

基板上でのパターン形成を伴う液滴蒸発の数値シミュレーション

日大生産工(院) ○関谷 駿 阿南工業高等専門学校 山田耕太郎
日大生産工 野々村 真規子 広島大学 小林 亮

1 まえがき

溶液を蒸発させた後、基板上に放射状、同心円状、ドット状などの様々なパターンが形成される。これらのパターンは蒸発と対流によって形成される。¹⁾²⁾

文献³⁾ではこのパターン形成について、数理モデルを作成、空間1次元で数値計算を行っている。本研究では文献³⁾のモデルを空間2次元で数値計算を行い、どのようなパターンが形成されるかを調べる。また、数値計算にGPGPUを用いて数値計算速度の向上を目指す。

2 数理モデル

液滴の厚みを $h(\mathbf{r}, t)$ という変数を用いて表す。 $\mathbf{r} = (x, y)$ は位置、 t は時間を表す。次の式で h は時間発展する。³⁾

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \nabla \cdot \left\{ \frac{1}{3} h^3 \nabla \left[-\gamma \chi(h) \nabla \cdot \left(\frac{\nabla h}{\sqrt{1+(\nabla h)^2}} \right) + \chi'(h) \left(\gamma \frac{1}{\sqrt{1+(\nabla h)^2}} - \Gamma \right) + h \right] \right\} - f_e \quad (1)$$

式(1)の右辺第1項は表面張力、右辺第3項は重力項である。右辺第2項は溶液と基板が接触しているところでのみ値を持つ。図1に示すように、溶液と基板との接触角 θ と、界面張力 γ_{lv} 、 γ_{sv} 、 γ_{ls} の間にはヤングの関係式が成立している。 $\cos \theta$ が $1 / \sqrt{1+(\nabla h)^2}$ 、 $\gamma_{lv} = \gamma$ 、 $\gamma_{sv} - \gamma_{ls} = \Gamma$ であることを考慮すると、この右辺第2項の括弧の中はヤングの式そのものであることがわかる。式(1)の f_e は蒸発を表しており、次のように書ける。

$$f_e = e[p_0 \exp(A\Phi) - p_v] \quad (2)$$

ただし、

$$\Phi = -\gamma \chi(h) \nabla \cdot \left(\frac{\nabla h}{\sqrt{1+(\nabla h)^2}} \right) + \chi'(h) \left(\frac{\gamma}{\sqrt{1+(\nabla h)^2}} - \Gamma \right) \quad (3)$$

とした。関数 $\chi(h)$ はその場所が濡れているかを表す指標関数で、数値計算では、

$$\chi(h) = \begin{cases} \tanh\left(\frac{h}{\delta}\right) & h > 0 \\ 0 & h \leq 0 \end{cases} \quad (4)$$

を用いた。

液滴内に含まれる物質が基板上に析出すると過程は、溶質の量 $s(\mathbf{r}, t)$ 、析出物質の量 $q(\mathbf{r}, t)$ を用いて次のように表している。³⁾

$$\frac{\partial s}{\partial t} = \nabla \cdot \left\{ \frac{1}{3} h^2 s \nabla \left[-\gamma \chi(h) \nabla \cdot \left(\frac{\nabla h}{\sqrt{1+(\nabla h)^2}} \right) + \chi'(h) \left(\gamma \frac{1}{\sqrt{1+(\nabla h)^2}} - \Gamma \right) + h \right] \right\} + D_s \nabla \cdot \left[h \nabla \left(\frac{s}{h} \right) \right] - G(h, s, q) \quad (5)$$

$$\frac{\partial q}{\partial t} = \nabla \cdot [\hat{D}_q \nabla q] + G(h, s, q) \quad (6)$$

$$\hat{D}_q(h, s) = \frac{D_q \chi(h) \left[1 + \tanh\left(\frac{s - hc_1}{\delta_q}\right) \right]}{2} \quad (7)$$

析出は関数 $G(h, s, q)$ で表す。(図2)

$G(h, s, q) =$

$$\begin{cases} \omega_1 q(s - hc_1) & s < hc_1 \\ \omega_2 s(q - k(h, s)) & s \geq hc_1, q \geq k(h, s) \\ \omega_3 q(q - k(h, s)) & s \geq hc_1, q \geq k(h, s) \end{cases} \quad (8)$$

析出により Γ が変わる効果を入れるため $\Gamma = \Gamma_0 + \Gamma_q \tanh(q/\delta_q)$ とした。

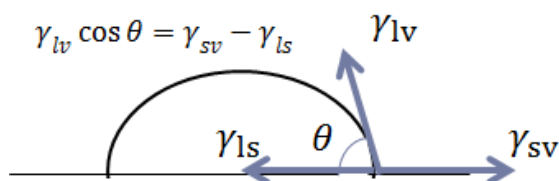


図1 ヤングの式。ここで γ_{lv} は液/気界面張力、 γ_{sv} は固/気界面張力、 γ_{ls} は液/固界面張力である。

Numerical simulation of droplet evaporation with the patterning on the substrate

Shun SEKIYA, Kohtarou YAMADA, Makiko NONOMURA and Ryo KOBAYASHI

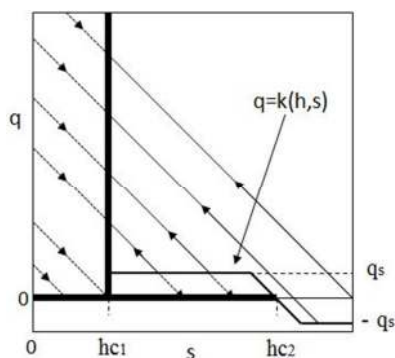


図2 s-q平面でのダイナミクス

3 数値計算手法

空間2次元で計算を行う際に空間1次元と同じように計算すると、膨大な計算時間が必要となる。そこで、数値計算にGPGPUを用いる。

GPGPUとは画像処理用のGPUを汎用計算に用いることである。CPUよりも安価に計算速度を高速化できるというメリットがある。GPGPUでの計算を行うために統合開発環境CUDAを用いる。CUDAはNvidia社によって無償で提供されており、Nvidia社のビデオカードを搭載しているPCであれば利用することができる。計算環境構築の容易さもメリットであるといえる。^{5) 6)}しかし、計算が行われても正しい値が出力されない等、プログラムのバグを探しにくいというデメリットがある。

4 計算結果

図3は空間2次元の計算をGPUで行った結果である。空間は100×100。蒸発させた後の析出物質 q の空間分布を表示している。図を見ると基板上にパターンが形成されていることがわかる。

また、CPUでも同じ計算を行い同じ値が出力されている事を確認した。この事からGPUでCPUと同じように計算できるようになったと言える。

5 まとめ

CPUで行っていた計算をGPUで行えるようにしたため、CPUで膨大な時間がかかっていた計算を高速化することができた。この事からCPUでは困難であった空間の大きい計算も実行可能となった。現在より良い結果出力のため計算の改善を行っている。



図3 GPUでの計算結果

「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, Journal of the Physical Society of Japan Vol. 72, No. 10 (2003)
- 4) L.Frastia, A.J.Archer and U.Thiele, Modelling the formation of structured deposits at receding contact lines of evaporating solutions and suspensions, Soft Matter, 11363,(2012)
- 5) 青木 尊之, 額田 彰, 初めてのCUDA[クーダ]プログラミング
- 6) 青山 幸也, CUDAプログラミング入門 2012 年6 月1 日版