The University of Osaka
Institutional Knowledge Archive

Title	分子動力学系内の局所的な面における応力・熱流の抽出法と動的接触線の解析への応用
Author(s)	楠戸, 宏城
Citation	大阪大学, 2022, 博士論文
Version Type	VoR
URL	https://doi.org/10.18910/89611
rights	
Note	

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

https://ir.library.osaka-u.ac.jp/

The University of Osaka

様式３

論　文　内　容　の　要　旨

氏　名　（　　楠戸　宏城　　）	
論文題名	分子動力学系内の局所的な面における応力・熱流の抽出法と 動的接触線の解析への応用

論文内容の要旨

固体・気体・液体の三相が交わる接触線が動的に移動する動的濡れ現象は，日々我々が目にする典型的な流体の流動現象であり，実用性の観点からも極めて重要である．しかしながら，連続体としての流体力学の方程式系で経験的に用いられるすべりなし境界条件を課して接触線近傍の流体運動を記述しようとすると，接触線において速度が不連続となることで妥当な解が求まり得ないという問題が知られている．このすべりなし境界条件を課した際の動的接触線における特異点の問題を回避する動的濡れモデルはいくつか提案されているが，それらは場当たり的なもので，特異点の近傍の散逸を無視したものや，すべりあり境界条件を課しつつも界面という本来はミクロスケールには厚みを持つものを無理やり境界条件として表現することで，動的接触線において各界面張力と固体壁面から流体が受ける摩擦力と固体壁面上での粘性応力がつり合うと表現したものであった．本研究では，動的濡れ現象のような巨視的に流れを有する分子動力学系における応力や熱流の分布を，連続体の保存則と整合するかたちで計算する枠組みの構築を行った．それに基づき，Lennard-Jones 流体を用いて，定常的に移動する固気液三相の接触線を分子動力学系により再現することで，これらの動的濡れモデルの妥当性を分子論の観点から詳細に論じ，代表的な動的濡れモデルの妥当性を分子動力学解析から検証し，それらに対する問題提起を行った．本論文は以下の6章で構成される．

第１章では，静的な濡れを表すYoungの式に対する，ミクロスケールでの力学的つり合いの解釈に関する既往の報告と，それを動的系に拡張する方法の概要を述べるとともに，既存の動的濡れモデルの詳細を説明した．また，本研究で行う分子動力学解析とこれらのモデルを対比する上で，連続体の保存則との整合性から，局所的に設定した検査面に対して応力や熱流を定義することの必要性について述べ，研究目的を示した．

第２章では，本研究で取り扱う分子動力学法の基本的な方法論について述べ，第３章では，通常は静止平衡系で検査面上での応力を計算する手法である検査面の方法（Method-of-Plane，以下MoP）を拡張することで，連続体の保存則に整合するかたちで各種物理量を定義する手法を提案した．その際，有限の面積の検査面上で平均化された巨視的な物理量は，検査面を通過する分子のもつ微視的な物理量を検査面法線方向速度の絶対値の逆数で重みづけすることで計算できることがわかった．これに基づいて，応力，熱流束などの連続体の保存則の基本的な変数を計算する方法を提案した．第４章では，提案したMoPを数値計算によって検証するために，まず，準一次元Couette 流系内部の密度，速度の分布をMoPにより計算し，これらが従来の体積平均の方法と矛盾しないことを示した．さらに，MoPにより計算した応力，熱流束の分布が連続体での Couette 流系の解と矛盾しないことも確認した．

第５章では，既存の動的濡れモデルに対する問題提起を行うため，液滴をふたつの壁で挟み，それらの壁に一定の速度差を与えることで，固気液三相の動的接触線を有する定常な準二次元系を再現し，前進，後退接触角に差異が表れることを示した．同時に，系内に設置した検査体積の表面を通過する質量流束を計算することで，提案したMoPが連続体の保存則と整合することを確認した．MoPによる応力解析に基づき，局所的な粘性の存在，および界面張力との分離が困難であることを示した．また，動的接触線における力のつり合いを各界面張力と摩擦力と粘性応力で表現するならば，ミクロスケールでは界面は厚みを持つため，粘性応力の作用する面は固体壁面から数nm離れた場所に設定するべきで，それに対して摩擦力の作用する領域は固体壁面から約0.4 nmの領域であるため，動的濡れ現象を境界条件として表現するのは難しいことを示した．さらに，熱流解析の結果から，固体が流体に対して形成するポテンシャル場を定常な流線が通過することで接触線近傍に現れる疑似的な潜熱の存在を明らかにした．これらに基づき，既存のモデルとの対比から，動的濡れ現象のモデル化を行う上で検討すべきミクロスケール特有の事象を明らかにした．

第6章は結論である．まず，本研究では，分子動力学系における応力や熱流束といった場を連続体の保存則と整合するかたちで定義する手法を提案した．それに基づき，動的濡れ現象を分子動力学法により解析したところ，今後動的濡れモデルを構築する上で局所的な粘性や接触線近傍の疑似的な潜熱を考慮すべきことが明らかになった．また，本研究で用いた手法を拡張することで可能となる新たな解析の方向性や，物理現象について示した．

様式 7

論文審査の結果の要旨及び担当者

氏　名　（　楠戸　宏城　）			
論文審査担当者		（職）	氏　名
	主 査	准教授	山口　康隆
	副 査	教授	矢野　猛
	副 査	教授	芝原　正彦
	副 査	准教授	竹内　伸太郎

論文審査の結果の要旨

固体・気体・液体の三相が交わる接触線が動的に移動する動的濡れ現象は、日々我々が目にする典型的な流体の流動現象であり、実用性の観点からも極めて重要である。しかしながら、連続体としての流体力学の方程式系で経験的に用いられるすべりなし境界条件を課して接触線近傍の流体運動を記述しようとすると、接触線において速度が不連続となることで妥当な解が求まり得ないという問題が知られている。このすべりなし境界条件を課した際の動的接触線における特異点の問題を回避する動的濡れモデルはいくつか提案されているが、それらは場当たり的なもので、特異点の近傍の散逸を無視したものや、すべりあり境界条件を課しつつも界面という本来はミクロスケールには厚みを持つものを無理やり境界条件として表現することで、動的接触線において各界面張力と固体壁面から流体が受ける摩擦力と固体壁面上での粘性応力がつり合うと表現したものであった。本論文では、動的濡れ現象のような巨視的に流れを有する分子動力学系における応力や熱流の分布を、連続体の保存則と整合するかたちで計算する枠組みの構築が行われている。それに基づき、Lennard-Jones 流体を用いて、定常的に移動する固気液三相の接触線を分子動力学系により再現することで、これらの動的濡れモデルの妥当性を分子論の観点から詳細に論じられ、代表的な動的濡れモデルの妥当性を分子動力学解析からの検証と、それらに対する問題提起が行われている。本論文は以下の６章で構成されている。

第１章では、静的な濡れを表す Young の式に対する、ミクロスケールでの力学的つり合いの解釈に関する既往の報告と、それを動的系に拡張する方法の概要が述べられ、既存の動的濡れモデルの詳細が説明されている。また、本研究で行う分子動力学解析とこれらのモデルを対比する上で、連続体の保存則との整合性から、局所的に設定した検査面に対して応力や熱流を定義することの必要性について述べられ、研究目的が示されている。

第２章では、本研究で取り扱う分子動力学法の基本的な方法論について述べられ、第３章では、通常は静止平衡系で検査面上での応力を計算する手法である検査面の方法（Method-of-Plane、以下 MoP）を拡張することで、連続体の保存則に整合するかたちで各種物理量を定義する手法が提案されている。その際、有限の面積の検査面上で平均化された巨視的な物理量は、検査面を通過する分子のもつ微視的な物理量を検査面法線方向速度の絶対値の逆数で重みづけすることで計算できることが示されている。これに基づいて、応力、熱流束などの連続体の保存則の基本的な変数を計算する方法が提案されている。第４章では、提案された MoP の数値計算による検証が行われている。まず、準一次元 Couette 流系内部の密度、速度の分布を MoP により計算し、これらが従来の体積平均の方法と矛盾しないことが示されている。さらに、MoP により計算した応力、熱流束の分布が連続体での Couette 流系の解と矛盾しないことも確認されている。

第５章では、既存の動的濡れモデルに対する問題提起を行うため、液滴をふたつの壁で挟み、それらの壁に一

定の速度差を与えることで、固気液三相の動的接触線を有する定常な準二次元系を再現している。これにより、前進、後退接触角に差異が表れることが示されているが、同時に、系内に設置した検査体積の表面を通過する質量流束を計算することで、提案したMoPが、確かに連続体の保存則と整合することが示されている。加えて、MoPによる応力解析に基づき、局所的な粘性の存在、および界面張力との分離が困難であることが述べられている。また、動的接触線における力のつり合いを各界面張力と摩擦力と粘性応力で表現するならば、ミクロスケールでは界面は厚みを持つため、粘性応力の作用する面は固体壁面から数nm離れた場所に設定するべきであり、それに対して摩擦力の作用する領域は固体壁面から約 0.4 nm の領域であるため、動的濡れ現象を境界条件として表現するのは難しいことが示されている。さらに熱流解析の結果から、固体が流体に対して形成するポテンシャル場を定常な流線が通過することで接触線近傍に現れる疑似的な潜熱の存在が明らかにされている。これらに基づき、既存のモデルとの対比から、動的濡れ現象のモデル化を行う上で検討すべきミクロスケール特有の事象が明示されている。

第6章は結論であり、本論文で提案された、分子動力学系における応力や熱流束といった場を連続体の保存則と整合するかたちで定義する手法についてまとめられている。また、それに基づき、動的濡れ現象を分子動力学法で解析することにより、今後動的濡れモデルを構築する上で局所的な粘性や接触線近傍の疑似的な潜熱を考慮すべきことが示されている。また、本論文で用いた手法を拡張することで可能となる新たな解析の方向性や、物理現象について述べられている。

以上のように、本論文の主題の一つである濡れという現象自体が極めて日常的かつ幅広いものであり、本論文で得られた濡れに関する知見が基礎、応用の両面から大きな意味を持つことに加え、新たに提案されている流動を含む分子動力学系における応力・熱流の抽出方法は、ここで取り扱われている動的濡れの系に限らず、他の界面を有する系についての分子動力学シミュレーションに対しても広く適用可能なものであり、十分な学術的価値が認められる。

よって本論文は博士論文として価値あるものと認める。