

## 付着濡れおよび拡張濡れを考慮した粒子ベース濡れ性手法の検討

夏目拓也<sup>1)</sup> 大石正道<sup>2)</sup> 大島まり<sup>2,3)</sup> 向井信彦<sup>1,2)</sup>(正会員)

1) 東京都市大学大学院 総合理工学研究科 2) 東京大学 生産技術研究所

3) 東京大学大学院 情報学環

## A Study on Particle-based Wettability Method Considering Adhisional and Spreading Wettings

Takuya Natsume<sup>1)</sup> Masamichi Oishi<sup>2)</sup>

Marie Oshima<sup>2,3)</sup> Nobuhiko Mukai<sup>1,2)</sup>(member)

1) Graduate School of Integrative Science and Engineering, Tokyo City University

2) Institute of Industrial Science, The University of Tokyo

3) Initiative in Information Industries, The University of Tokyo

{g1991803, nmukai}@tcu.ac.jp, {oishi,marie}@iis.u-tokyo.ac.jp

### 概要

濡れ性とは固体表面上における液体の接触角が維持される現象であり、濡れ性の表現は物理シミュレーションの最も重要なテーマの1つである。粒子法を用いた従来手法は接触角を指定し、液滴を構成する粒子の挙動を矯正することで濡れ性を表現している。しかしながら、濡れ性は接触角の指定で起こるのではなく、液体と固体の物理特性を基にした相互作用で生じている。そこで、著者らは接触角を指定するのではなく付着濡れと拡張濡れを考慮することで、濡れ性を表現する新しい手法を提案する。提案手法では、流体構造連成の解析において、液滴を構成する粒子数が少ない場合や液滴と構造体の接触面が小さい場合でも安定した解析が行えるように平均圧力を用いる。シミュレーションの結果、提案手法では接触角を指定しなくても、生成された接触角は従来手法よりも正確であった。また、高接触角を維持したまま液滴が葉の表面上を滑り落ちる現象も流体構造連成解析によって表現することができた。

### Abstract

Wettability is a phenomenon where the contact angle of liquid against solid surface is kept, and representing wettability is one of the most important issues in physical simulations. All previous works using particle methods specified the contact angle and rectified the behavior of particles constructing the droplet. However, wettability occurs not by the specification of the contact angle but by the interaction between solid and liquid based on the physical properties. Therefore, the authors propose a new method to represent wettability not by specifying the contact angle but by considering adhisional and spreading wettings. The proposed method uses the average pressure in the fluid-structure interaction analysis for stable analysis even in the cases where the number of particles in the droplet is small or the contact surface region between the droplet and the structure is small. As the result of the simulations, the contact angle reproduced by the proposed method was more accurate than that by the previous method without specifying the contact angle. In addition, the phenomenon of a droplet sliding down on a leaf surface maintaining the high contact angle has also been represented by the fluid-structure interaction analysis.

## 1 はじめに

CG (Computer Graphics) の分野で最も重要な課題の1つとして濡れ性がある。濡れ性とは、固体表面上にある液体の接触角が維持される現象であり、これは2つの物質の接触による分子間力に起因する。代表的な例として、ガラス面に滴下した液滴が広がる現象があり、濡れ性の再現は産業的にも画像工学的にも非常に重要な課題である。

CG 分野における濡れ性表現には様々な手法が用いられており、Zhang ら [1] はメッシュ、Wang ら [2] は粒子レベルセット法を用いて様々な固体表面上に液体を接触させ、濡れ性の影響によって形成される液滴を表現している。一方、粒子法による濡れ性表現では表面張力モデルを用いており、表面張力モデルには大きく分けて CSF (Continuum Surface Force) モデルとポテンシャルモデルの2つがある。CSF モデルは Brackbill ら [3] によって提案され、体積力を用いて表面張力をモデル化する手法であり、非圧縮性流体を対象として Koshizuka and Oka [4] によって開発された MPS (Moving Particle Semi-implicit) 法には Nomura ら [5] が、また、圧縮性流体を対象として Gingold and Monaghan [6] によって開発された SPH (Smoothed Particle Hydrodynamics) 法には Morris [7] がこの CSF モデルを導入した。一方、表面張力を Van der Waals 力に起因する分子間力から表現する手法がポテンシャルモデルであり、ポテンシャルモデルは MPS 法では Shirakawa ら [8] によって、また、SPH 法には Tartakovsky and Meakin [9] によって導入された。ポテンシャルモデルを用いた濡れ性の表現として、MPS 法では静摩擦を考慮し斜面を滑落する液滴の形状に着目した Hattori and Koshizuka のモデル [10]、SPH 法では濡れの中の1つの要素である付着濡れを考慮した Akinci らのモデル [11] や異なる種類の液体を用いた場合にそれぞれの液体-固体間に合わせたポテンシャルモデルを使い分ける手法を Yang [12] が提案した。なお、これらの手法による濡れ性の再現には接触角を用いている。接触角とは、固相が液相および気相と接触している際に、3相の交わる境界線において固相と液相が成す角度であり、接触角は液体と固体の物性である表面自由エネルギーによって決まる単一の値である。

しかしながら、濡れ性に関する従来の2手法は固体の

物性を考慮するのではなく、結果として得られるべき接触角を予め指定することで液体の形状を矯正するため、接触角が既知である物理現象には適用可能であるが、接触角が未知の現象には適用できない。そこで、Natsume ら [13] は付着濡れに着目して濡れ性の表現手法を提案したが、Natsume らの手法も従来のポテンシャルモデルと同様に液体と固体の付着濡れのみを考慮し、もう一つの濡れである拡張濡れを考慮していなかった。このため、本稿では、液体、固体、および固液間の表面自由エネルギーから求められる付着濡れと拡張濡れを用いることで接触角を指定することなく、濡れ性を表現する手法を提案する。

本稿では、まず、提案手法の妥当性を検証するために平行板に水を垂らして、形成される液滴の接触角を測定する。次に、濡れ性の代表的な物理現象として、葉に滴下した水滴が高接触角を保ちながら、葉の表面上を落下する挙動を表現する。

## 2 解析手法

### 2.1 支配方程式

本稿では、使用する液体を非圧縮性流体と仮定し、支配方程式は密度一定の条件式、およびナビエ・ストークス方程式を用いる。

$$\frac{D\rho}{Dt} = 0, \quad (1)$$

$$\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = -\nabla P + \mu \nabla^2 \mathbf{u} + \mathbf{F}, \quad (2)$$

ここで、 $\rho$  は密度、 $\mathbf{u}$  は速度ベクトル、 $t$  は時刻、 $P$  は圧力、 $\mu$  は粘性係数、および  $\mathbf{F}$  は外力である。(2) 式の右辺第一項は圧力項、第二項は粘性項、および第三項は外力項である。なお、本研究において外力項は以下の (3) 式に示す3つの力を考慮する。

$$\mathbf{F} = \rho \mathbf{g} + \mathbf{F}^{SF} + \mathbf{F}^{surf}, \quad (3)$$

ここで、 $\mathbf{g}$  は重力加速度、 $\mathbf{F}^{SF}$  は流体構造連成の解析において弾性体から液体へ加えられる力、および  $\mathbf{F}^{surf}$  は表面張力である。なお、 $\mathbf{F}^{SF}$  および  $\mathbf{F}^{surf}$  の計算方法については2.4節および3章にて述べる。

### 2.2 MPS 法

MPS 法などの粒子法は多数の計算点となる粒子を用いてラグランジュ的に解析をする手法であり、解析に

は粒子間相互作用モデルである勾配モデル、発散モデル、およびラプラシアンモデルを用いる。また、粒子間距離に応じた重み付けを行う。本研究では Tamai and Koshizuka [14] の重み関数を用いる。

$$\omega(r_{ij}) = \begin{cases} \left(\frac{r_{ij}}{r_e} - 1\right)^2 & (r_{ij} \leq r_e) \\ 0 & (r_e < r_{ij}) \end{cases}, \quad (4)$$

ここで、 $r_{ij}$  は粒子  $ij$  間の距離、および  $r_e$  は影響半径である。MPS 法において影響半径は経験則から一般的に粒子径の 2～4 倍とすることが多く、本研究では勾配モデルおよび発散モデルで粒子径の 2.1 倍、ラプラシアンモデルで粒子径の 3.1 倍とする。

ただし、Koshizuka and Oka の開発した MPS 法 [4] は数値的に不安定であることが判っており、数値的不安定性軽減のために高精度化を行う必要がある。本研究では、勾配モデルおよび圧力計算において高精度化手法を適用する。ただし、Koshizuka and Oka の勾配モデルは粒子が正則配置であることを前提にモデル化されているため、正則配置が保たれている解析開始時には安定的な解析が可能であるが、解析が進むにつれて粒子配置が不規則になると数値的不安定性が生じる。一方、入部・仲座の勾配モデル [15] は 1 次精度が保証されているため、粒子配置が不規則でも対応可能なモデルである。このため本稿では、勾配モデルとして入部・仲座の勾配モデルに Monaghan [16] の人工斥力モデルを複合したより高精度な圧力勾配モデル [17] を採用する。

次に、Koshizuka and Oka の圧力 Poisson 方程式の生成項は粒子数密度をベースとして計算されているため、体積保存性は高いが計算精度は低いため、圧力振動が生じる。一方、Tanaka and Masunaga [18] の生成項は体積保存性は劣るものの計算精度は高く、速度発散型の生成項と Koshizuka and Oka の粒子数密度型の生成項を併用したモデルであるため、本稿では Tanaka and Masunaga の生成項 [18] を用いる。

さらに、Koshizuka and Oka の MPS 法 [4] では自由表面粒子を判定し、自由表面粒子と判定された粒子の圧力を大気圧 (圧力を 0) にして、Dirichlet 境界条件を設定することで圧力の Poisson 方程式を解くことができる。しかしながら、Koshizuka and Oka の自由表面粒子判定は粒子数密度に依存し、誤判定が生じることが判っている。そこで本研究では、Koshizuka and Oka の手法に加えて Marrone ら [19] の幾何学的自由表面判定手法を補

助条件として用いる Tamai and Koshizuka の自由表面粒子判定手法 [14] を採用する。

### 2.3 濡れ性モデル

従来の表面張力モデルを用いた濡れ性は接触角を指定することで実現しており、接触角は Young の式より求められる。なお、接触角は固体表面が液体および気体と接触している時に、固体、液体、および気体の境界線において液体が固体表面となす角度であり、接触角は  $0^\circ < \theta < 180^\circ$  の範囲であり、(5) 式が成立する。

$$\gamma_s = \gamma_l \cos \theta + \gamma_{sl}, \quad (5)$$

ここで、 $\gamma_s$ 、 $\gamma_l$ 、および  $\gamma_{sl}$  は固相、液相、および固液間の表面自由エネルギーであり、 $\theta$  は接触角である。従来の CSF モデルや石井・杉井の手法による濡れ性は固相と接触している液体の挙動を矯正することで実現している。

ポテンシャルモデルでは、固相と液相を引き剥がした際に固相と液相の界面を生成するのに必要な仕事の比からポテンシャル係数の比を算出するため、固液間と液体間のポテンシャル係数には (6) 式の関係が成立する [20]。

$$C_{sl} = \frac{1 + \cos \theta}{2} C_{ll}, \quad (6)$$

ここで、 $C_{sl}$  および  $C_{ll}$  は固液間および液体間のポテンシャル係数である。(5) 式で成立する接触角  $\theta$  を (6) 式の  $\theta$  に代入することで  $C_{ll}$  から  $C_{sl}$  を求めることができる。求められた  $C_{ll}$  および  $C_{sl}$  は (3) 式における表面張力  $\mathbf{F}^{surf}$  を計算するために近藤らの提案したポテンシャルモデル ((7) 式) で用いられる。

$$\mathbf{F}_i^{surf} = C_k \sum_{j \neq i} f^{ip}(r_{ij}) \frac{\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i}{r_{ij}}, \quad (7)$$

ここで、 $C_k$  の右下添え字  $k$  は  $k = \{ll, sl\}$  であり、それぞれ液体間および固液間を意味し、 $\mathbf{r}_i$  と  $\mathbf{r}_j$  は粒子  $i$  と  $j$  の位置ベクトルである。粒子間力  $f^{ip}$  は近藤らが提案しており、(8) 式として以下に示す。

$$f^{ip}(r_{ij}) = \begin{cases} (r_{ij} - l_0)(r_{ij} - r_e^{st}) & (r_{ij} \leq r_e^{st}) \\ 0 & (r_e^{st} < r_{ij}) \end{cases}, \quad (8)$$

ここで、 $l_0$  は初期粒子間距離および  $r_e^{st}$  はポテンシャルモデルで使用する影響半径である。 $C_k$  を液体間および固液間によって使い分け、ポテンシャル力に強弱が生じ

ることで液体の形状が矯正されて濡れ性が実現されている。

しかしながら、この手法では接触角  $\theta$  が既知でないと濡れ性を表現することはできない。そこで、我々は固体、液体、および固液間の 3 相の表面自由エネルギーから求められる付着濡れを用いた濡れ性の表現手法を提案 [13] してきたが、拡張濡れを考慮できていなかったため十分なモデルではなかった。

## 2.4 流体構造連成モデル

本稿で用いる構造体の支配方程式である連続の式および運動方程式を以下に示す。

$$\frac{\partial \rho^S}{\partial t} + \rho^S \nabla \cdot \mathbf{u}^S = 0, \quad (9)$$

$$\rho^S \frac{D\mathbf{u}^S}{Dt} = \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}^S + \mathbf{F}^S, \quad (10)$$

ここで、 $\rho^S$  は構造体の密度および  $\boldsymbol{\sigma}^S$  は応力テンソルである。なお、本研究における (10) 式の外力  $\mathbf{F}^S$  は (11) 式に示す 2 つの力を考慮する。

$$\mathbf{F}^S = \rho^S \mathbf{g} + \mathbf{F}^{FS}, \quad (11)$$

ここで、 $\mathbf{F}^{FS}$  は構造体が流体から受ける力である。(10) の応力テンソル  $\boldsymbol{\sigma}^S$  はフックの法則を用いて (12) 式で表される。

$$\boldsymbol{\sigma}^S = \lambda^S \mathbf{I} \nabla \cdot \mathbf{z} + 2\mu^S \boldsymbol{\epsilon}^S, \quad (12)$$

ここで、 $\mathbf{I}$  は 2 階の単位テンソル、 $\mathbf{z}$  は変位ベクトル、および  $\boldsymbol{\epsilon}^S$  は構造体のひずみテンソルである。(12) 式の  $\lambda^S$  および  $\mu^S$  はラメ定数であり、ヤング率  $E^S$  およびポアソン比  $\nu^S$  を用いて (13) および (14) 式から求められる。

$$\lambda^S = \frac{E^S \nu^S}{(1 + \nu^S)(1 - 2\nu^S)}, \quad (13)$$

$$\mu^S = \frac{E^S}{2(1 + \nu^S)} \quad (14)$$

次に、構造体の解析において応力テンソル  $\boldsymbol{\sigma}^S$  の発散が必要である。本研究では、宗らの開発した構造体解析手法 [21] を採用し、 $\boldsymbol{\sigma}^S$  の発散モデルとして (15) 式に示す離散化モデルを用いる。

$$\langle \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}^S \rangle_i = \frac{d}{n^0} \left[ \lambda^S \sum_{j \neq i} \frac{(\nabla \cdot \mathbf{z})_{ij} \mathbf{r}_{ij}}{r_{ij}^0 r_{ij}} \omega(r_{ij}^0) + 2\mu^S \sum_{j \neq i} \frac{\mathbf{z}_{ij}}{(r_{ij}^0)^2} \omega(r_{ij}^0) \right], \quad (15)$$

ここで、ここで、 $d$  は次元数、 $n^0$  は初期粒子数密度、および  $r_{ij}^0$  は初期位置における粒子  $ij$  間の距離である。

また、流体構造連成の解析では液相と固相の界面で、(16) および (17) 式に示す non-slip 条件および構造体と流体の力の釣り合い条件を満足する必要がある。

$$\mathbf{u}^S = \mathbf{u}^F, \quad (16)$$

$$\boldsymbol{\sigma}^S \cdot \mathbf{n}^S = -\boldsymbol{\sigma}^F \cdot \mathbf{n}^F, \quad (17)$$

ここで、 $\mathbf{u}^S$  と  $\mathbf{u}^F$  は構造体と流体の速度ベクトル、 $\boldsymbol{\sigma}^S$  と  $\boldsymbol{\sigma}^F$  は構造体と流体の応力、および  $\mathbf{n}^S$  と  $\mathbf{n}^F$  は構造体と流体の法線ベクトルである。(16) および (17) 式を満足するため、本研究では Khayyer らの連成手法 [22] を用いる。Khayyer らの手法では、流体粒子から構造体粒子への圧力勾配と構造体粒子から流体粒子への圧力勾配は原理的に等しくなることから (18) 式を導出している。

$$\nabla P^{FS} \cdot \mathbf{n}^S = -\nabla P^{SF} \cdot \mathbf{n}^F, \quad (18)$$

ここで、 $\nabla P^{FS}$  は流体粒子の圧力  $P^F$  から構造体粒子の圧力  $P^S$  への圧力勾配、および  $\nabla P^{SF}$  は構造体粒子の圧力  $P^S$  から流体粒子の圧力  $P^F$  への圧力勾配である。(18) 式は流体と構造体の界面における圧力勾配と法線ベクトルの内積は釣り合うことを示しており、 $P^{FS}$  および  $P^{SF}$  は (20) および (19) 式を用いて求められる。

$$\nabla P^{SF} = \frac{P^S - P^F}{r_{FS}^2} \mathbf{r}^{FS} \omega(r^{SF}), \quad (19)$$

$$\nabla P^{FS} = \frac{P^F - P^S}{r_{SF}^2} \mathbf{r}^{SF} \omega(r^{FS}), \quad (20)$$

ここで、 $\mathbf{r}^{SF}$  および  $\mathbf{r}^{FS}$  は構造体から流体および流体から構造体への方向ベクトルであり、 $r^{SF}$  および  $r^{FS}$  は構造体粒子から流体粒子および流体粒子から構造体粒子への距離である。さらに、流体から構造体および構造体から流体へ及ぼされる力  $\mathbf{F}^{FS}$  および  $\mathbf{F}^{SF}$  は (22) および (21) 式から求められる。

$$\mathbf{F}^{SF} = -\frac{\langle \nabla P \rangle^F}{\rho^F} = -\frac{1}{\rho^F} \sum_{K \in \Omega} \nabla P^{KF}, \quad (21)$$

$$\mathbf{F}^{FS} = -\frac{\langle \nabla P \rangle^S}{\rho^S} = -\frac{1}{\rho^S} \sum_{K \in \Omega} \nabla P^{KS}, \quad (22)$$

ただし、 $\Omega = \Omega_F \cup \Omega_S$ ,

ここで、 $\rho^F$  は流体の密度および  $K$  は流体もしくは構造体の粒子を表す。なお、 $\Omega_F$  および  $\Omega_S$  はそれぞれ流体

と構造体の領域を示す. また,  $P^{FF}$  および  $P^{SS}$  の場合はそれぞれ流体粒子同士および構造体粒子同士で圧力勾配を求める.

### 3 提案手法

#### 3.1 濡れ性のモデル化

本稿では, 付着濡れと拡張濡れを組み合わせることで接触角を指定することなく, 固体物性の影響を受けた液体が接触角を形成する濡れ性の表現手法を提案する. 付着濡れおよび拡張濡れはどちらも固体, 液体, および固液間の表面自由エネルギーの関係から液体が固体に付着する仕事および液体の濡れ拡がった状態から拡がる前の状態に戻すのに必要な仕事によって発生する現象であり, それらの現象を引き起こす仕事は付着仕事および拡張仕事と呼ばれる. これらの付着および拡張仕事によるポテンシャル力を合成した  $F_i$  を求め, 濡れ性を付与する粒子に適用して表面張力  $F^{surf}$  を計算することで濡れ性を表現する. なお, 付着仕事および拡張仕事は単位面積あたりの仕事もしくはエネルギーとして定義されており, 仕事と表面自由エネルギーは同等に扱うことができる [23]. また, 表面自由エネルギーの単位は  $[J/m^2]$  であり,  $J = N \cdot m$  の関係より表面張力の単位  $[N/m]$  と同一になる.

本研究では近藤らのポテンシャルモデル [20] をベースに他相からの影響を考慮できる石井・杉井の表面張力モデル [24] を採用し, 濡れ性モデルの改良を行う.

##### 3.1.1 濡れ性対象粒子の判定

まず, 自由表面粒子の判定を行う. 本研究で採用している石井・杉井の表面張力モデル [24] では, 境界面上の粒子に対してのみ自由表面粒子と判定し, 表面張力が求められるため, 境界面上の粒子であるかの判定を行う必要があり, (23) 式で法線ベクトル  $n_i^{in}$  が求められるかどうかで自由表面粒子の判定を行う.

$$n_i^{in} = \begin{cases} F_i^l / |F_i^l| & (|F_i^l| / |F_i^l|^{flat} \geq \eta) \\ 0 & (|F_i^l| / |F_i^l|^{flat} < \eta) \end{cases}, \quad (23)$$

ここで,  $F_i^l$  は粒子  $i$  の液体ポテンシャル力,  $|F_i^l|^{flat}$  は曲率ゼロでのポテンシャル力, および  $\eta$  は境界面上の粒子判定に用いる閾値である.  $|F_i^l|^{flat}$  は解析前に求められた値 (一定値) を常に用いる. また,  $\eta$  は石井・杉井の手法に従って 0.2 とする. しかしながら, (23) 式は境界面上ではない粒子でも法線ベクトル  $n_i^{in}$  が求められるた

め, 表面張力が過度に計算される可能性がある. そこで, 本研究では (23) 式で法線ベクトルが求められた粒子に補助条件として Marrone らの幾何学的判定手法 [19] を適用して表面張力が求められる自由表面粒子の判定を行う. 以下にアルゴリズムを示す.

---

#### Algorithm 自由表面粒子の判定アルゴリズム

---

- 1: **if** 法線ベクトル  $n_i^{in}$  が求められる **then**
  - 2:     **if**  $\lambda_i \leq \beta_1$  **then**
  - 3:         自由表面粒子.
  - 4:     **else if**  $\lambda_i \geq \beta_2$  **then**
  - 5:         自由表面粒子ではない.
  - 6:     **else**  $\{\beta_1 < \lambda_i < \beta_2 \text{ 場合.}\}$
  - 7:         **if** Marrone らの判定で自由表面粒子 **then**
  - 8:             自由表面粒子.
  - 9:         **else**
  - 10:             自由表面粒子ではない.
  - 11:         **end if**
  - 12:     **end if**
  - 13: **else**  $\{\text{法線ベクトル } n_i^{in} \text{ が求められない.}\}$
  - 14:     自由表面粒子ではない.
  - 15: **end if**
- 

アルゴリズムにおいて,  $\lambda_i$  は粒子  $i$  の最小固有値, および  $\beta_k (k = 1, 2)$  は最小固有値  $\lambda_i$  に対する閾値であり, それぞれ  $\beta_1 = 0.2$  および  $\beta_2 = 0.8$  とする. ただし,  $\lambda_i$  は (24) 式を用いて求められたモーメント行列  $M_i$  からヤコビ法によって算出される.

$$M_i = \frac{d}{n^0} \sum_{j \neq i} \frac{(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i) \otimes (\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i)}{r_{ij}^2} \omega(r_{ij}), \quad (24)$$

図 1 に Marrone らの幾何学的判定の概念図を示す. 判定に必要な法線ベクトル  $n_i$  を (25), (26), および (27) 式を用いて求める.

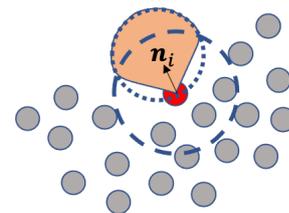


図 1 Marrone らの自由表面粒子判定の模式図.

$$\mathbf{n}_i = \frac{\boldsymbol{\nu}_i}{|\boldsymbol{\nu}_i|}, \quad (25)$$

$$\boldsymbol{\nu}_i = -M_i^{-1}\mathbf{b}_i, \quad (26)$$

$$\mathbf{b}_i = \frac{1}{n^0} \sum_{j \neq i} \frac{\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i}{r_{ij}} \omega(r_{ij}), \quad (27)$$

ここで、上記式で求められた法線ベクトル  $\mathbf{n}_i$  の向きに粒子が存在しなければ自由表面粒子と判定される。

次に、自由表面粒子が濡れ性の対象となるかどうかの判定を行う。濡れ性の対象となる粒子は、固体から一定以内の距離にあり、かつ境界面上に存在する粒子とする。図 2 は濡れ性判定の概念図を示す。

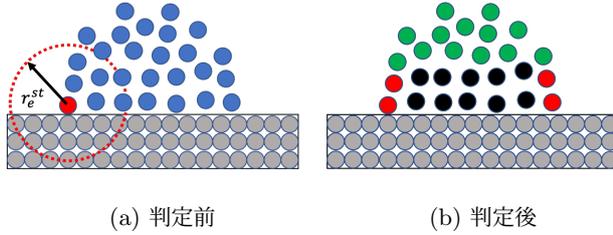


図 2 濡れ性の対象粒子判定前後。

図 2 (a) および (b) において赤色の粒子が対象粒子、青色の粒子が参照粒子、および灰色の粒子が壁粒子である。図 2 (a) の赤い円は対象粒子の影響半径を示しており、影響半径内に壁粒子があれば壁近傍粒子として判定され、壁近傍粒子かつ境界面上の粒子であれば、濡れ性の対象粒子として判定される。一方、図 2 (b) は濡れ性対象粒子判定後の図であり、赤色の粒子が濡れ性対象粒子、黒色の粒子が内部粒子、および緑色の粒子が外部粒子である。濡れ性対象粒子は本研究で提案する付着濡れと拡張濡れを考慮した表面張力計算を行う。内部粒子は固体と接着しているため表面張力  $\mathbf{F}^{surf}$  は 0 となり、粒子の速度ベクトルも 0 となる。一方、緑色の外部粒子は濡れ性の影響を受けないため、石井・杉井の手法による表面張力計算を行う。

### 3.1.2 付着濡れ

ここでは、付着濡れに対する表面張力について述べる。まず、付着濡れは巨大な固体に少量の液体が接触して形状を保持している状態であり、この固体に付着している液体を引き離すのに必要な仕事は付着仕事  $W_a$  と呼ば

れ、Dupré の式 ((28) 式) から求めることができる。

$$W_a = \gamma_s + \gamma_l - \gamma_{sl}, \quad (28)$$

ここで、 $W_a$  は付着仕事である。(28) 式に (5) 式を代入すると (29) 式 (Young-Dupré の式) になる。

$$W_a = \gamma_l(\cos \theta + 1), \quad (29)$$

(29) 式において、接触角  $\theta$  は  $0^\circ < \theta < 180^\circ$  であるから付着仕事  $W_a$  は常に正となり付着濡れが発生する。濡れ性の対象粒子 (図 2(b) の赤色粒子) において Dupré の式 ((28) 式) を満足するように、固体、液体、および固液間のポテンシャル力は (30) 式のように合成される。

$$\mathbf{F}_i^a = \mathbf{F}_i^s + \mathbf{F}_i^l - \mathbf{F}_i^{sl}, \quad (30)$$

ここで、 $\mathbf{F}_i^a$  は粒子  $i$  の付着仕事に必要なポテンシャル合成力、 $\mathbf{F}_i^s$ 、 $\mathbf{F}_i^l$ 、および  $\mathbf{F}_i^{sl}$  はそれぞれ粒子  $i$  の固体、液体、および固液間のポテンシャル力である。固体、液体、および固液間のポテンシャル力は (7) 式と同様に (31) 式で求められる。

$$\mathbf{F}_i^k = C^k \sum_{j \neq i} f^{ip}(r_{ij}) \frac{\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i}{r_{ij}}, \quad (31)$$

ここで、 $C^k$  の右上添え字  $k$  は  $k = \{s, l, sl\}$  であり、それぞれ固体、液体、および固液間を意味する。なお、固体、液体、および固液間のポテンシャル係数  $C^k$  の計算方法については 3.2 節で述べる。粒子間力  $f^{ip}$  に必要となるポテンシャルモデルの影響半径  $r_e^{st}$  は、本研究ではラプラシアンモデルと同様に粒子径の 3.1 倍とする。付着仕事は固体と液体が接触している面を引き離すのに必要な仕事であるから、固体表面に対して垂直に働く仕事とみなされ、(32) 式を用いて (30) 式の  $\mathbf{F}_i^a$  に対して垂直方向の力  $\mathbf{F}_i^{an}$  を算出する。

$$\mathbf{F}_i^{an} = (\mathbf{F}_i^a \cdot \mathbf{n}^{wall}) \mathbf{n}^{wall}, \quad (32)$$

ここで、 $\mathbf{F}_i^{an}$  は  $\mathbf{F}_i^a$  の垂直成分および  $\mathbf{n}^{wall}$  は固体表面の単位法線ベクトルである。

### 3.1.3 拡張濡れ

次に、拡張濡れに対する表面張力について述べる。拡張濡れは液体が固体表面に無限に濡れ拡がる状態であり、その状態から拡がる前の状態に戻すのに必要な仕事

である拡張仕事  $W_s$  によって濡れ拡がり が抑制される。なお,  $W_s$  は (33) 式から求められる。

$$W_s = \gamma_s - \gamma_l - \gamma_{sl}, \quad (33)$$

ここで,  $W_s$  は拡張仕事である。(33) 式に (5) 式を代入すると (34) 式になる。

$$W_s = \gamma_l(\cos \theta - 1), \quad (34)$$

(34) 式において接触角  $\theta$  は,  $0^\circ < \theta < 180^\circ$  であるから  $W_s < 0$  となり, 液体の濡れ拡がり は抑制されて液滴を形成する。一般に  $\theta \geq 90^\circ$  は疎水性であり固体表面上の液体をよく弾く。一方,  $\theta < 90^\circ$  は固体表面上で液体はよく濡れ拡がる。したがって, 本研究では  $\theta < 90^\circ$  の際に, 拡張仕事の影響を受けて液体の濡れ拡がり が抑制されて液滴が形成されるモデルの検討を行う。(33) 式を満足するように固体, 液体, および固液間のポテンシャル力を (35) 式のように合成する。

$$\mathbf{F}_i^e = \mathbf{F}_i^s - \mathbf{F}_i^l - \mathbf{F}_i^{sl}, \quad (35)$$

ここで,  $\mathbf{F}_i^e$  は粒子  $i$  の拡張仕事によるポテンシャル合力である。

### 3.1.4 付着濡れと拡張濡れの合成

本節では, 付着仕事によるポテンシャル力  $\mathbf{F}^{an}$  および拡張仕事によるポテンシャル力  $\mathbf{F}^e$  の合成について検討する。前述のとおり, 接触角  $\theta$  は  $0^\circ < \theta < 180^\circ$  の範囲であるから付着濡れが発生し, 固体表面上に液体が接触している際は常に付着仕事の影響によって液滴が形成される。ただし,  $\theta < 90^\circ$  では液体はよく濡れ拡がるのに対し,  $\theta \geq 90^\circ$  ではあまり濡れ拡がらないために拡張仕事は働かない。また, 接触角  $\theta$  が小さく濡れ拡がった状態の液体を濡れ拡がる前の状態に戻すのに必要な拡張仕事  $W_s$  は大きくなる。そこで, 拡張仕事を行うためのポテンシャル力  $\mathbf{F}_i^e$  に係数を設けて拡張仕事をコントロールする。なお, 係数には近似ヘビサイド関数を用い, 拡張仕事によるポテンシャル力  $\mathbf{F}^e$  は濡れ拡がり を抑制するための力であるから負の係数を設定し, (36) 式を用いて  $\mathbf{F}_i^{an}$  と  $\mathbf{F}_i^e$  を合成する。

$$\mathbf{F}_i = \mathbf{F}_i^{an} - H\mathbf{F}_i^e, \quad (36)$$

ここで,  $\mathbf{F}_i$  は粒子  $i$  の合成ポテンシャル力,  $H$  は近似ヘビサイド関数値である。(36) 式で求めた  $\mathbf{F}_i$  を (37) 式の

$\mathbf{F}_i$  に代入して付着仕事および拡張仕事による粒子  $i$  の表面張力  $\mathbf{F}_i^{surf}$  を求め, (3) 式の  $\mathbf{F}^{surf}$  に適用する。

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_i^{surf} &= d \frac{P_i^n - P_i^n|^{flat}}{h} \mathbf{n}_i^{in}, \\ &= S_i \frac{d}{V_0} \left[ \left( \frac{1}{\frac{1}{N} \sum_j \sin \varphi_{ij}} - 1 \right) \right] \mathbf{F}_i, \end{aligned} \quad (37)$$

ここで,  $P_i^n$  は粒子  $i$  の法線方向の力 (圧力),  $P_i^n|^{flat}$  は曲率ゼロの液相圧力,  $S_i$  は凸形状界面で 1, 凹形状界面で -1 を取る係数,  $V_0$  は粒子 1 個分の体積,  $N$  は影響半径内の粒子数, および  $\varphi_{ij}$  は粒子  $i$  と粒子  $j$  の法線ベクトルの成す角度である。(38) 式および図 3 に, 近似ヘビサイド関数の式およびグラフを示す。

$$H = \begin{cases} 1 & (x < -\frac{\Delta x}{2}) \\ 1 - \frac{1}{2} \left( \frac{2x + \Delta x}{\Delta x} + \frac{1}{\pi} \sin \frac{2\pi x}{\Delta x} \right) & (|x| < \frac{\Delta x}{2}) \\ 0 & (x > \frac{\Delta x}{2}) \end{cases}, \quad (38)$$

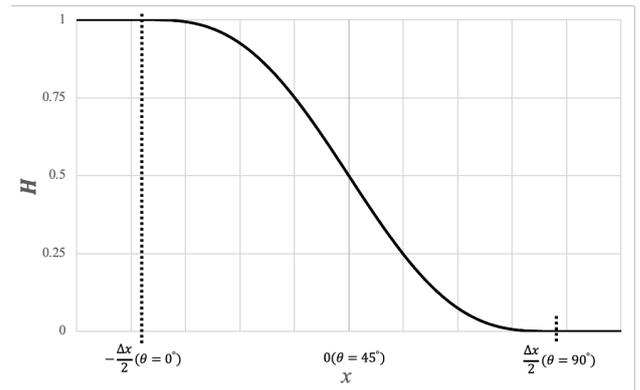


図 3 近似ヘビサイド関数。

図 3 において, 横軸は入力 ( $x$ ), 縦軸は近似ヘビサイド関数値 ( $H$ ) であり,  $H$  は  $[0, 1]$  の範囲で設定している。なお,  $\Delta x$  は近似ヘビサイド関数の有限幅である。有限幅 ( $\Delta x$ ) は形成される液滴の接触角  $\theta$  が  $\theta < 90^\circ$  の場合にヘビサイド関数値 ( $H$ ) が  $[0, 1]$  の範囲の値を取り,  $\theta \leq 90^\circ$  の場合に 0 となるように設定する必要があるため, 有限幅の範囲は  $[0^\circ, 90^\circ]$ , つまり  $\Delta x = 90^\circ$  とする。しかしながら, 解析中に接触角  $\theta$  を求めることは困難であるため, 有限幅 ( $\Delta x$ ) に使用することはできない。そこで本研究では, 液滴形状によって変化する接触角  $\theta$  と液体間のポテンシャル力の大きさの変化が比例することに着目して, ヘビサイド関数の入力 ( $x$ ) および有限幅 ( $\Delta x$ ) をポテンシャル力を用いて設定する。

まず、固体表面上で形成される液滴の接触角  $\theta$  が有限幅  $\Delta x$  に収まるように  $90^\circ$  未満であるかどうかを判定する必要がある。このため、液体間のポテンシャル力の大きさを (39) 式より求める。

$$\alpha_i^k = \sqrt{(\mathbf{F}_i^l)^2}, \quad (39)$$

ここで、 $\alpha_i^k$  は時刻  $k$  における粒子  $i$  の液体間のポテンシャル力の大きさである。なお、曲率ゼロの粒子配置におけるポテンシャル力の大きさを基準値  $\alpha_0$  とする。

次に、有限幅  $\Delta x$  の最大値に相当する  $\theta = 90^\circ$  におけるポテンシャル力の大きさ求めるため、図 4 の赤色の粒子に対して (39) 式を用いてポテンシャル力の大きさ  $\alpha_i^k$  を算出する。

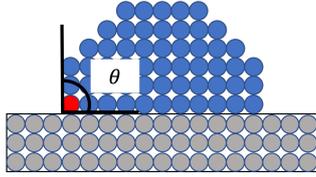


図 4  $\theta = 90^\circ$  でのポテンシャル力の計算対象粒子。

(39) 式によって求められた図 4 の赤色粒子のポテンシャル力の大きさ  $\alpha_i^k$  は基準値  $\alpha_0$  の 75% であった。したがって、 $\theta > 90^\circ$  の場合は濡れ性対象粒子の粒子間距離が短くなるためポテンシャル力は大きくなり、 $\alpha_i^k$  は基準値  $\alpha_0$  の 75% 以上となる。一方、 $\theta \leq 90^\circ$  の場合は濡れ性対象粒子の粒子間距離が長くなるためポテンシャル力は小さくなり、 $\alpha_i^k$  は基準値  $\alpha_0$  の 75% 以下となる。つまり、時刻  $k$  におけるポテンシャル力の大きさ  $\alpha_i^k$  が  $\alpha_0$  の 75% 以下であれば接触角  $\theta$  は  $90^\circ$  以下であると判断する。したがって、有限幅  $\Delta x$  の最大値は  $\theta = 90^\circ$  のとき、 $\alpha_i^k$  が  $\alpha_0$  の 75%、つまり 0.75 となる。一方、最小値は  $\theta = 0^\circ$  のとき  $\alpha_i^k$  が  $\alpha_0$  の 0%、つまり 0.0 となるため有限幅の範囲は  $[0^\circ, 90^\circ] = [0.0, 0.75]$  となる。この結果、有限幅 ( $\Delta x$ ) は  $\Delta x = 0.75$  となる。ただし、入力  $x$  の中央値を 0 とするために  $\Delta x$  の範囲は図 3 に示すように  $\theta = 45^\circ$  を 0 とし、 $[-\frac{\Delta x}{2}, \frac{\Delta x}{2}] = [-0.375, 0.375]$  とする。

### 3.2 表面自由エネルギー

本節では、ポテンシャル係数  $C^k$  を求めるために必要な表面自由エネルギーの取り扱いについて示す。まず、表面張力計算には固体、液体、および固液間の表面自由

エネルギーが必要であるが、固液間の表面自由エネルギーは測定できないため、計算モデルで求める。表面自由エネルギーの理論 [25, 26, 27, 28] の中で、幾つかの理論 [25, 26, 27] では 2 種類の極性しか考慮できないのに対し、北崎・畑の理論 [28] では 3 種類の極性を考慮できるため、本研究では (40) 式に示す北崎・畑の拡張 Fowkes 式を用いる。

$$\gamma_{sl} = \gamma_s + \gamma_l - 2\sqrt{\gamma_s^d \gamma_l^d} - 2\sqrt{\gamma_s^p \gamma_l^p} - 2\sqrt{\gamma_s^h \gamma_l^h}, \quad (40)$$

ここで、 $\gamma_s^d$  と  $\gamma_l^d$ 、 $\gamma_s^p$  と  $\gamma_l^p$ 、および  $\gamma_s^h$  と  $\gamma_l^h$  は、それぞれ固体と液体の表面自由エネルギーの分散成分、双極子成分、および水素結合成分である。

次に、(40) 式より求められた  $\gamma_{sl}$  と固体および液体の物性値である  $\gamma_s$  および  $\gamma_l$  を (41) 式の  $\gamma_k$  に代入することで、固体、液体、および固液間のポテンシャル係数  $C^k$  が求められる。

$$C^k = \frac{\gamma_k}{l_0(T_n - T_e)}, \quad (41)$$

$$T_n = \frac{1}{A_0} \sum_j^{N_1} f^{ip}(r_{ij}) \frac{\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i}{r_{ij}} \cdot \mathbf{n}_i^p, \quad (42)$$

$$T_e = \frac{1}{A_0} \sum_j^{N_2} f^{ip}(r_{ij}) \frac{\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i}{r_{ij}} \cdot \mathbf{e}_i^p, \quad (43)$$

ここで、 $\gamma_k$  は固体、液体、および固液間の表面自由エネルギー、 $l_0$  は初期粒子間距離、 $A_0$  は曲率ゼロの微小面積要素、 $N_1$  は法線方向の粒子数、 $N_2$  は接線方向の粒子数、 $\mathbf{n}_i^p$  と  $\mathbf{e}_i^p$  はポテンシャル係数を求めるための法線ベクトルおよび接線ベクトルである。

### 3.3 安定化流体構造連成モデル

2.4 節で述べた Khayyer らの手法 [22] は、計算対象粒子を流体および構造体の界面付近の粒子のみとするため、計算コストを低く抑えることができる。ただし、Khayyer らの手法の解析対象は構造体の境界付近に数多くの流体粒子が存在している場合であるため、安定した計算が可能であった。しかしながら、本研究で扱う問題は流体の粒子数が少ない液滴であり、また、流体と構造体の接触面積が小さいと流体および構造体間の圧力が正しく求められず、数値的に不安定となる可能性がある。そこで、本研究では少ない流体粒子の場合や流体と構造体の接触面積が小さい場合も安定的な解析を可能とするために、各粒子の影響半径内における平均圧力をそれぞれ

れ求め勾配計算式に用いる。

$$\mathbf{F}^{SF} = -\frac{1}{\rho^F} \sum_{K \in \Omega} \frac{\hat{P}^K - \hat{P}^F}{|\mathbf{r}^{KS}|^2} \mathbf{r}^{KS} \omega(r^{KF}), \quad (44)$$

$$\mathbf{F}^{FS} = -\frac{1}{\rho^S} \sum_{K \in \Omega} \frac{\hat{P}^K - \hat{P}^S}{|\mathbf{r}^{KF}|^2} \mathbf{r}^{KF} \omega(r^{KS}), \quad (45)$$

ここで、 $\hat{P}^K$  は流体あるいは構造体の領域に存在する粒子の影響半径内における平均圧力である。(21) および (22) 式の代わりに (45) および (44) 式を用いることで、不安定な圧力計算結果による解析全体への影響を抑え、安定的な流体構造連成の解析が可能となる。ただし、 $P^{FF}$  および  $P^{SS}$  の場合はそれぞれ基準粒子に平均圧力  $\hat{P}^K$  を用い、対象粒子は通常の圧力  $P^K$  を用いて圧力勾配を求める。なお、(44) 式で求めた  $\mathbf{F}^{SF}$  を (3) 式へ、また  $\mathbf{F}^{FS}$  を (11) 式に適用する。

#### 4 シミュレーション

シミュレーションでは、最初に濡れ性手法の妥当性を検証するために液体を水として、接触角が  $30^\circ$  から  $150^\circ$  の範囲となる固体を用いて形成された液滴の接触角を測定する。次に、葉に水を垂らして、液滴の形成を行い液滴が高接触角を維持しながら葉面上を落下する流体構造連成によるシミュレーションを行う。本研究におけるシミュレーション環境を表 1 に示す。

表 1 シミュレーション環境。

OS	Arch Linux
CPU	Xeon(R) CPU E5-1650 v3 (3.5GHz)
GPU	Tesla K40 (Memory 12GB)
CPU Memory	32 GB

##### 4.1 精度検証

濡れ性手法の妥当性を検証するために、平行板に水を垂らして、形成される液滴の接触角を測定する。なお、液滴のサイズは重力の影響を受けないほど小さい直径  $2.0[\text{mm}]$  とした。また、接触角の測定は (46) 式に示す  $\theta/2$  法を用いて測定する。図 5 に概念図を示す。

$$\theta = 2 \tan^{-1} \left( \frac{2h}{l} \right), \quad (46)$$

ここで、 $h$  は壁表面からの液滴高さ、および  $l$  は壁表面に接触している液滴の半径である。なお、シミュレーシ

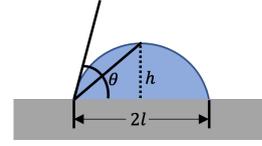


図 5  $\theta/2$  法 の 概 念 図。

ンにおける時間刻み幅  $\Delta t$  は  $0.01[\text{ms}]$  であり、粒子径は  $0.1[\text{mm}]$  とし、液体粒子の数は  $2,222$  個、壁粒子およびダミー壁粒子の数は  $40,000$  個とした。表 2 に固体、液体、および固液間の表面自由エネルギーと各固体ごとの接触角を示す。ただし、液体は水とし、固体はガラス、ナイロン、および高接触角となるよう調整したパラフィンである。また、(40) 式を用いて固液間の表面自由エネルギー  $\gamma_{sl}$  を算出する際に必要な固体と液体の表面自由エネルギーの分散成分、双極子成分、および水素結合成分を表 3 に示す。

表 2 接触角と表面自由エネルギー。

		[mJ/m <sup>2</sup> ]		
	接触角	$\gamma_s$	$\gamma_l$	$\gamma_{sl}$
ガラス	$30^\circ$	76.0	–	13.1
ナイロン	$71^\circ$	24.4	–	43.9
調整パラフィン	$130^\circ$	5.8	–	52.6
水	–	–	72.9	–

表 3 固液間の物性値。

	[mJ/m <sup>2</sup> ]		
	$\gamma_l^d$	$\gamma_l^p$	$\gamma_l^h$
水	29.1	1.3	42.4
	$\gamma_s^d$	$\gamma_s^p$	$\gamma_s^h$
ガラス	25.0	21.0	30.0
ナイロン	42.0	1.4	3.1
調整パラフィン	5.8	0.0	0.0

図 6 にシミュレーションの初期状態および安定後の画像を示す。なお、初期状態は接触角  $90^\circ$  の半球形状であり、シミュレーション結果において、青色粒子が液体粒子、白色粒子が壁粒子、および赤色粒子がダミー壁粒子である。また、水の密度  $\rho$  は  $1,000.0[\text{kg}/\text{m}^3]$ 、粘性係数  $\mu$  は  $0.001[\text{Pa} \cdot \text{s}]$  とした。

図 6 (a)~(d) より、各固体の物性値によって異なる接触角を形成していることが確認できる。次に、接触角が

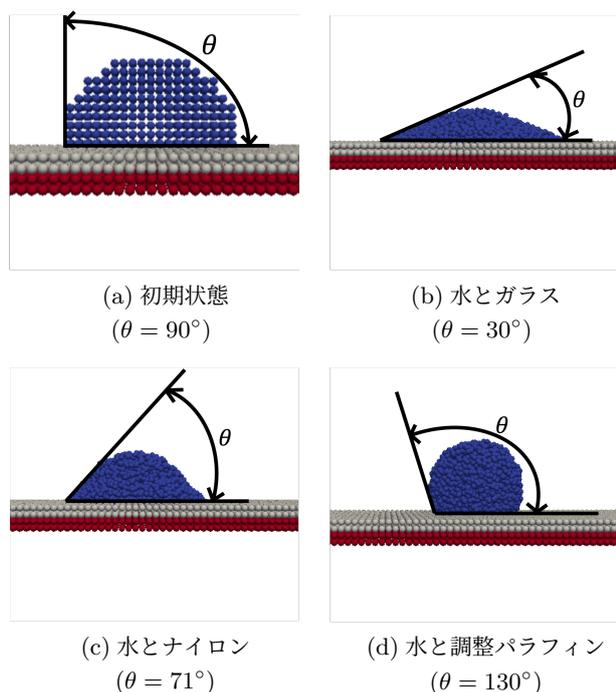


図6 シミュレーション結果.

30° から 150° の範囲となる固体を用いて形成された液滴の接触角の (46) 式による測定結果を図 7 に示す. 図 7 には, 比較対象として近藤らの手法 [20] で形成された液滴の接触角も示してある. なお, 提案手法は近藤らの手法と同じ時間刻み幅, 粒子径, 密度, および粘度を用いてシミュレーションを行っている.

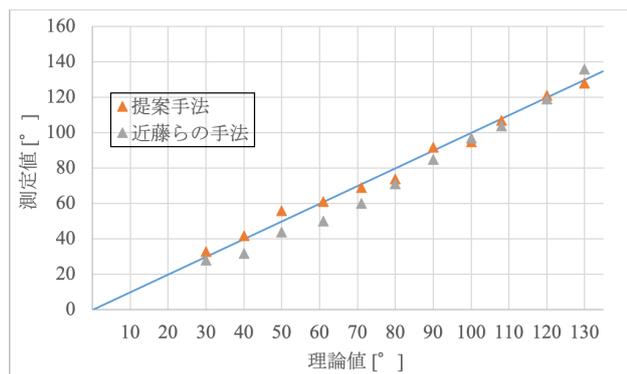


図7 接触角の比較.

図 7 において, 横軸は接触角の理論値であり, 縦軸はシミュレーション結果の (46) 式による測定値である. 図 7 より, 提案手法の方が近藤らの手法に比べて, 精度良く接触角が再現できていることが確認できる. また, 提案手法の理論値との最大相対誤差は接触角  $\theta$  の理論値

が 50° の際に 12% であり, 近藤らの手法では接触角  $\theta$  の理論値が 40° の際に -20% であった. さらに, 近藤らの手法では接触角 90° 以下の場合, 全ての測定値が理論値よりも小さくなっているが, 提案手法では理論値に近い状態で上下に分散している. これは, 提案手法で拡張濡れを考慮したことにより, 濡れ拡がり抑制されたことが要因であると考えられる. そして, 提案手法の平均相対誤差は 4.3% であったのに対し, 近藤らの手法の平均相対誤差は 9.2% であったことから提案手法の方が近藤らの手法に比べ精度良く接触角が再現できていることが確認できる.

次に, 提案手法および近藤らの手法による 1step に必要な計算時間と最大メモリ使用量を表 4 に示す. なお, 1step に必要な計算時間は 100,000step 計算した際の平均としている.

表 4 計算時間と最大メモリ使用量の比較.

	1step あたりの 計算時間 [s]	最大メモリ 使用量 [MB]
提案手法	0.171	350
近藤らの手法	0.092	320

表 4 より, 提案手法の 1step あたりの計算時間は近藤らの手法に比べて増加している. これは, 提案手法の濡れ性表現に用いる表面張力モデルが近藤らのポテンシャルモデルをベースに開発されていることに加えて, 3.1.1 で述べた濡れ性対象粒子判定に用いる, Marrone らの幾何学的判定に必要な最小固有値を算出する際に行うヤコビ法による計算の影響だと考えられる. また, 最大メモリ使用量については大きな差が見られなかった. MPS 法で最もメモリを消費するのは圧力計算に使用する行列の領域確保であるため, 提案手法を用いて粒子数が増加したとしても計算全体への影響は少ないと考えられる.

#### 4.2 流体構造連成解析

本節では, 代表的な濡れ性現象である蓮の葉に滴下した水滴が濡れ拡がることなく, 高接触角を維持したまま葉面上を落下するシミュレーションを流体構造連成解析で行った. 表 5 に葉の物性値を示す. なお, 水の密度  $\rho$  および粘性係数  $\mu$  は 4.1 節と同様である. また, 葉と液体間の表面自由エネルギー  $\gamma_{sl}$  を求めるための表面自由

エネルギーの分散成分，双極子成分，および水素結合成分は4.1節の調整パラフィンと同様である。

表5 葉の物性値.

$\gamma_s$	$\gamma_l$	$\gamma_{sl}$	$\rho^S$	$E^S$	$\nu^S$
[mJ/m <sup>2</sup> ]			[kg/m <sup>3</sup> ]	[MPa]	
5.8	72.8	52.6	500.0	1.0	0.1

また，シミュレーションの時間刻み幅  $\Delta t$  は 0.002[ms]，粒子径は 0.1[mm]，および液滴径は 2.0[mm] とし，液体の粒子数は 4,155 個で蓮の葉を構成する粒子数は 16,126 個である．図8にシミュレーション結果を示す．なお，計算された点群を Marching cubes 法でボクセル化し，POV-Ray を用いたレイトレーシングによりレンダリングしている．

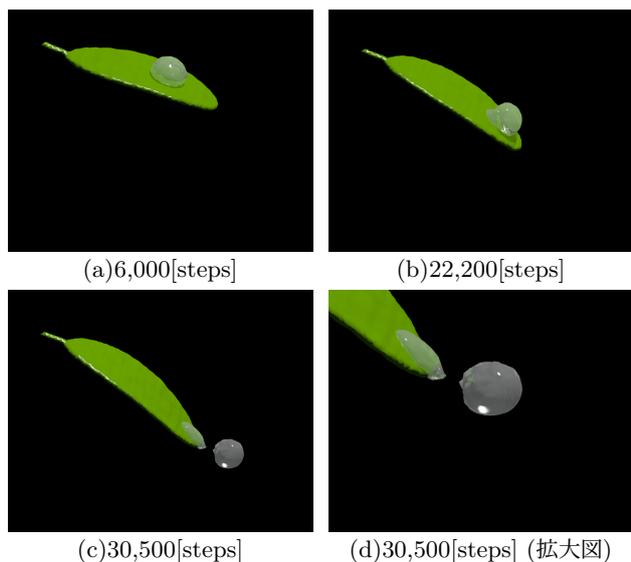


図8 葉の上に滴下した液滴挙動の流体構造連成解析.

図8(a)~(d)より，葉に接触した液滴が高接触角を保ちながら葉面上を落下していく様子が確認できる．さらに，液滴が落下する際に一部の液滴が葉の先端に残っているが，残留した液滴も濡れ拡がることなく高接触角を維持していることが判る．

次に，3.3節で提案した安定化流体構造連成モデルの影響を調べるため，本提案の流体構造連成モデルと Khayyer らのモデルの比較を図9に示す．なお，シミュレーション条件は流体構造連成モデルを除いて同一である．

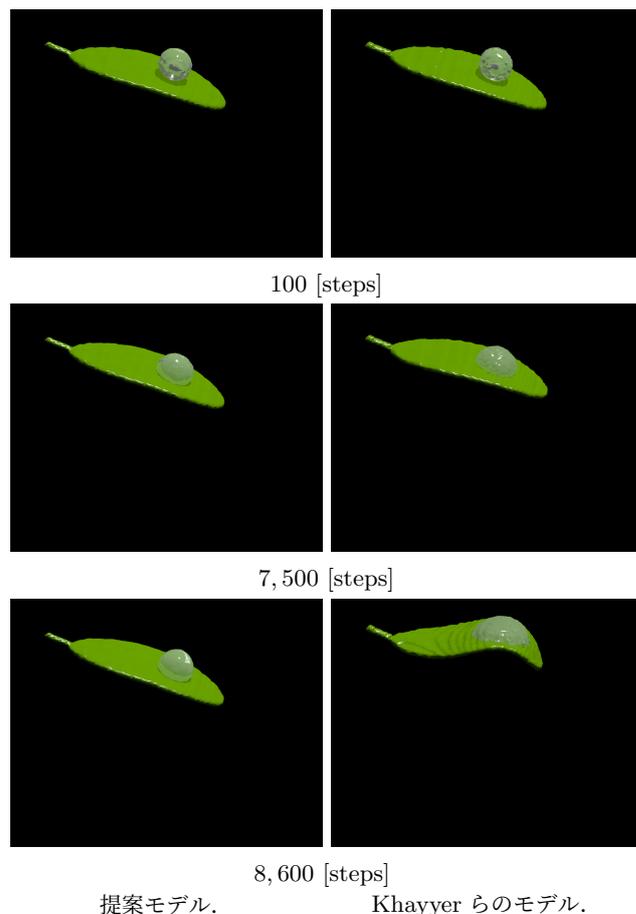


図9 流体構造連成モデルの比較.

図9より，100stepsの状態では提案モデルも Khayyer らのモデルも差はないが，7,500 および 8,600steps の状態で，提案モデルでは 100steps の状態に比べて液滴が葉の上に滴下された影響によって葉が少し沈むように形状が変化しているのに対して，Khayyer らのモデルでは液滴が葉の上に滴下されたにも関わらず，7,500steps では葉が沈むのではなく逆方向に変形し，8,600steps になると葉の形状が大きく崩れ，8,600steps 以降で計算が崩壊した．これは，Khayyer らのモデルでは少ない粒子数の場合に流体と構造体間の圧力が不安定になることが要因であると考えられる．一方，本提案モデルでは平均圧力を導入したことで少ない粒子数でも流体と構造体間の圧力が不安定になることがなく，安定した解析が可能となった．また，1stepあたりの計算時間は提案モデルが 0.275[s]，Khayyer らのモデルが 0.273[s] と大きな差は確認できず，最大使用メモリ量は提案モデルが 247[MB]，Khayyer らのモデルが 242[MB] と大きな差は見られな

かった。以上の結果から、本稿で提案した安定化流体構造連成モデルは従来手法とほぼ同じ計算時間、およびメモリ使用量で安定した結果が得られている。

最後に、大きな液滴 (液滴径 2.0[mm]) と小さな液滴 (液滴径 1.0[mm]) を葉の上に滴下し、2つの液滴が結合して高接触角を維持したまま葉面上を落下する流体構造連成解析を行った。なお、シミュレーション条件は時間刻み幅  $\Delta t$  を 0.001[ms] とした以外、前述した液滴1つの場合と同一である。また、小さな液滴の粒子数は 497 個であり、大きな液滴と合わせて計 4,652 個の粒子で液滴は構成されている。シミュレーション結果を図 10 に示す。

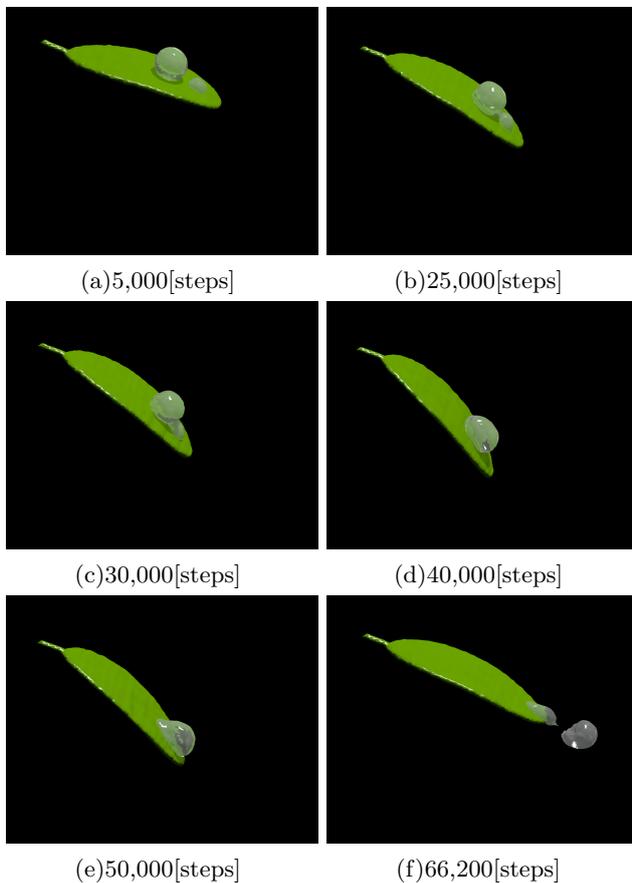


図 10 複数の液滴による流体構造連成解析。

図 10 より、図 10(a) では大きな液滴と小さな液滴が葉の上に独立して存在しており、図 10(b) では葉面上を落下し始めた大きな液滴が静止している小さい液滴に接近している様子が確認できる。また、図 10(c) では、大きな液滴と小さな液滴が結合し始め、図 10(d) では完全に 1つの大きな液滴となっていることが確認できる。そ

して、図 10(e) では、結合した液滴が葉面上を落下しており、図 10(f) では液滴の一部が葉面上から滴下している様子が確認できる。

## 5 まとめ

本稿では、付着濡れと拡張濡れを組合せることで、従来手法では必要であった接触角を指定することなく、濡れ性を表現する手法を提案した。様々な物性値の固体表面上に水を滴下したシミュレーションを行い、固体物性の違いで異なる接触角の液滴が形成されることを確認した。また、従来手法である近藤らの手法と比較したところ、提案手法の方がより精度良く接触角を再現できていることを確認した。さらに、濡れ性の代表的な現象である、液滴が高接触角を維持したまま葉面上を落下する挙動を再現するため、新たに安定化流体構造連成モデルを提案した。流体構造連成解析の結果、葉に接触した液滴が高接触角を保ちながら葉面上を落下していく様子を確認することができた。また、従来手法である Khayyer らの手法 [22] との比較により、提案した平均圧力を用いる安定化流体構造連成モデルが有用であることを確認できた。

しかしながら、本研究で扱った液滴は重力の影響を受けないほど小さなサイズであるため、重力の影響を受けるサイズの液滴への適用については今後検討する必要がある。また、接触角も  $150^\circ$  以上の超撥水や  $30^\circ$  以下の超親水についての検討も必要である。

## 参考文献

- [1] Y. Zhang, H. Wang, S. Wang, Y. Tong, and K. Zhou. A deformable surface model for real-time water drop animation. *IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics*, Vol. 18, No. 8, pp. 1281–1289, 2012.
- [2] H. Wang, P. J. Mucha, and G. Turk. Water drops on surfaces. *ACM Trans. Graph.*, Vol. 24, No. 3, p. 921–929, jul 2005.
- [3] J. U Brackbill, D. B Kothe, and C Zemach. A continuum method for modeling surface tension. *J. Comput. Phys*, Vol. 100, No. 2, pp. 335–354, 1992.
- [4] S. Koshizuka and Y. Oka. Moving-particle semi-

- implicit method for fragmentation of incompressible fluid. *Nuclear Sci. Eng*, Vol. 123, pp. 421–434, 1996.
- [5] K. Nomura, S. Koshizuka, Y. Oka, and H. Obata. Numerical analysis of droplet breakup behavior using particle method. *J. Nuclear Sci. Tech*, Vol. 38, pp. 1057–1064, 2001.
- [6] R. A. Gingold and J. J. Monaghan. Smoothed particle hydrodynamics: theory and application to non-spherical stars. *Mon. Not. R. Astron. Soc*, Vol. 181, pp. 375–389, 1977.
- [7] J. P. Morris. Simulating surface tension with smoothed particle hydrodynamics. *Int'l. J. Numer. Meth. Fluids*, Vol. 33, pp. 333–353, 2000.
- [8] N. Shirakawa, H. Rorie, Y. Yamamoto, and S. Tsunayama. Analysis of the void distribution in a circular tube with the two-fluid particle interaction method. *J. Nuclear Sci. Tech*, Vol. 38, No. 6, pp. 392–402, 2001.
- [9] A. Tartakovsky and P. Meakin. Modeling of surface tension and contact angles with smoothed particle hydrodynamics. *Phys. Rev. E*, Vol. 72, p. 26301, 2005.
- [10] T. HATTORI and S. KOSHIZUKA. Numerical simulation of droplet behavior on an inclined plate using the moving particle semi-implicit method. *Mechanical Engineering Journal*, Vol. 6, No. 5, pp. 19–00204–19–00204, 2019.
- [11] N. Akinci, G. Akinci, and M. Teschner. Versatile surface tension and adhesion for sph fluids. *ACM Transactions on Graphics (TOG)*, Vol. 32, No. 6, pp. 1–8, 2013.
- [12] T. Yang, M. C. Lin, R. R. Martin, J. Chang, and S. Hu. Versatile interactions at interfaces for sph-based simulations. In *Eurographics/ACM SIGGRAPH Symposium on Computer Animation (2016)*, pp. 57–66. Association for Computing Machinery, 2016.
- [13] T. Natsume, M. Oishi, M. Ohsima, and N. Mukai. Wettability method based on surface free energy between solid and liquid. *IWAIT2021 Abstract, Proc. of SPIE*, Vol. 11766, pp. 1176613–1–1176613–6, 1 2021.
- [14] T. Tamai and S. Koshizuka. Least squares moving particle semi-implicit method. *Comput. Part. Mech*, Vol. 1, No. 3, pp. 277–305, 2014.
- [15] 入部綱清, 仲座栄三. MPS 法における勾配計算の高精度化とその応用. 土木学会論文集 B2 (海岸工学), Vol. 66, No. 1, pp. 46–50, 2010.
- [16] J. J. Monaghan. SPH without a tensile instability. *J. Comput. Phys*, Vol. 159, No. 2, pp. 290–311, 2000.
- [17] T. Natsume, M. Oishi, M. Ohsima, and N. Mukai. Droplet formulation method for viscous fluid injection considering the effect of liquid-liquid two-phase flow. *ITE Transactions on Media Technology and Applications*, Vol. 9, No. 1, pp. 33–41, 2021.
- [18] M. Tanaka and T. Masunaga. Stabilization and smoothing of pressure in mps method by quasi-compressibility. *J. Comput. Phys*, Vol. 229, No. 11, pp. 4279–4290, 2010.
- [19] S. Marrone, A. Colagrossi, D. Le Touzé, and G. Graziani. Fast free-surface detection and level-set function definition in sph solvers. *J. Comput. Phys*, Vol. 229, No. 10, pp. 3652–3663, 2010.
- [20] 近藤雅弘, 越塚誠一, 滝本正人. MPS 法による粒子間ポテンシャル力を用いた表面張力モデル”. *Transactions of the Japan Society for Computational Engineering and Science*, Vol. 2007, pp. 20070021–20070021, 2007.
- [21] 宋武燮, 越塚誠一, 岡芳明. MPS 法による弾性構造体の動的解析. 日本機械学会論文集 A 編, Vol. 71, No. 701, pp. 16–22, 2005.
- [22] A. Khayyer, N. Tsuruta, Y. Shimizu, and H. Gotoh. Multi-resolution mps for incompressible fluid-elastic structure interactions in ocean engineering. *APPL OCEAN RES*, Vol. 82, pp. 397–414, 2019.
- [23] 高田保之. ぬれと表面張力. 伝熱, Vol. 43, No. 178, pp. 43–48, 2004.
- [24] 石井英二, 杉井泰介. 粒子法における表面張力モデ

ルの開発. 日本機械学会論文集B編, Vol. 78, No. 794, pp. 1710–1725, 2012.

- [25] F. M. Fowkes. Attractive force at interfaces. *Ind. Eng. Chem*, Vol. 56, pp. 40–52, 1964.
- [26] D. K. Owens and R. C. Wendt. Estimation of the surface free energy of polymers. *J. Appl. Polym. Sci*, Vol. 13, No. 18, pp. 1741–1747, 1969.
- [27] D. H. Kaelble. Dispersion-polar surface tension properties of organic solids. *J ADHESION*, Vol. 2, No. 2, pp. 66–81, 1970.
- [28] 北崎寧昭, 畑敏雄. Fowkes 式の拡張と高分子固体の表面張力の評価. 日本接着協会誌, Vol. 8, 3, pp. 131–141, 1972.

#### 夏目 拓也



2017 年, 東京都市大学知識工学部卒業. 2019 年, 同大学大学院工学研究科修士課程修了. 現在, 同大学大学院総合理工学研究科博士後期課程在学中. コンピュータグラフィックスに興味を持ち, 現在, 流体解析の医療応用に関する研究に従事. 日本機械学会学生会員, 日本バイオレオロジー学会学生会員.

#### 大石 正道



1998 年, 早稲田大学工学部卒業. 同年三井造船(株)(現三井 E&S ホールディングス(株))入社. 2001 年, 東京大学生産技術研究所技術専門職員. 光学技術を応用した, バイオ・マイクロ混相流の可視化計測に関する研究に従事. 日本機械学会および可視化情報学会会員.

#### 大島 まり



1984 年, 筑波大学第三学群基礎工学類卒業. 1986 年, 東京大学大学院工学研究科博士前期課程修了. 1992 年, 同大学大学院博士後期課程修了. 博士(工学). 同年東京大学生産技術研究所助手. 1998 年, 同研究所講師. 1999 年, 筑波大学・東京大学生産技術研究所併任助教授. 2000 年, 東京大学生産技術研究所助教授. 2005 年, 同研究所教授. 2006 年, 東京大学大学院情報学環教授. 血行力学解析の可視化に関する研究に従事. 日本機械学会および可視化情報学会会員. 2017 年度, 日本機械学会会長(第 95 期).

#### 向井 信彦



1983 年, 大阪大学基礎工学部卒業. 1985 年, 同大学院博士前期課程修了. 同年三菱電機(株)入社. 1997 年, コーネル大学コンピュータサイエンス修士課程修了. 2001 年, 大阪大学大学院博士後期課程修了. 博士(工学). 2002 年, 武蔵工業大学(現東京都市大学)工学部助教授. 2007 年, 同大学知識工学部教授. 2020 年, 東京大学生産技術研究所客員教授. 画像工学に関する研究に従事. ACM, 芸術科学会, 映像情報メディア学会など各会員.