

MPS 法における表面張力シミュレーション

著者 市橋 啓太

指導教員 下條 雅史

1. はじめに

粒子法を用いた流体のシミュレーションは現在広く行われているが、マイクロスケールの自由表面流れを取り扱う際などには表面張力の効果を取り扱う必要性が出てくる。表面張力は、表面積を小さくしようとする液体の性質である。一般には界面張力と呼ばれ、気体-液体の界面の場合には表面張力と呼ばれる。本研究では、粒子法の 1 つである MPS (Moving Particle Semi-implicit) 法における表面張力モデルの実装や検証を行う。

$$\frac{D\rho}{Dt} = 0 \quad (5)$$

$$\frac{D\vec{u}}{Dt} = -\frac{1}{\rho}\nabla P + \nu\nabla^2\vec{u} + \vec{g} \quad (6)$$

(5)は密度 ρ が一定の式、(6)はナビエ-ストークス方程式である。(6)の右辺第 1 項から圧力勾配項、粘性項、重力項である。

2. 基礎式

2.1 粒子法

連続体を有限個の粒子の集合として表し、粒子 1 つ 1 つに速度や圧力といった変数を保持させ、連続体の挙動を粒子の運動によって計算する方法。

2.2 MPS (Moving Particle Semi-implicit) 法

MPS 法は粒子法の 1 つであり、連続体の挙動を表す微分方程式の微分演算子に粒子間相互作用モデルを適用して離散化する。以下の重み関数を導入し、作用効果の大きさを決定する。

$$w(r) = \begin{cases} \frac{r_e}{r} - 1 & (0 \leq r < r_e) \\ 0 & (r_e \leq r) \end{cases} \quad (1)$$

ある粒子において重み関数の和をとったものを粒子数密度とする。非圧縮性流れの場合、流体の密度は一定であるため、粒子数密度も一定でなければならない。この一定量を n^0 とする。

(2)は勾配モデル、(3)はラプラシアンモデルである。

$$\langle \nabla \phi \rangle_i = \frac{d}{n^0} \sum_{j \neq i} \left[\frac{\phi_j - \phi_i}{|\vec{r}_j - \vec{r}_i|^2} (\vec{r}_j - \vec{r}_i) w(|\vec{r}_j - \vec{r}_i|) \right] \quad (2)$$

$$\langle \nabla^2 \phi \rangle_i = \frac{2d}{\lambda n^0} \sum_{j \neq i} [(\phi_j - \phi_i) w(|\vec{r}_j - \vec{r}_i|)] \quad (3)$$

ここで d は次元数であり、 λ の計算は以下に示す。

$$\lambda = \frac{\sum_{j \neq i} |\vec{r}_j - \vec{r}_i|^2 w(|\vec{r}_j - \vec{r}_i|)}{\sum_{j \neq i} w(|\vec{r}_j - \vec{r}_i|)} \quad (4)$$

2.3 非圧縮性流れ

非圧縮性流れの支配方程式は以下の 2 式である。

3. 表面張力モデル

3.1 CSF (Continuum Surface Force) モデル

CSF モデルでは以下のように表面張力を粒子に働く力としてモデル化する。

$$\frac{D\vec{u}}{Dt} = -\frac{1}{\rho}\nabla P + \nu\nabla^2\vec{u} + \vec{g} + \frac{1}{\rho}\sigma\kappa\delta\vec{n} \quad (7)$$

右辺最後の項が表面張力項である。 σ は表面張力係数、 κ は曲率、 δ は表面張力が表面にのみ働くためのデルタ関数、 \vec{n} は表面と垂直な単位法線ベクトルである。

3.1.1 自由表面判定

表面張力は表面に位置する粒子のみに働くものとし、判定には以下の条件を用いる。

$$n^* < \beta n^0 \quad (\beta < 1.0) \quad (8)$$

3.1.2 曲率の計算

自由表面粒子に対して、曲率の計算のために(1)とは異なる重み関数を用いて粒子数密度を計算する。

$$w^{st1}(r) = \begin{cases} 1 & (0 \leq r < r_e^{st}) \\ 0 & (r_e^{st} \leq r) \end{cases} \quad (9)$$

$$n_i^{st1} = \sum_{j \neq i} w^{st1}(|\vec{r}_j - \vec{r}_i|) \quad (10)$$

r_e^{st} は初期粒子間距離を l_0 とすると、経験的に $3.1l_0$ を用いる。曲率が 0 の界面の粒子数密度 n_0^{st} はシミュレーションの初期に計算し、以後一定値を使い続ける。表面は、パラメータ β に依存する厚さを持ち、内側に存在する粒子の粒子数密度は過大評価されるため、粒子数密度を修正し n_i^{st2} とする。凸表面では $n_i^{st2} < n_0^{st}$ 、凹表面では $n_i^{st2} > n_0^{st}$ となるため、 n_i^{st2} と n_0^{st} の比から曲率が計算できる。

3.1.3 単位法線ベクトルの計算

ある粒子*i*の周囲 4 点の粒子数密度を(9)と(10)を用いて計算する。この 4 点は*x,y*方向に上下左右 l_0 離れた位置とする。これらの粒子数密度の重みづけにより、表面張力の働く方向を決定する。

3.2 粒子間力モデル

粒子法の表面張力の計算は、分子間力に似た粒子間力で計算できることが知られている。粒子間力を利用した表面張力モデルでは、気液界面の相互作用を粒子間力で直接定式化でき、CSFモデルにおける計算の不安定化を招きやすい法線ベクトルと曲率の計算を必要としない。

3.2.1 粒子間力

表面上の粒子*i*に働く、周辺粒子*j*からのポテンシャル力 \vec{f}_{ij} を以下のように計算する。

$$\vec{f}_{ij} = -\frac{\partial \phi}{\partial r_{ij}} \frac{\vec{r}_{ij}}{r_{ij}} \quad (11)$$

$$\phi(r_{ij}) = C\varphi(r_{ij}) \quad (12)$$

$$\varphi(r_{ij}) = \begin{cases} -\frac{1}{3}\left(r_{ij} - \frac{3}{2}l_0 + \frac{1}{2}r_s\right)(r_{ij} - r_s)^2 & (r_{ij} < r_s) \\ 0 & (r_{ij} \geq r_s) \end{cases} \quad (13)$$

ここで(12)はポテンシャルエネルギーである。 C は定数であり、平面状の気液界面の Bakker の式を用いて求める。(13)はポテンシャル関数である。

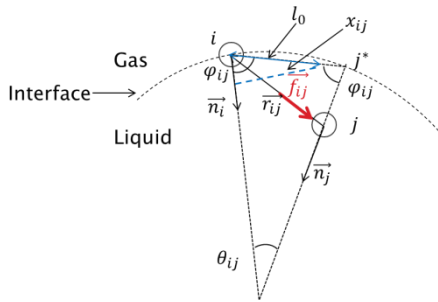


図 1 粒子*j*から*i*に働くポテンシャル力

粒子*i*に働く力 \vec{F}_i は周辺粒子からのポテンシャル力 \vec{f}_{ij} の総和となる。最終的な粒子*i*に働く体積力 \vec{F}_v を以下のように計算する。

$$\vec{F}_v = S_i \frac{d}{dV_0} \left[\left(\frac{1}{\frac{1}{N} \sum_j^N \sin(\varphi_{ij})} \right) - 1 \right] \vec{F}_i \quad (14)$$

ここで V_0 は l_0^3 、 N は半径 r_s 領域内の近傍粒子数、 S_i は凹凸係数であり凸形状の界面で 1、凹形状の界面で -1 となる。

3.3 壁面濡れモデル

液体と固体が接する際、それぞれが持つ表面張力の作用により液体表面が固体近傍でなす角 θ が一定となる。これを接触角といい、濡れやすさの指標となる。

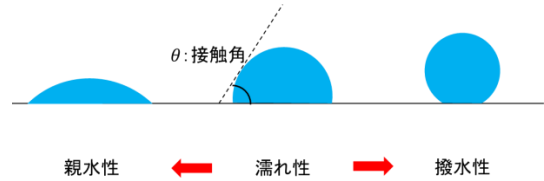


図 2 濡れ性

本モデルでは、液体と固体の組み合わせによる静的接触角をシミュレーション初期に与え、壁面近傍の粒子の表面張力の働く向きを修正することで接触角を制御する。

4. 表面張力シミュレーション

4.1 無重力下での液滴振動

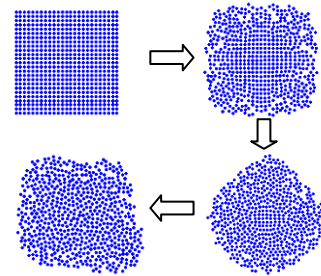


図 3 1 周期の液滴振動シミュレーション結果

4.2 重力下での壁面濡れ広がり

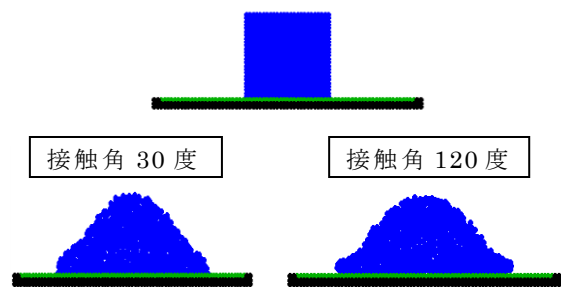


図 4 壁面濡れシミュレーション結果

5. 今後の課題

- ・液滴振動での左右非対称崩れの改善
- ・粒子間力モデルの計算不安定性の改善

参考資料

- ・「粒子法」 越塚誠一
- ・「粒子法における表面張力モデルの開発」 石井英二、杉井泰介