

令和 5 年 5 月 31 日現在

機関番号：24405

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2018～2022

課題番号：18K03929

研究課題名(和文) Navier境界条件の再定義：固体面における流体力学的境界条件の構築

研究課題名(英文) Re-definition of Navier boundary condition: development of the hydrodynamic boundary condition on the solid surface

研究代表者

大森 健史 (Omori, Takeshi)

大阪公立大学・大学院工学研究科・准教授

研究者番号：70467546

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,500,000円

研究成果の概要(和文)：固体面における流体力学的境界条件の構成要素は条件式および境界条件を課すべき位置(流体力学的壁位置)である。本研究では条件式として壁面摩擦応力と滑り速度の間に比例関係があると仮定する(液体に対しては実用的な条件下では正しいと考えてよい) Navier境界条件を採用し、比例係数である固液摩擦係数と流体力学的壁位置を共に同定する理論を構築し、分子動力学法を用いた解析結果に理論を適用して、その有用性を示した。また、数値流体力学による流動解析において、任意形状の壁面にNavier境界条件を適用するための手法を開発し、研究の実用面への展開も行った。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究は、流体運動に対する壁面境界条件を課すべき位置は壁面とは異なりNavier-Stokes方程式が成立する領域外縁であるということを初めて明確に示し、境界位置と境界条件に含まれる未定係数の計測方法についても提案したものである。また、分子動力学解析によって求めた壁面摩擦応力の自己相関関数をGreen-Kubo積分すると収束値がゼロになってしまう(実はこれも正しくなく実際にはゼロにはならない)という「プラトー(Plateau)問題」を解決した点は流体力学だけでなく非平衡統計力学における意義も大きいと考える。

研究成果の概要(英文)：The hydrodynamic boundary condition (BC) consists of two elements: not only the constitutive equation for the condition but the boundary position where the condition should be imposed (the hydrodynamic wall position, HWP) need to be specified. As the constitutive equation, we employed Navier BC (NBC) assuming the wall shear stress is proportional to the slip velocity, and developed methods to determine both the HWP and the solid-liquid friction coefficient (FC), the proportionality coefficient in NBC, on our theoretical basis. We applied the present methods to a number of molecular dynamics (MD) simulation data and showed their significant advantages over the conventional methods, which usually fail to calculate correct FCs from MD simulation data. We have also developed a numerical scheme to apply NBC on arbitrary shaped walls in computational fluid dynamics, which can be used for flow prediction e.g. in fine and complex conduits.

研究分野：流体工学

キーワード：固液摩擦 滑り長さ 非平衡統計力学 Green-Kubo積分 Navier境界条件 動的濡れ 分子動力学

1. 研究開始当初の背景

固体面（壁面）における Navier-Stokes 方程式の境界条件（以下、流体力学的境界条件と称す）として最もよく用いられるものは、流速が壁面の移動速度に一致するという滑りなし境界条件であるが、一般的には希薄気体だけでなく液体も壁面上で滑り速度をもっている (Thompson & Robbins, 1990)。例えば、半導体基板の洗浄プロセスや生体膜を模倣した物質の分離プロセスにおいては流路幅がナノメートルのオーダーになるため、滑り速度の効果が顕著になり、壁面における滑りなし境界条件を前提とした設計・制御は有効でない。

壁面上での流体の滑り速度を与えるモデルには、流体の滑り速度と壁面剪断応力に比例関係があるとする Navier「境界条件」があり、比例係数（摩擦係数と呼ばれる）について多くの理論的・数値的研究が行われている。強調しておきたいのは Navier 境界条件そのものは Navier-Stokes 方程式の境界条件ではないということである。壁面剪断応力に対する Newton の粘性法則と合わせてはじめて Navier-Stokes 方程式に対するロビン型境界条件が構成される。ところが、壁面近傍では流体は層構造をなすため、Newton の粘性法則は壁面から一定距離離れたところでしか成立しない。したがって、壁面における Navier-Stokes 方程式の境界条件を構築するためには、壁面とは一致しない流体力学的境界面をどこに設定すべきなのか、その境界面において剪断応力がどのように与えられるべきなのかを明らかにしなければならない。

流体力学的境界面を Newton の粘性法則が成り立つバルク領域の縁であるとして同定する研究や Navier 境界条件の成立について調べる研究は、個別には前者について数例、後者について多数存在しているが、流体力学的境界条件を構築するために必要な、両者を統合した研究は過去に Bocquet と Barrat (1994) による試みが一例あるのみである。なお、Bocquet と Barrat による理論では熱力学極限をとることが前提であるため、理論に現れる各種相関を微小スケール流動の解析に多用される、分子動力学法を用いて実際に求めることができないという問題がある。

2. 研究の目的

我々の身の回りにある物体周りや流路内の単相流れを考えるのであれば、滑りなし境界条件は Navier-Stokes 方程式の境界条件として十分な精度で有効である。しかしながら、次世代の物質分離プロセス (Shannon et al., 2008; Park & Jung, 2014) や半導体基板洗浄プロセス (Xu et al., 2014) においては流路幅がサブミクロンのオーダーになる。そこで実測された流量は滑りなし境界条件を適用して予測されたものに対して桁違いに大きくなっており、壁面上での滑り速度が無視できないことは明らかである。また、作動流体が混相である場合には、流路幅が微小サイズでなかったとしても、壁面上に形成された移動接触線においては滑り速度の存在は無視できず、マクロの流れに影響する (Qian et al., 2003; 著者ら, 2015, 2017)。したがって、動的濡れの数理モデル構築（原油採取、スプレー・コーティング、燃料電池など多くの工業分野にとって重要である）のためには滑り境界条件の理論確立が強く望まれる。

「背景」で述べた通り、壁面上での滑り速度を与えるだけでは Navier-Stokes 方程式の境界条件としては機能しない (著者ら, 2015)。本研究では、壁面上での滑り速度を与える Navier「境界条件」を、バルク流体と接続できる流体力学的境界面における滑り速度を与える境界条件として再定義する。

3. 研究の方法

分子動力学 (MD) 法を用いてナノスケールチャネル内の液体流れを数値計算によって再現した。壁面の並進運動（外場）によって流れを駆動する非平衡 MD 系（図 1）と外場を与えない平衡 MD 系それぞれについて固液摩擦係数の同定と物理的解釈を行なった。MD 法による解析結果を単純に処理するだけでは流体力学的境界条件についての考察にはつながらない。本研究では、まず非平衡系に対して、流体運動は壁面とは異なる位置（未定の固液境界位置）に課された Navier 境

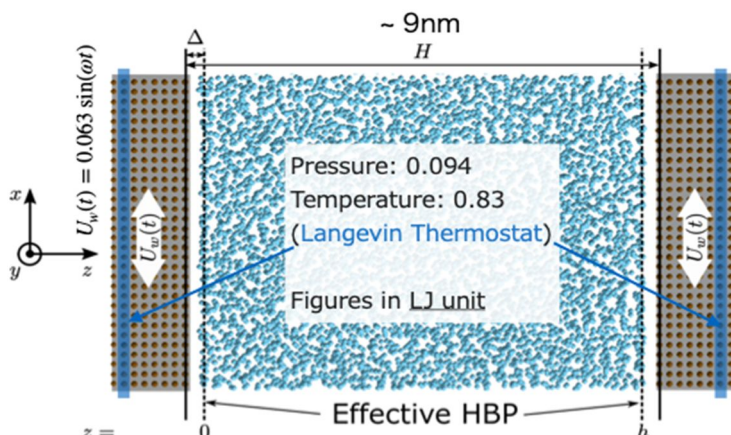


図 1: 非平衡 MD 系の一例 (T. Omori et al., Physical Review Fluids, 4-11, 2019 より一部改変して転載)。両側の壁面を同速度で上下に振動させて流体を駆動し、流体運動の周波数特性を数値解析した。

界条件のもとで Stokes 方程式に従うと考えて壁面速度に対する壁面剪断応力の応答を立式し、MD 解析で得られた壁面剪断応力の周波数特性データのフィッティングから固液摩擦係数と固液境界位置を共に同定した。次に、平衡系においても瞬時の流体揺らぎが同じ応答関数に従うとの考えのもと固液摩擦係数に対する Green-Kubo 積分を立式し、平衡 MD 解析からも固液摩擦係数を同定した。

4. 研究成果

非平衡系・平衡系において求めた固液摩擦係数はよく一致しており、平衡系における流体の揺らぎが巨視的な流体力学に従うということが強く示唆された。平衡 MD 解析で固液摩擦係数を求める際の問題として、Green-Kubo 積分の収束値がゼロになってしまうという「プラトー (Plateau) 問題」がよく知られているが、本研究での流体力学を組み入れた Green-Kubo 積分の理論式からは収束値はゼロではなく滑り長さと流路幅に依存した値となることが予測され、MD 解析結果からこの予測の正しさが立証された。なお、流路幅が無限大となる熱力学極限においては積分の収束値はゼロとなる。この成果は流体力学だけでなく非平衡統計力学における意義も大きいと考える。

非平衡系での解析により、ナノスケール幅のチャンネル流れであっても、Navier 境界条件を適切な境界位置に課せば、流れは Stokes 方程式で記述できることが直接的に示された。このことは、微細流れを高コストな MD 解析に頼ることなく連続体力学によって予測できることを示しており、工学的な意義が大きい。なお、固液摩擦係数の周波数依存性は、多くの場合にバルク部の粘性係数と同様に Maxwell モデルでよく表され、その時定数はピコ秒のオーダーであったので通常の流動解析においては弾性を無視して定数として取り扱ってよい。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計8件（うち査読付論文 8件/うち国際共著 5件/うちオープンアクセス 5件）

1. 著者名 Oga Haruki, Omori Takeshi, Herrero Cecilia, Merabia Samy, Joly Laurent, Yamaguchi Yasutaka	4. 巻 3
2. 論文標題 Theoretical framework for the atomistic modeling of frequency-dependent liquid-solid friction	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Review Research	6. 最初と最後の頁 1~6
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1103/physrevresearch.3.1032019	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 該当する
1. 著者名 Chen Kuan-Ting, Li Qin-Yi, Omori Takeshi, Yamaguchi Yasutaka, Ikuta Tatsuya, Takahashi Koji	4. 巻 189
2. 論文標題 Slip length measurement in rectangular graphene nanochannels with a 3D flow analysis	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Carbon	6. 最初と最後の頁 162~172
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1016/j.carbon.2021.12.048	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Herrero Cecilia, Omori Takeshi, Yamaguchi Yasutaka, Joly Laurent	4. 巻 151
2. 論文標題 Shear force measurement of the hydrodynamic wall position in molecular dynamics	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 41103
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1063/1.5111966	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する
1. 著者名 Ogawa Koshun, Oga Haruki, Kusudo Hiroki, Yamaguchi Yasutaka, Omori Takeshi, Merabia Samy, Joly Laurent	4. 巻 100
2. 論文標題 Large effect of lateral box size in molecular dynamics simulations of liquid-solid friction	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physical Review E	6. 最初と最後の頁 23101
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1103/PhysRevE.100.023101	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 該当する

1. 著者名 Oga Haruki, Yamaguchi Yasutaka, Omori Takeshi, Merabia Samy, Joly Laurent	4. 巻 151
2. 論文標題 Green-Kubo measurement of liquid-solid friction in finite-size systems	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 54502
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.5104335	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Omori Takeshi, Inoue Naoki, Joly Laurent, Merabia Samy, Yamaguchi Yasutaka	4. 巻 4
2. 論文標題 Full characterization of the hydrodynamic boundary condition at the atomic scale using an oscillating channel: Identification of the viscoelastic interfacial friction and the hydrodynamic boundary position	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physical Review Fluids	6. 最初と最後の頁 114201
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevFluids.4.114201	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Yamaguchi Yasutaka, Kusudo Hiroki, Surblys Donatas, Omori Takeshi, Kikugawa Gota	4. 巻 150
2. 論文標題 Interpretation of Young's equation for a liquid droplet on a flat and smooth solid surface: Mechanical and thermodynamic routes with a simple Lennard-Jones liquid	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 044701 ~ 044701
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.5053881	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Omori Takeshi, Kobayashi Yosuke, Yamaguchi Yasutaka, Kajishima Takeo	4. 巻 to appear
2. 論文標題 Understanding the asymmetry between advancing and receding microscopic contact angles	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Soft Matter	6. 最初と最後の頁 to appear
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/C9SM00521H	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計33件（うち招待講演 0件 / うち国際学会 2件）

1. 発表者名 大賀 春輝, 千崎 亮平, 大森 健史, 山口 康隆
2. 発表標題 平衡分子動力学系を用いた壁面すべりを有するPoiseuille流れの流量抽出方法の提案
3. 学会等名 日本伝熱シンポジウム
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Kuan-Ting Chen, 大森 健史, 生田 竜也, 李 秦宜, 山口 康隆, 高橋 厚史
2. 発表標題 Measurement and modulation of the liquid slip length in graphene nanochannels
3. 学会等名 日本伝熱シンポジウム
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 大賀 春輝, 大森 健史, 山口 康隆
2. 発表標題 線形応答理論から導かれる平衡ゆらぎと非定常応答との関係に関する分子動力学解析
3. 学会等名 日本流体力学会年会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 山本紘生, 大森健史
2. 発表標題 微視的な幾何学的不均一性のある固体面における流体力学的境界条件
3. 学会等名 数値流体力学シンポジウム
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 大賀 春輝, 大森 健史, 山口 康隆
2. 発表標題 固体・液体間摩擦力の自己相関関数を用いた滑り長さの計測方法の提案と非平滑面への適用
3. 学会等名 数値流体力学シンポジウム
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 大賀 春輝, 千崎 亮平, 大森 健史, 山口 康隆
2. 発表標題 平衡分子動力学系を用いた壁面すべりを有するPoiseuille流れの流量抽出方法の提案
3. 学会等名 日本伝熱シンポジウム
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Kuan-Ting Chen, 大森 健史, 生田 竜也, 李 秦宜, 山口 康隆, 高橋 厚史
2. 発表標題 Measurement and modulation of the liquid slip length in graphene nanochannels
3. 学会等名 日本伝熱シンポジウム
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 楠戸 宏城, 大森 健史, 山口 康隆
2. 発表標題 動的濡れの非平衡分子動力学解析：熱流体場の抽出に基づく，前進・後退接触線近傍の局所的な温度上昇・低下の解析
3. 学会等名 日本伝熱シンポジウム
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 大賀 春輝, 大森 健史, 山口 康隆
2. 発表標題 線形応答理論から導かれる平衡ゆらぎと非定常応答との関係に関する分子動力学解析
3. 学会等名 日本流体力学会年会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 山本紘生, 大森健史
2. 発表標題 微視的な幾何学的不均一性のある固体面における流体力学的境界条件
3. 学会等名 数値流体力学シンポジウム
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 大賀 春輝, 大森 健史, 山口 康隆
2. 発表標題 固体・液体間摩擦力の自己相関関数を用いた滑り長さの計測方法の提案と非平滑面への適用
3. 学会等名 数値流体力学シンポジウム
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 楠戸 宏城, 大森 健史, 山口 康隆
2. 発表標題 Lennard-Jones 流体の動的接触線近傍の流れ場と粘性応力の抽出
3. 学会等名 日本伝熱シンポジウム
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 千崎 亮平, 大賀 春輝, 大森 健史, 山口 康隆
2. 発表標題 縞状の濡れ性の分布を持つ固体面と単純液体の間の摩擦に関する非平衡分子動力学解析
3. 学会等名 日本伝熱シンポジウム
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 大賀 春輝, 大森 健史, Herrero Cecilia, Merabia Samy, Joly Laurent, 山口 康隆
2. 発表標題 固液摩擦力の揺らぎを用いた固液摩擦の周波数特性の抽出
3. 学会等名 日本流体力学会年会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 藤井 健博, 大森 健史, 梶島 岳夫
2. 発表標題 滑り速度を有する境界に対する埋め込み境界射影法：境界力の分配演算子が満たすべき条件
3. 学会等名 数値流体力学シンポジウム
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 赤井 優斗, 大島 洋喜, 大森 健史, 山口 康隆, 梶島 岳夫
2. 発表標題 接触線近傍での流体界面の易動度
3. 学会等名 日本流体力学会年会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 大賀 春輝, 大森 健史, 山口 康隆
2. 発表標題 固液界面における摩擦力の揺らぎと流体力学の関係: Langevin 方程式を介した接続
3. 学会等名 日本流体力学会年会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 藤井 健博, 大森 健史, 梶島 岳夫
2. 発表標題 すべり境界条件に対する埋め込み境界射影法の開発
3. 学会等名 日本機械学会 流体工学部門講演会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 大賀 春輝, 大森 健史, 山口 康隆
2. 発表標題 平衡MDとLFHによる固液間剪断力の自己相関係数算出
3. 学会等名 数値流体力学シンポジウム
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 大賀春輝, 小川皓俊, 山口康隆, 大森健史
2. 発表標題 固体結晶面とLennard-Jones流体の間の固液摩擦に関する平衡, 非平衡分子動力学解析
3. 学会等名 日本伝熱シンポジウム
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 楠戸宏城, 山口康隆, 大森健史, 香川勝, 藤村秀夫
2. 発表標題 非平衡流れ場の応力分布の算出による固気液三相の動的接触角に関する分子動力学解析
3. 学会等名 日本伝熱シンポジウム
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 大森健史, 山口康隆, 梶島岳夫
2. 発表標題 接触線運動の運動方向に対する非対称性
3. 学会等名 混相流シンポジウム
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 楠戸宏城, 大森健史, 山口康隆
2. 発表標題 定常せん断を受ける壁面間のLennard-Jones流体の動的接触角に関する分子動力学解析
3. 学会等名 日本流体力学会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 大賀春輝, 大森健史, 山口康隆
2. 発表標題 Lennard-Jones流体と固体結晶面の間の滑り摩擦に関する平衡, 非平衡分子動力学解析
3. 学会等名 日本流体力学会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 小川皓俊, 大賀春輝, 楠戸宏城, 大森健史, 山口康隆
2. 発表標題 固液摩擦の分子動力学解析に与える接線方向のセルサイズの影響
3. 学会等名 日本流体力学会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Hiroki Kusudo, Takeshi Omori, Yasutaka Yamaguchi
2. 発表標題 Molecular Dynamics Analysis on the Dynamic Contact Angle Based on the Extraction of the Stress Distribution in Steady-State Non-Equilibrium Systems of a Single Lennard-Jones Fluid between Solid Walls under Shear
3. 学会等名 APS-DFD (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Takeshi Omori, Naoki Inoue, Laurent Joly, Samy Merabia, Yasutaka Yamaguchi
2. 発表標題 Measuring the hydrodynamic wall position and viscoelastic friction coefficient by molecular dynamics
3. 学会等名 APS-DFD (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 大賀春輝, 大森健史, 山口康隆
2. 発表標題 Langevin方程式に基づく固液摩擦係数の算出方法の適用範囲に関する分子動力学解析
3. 学会等名 数値流体力学シンポジウム
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 井上直樹, 小川皓俊, 大森健史, 山口康隆, 梶島岳夫
2. 発表標題 固液摩擦係数に対するGreen-Kubo関係式 - 有限サイズ効果についての考察
3. 学会等名 日本伝熱シンポジウム
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 小川皓俊, 井上直樹, 大森健史, 山口康隆, 梶島岳夫
2. 発表標題 固液摩擦係数に対するGreen-Kubo関係式 - 計算セルのアスペクト比の影響
3. 学会等名 日本伝熱シンポジウム
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 大森健史, 小林要佑, 山口康隆, 梶島岳夫
2. 発表標題 分子動力学法による微視的動的接触角の解析
3. 学会等名 日本流体力学会年会
4. 発表年 2018年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究 分担者	山口 康隆 (Yamaguchi Yasutaka) (30346192)	大阪大学・大学院工学研究科・准教授 (14401)	

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8 . 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関		
フランス	Universite Claude Bernard Lyon 1	CNRS	