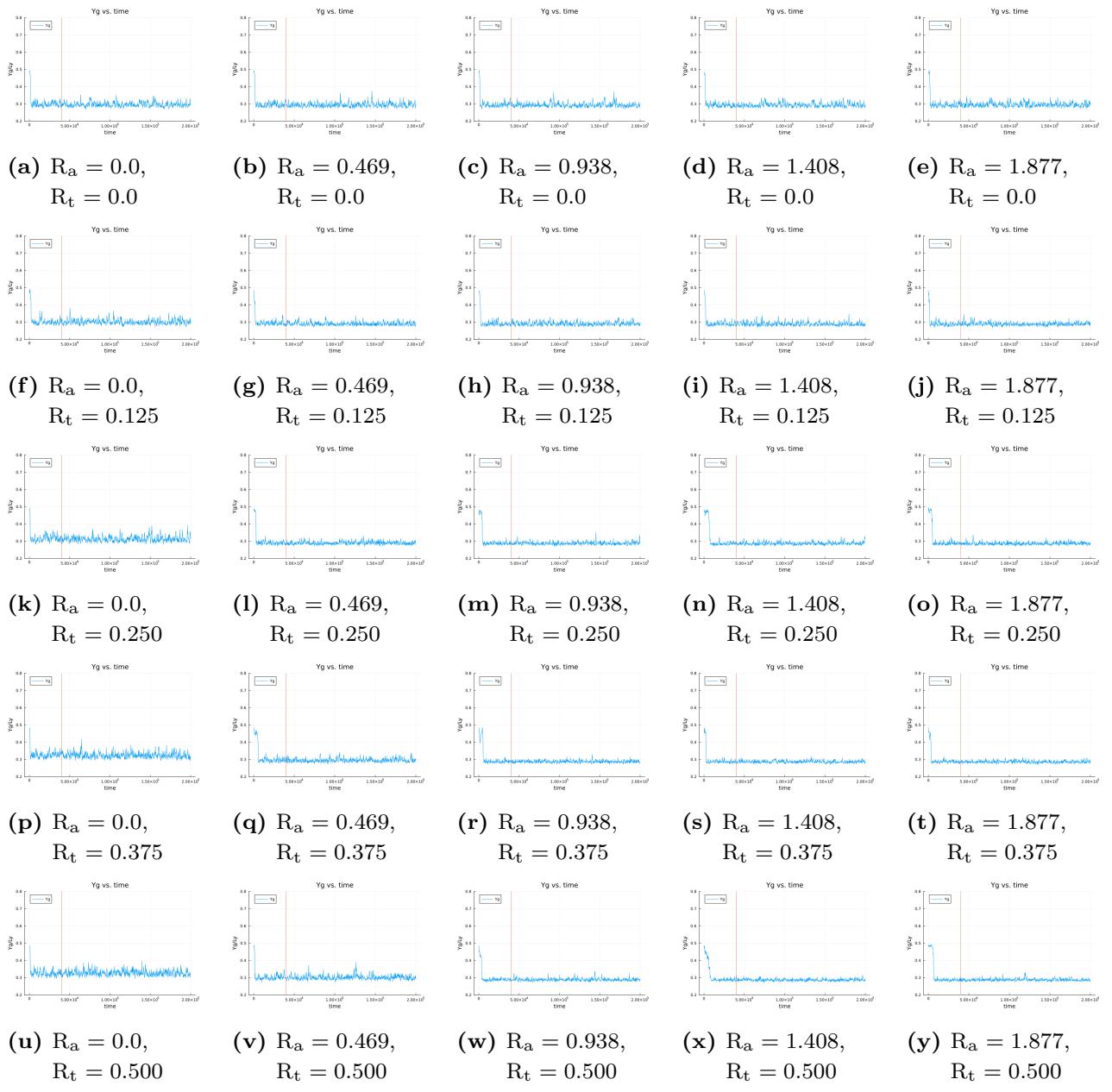


図 1.7: $t_i = 0$, $t_f = 2.0 \times 10^5$, $dt\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 0.005$, $t\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 200$ ごとにプロット.

1.4 熱流のみをかける

- $N = 1250$
- $\rho\sigma^2 = 0.4$
- $L_x/\sigma \simeq 39.5$
- $L_y/\sigma \simeq 79.0$
- $k_B T/\varepsilon = 0.43$
- $k_B \Delta T/\varepsilon = 0.04$

- $mg\sigma/\varepsilon = 0.0$
- $t_f \sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 2.0 \times 10^5$

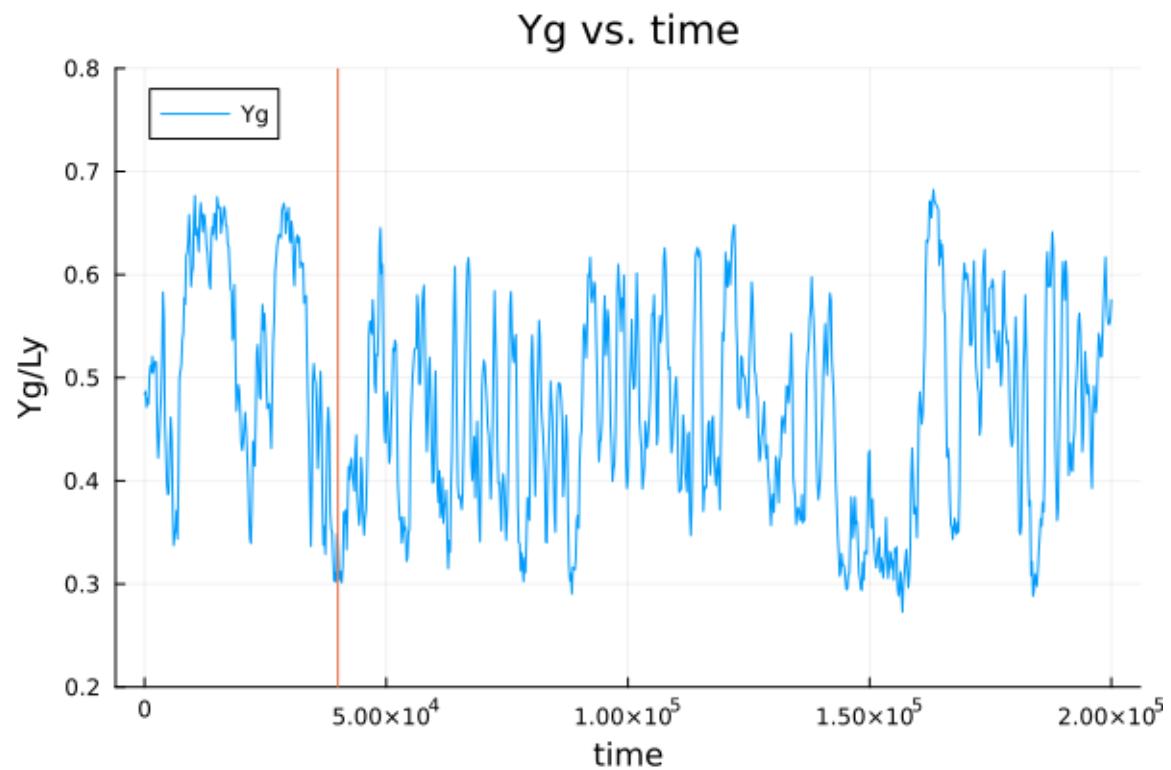


図 1.8: $R_a = 0.0, R_t = 0.0$

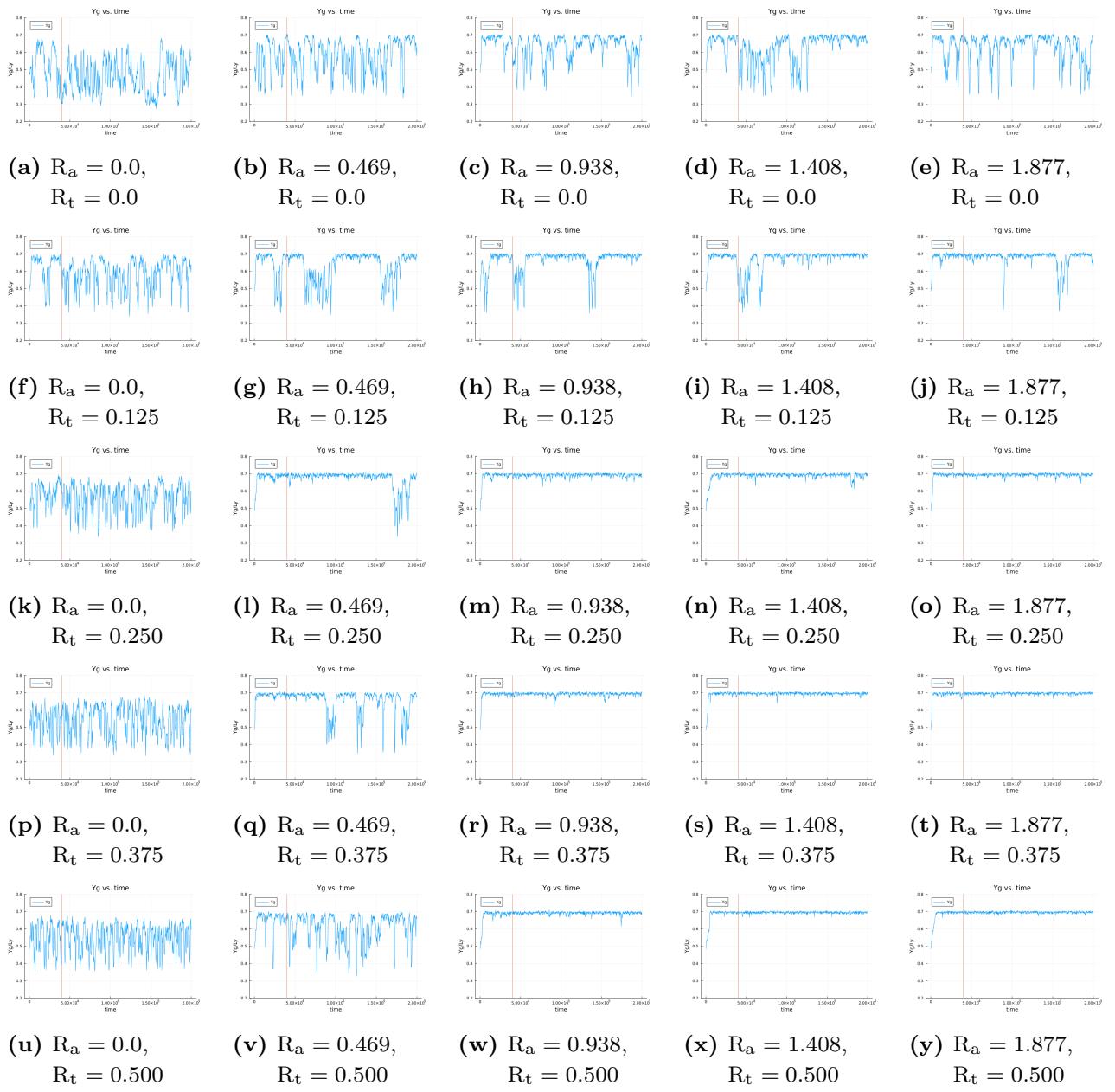


図 1.9: $t_i = 0$, $t_f = 2.0 \times 10^5$, $dt\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 0.005$, $t\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 200$ ごとにプロット.

1.5 重力と熱流を同時にかける (時間 10 倍)

- $N = 1250$
- $\rho\sigma^2 = 0.4$
- $L_x/\sigma \simeq 39.5$
- $L_y/\sigma \simeq 79.0$
- $k_B T/\varepsilon = 0.43$
- $k_B \Delta T/\varepsilon = 0.04$

- $mg\sigma/\varepsilon \simeq 4.0 \times 10^{-4}$
- $t_f \sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 2.0 \times 10^6$

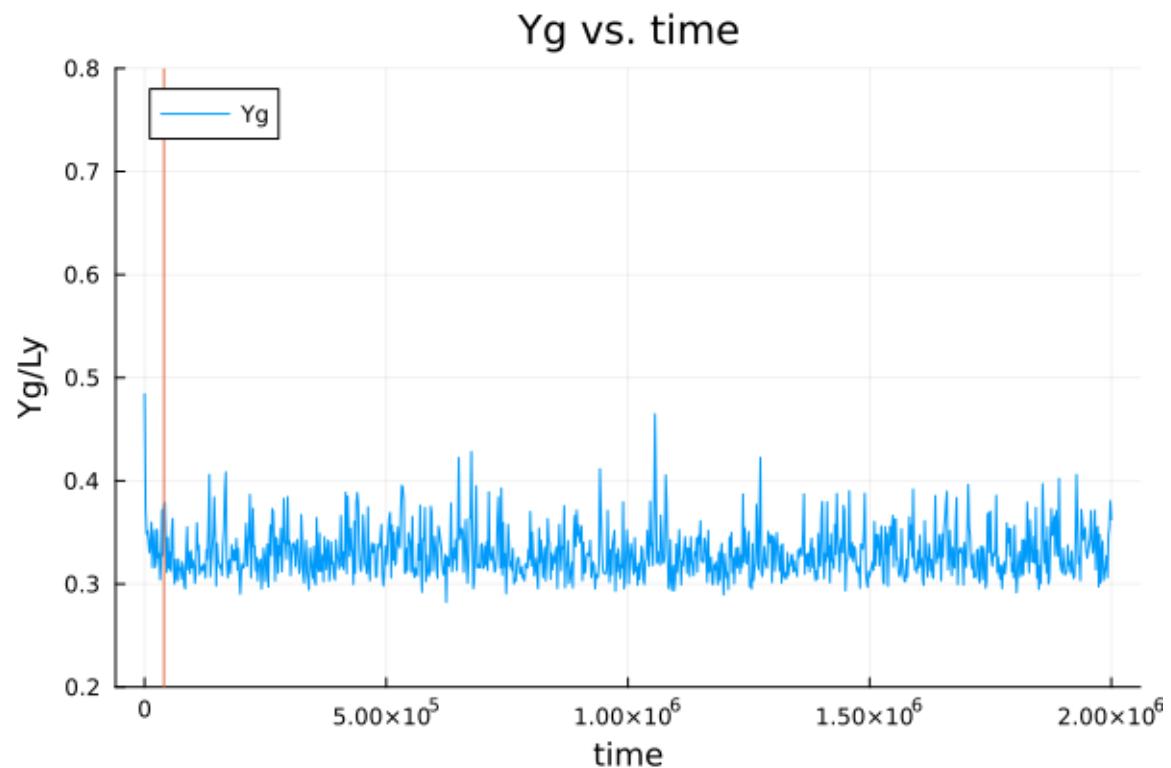


図 1.10: $R_a = 0.0, R_t = 0.0$

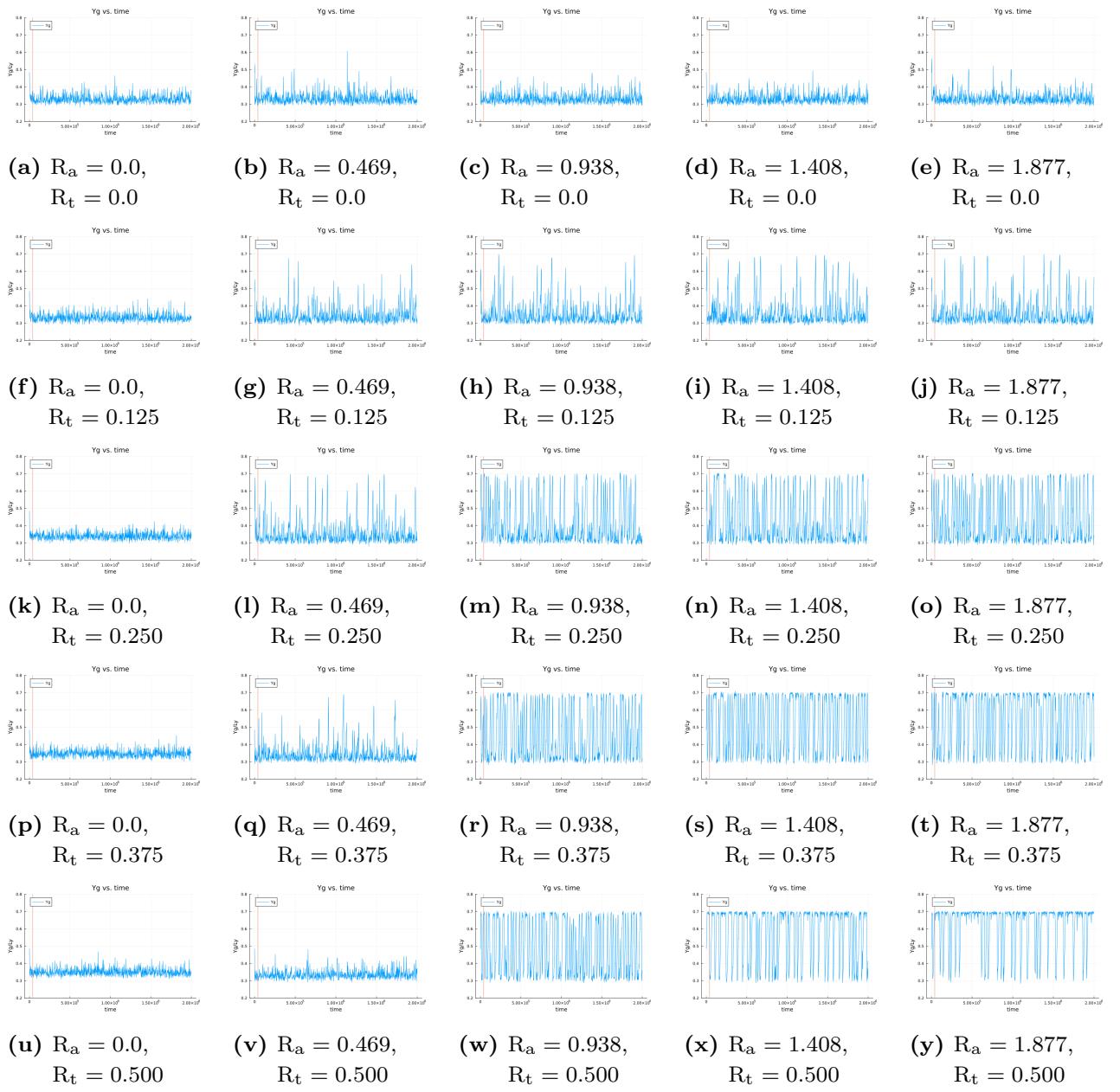


図 1.11: $t_i = 0$, $t_f = 2.0 \times 10^6$, $dt\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 0.005$, $t\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 2000$ ごとにプロット.

1.6 重力を先にかけて、熱流を後からかける（時間 10 倍）

先ほどと同様に重力のみをかけて、粒子集団が落ちきってから熱流をかけると同時に測定を開始する。

- $N = 1250$
- $\rho\sigma^2 = 0.4$
- $L_x/\sigma \simeq 39.5$

- $L_y/\sigma \simeq 79.0$
- $k_B T/\varepsilon = 4.3$
- $k_B \Delta T/\varepsilon = 0.0$
- $mg\sigma/\varepsilon \simeq 2.0 \times 10^{-4}$
- $t_f' \sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 2.0 \times 10^5$

続いて重力をかけた緩和後の系で、温度差のある熱浴をそれぞれ改めて以下のようにつけ、熱流をかけてシミュレーションをする。

- $\chi = k_B \Delta T / mg L_y = 1.265$
- $k_B \Delta T/\varepsilon = 0.04$
- $t_i \sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 2.4 \times 10^5$
- $t_f \sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 2.2 \times 10^6$

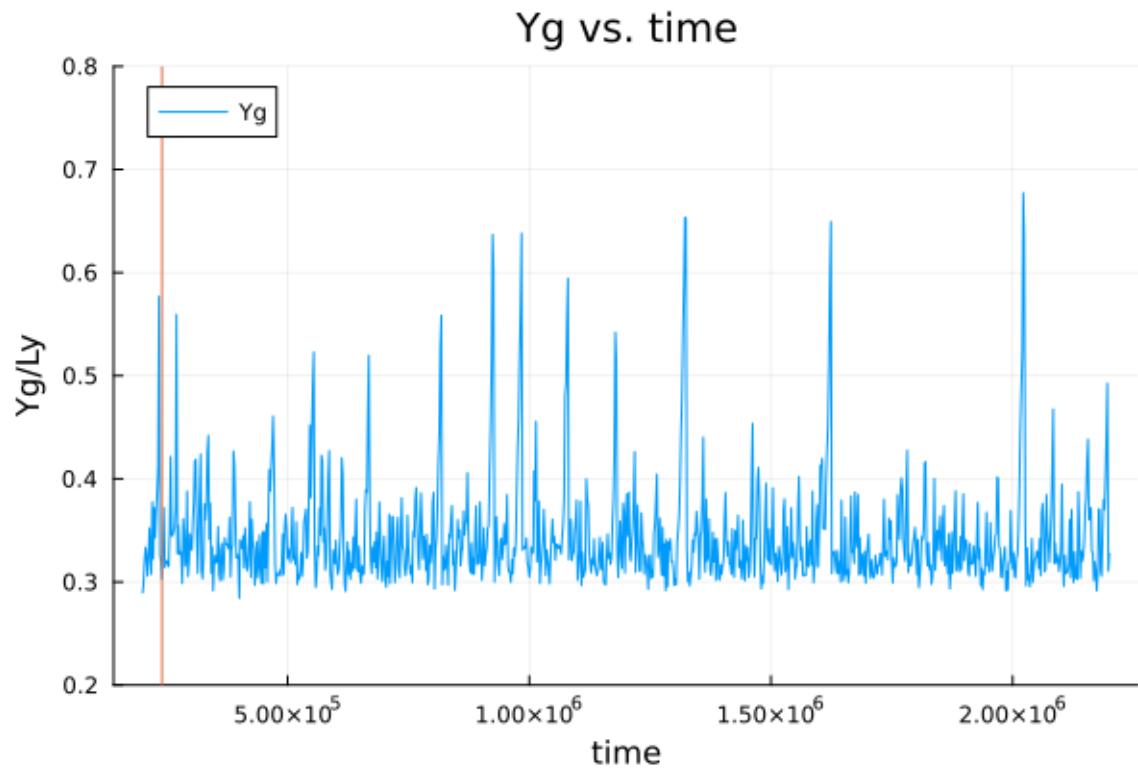


図 1.12: $R_a = 0.0, R_t = 0.0$

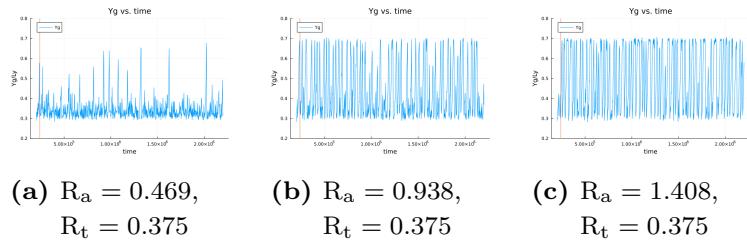


図 1.13: $t_i = 2.4 \times 10^5, t_f = 2.2 \times 10^6, t\sqrt{\epsilon/m\sigma^2} = 2000$ ごとにプロット.

参考文献

- [1] N. Nakagawa A. Yoshida and S. Sasa. arxiv:2310.05817.