ISSN 2186-5647

P-68

液滴蒸発で現れるパターンのシミュレーション

日大生産工　○渡辺 駿希　日大生産工(院修了生)　関谷 駿　日大生産工　野々村 真規子
阿南高等専門学校　山田 耕太郎　広島大学　小林 亮

1 まえがき

基板上で溶液が蒸発した際に、基板上に溶質が析出される[1)]。その析出した溶質は、放射状、同心円状、ドット状などの様々なパターンを描くことが知られている[1) 2)]。文献[3)]ではパターン形成について数理モデルを作成し、空間1次元で数値計算を行っている。関谷らはGPGPUを使い、空間2次元で数値計算を行うことで同心円パターンを得ることができている[4)]。本研究では文献[4)]の研究をさらに進めて様々なパラメータの数値計算を行うことで、同心円以外のパターンが形成される条件を調べていく。

2 数理モデル

ここでは文献[3)]のモデルを紹介する。液滴の厚みを $h(\vec{r},t)$ という変数を用いて表し、$\vec{r}=(x,y)$ は位置、t は時間を表す。液滴の形を表す自由エネルギーは式(1)と式(2)を用いて次のように書ける。

$$F[h]=\int dr[\gamma_{lv}\sqrt{1+(\nabla h)^2}X(h)+\gamma_{ls}X(h)+\gamma_{sv}(1-X(h))+\frac{pg}{2}h^2] \quad (1)$$

$$\frac{dh}{dt}=\nabla(\frac{1}{3}h^3\nabla\frac{\delta F}{\delta h})-f_e \quad (2)$$

ここで γ_{lv} は液/気界面張力、γ_{sv} は固/気界面張力、γ_{ls} は液/固界面張力、p は溶液の密度、g は重力加速度を表す。式(1)に含まれる関数 $X(h)$ はその場所が濡れているかを表す指標関数

$$X(h)=\begin{cases}1 & h>0\\ 0 & h\le 0\end{cases} \quad (3)$$

である。式(2)を数値計算すると、液滴の形は液滴と基板との接触角 θ がヤングの関係式 $\gamma_{lv}\cos\theta=\gamma_{sv}-\gamma_{ls}$ となるように時間発展する（図1）。

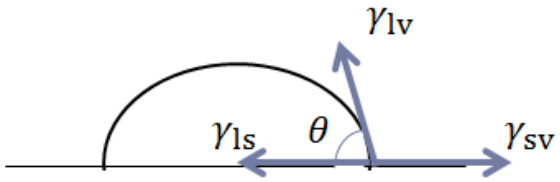

図1　液滴の概念図

式（2）の f_e は蒸発を表しており、次のように書ける。

$$f_e=e[p_0\exp(A\phi)-p_v] \quad (4)$$

$$\phi=-\gamma X(h)\nabla\left(\frac{\nabla h}{\sqrt{1+(\nabla h)^2}}\right)+X'(h)\left(\gamma\frac{1}{\sqrt{1+(\nabla h)^2}}-\Gamma\right) \quad (5)$$

ただし、$\gamma_{lv}=\gamma$ 、$\gamma_{sv}-\gamma_{ls}=\Gamma$ とした。

液滴内に含まれる物質が基板上に析出する過程は、溶質の量 $s(\vec{r},t)$ 析出物質の量 $q(\vec{r},t)$ を用いて次のように表される[3)]。

$$\frac{ds}{dt}=\nabla\left[\frac{1}{3}h^3\nabla\left\{-\gamma X(h)\nabla\left(\frac{\nabla h}{\sqrt{1+(\nabla h)^2}}\right)+X'(h)\left(\gamma\frac{1}{\sqrt{1+(\nabla h)^2}}-\Gamma\right)+h\right\}\right]+D_s\nabla\left[h\nabla\left(\frac{s}{h}\right)\right]-G(h,s,q) \quad (6)$$

$$\frac{\partial q}{\partial t}=\nabla\left[\hat{D}_q\nabla q\right]+G(h,s,q) \quad (7)$$

$$\hat{D}_q(h,s)=\frac{D_qX(h)\left[1+\tanh\left(\frac{s-hc_1}{\delta_q}\right)\right]}{2} \quad (8)$$

Simulation of droplet evaporation

Shunki WATANABE,Shun SEKIYA, Kohtarou YAMADA, Makiko NONOMURA and Ryo KOBAYASHI

ここで、析出によりΓが変わる効果をいれるため、$\Gamma = \Gamma_0 + \Gamma_q \tanh(q/\delta_q)$とする。関数$G(h,s,q)$は析出を表す。

$$G(h,s,q) = \begin{cases} \omega_1 q(s - hc_1) & s < hc_1 \\ \omega_2 s(q - k(h,s)) & s < hc_1, q \geq k(h,s) \\ \omega_3 q(q - k(h,s)) & s < hc_1, q \geq k(h,s) \end{cases} \quad (9)$$

ここで、図2に$q = k(h,s)$のグラフを示す[3]。c_1よりも濃度が高くなると過飽和状態であることを表す。

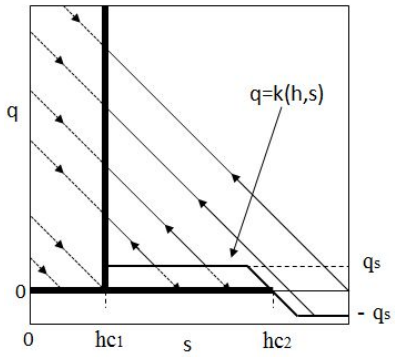

図2　s-q平面でのダイナミクス[3]

3 数値計算

文献[3]では、まえがきで述べたように空間1次元でしか数値計算していない。それは、式(2)の空間4階微分が非対称な形をしているため、空間2次元では膨大な計算時間が必要となってしまうからである。

そこで、関谷らは数値計算にGPGPUを用いた[4]。GPGPUとは画像処理用のGPUを汎用計算に用いることである。数値計算において、逐次処理のCPUと違いGPGPUでは並列処理であるため計算を高速化できるというメリットがある。関谷らはGPGPUでの計算を行うために統合開発環境CUDAを用い、式(2)を空間2次元で数値計算し、同心円上のパターンを得ることができている。本研究でも、同じ手法を用いる。

図3に1次元数値計算結果を示す。液滴が安定している状態から安定状態を保ちながら蒸発していく様子がわかる。さらにこの結果に溶質の量と析出物質の析出を加えることで、パターン形成を考える。

4 まとめ

学術講演会では、空間2次元でパラメータを変えて得られた析出パターン結果を報告する。

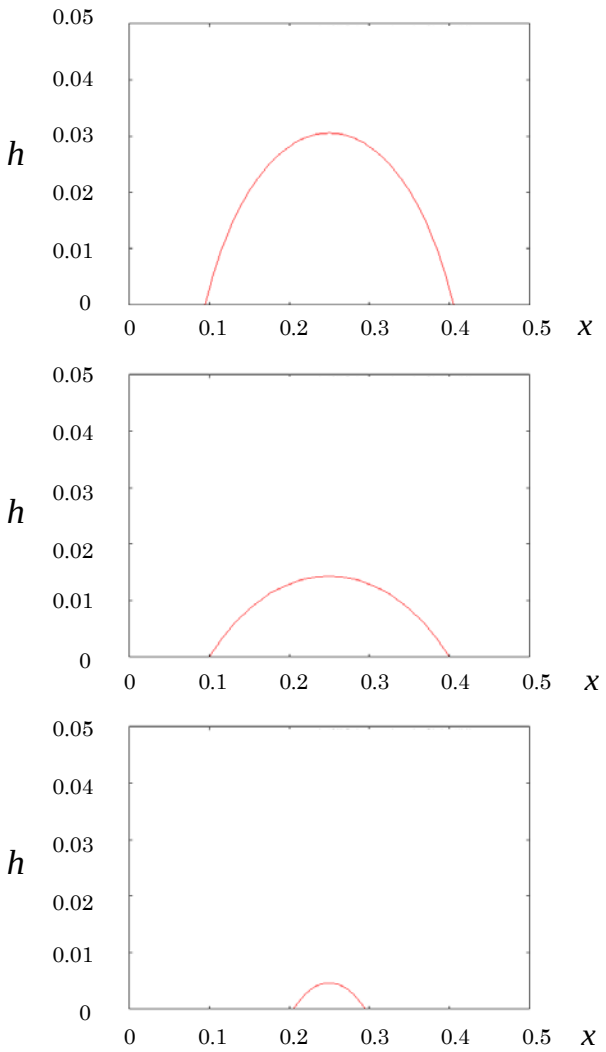

図3　安定状態から蒸発までの計算。上から$t=0$、$t=100$、$t=200$のhのプロファイルである。

「参考文献」

1) O.Karthaus, L.Grasjo, N.Maruyama and M.Shimomura,Chaos 9,308,(1990)

2) R.D.Deegan,Phys.Rev.E61,475,(2000)

3) M.Nonomura, R.Kobayashi, Y.Nishiura and M.Shimomura, Periodic Precipitation during Droplet Evaporation on a Substrate,Jounal of the Physical Society of JapanVol. 72, No. 10 (2003)

4) 関谷　駿,基板上の液滴蒸発によるパターン形成の数値計算に関する研究,平成26年度修士論文