

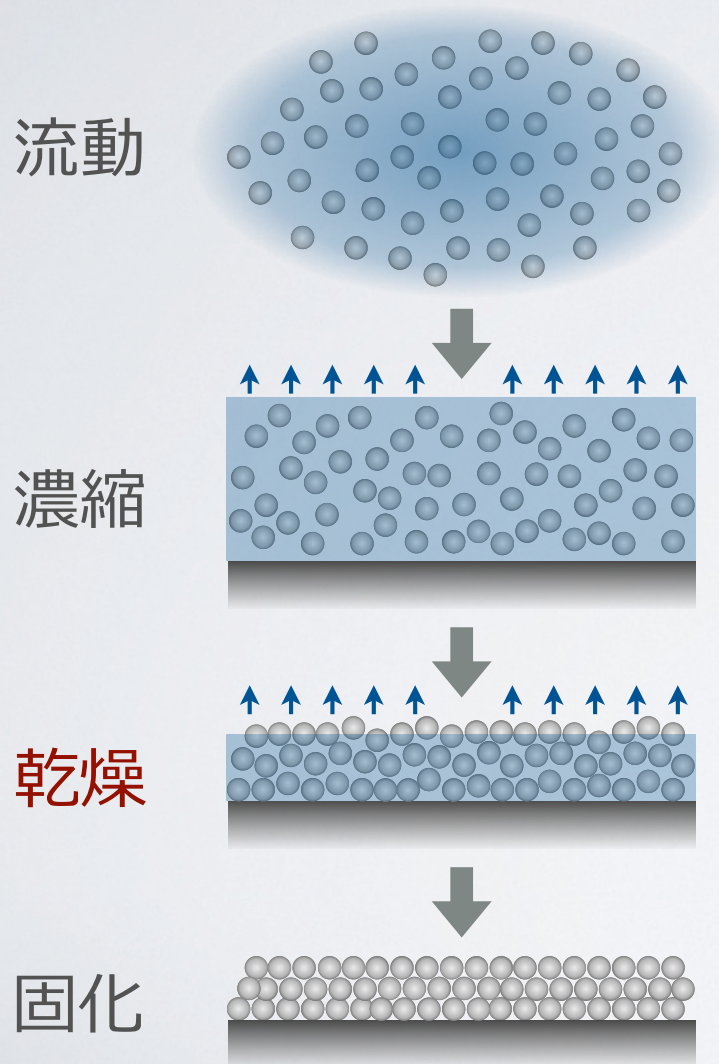
メソスケール気液固混相流シミュレーションのための自由表面埋め込み法

○藤田昌大・小池修・山口由岐夫

東京大学大学院工学系研究科化学システム工学専攻

メソスケール気液固混相流

微粒子分散液の塗布乾燥過程



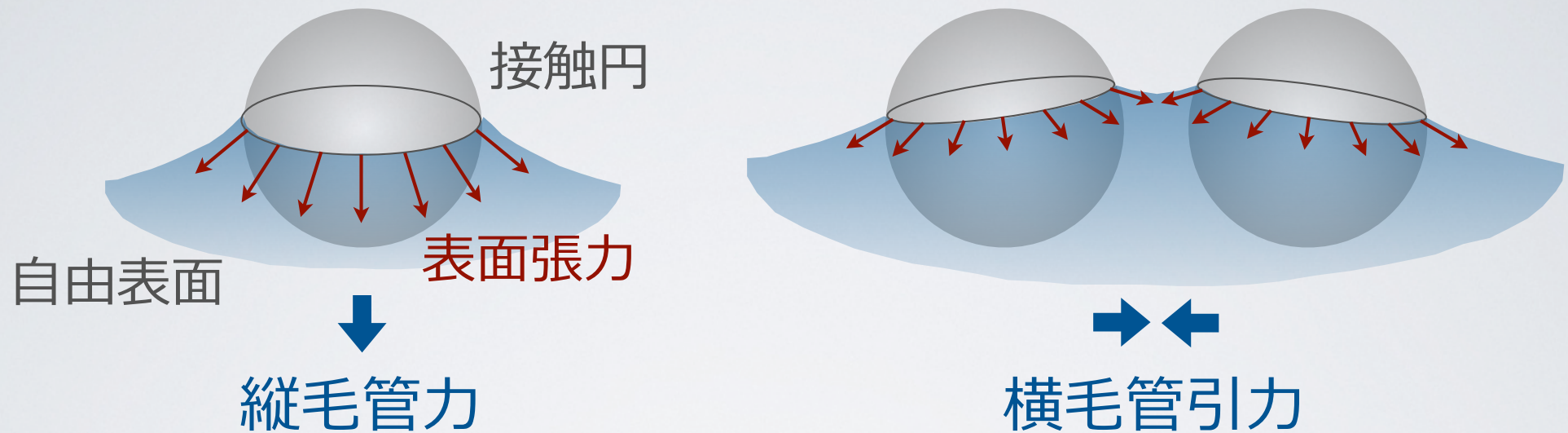
流体抵抗力・熱揺動力

流体抵抗力・熱揺動力・静電気力
・分子間力

流体抵抗力・熱揺動力・静電気力
・分子間力・接触力・毛管力

粒子に働く力

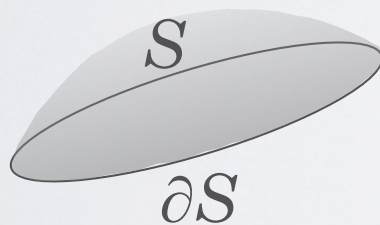
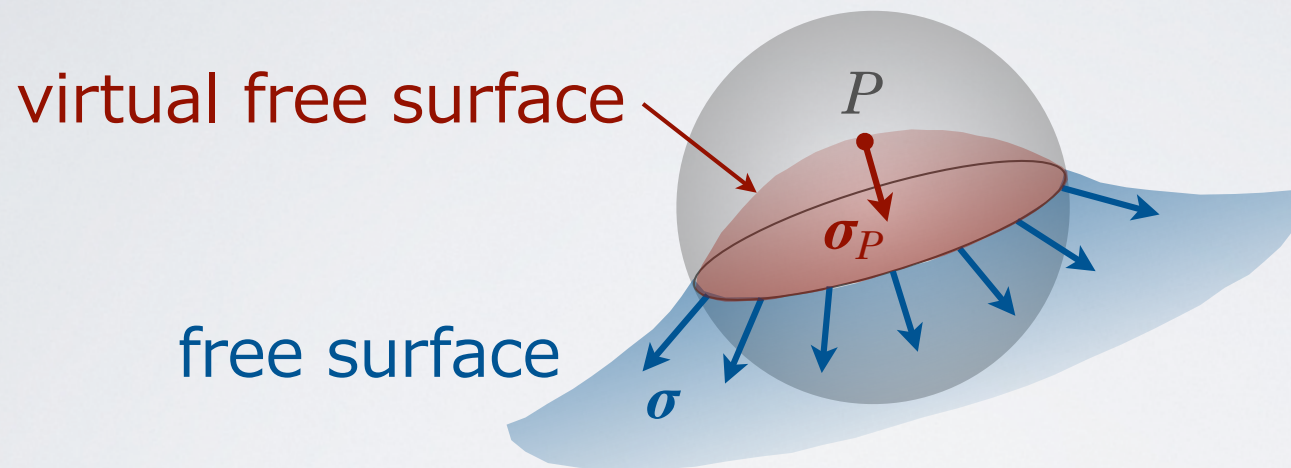
自由表面上の粒子に働く毛管力



- 粒子に働く流体力
- ➡ 浮力（体積力）
 - ➡ 圧力・粘性応力（面積力）
 - ➡ 毛管力（線分力）

自由表面埋め込みモデル

Immersed Free Surface model



$$\oint_{\partial S} \sigma dr = \int_S \sigma_P ds$$

線分力 面積力

→ 体積力
CSFモデル

粒子-流体カップリング

Immersed Boundary Method

流体運動

表面張力誘起速度 : $\rho \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} = \dots + \mathbf{F}_{\text{csf}}$: CSFモデル

粒子内部速度 : $\rho \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} = \rho \frac{\mathbf{v}_p(V, \Omega) - \mathbf{v}}{\Delta t} \equiv \mathbf{F}_p$: 体積力

$\mathbf{F}_p \downarrow \quad \uparrow V, \Omega$

粒子運動

並進速度 : $m \frac{dV}{dt} = - \int \mathbf{F}_p dV$: 毛管力

回転速度 : $I \frac{d\Omega}{dt} = - \int (\mathbf{r}_p \times \mathbf{F}_p) dV$: 毛管トルク

粒子-自由表面カップリング

Level Set Method

全領域で移流



粒子内部で修正

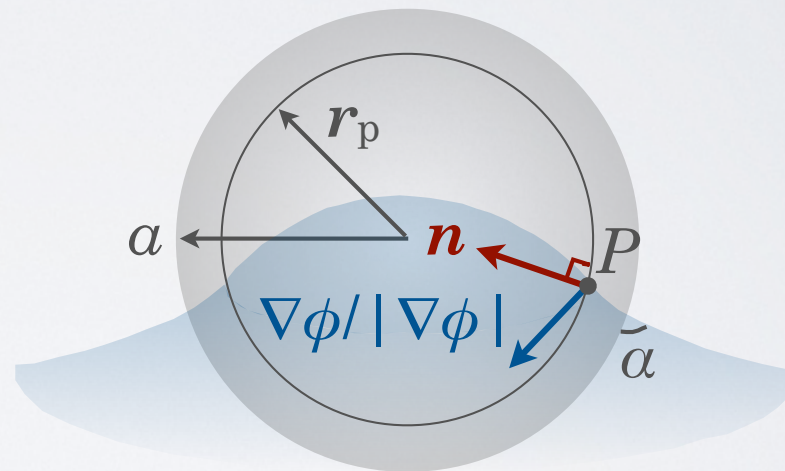


全領域で再初期化



全領域で体積補正

$$\frac{\partial \phi}{\partial \tau} = \frac{|\mathbf{r}_p|}{a} \left(|\nabla \phi| \cos \alpha - \mathbf{n} \cdot \nabla \phi \right)$$

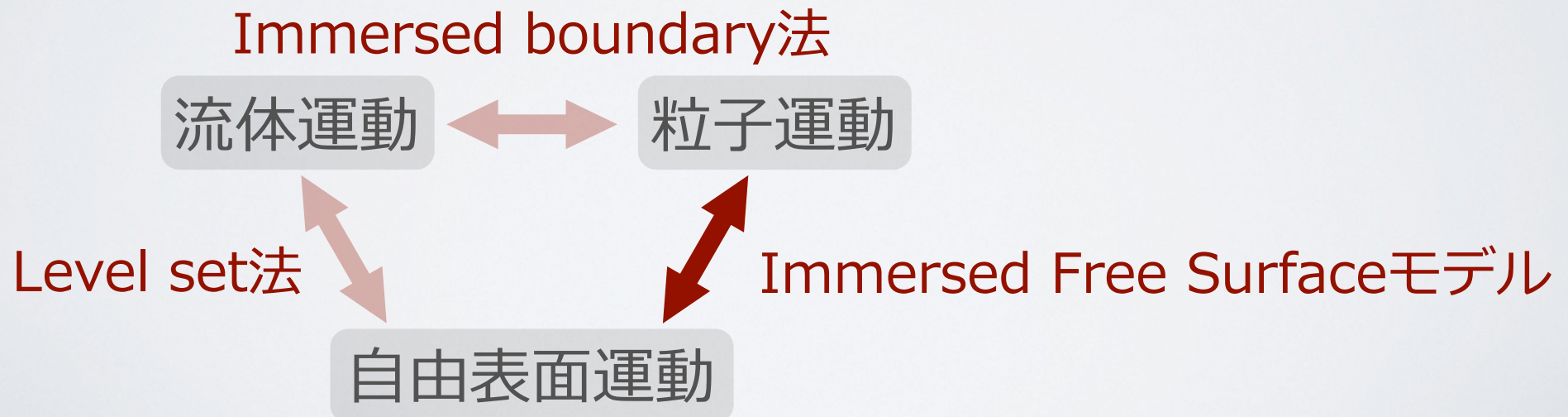


$$\phi = \phi - \frac{\Delta V_e}{S_{fs}}$$

ΔV_e : 液相体積誤差
 S_{fs} : 自由表面面積

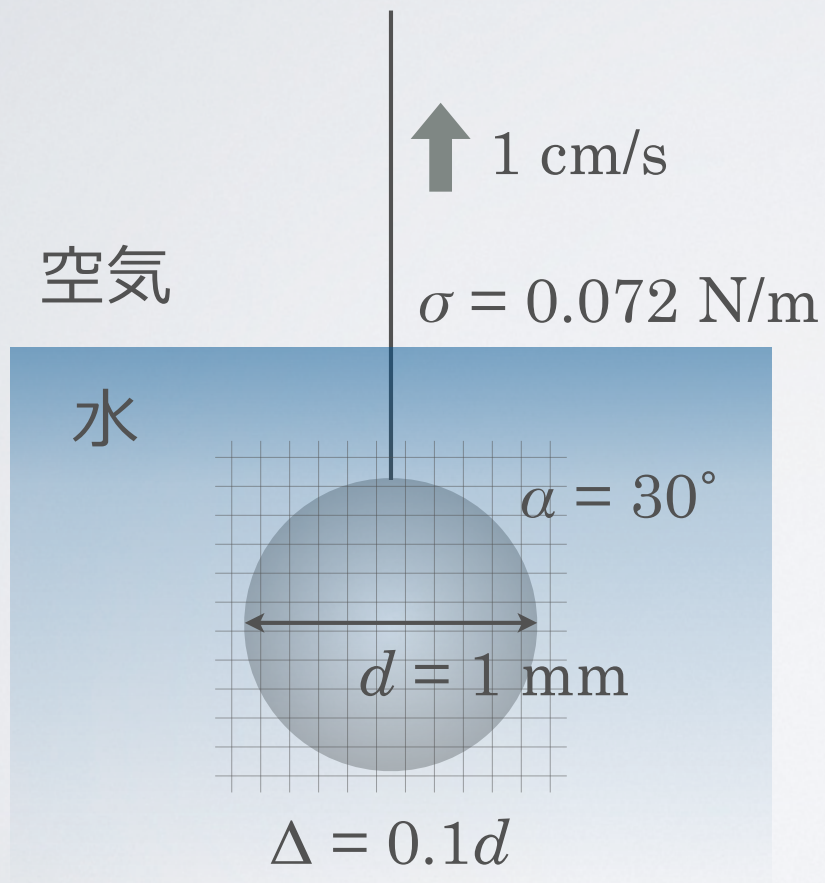
その他のシミュレーション・モデル

- 非圧縮性Landau-Lifshitz Navier-Stokes方程式
 - 確率的熱揺動項を含み, IBMで粒子のブラウン運動を解く
- DEMで用いられる粘弾性固体接触力
- 2体間ポテンシャルの静電気力・分子間力 (DLVO理論)



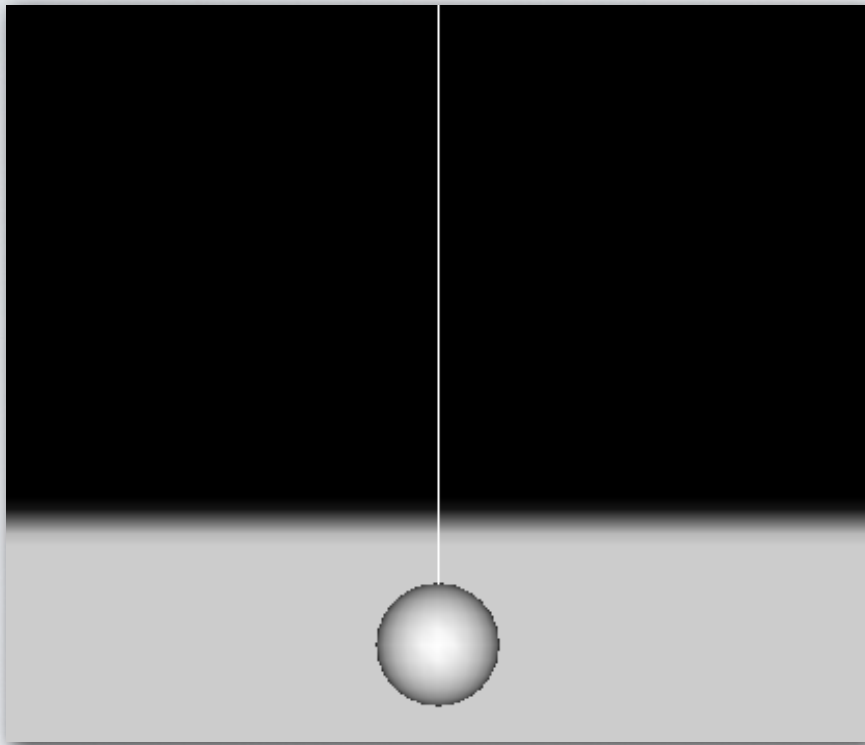
縦毛管力の検証

自由表面の動的変形



縦毛管力の検証

自由表面の動的変形



縦毛管力の検証

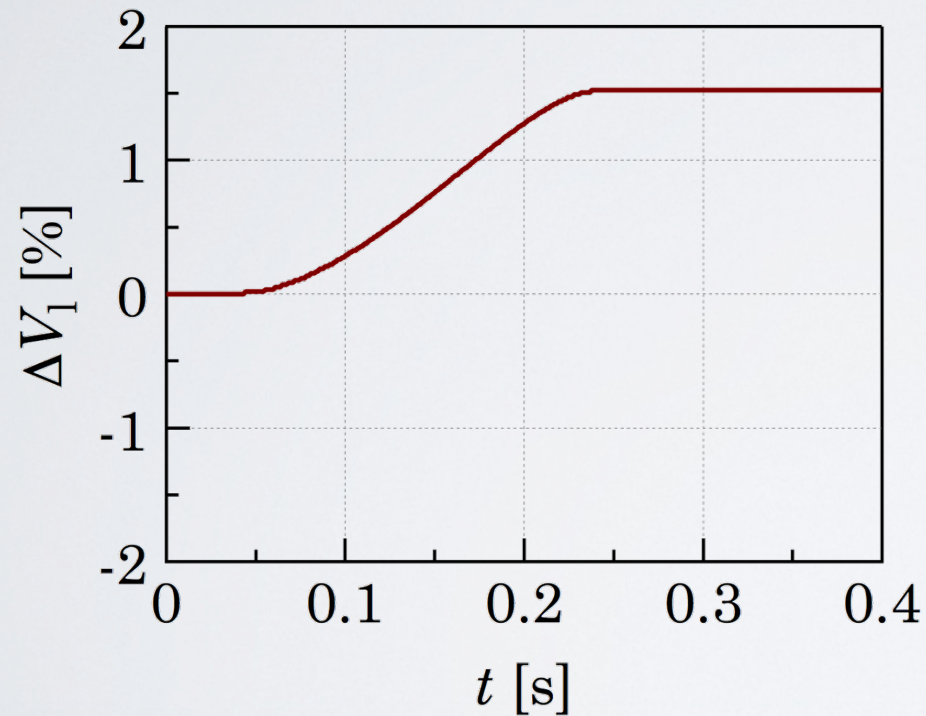
自由表面の動的変形



縦毛管力の検証

自由表面の動的変形

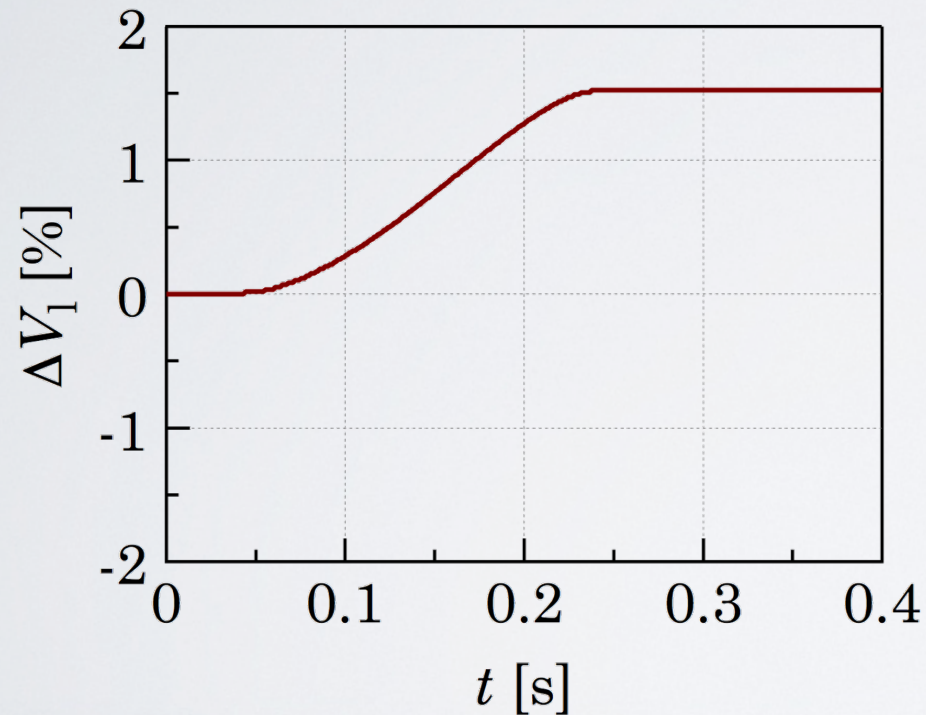
液相体積誤差



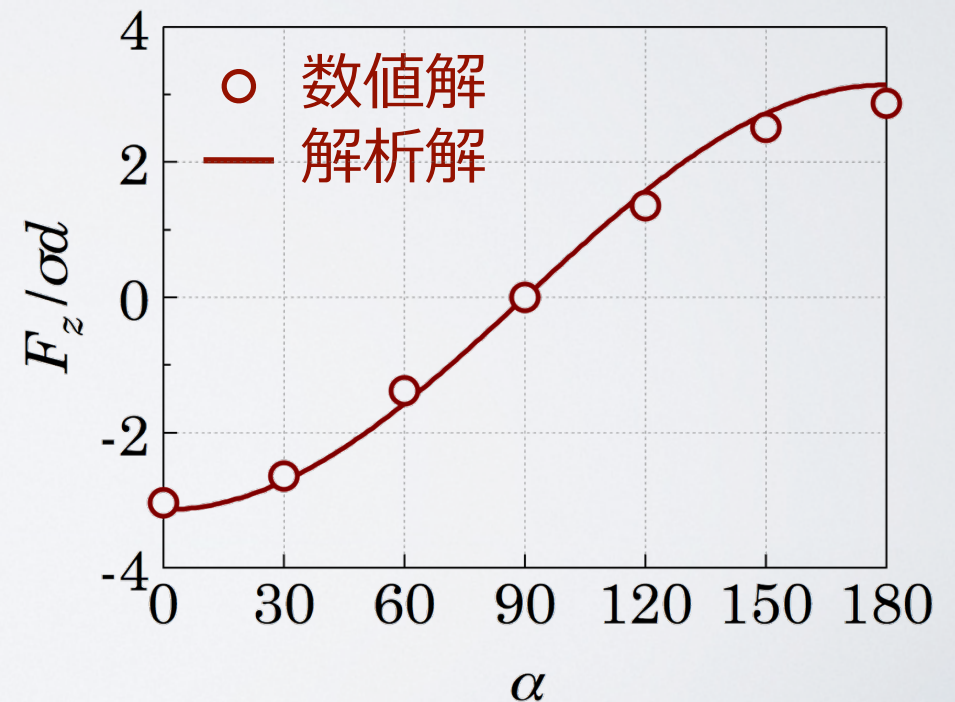
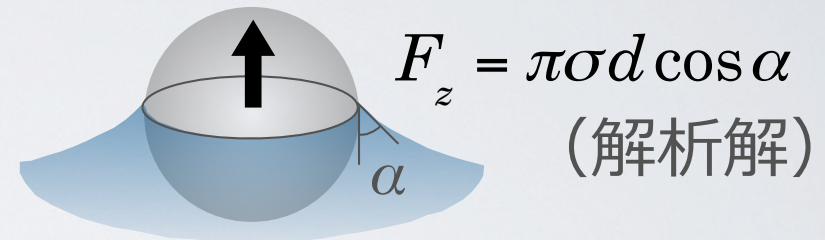
縦毛管力の検証

自由表面の動的変形

液相体積誤差

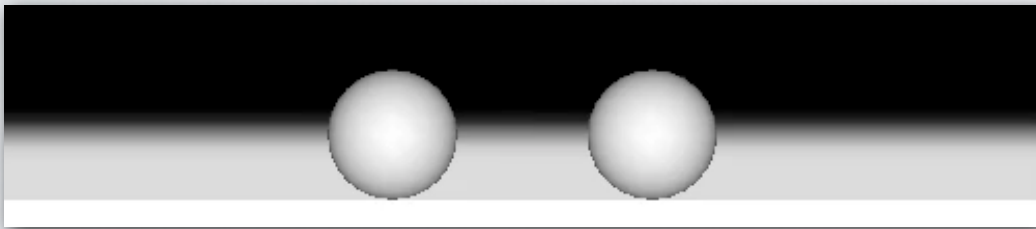
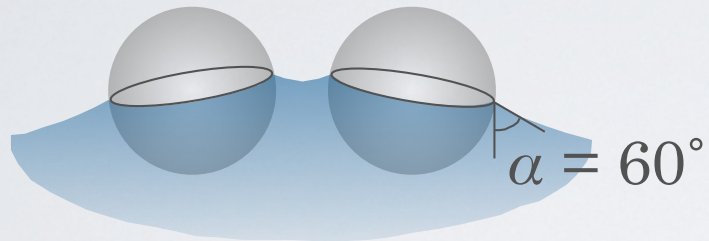


粒子に働く縦毛管力



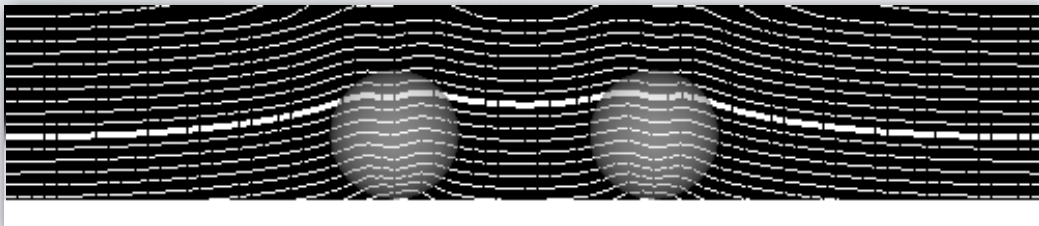
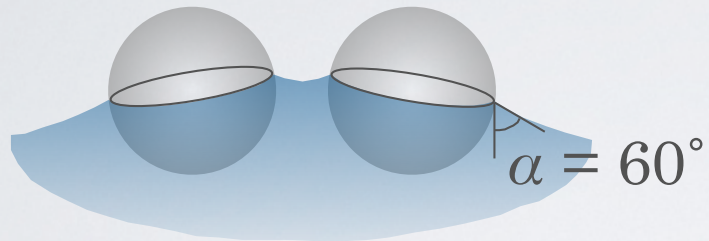
横毛管引力の検証

自由表面の変形



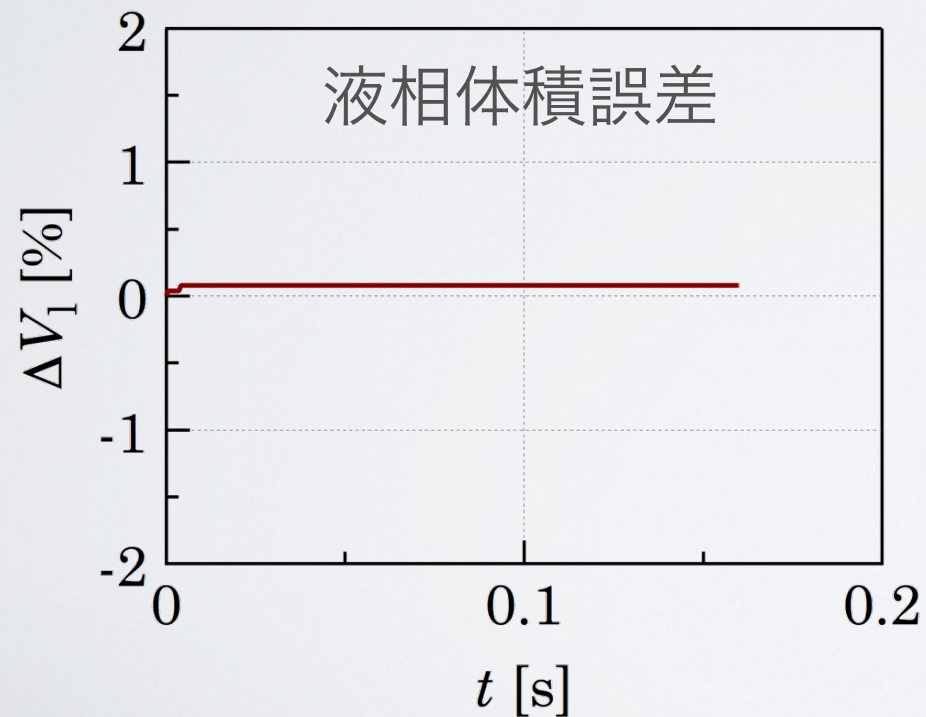
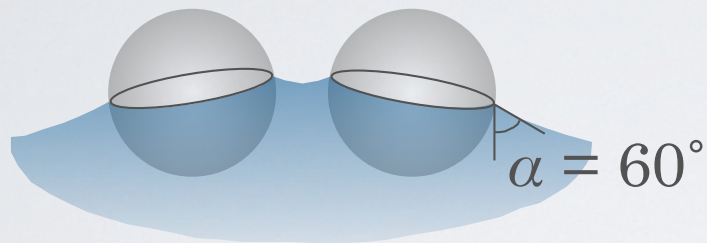
横毛管引力の検証

自由表面の変形



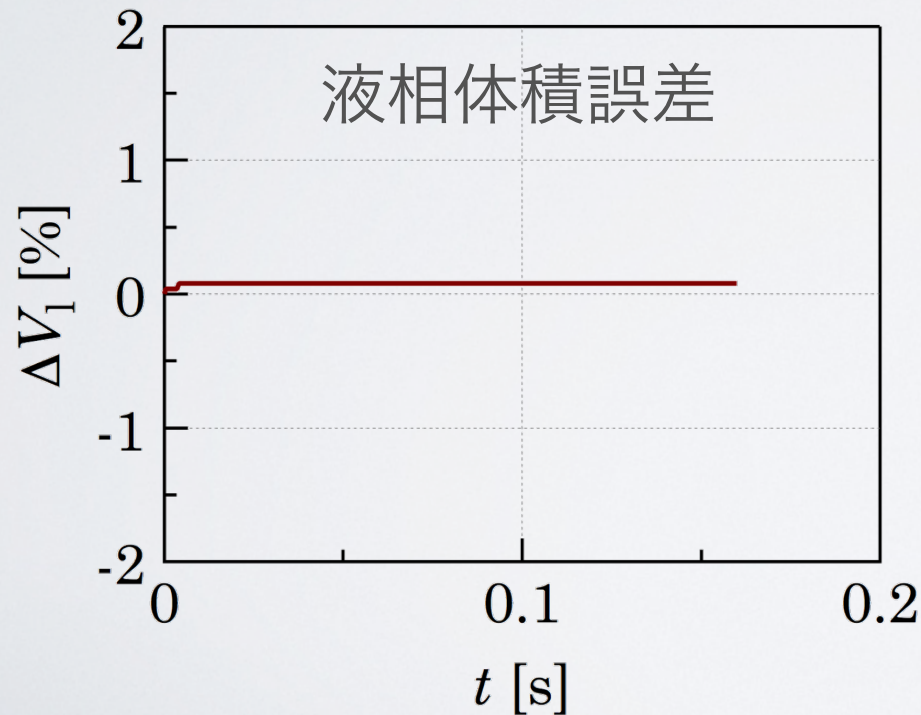
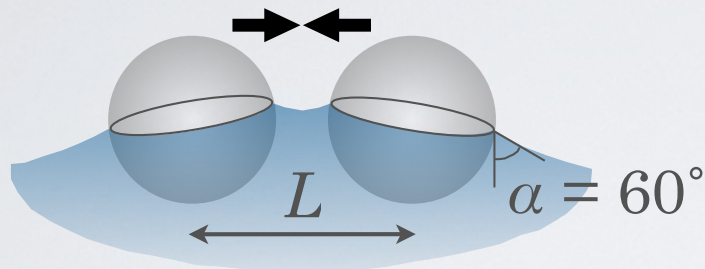
横毛管引力の検証

自由表面の変形



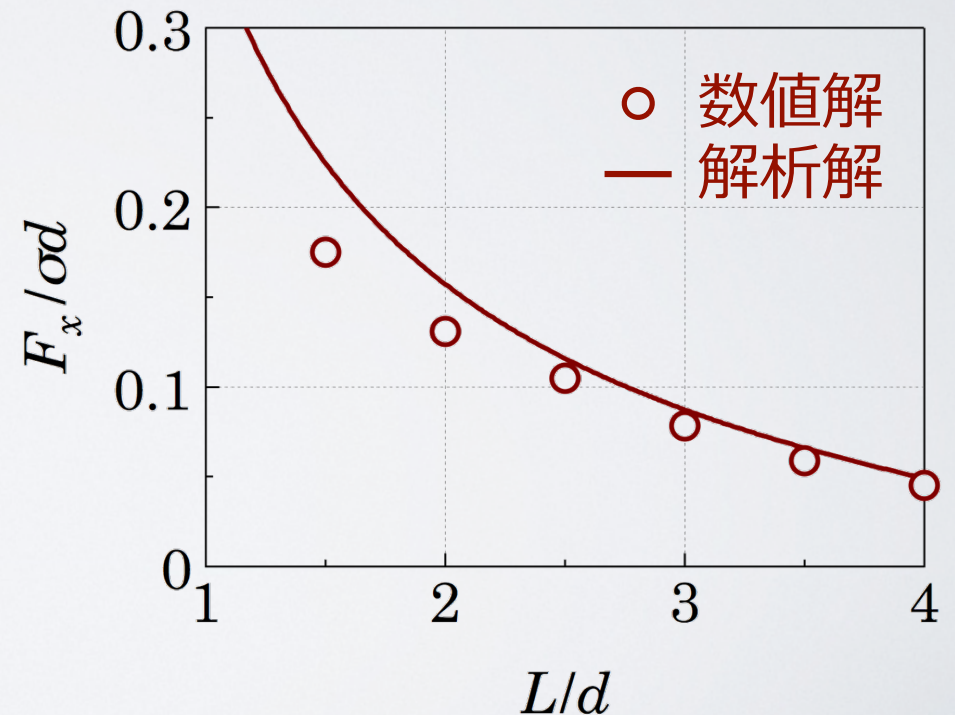
横毛管引力の検証

自由表面の変形



粒子に働く横毛管引力

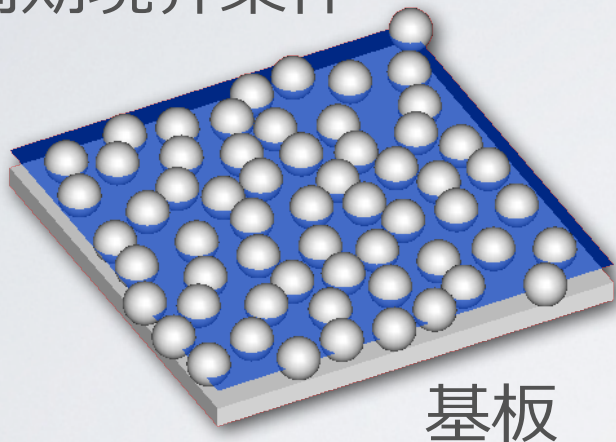
$$F_x \approx \frac{\pi \sigma d^2 \cos^2 \alpha}{2L} \quad (\text{近似解析解})$$



基板上的自己配列シミュレーション

横毛管引力による粒子凝集

周期境界条件



基板

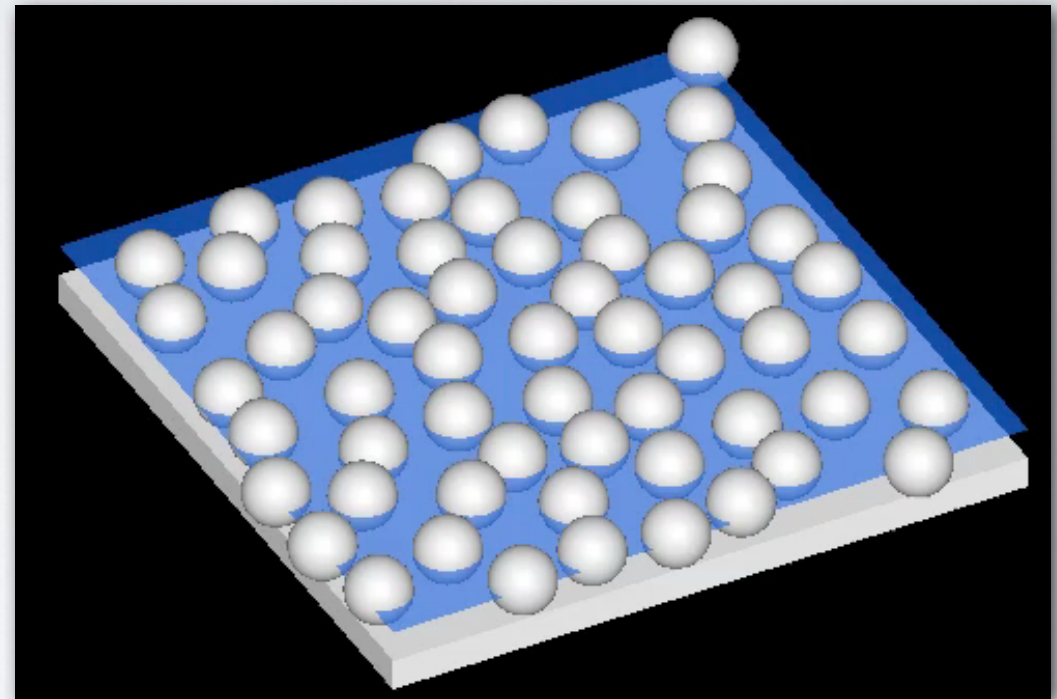
$$\alpha = 120^\circ$$

$$\rho_p = 2 \times 10^4 \text{ kg/m}^3$$

$$\mu_{pp} = \mu_{pw} = 0$$

$$\Delta t = 10^{-5} \text{ s}$$

格子点数：25万点



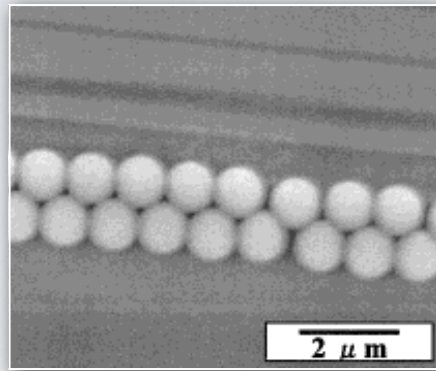
粒子ぬれ性 → 自由表面運動

↑
粒子運動

↓
横毛管力

基板上の溶媒乾燥シミュレーション

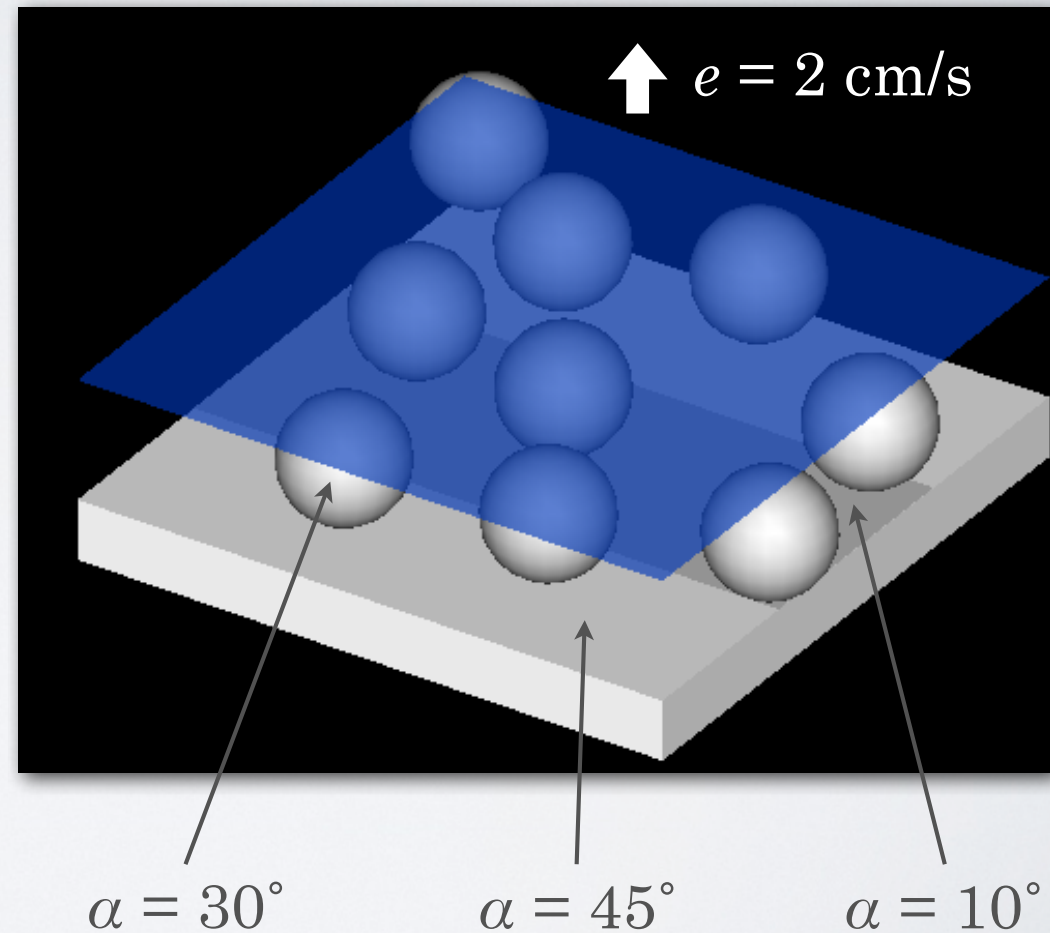
パターン化基板上の1次元粒子配列



Masuda, et al.,
Langmuir, 2002

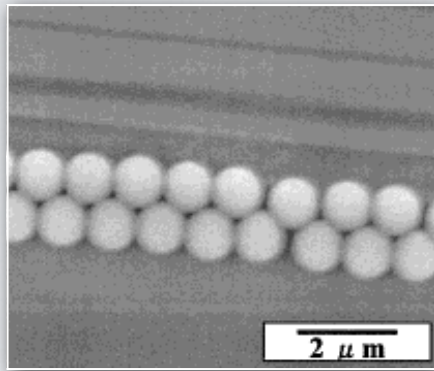


フォトニックバンド
ギャップを利用した
光学デバイス



基板上の溶媒乾燥シミュレーション

パターン化基板上の1次元粒子配列

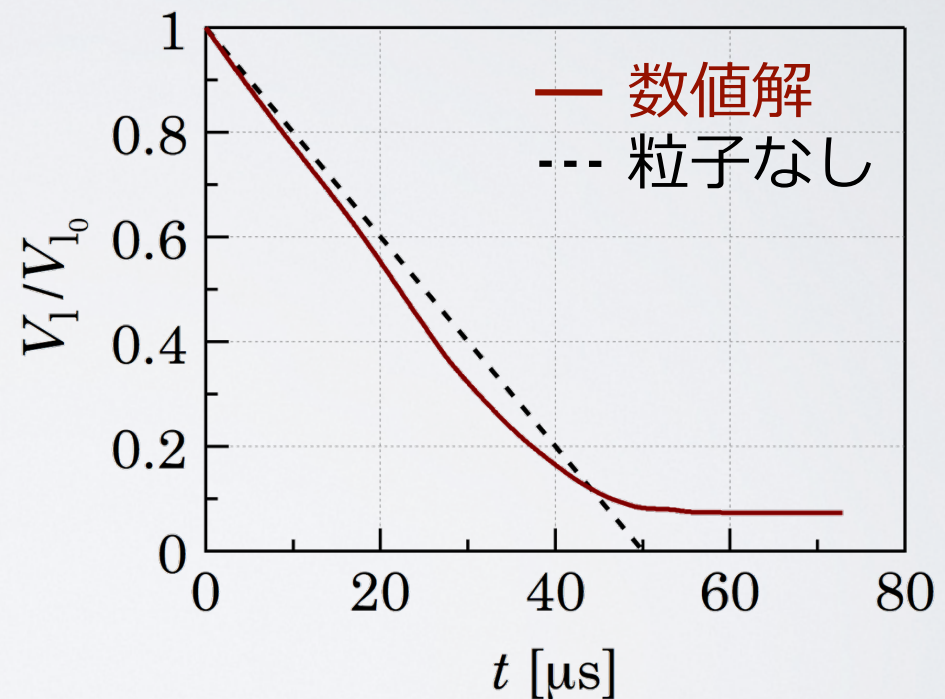


Masuda, et al.,
Langmuir, 2002



フォトニックバンド
ギャップを利用した
光学デバイス

液相体積の変化



まとめ

- LS法, IB法とともにIFSモデルを用いることによって, 粒子に働く表面張力が体積力に変換されて効率的に計算できる
- 本方法は粒子に働く毛管力を十分正確に計算できる
- 本方法を用いて, 毛管力が支配的になるメソスケール気液固混相流における多粒子の自己配列シミュレーションができる