

# 固体表面上液滴挙動解析への保存型レベルセット格子ボルツマン法の適用

## Application of a Conservative Level-set Lattice-Boltzmann Method to Analysis of Motion of Droplet on Solid Surface

- 高田 尚樹, 産総研, 〒305-8564 茨城県つくば市並木 1-2-1, E-mail: naoki-takada@aist.go.jp  
 松本 純一, 産総研, 〒305-8564 茨城県つくば市並木 1-2-1  
 松本 壮平, 産総研, 〒305-8564 茨城県つくば市並木 1-2-1  
 栗原 一真, 産総研, 〒305-8564 茨城県つくば市並木 1-2-1  
 穂苅 遼平, 産総研, 〒305-8564 茨城県つくば市並木 1-2-1  
 Naoki Takada, AIST, 1-2-1 Namiki, Tsukuba, Ibaraki 305-8564, Japan  
 Junichi Matsumoto, AIST, 1-2-1 Namiki, Tsukuba, Ibaraki 305-8564, Japan  
 Sohei Matsumoto, AIST, 1-2-1 Namiki, Tsukuba, Ibaraki 305-8564, Japan  
 Kazuma Kurihara, AIST, 1-2-1 Namiki, Tsukuba, Ibaraki 305-8564, Japan  
 Ryohei Hokari, AIST, 1-2-1 Namiki, Tsukuba, Ibaraki 305-8564, Japan

Applicability of a diffuse-interface tracking method is examined to microscopic immiscible liquid-liquid two-phase motions on partially-wetted and textured solid surfaces for evaluating micro-fluidic devices and for predicting underground fluid flows. The method adopts a one-step conservative level-set (CLS) advection equation and a lattice-Boltzmann model (LBM). The CLS equation, equivalent to a conservation-modified Allen-Cahn equation in phase-field modeling based on the free-energy theory, retains interfacial thickness to be constant with use of anti-diffusion flux. One of features of a semi-Lagrangian LBM is simple mesoscopic particle-kinematic operation in discrete conservation form on an isotropic spatial lattice. The major findings in the fluid simulations are as follows: (1) the method simulates successfully 2D droplet downward sliding over solid edge under external forcing; (2) solid-surface texturing has the same effect on droplet shape and motion as heterogeneous wettability patterning; (3) the motion of 3D droplet on solid surface is affected by microscopic groove-like texturing.

### 1. 緒言

本研究では, 生体医用流体デバイス<sup>(1)</sup>, 親水性プラスチックフィルム部材<sup>(2)</sup>, MEMS デバイスの微細加工プロセス<sup>(3)(4)</sup>, 地層など自然環境等で見られる, 固体表面の不均一な濡れ性や凹凸形状を持つ人工物体上や多孔質構造を有する天然物質内部における微小スケール二相流体挙動の詳細な予測を目的として, 格子ボルツマン法 (Lattice Boltzmann Method, LBM)<sup>(7)(14)</sup>とフェーズフィールドモデル (Phase-field Model, PFM)<sup>(15)(20)</sup>に基づく数値流体力学 (CFD) シミュレーション法<sup>(5)(21)(22)</sup>の適用性を検討する。

LBM は, マクロスケールの連続体を構成するメソスケールの仮想的な離散粒子集合の相互作用 (衝突) と並進運動の反復に基づくボトムアップ的アプローチで連続体の現象を創発的に再現する。この特徴は, 利点として, (1) 流れ場内の複雑形状物体境界の容易な再現, (2) 計算コードの容易な作成, (3) 質量・運動量等保存性と空間等方性の両方に優れた移流スキーム, (4) 並列化効率の高い計算, 等をもたらす<sup>(7)(14)</sup>。

PFM-CFD 法では, 材料科学分野の非平衡系の自由エネルギー理論に基づく Phase-field 法<sup>(15)(18)(20)</sup>と同様に, 拡散流束を瞬時局所的に調整して一定の厚みを持つ界面領域 (拡散界面) を自律形成する<sup>(8)(16)(17)</sup>。この特徴から, 本法は多数の界面の同時多発の大規模変形・移流を従来法よりも効率的に計算可能である<sup>(17)(30)</sup>。また, 濡れ性が不均一かつ凹凸の固体表面に接触する流体界面 (接触線) の挙動も, 界面領域で連続的に境界条件を課すことによって接触線の滑り速度を陽に設定する必要無く従来よりも容易に再現できる<sup>(9)(10)(12)</sup>。本研究では, 計算効率と数値安定性の観点から流体界面を実在よりも非常に厚い仮想的連続体領域として扱う<sup>(21)(22)</sup>。

上述の利点を備える LBM と PFM に基づく混相流 CFD 法に関しては, 国内外で既に多くの研究開発成果と適用事例が報告されている<sup>(8)(12)(14)</sup>。我々は近年, 文献<sup>(30)</sup>で示される新しい PFM を導入

する界面移流方程式について LBM で解く二相流 CFD 法を提案し<sup>(5)(21)(22)</sup>, T 型マイクロ流路内液液二相系スラグ流動シミュレーションで実験結果と良く一致する数値結果を得た<sup>(4)(5)(22)</sup>。以上を踏まえ, 本報では, 固体表面の形状と濡れ性がより複雑な微小二相流体問題を通して当該 PFM-CFD 法の適用可能性を更に検討する。

### 2. 拡散界面モデル (DIM) 基礎方程式

本研究では, 連続体近似が成り立つ非圧縮性・非混和性・等温二相流体系を対象とし, 座標  $\mathbf{x}$  の空間で各時刻  $t$  の系の状態を得るため, PFM<sup>(15)(17)</sup>に基づく以下の連続の式(1), 運動方程式(2), 及び 1 ステップ保存型レベルセット (LS) 移流方程式 (修正保存形 Allen-Cahn (AC) 型移流方程式と等価) (3)<sup>(30)(33)</sup>を解く<sup>(5)(21)(22)</sup>。

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = -\frac{\nabla p}{\rho} + \nu \nabla^2 \mathbf{u} + \frac{\mathbf{F}_I(\phi)}{\rho} \quad (2)$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \phi = \nabla \cdot (D(\phi) \nabla \phi) \quad (3)$$

上式で,  $\mathbf{u}$  は流速, 圧力  $p$ ,  $\phi$  は界面形状を表す秩序変数,  $\rho$  は密度,  $\nu$  は動粘性係数である。本研究では, 式(2)右辺の界面張力  $\gamma$  による力  $\mathbf{F}_I(\phi)$  及び  $\phi$  の拡散係数  $D(\phi)$  を次式で与えた<sup>(5)(16)(21)(22)(30)</sup>。

$$\mathbf{F}_I(\phi) = -\frac{3}{2} \gamma \delta_\phi (\nabla^2 \phi) \nabla \phi \quad (4)$$

$$D(\phi) = D_0 \left\{ 1 - \frac{4\phi(1-\phi)}{\delta_\phi |\nabla \phi|} \right\} \quad (5)$$

ここで  $\delta_\phi$  は人工的な界面領域の幅,  $D_0$  は定数である。式(3)及び(5)

により、指標 $\phi(\mathbf{x}, t)=0$ 及び1の各領域に相当する二相の間で、界面は $0 < \phi(\mathbf{x}, t) < 1$ で幅 $\delta_\phi$ の連続体とモデル化される<sup>(30)</sup>。変数 $\phi$ は平衡状態で界面の法線軸 $\xi$ 方向に次の分布を取る<sup>(16),(30),(31)</sup>。

$$\phi(\xi) = \frac{1}{1 + \exp(-4\xi/\delta_\phi)} = \frac{1 + \tanh(2\xi/\delta_\phi)}{2} \quad (6)$$

ここで $\phi(-\infty)=0$ 、 $\phi(0)=1/2$ 、 $\phi(+\infty)=1$ である。界面幅 $\delta_\phi$ は、流れ場に現れる $\phi$ の空間勾配の絶対値 $|\nabla\phi|$ が式(6)に基づく理論値 $4\phi(1-\phi)/\delta_\phi$ よりも大きい場合は式(3)右辺の正の拡散により増加し、逆の場合は負の拡散により減少する。その結果、右辺が消える平衡状態で $|\nabla\phi|=4\phi(1-\phi)/\delta_\phi$ を満たす $\delta_\phi$ が一定の界面が形成される。本法では、 $\phi$ の4階微分の拡散項を持つCahn-Hilliard (CH) 保存型移流方程式を用いる PFM-CFD 法<sup>(8)(10)(12)(23)(24)(29)</sup>同様、 $\delta_\phi$ を空間分割セル幅 $\Delta x$  数個相当に設定した(本研究では $\delta_\phi=4\Delta x$ )。

保存型 LS 移流方程式(3)は、CH 型方程式よりも低い階数の微分を行い且つ界面曲率依存性を排した拡散項を持つ<sup>(30)(31)(34)</sup>。この特徴により、式(3)を採用する本 PFM-CFD 法では、CH 型方程式を採用する PFM 法<sup>(8)(10)(12)(23)(27)(29)</sup>よりも、界面形成・移流演算負荷が低減できるとともに、体積保存性が向上しつづつ界面張力効果が移流方程式から取り除かれるため、二相流体现象の予測の高精度化が期待できる<sup>(5)(21)(22)</sup>。

### 3. 計算スキーム

#### 3. 1 空間・時間・粒子速度の離散化

本法では、式(1)~(3)の数値解法として、連続体を構成する微視的仮想粒子集合の挙動を統計学的に記述する LBM<sup>(7)(14)</sup>を採用し、等方的並進速度 $\mathbf{e}_a$ 毎の粒子数密度を表す2種類の離散速度分布関数 $f_a(\mathbf{x}, t)$ 及び $g_a(\mathbf{x}, t)$ に関する次の時間発展を計算する<sup>(21)(22)</sup>。

$$\frac{\partial f_a}{\partial t} + \mathbf{e}_a \cdot \nabla f_a + \frac{\mathbf{F}_t}{\rho} \cdot \frac{\partial f_a}{\partial \mathbf{e}_a} = -\frac{1}{\tau_f} (f_a - f_a^{eq}) \quad (7)$$

$$\frac{\partial g_a}{\partial t} + \mathbf{e}_a \cdot \nabla g_a = -\frac{1}{\tau_g} (g_a - g_a^{eq}) \quad (8)$$

下付添字 $a$ は粒子並進速度方向指標、 $\eta$ 及び $\tau_g$ は $f_a$ 、 $g_a$ 各々が粒子間相互作用(衝突)により局所平衡状態 $f_a^{eq}$ 、 $g_a^{eq}$ に至るまでの緩和時間を表す。流体の変数は分布関数を使って次式で定義される。

$$\rho = \sum_a f_a \quad (9)$$

$$\rho \mathbf{u} = \sum_a f_a \mathbf{e}_a \quad (10)$$

$$\phi = \sum_a g_a \quad (11)$$

時刻 $t$ で空間分割セル中心点 $\mathbf{x}$ 上に分布する $a$ 方向に向かう粒子の $f_a(\mathbf{x}, t)$ と $g_a(\mathbf{x}, t)$ を計算するため、式(7)及び(8)を次のような空間・時間2次精度のセミ・ラグランジュ形式に離散化した<sup>(8)(11)(21)(22)</sup>。

$$f_a(\mathbf{x} + \mathbf{e}_a \Delta t, t') = f_a(\mathbf{x}, t) - \frac{\Delta t}{\tau_f} [f_a(\mathbf{x}, t) - f_a^{eq}(\mathbf{x}, t)] \quad (12)$$

$$f_a(\mathbf{x}, t + \Delta t) = f_a(\mathbf{x}, t') + \Delta t \frac{w_a \mathbf{e}_a \cdot \mathbf{F}_t(\mathbf{x}, t')}{c_s^2} \quad (13)$$

$$g_a(\mathbf{x} + \mathbf{e}_a \Delta t, t + \Delta t) = g_a(\mathbf{x}, t) - \frac{\Delta t}{\tau_g} [g_a(\mathbf{x}, t) - g_a^{eq}(\mathbf{x}, t)] \quad (14)$$

ここで、各分布関数と流体に関する変数は全て空間セル中心で定義される。 $\Delta t$ は一定の時間進行幅、 $t'$ は並進演算後の中間時刻、 $c_s$ は音速であり、重み係数 $w_a$ は $a$ に関する総和の次式を満たす。

$$\sum_a w_a = 1 \quad (15)$$

$$\sum_a w_a \mathbf{e}_a \mathbf{e}_a = c_s^2 \mathbf{I} \quad (16)$$

$\mathbf{I}$ は Kronecker Delta  $\delta_{\alpha\beta}$ で成分が表される2階の等方テンソルである。式(12)及び(14)は、運動粒子が $\Delta t$ の並進後に $\mathbf{e}_a$ の方向に隣接する空間セルの中心位置に到着することを意味する。

本研究では、時刻 $t$ を一定幅 $\Delta t=1$ で進め、3次元 $(x, y, z)$ デカルト座標系物理空間を幅 $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 1$ の立方形セルで等分割するとともに、3次元 $(e_{ax}, e_{ay}, e_{az})$ 座標系の速度空間で次の15成分のベクトル $\mathbf{e}_a$  ( $a=0\sim 14$ )から成る離散粒子速度集合を用いた<sup>(8)</sup>。

$$\{\mathbf{e}_0, \mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3, \mathbf{e}_4, \mathbf{e}_5, \mathbf{e}_6, \mathbf{e}_7, \mathbf{e}_8, \mathbf{e}_9, \mathbf{e}_{10}, \mathbf{e}_{11}, \mathbf{e}_{12}, \mathbf{e}_{13}, \mathbf{e}_{14}\} \\ = c \begin{pmatrix} 0 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & -1 & 1 \end{pmatrix} \quad (17)$$

$c = \Delta x / \Delta t$ は格子定数である。2次元では9速度モデルを採用した<sup>(21)</sup>。

#### 3. 2 粒子速度平衡分布と流体変数の定義

平衡分布関数 $f_a^{eq}$ 及び $g_a^{eq}$ には、Maxwell-Boltzmann 分布の Taylor 展開に基づき $\mathbf{u}$ の2次までの項を含む次の形式を与えた<sup>(21)(22)</sup>。

$$f_a^{eq} = w_a \rho \left[ 1 + \frac{\mathbf{e}_a \cdot \mathbf{u}}{c_s^2} + \frac{1}{2c_s^2} \left\{ \left( \frac{\mathbf{e}_a \cdot \mathbf{u}}{c_s} \right)^2 - \mathbf{u} \cdot \mathbf{u} \right\} \right] \quad (18)$$

$$g_0^{eq} = \phi \left[ 1 - \Gamma(1 - w_0) - w_0 \frac{\mathbf{u} \cdot \mathbf{u}}{2c_s^2} \right] \quad (19)$$

$$g_a^{eq} = w_a \phi \left[ \Gamma + \frac{\mathbf{e}_a \cdot (\mathbf{u} + \mathbf{j})}{c_s^2} + \frac{1}{2c_s^2} \left\{ \left( \frac{\mathbf{e}_a \cdot \mathbf{u}}{c_s} \right)^2 - \mathbf{u} \cdot \mathbf{u} \right\} \right] \quad (20) \\ \text{(for } a \neq 0)$$

ここで、式(19)は $a=0$ の静止粒子( $\mathbf{e}_0=\mathbf{0}$ )に対する関数、重み係数 $w_0=2/9$ 、 $w_a=1/9$  ( $a=1\sim 6$ )、 $w_a=1/72$  ( $a=7\sim 14$ )、 $\Gamma$ は静止平衡流体中の静止・運動各粒子数密度を調整するパラメータ<sup>(14)</sup>であり、式(17)の $\mathbf{e}_a$ に対する音速 $c_s$ は次式で表される。

$$c_s = c / \sqrt{3} \quad (21)$$

式(20)の $\mathbf{j}$ は、式(3)右辺が含む $\phi$ に関する次の拡散流束を表す<sup>(30)</sup>。

$$\mathbf{j} = \frac{4D_0(1-\phi)}{\delta_\phi} \frac{\nabla\phi}{|\nabla\phi|} \quad (22)$$

平衡分布 $f_a^{eq}$ 及び $g_a^{eq}$ の粒子速度 $\mathbf{e}_a$ に関するモーメントの和は、対象とするマクロな連続性流体の変数と以下の関係を満たす。

$$\sum_a f_a^{eq} = \rho \quad (23)$$

$$\sum_a f_a^{eq} \mathbf{e}_a = \rho \mathbf{u} \quad (24)$$

$$\sum_a f_a^{eq} \mathbf{e}_a \mathbf{e}_a = \rho \mathbf{u} \mathbf{u} + p \mathbf{I} \quad (25)$$

$$\sum_a g_a^{eq} = \phi \quad (26)$$

$$\sum_a g_a^{eq} \mathbf{e}_a = \phi (\mathbf{u} + \mathbf{j}) \quad (27)$$

流体の質量と運動量の保存に関する方程式(1)及び(2)は  $f_a$  の時間発展式(12)及び(13)から、拡散界面移流方程式(3)は  $g_a$  の時間発展式(14)から、漸近理論展開<sup>(8)</sup>等により局所平衡及び低 Mach 数の極限条件下で導かれる。その中で、 $p$ ,  $\nu$  及び  $D_0$  は次式で表される<sup>(21),(22)</sup>。

$$p = \rho c_s^2 \quad (28)$$

$$\nu = c_s^2 \left( \tau_f - \frac{\Delta t}{2} \right) \quad (29)$$

$$D_0 = \Gamma c_s^2 \left( \tau_g - \frac{\Delta t}{2} \right) \quad (30)$$

本研究では、流れ場内で界面形状を厚さ一定で形成し且つ各相体積を保存するため、 $\phi$  の数値拡散誤差が最小になるよう単一緩和時間 $\tau_g$ を決定するとともに、 $D_0$ に基づく代表的な拡散速度が移流の代表速度 $U$ と同程度になるよう<sup>(30)</sup> $\Gamma$ の値を次のように調整した<sup>(21),(22)</sup>。まず、以下の関係を想定した<sup>(30)</sup>。ここで、 $\varepsilon = \delta_\phi/4$  である。

$$\frac{D_0}{\varepsilon} \equiv |U| \quad (31)$$

次に、文献<sup>(7)</sup>を参考に衝突緩和係数 $\tau_g$ を次のように選択した。

$$\tau_g = \frac{\Delta t}{2} \left( 1 + \frac{1}{\sqrt{3}} \right) \quad (32)$$

式(32)を式(30)に代入すると、拡散の定数 $D_0$ が次のように決まる。

$$D_0 = \Gamma c_s^2 \frac{\Delta t}{2\sqrt{3}} \quad (33)$$

上式と式(31)から式(18)及び(19)の $\Gamma$ を以下のように与えた。

$$\Gamma \equiv 2\sqrt{3} \frac{|U|\varepsilon}{c_s^2 \Delta t} \quad (34)$$

### 3. 3 境界条件

流れ場の滑り無し静止固体境界上では、入射速度 $\mathbf{e}_a$ の粒子の分布関数 $f_a$ を逆方向速度 $\mathbf{e}_b = -\mathbf{e}_a$ の関数 $f_b$ に変更するBounce-back条件を適用した。その結果、圧力 $p$ 及び流速 $\mathbf{u}$ は以下の境界条件を満たす。

$$\mathbf{n}_s \cdot \nabla p = 0 \quad (35)$$

$$\mathbf{u} = \mathbf{0} \quad (36)$$

$\mathbf{n}_s$  は固体表面で流体領域側に向く単位法線ベクトルである。また、他の PFM 法<sup>(9),(10),(12)</sup>同様、自由エネルギー理論に基づき二相流体に対する平衡状態の固体表面の濡れ性を考慮する次式によって静的接触角 $\theta_w$ を設定した<sup>(21),(22)</sup>。

$$\mathbf{n}_s \cdot \varepsilon^2 \nabla \phi = -\gamma_s \quad (37)$$

Wetting potentialと呼ばれるパラメータ $\gamma_s$ に空間セル表面毎で異なる値を設定することにより不均一な濡れ性を表現できる<sup>(9),(10),(12)</sup>。 $\gamma_s = 0$ は $\theta_w = 90^\circ$ を与える。濡れ性条件式(37)は、式(4)及び(22)による界面力 $\mathbf{F}_I$ 及び拡散流束 $\mathbf{j}$ の計算で考慮される。本研究では、固体表面に接する流体領域内の空間セルで $\mathbf{F}_I$ と $\mathbf{j}$ を計算する際、固体領域内の仮想空間セルの変数 $\phi$ を2次精度差分近似の外挿により求めた。例えば、 $\mathbf{n}_s$ が $x$ 軸方向の固体表面上では次式が使用される<sup>(24)</sup>。

$$\phi_{-1} = \phi_0 + \frac{\gamma_s \Delta x}{\varepsilon^2} \quad (38)$$

ここで下付添字 -1 及び 0 は各々、固体表面に接する固体側の仮想空間セルでの値及び流体側に実在する空間セルでの値を意味する。

時間幅 $\Delta t$ の並進過程で計算領域外部から内部に入る粒子の分布関数 $f_a$ 及び $g_a$ の値は、局所平衡仮定下で式(18)~(20)により与え

た。それら領域境界での $\mathbf{u}$ ,  $p$ ,  $\phi$ 等の流体の変数は、他のCFD法と同様のディリクレ及びノイマン条件によって与えた<sup>(21),(22)</sup>。

### 3. 4 計算手順

本研究での計算スキームの実行手順を以下に述べる。

- (1) シミュレーション条件 (代表とする流速 $U$ , 長さ $d$ , 流体物性, 本研究では二相共通の密度 $\rho_0$ と動粘性 $\nu$ 及び界面張力 $\gamma$ ) から、対象の系を特徴付ける無次元数, 例えば, Capillary 数 $Ca$ , Reynolds 数 $Re$ 等の値を設定する。

$$Ca = \frac{\rho_0 \nu |U|}{\gamma}, \quad Re = \frac{d |U|}{\nu} \quad (39), (40)$$

- (2) LBM の入力データである, 流速 $U$ , 長さ $d$ , 初期密度 $\rho_0$ , 界面幅 $\delta_\phi$ の値を設定する。 $U$ はMach数 $|U|/c_s$ が1よりも十分小さくなる(流体が非圧縮性と見なし得る)範囲で与え、 $d$ は割り当てる空間セルの数 $n$ と幅 $\Delta x$ の積 $n\Delta x$ で与える。本研究では $\rho_0 = 1$ ,  $\delta_\phi = 4\Delta x$ とした。
- (3)  $f_a$ の緩和係数 $\tau_f$ を式(29)から,  $g_a$ の緩和係数 $\tau_g$ を式(32)から, 平衡分布 $g_a^{eq}$ のパラメータ $\Gamma$ を式(34)から与える。
- (4) 固体表面の濡れ性を表すWetting Potential  $\gamma_s$ の値を, あらかじめ得た静的接触角 $\theta_w$ との関係<sup>(22)</sup>から, 固液界面に位置する空間セル表面各々に対して設定する。
- (5) 時刻 $t=0$ で計算領域内の各計算セル中心 $\mathbf{x}$ に配置する分布関数の初期値 $f_a(\mathbf{x}, 0)$ 及び $g_a(\mathbf{x}, 0)$ を, 流速 $\mathbf{u}$ , 密度 $\rho$  (圧力 $p$ , 式(28))及び秩序変数 $\phi$ の空間分布の状態に基づき平衡分布関数 $f_a^{eq}$ 及び $g_a^{eq}$ の式(18), (19)及び(20)により設定する。本研究では, 液滴側の分散相に含まれる空間セルでは秩序変数 $\phi = 1$ を, 液滴外の連続相側のセルでは $\phi = 0$ を設定する。
- (6) 固体壁面の濡れ性境界条件(37)に従って, 固体内部の仮想空間セルの秩序変数の値を式(38)により算出する。
- (7) 流出・流入境界で, 計算領域外部から内部に進入する分布関数を,  $\mathbf{u}$ ,  $p$ 及び $\phi$ の境界条件に基づき式(18), (19)及び(20)により計算する。
- (8) 各空間セルで式(12)及び(14)の右辺第2項により粒子間相互作用(衝突)を計算する。今回のシミュレーションでは, 流束 $\mathbf{j}$ の式(22)の勾配 $\nabla \phi$ を2次精度中心差分近似で評価した。
- (9) 並進過程で, 分布関数 $f_a$ 及び $g_a$ の値を式(17)の各粒子速度 $\mathbf{e}_a$ の方向に隣接する各セルの関数へ代入する。
- (10) 固体壁境界で, 壁面で反射して計算領域内のセルに到達する $f_a$ 及び $g_a$ を3.3のBounce-back条件に従って計算する。
- (11) 式(4)と式(13)により $f_a$ に対する界面張力効果を計算する。
- (12) 時刻 $t$ を幅 $\Delta t$ 進行させて次の時刻 $t+\Delta t$ の各空間セルでの $f_a$ 及び $g_a$ を得る。流体の変数 $\mathbf{u}$ ,  $p$ 及び $\phi$ を式(9), (10)及び(11)により計算する。以後, (6) ~ (12)を繰り返す。

## 4. シミュレーション結果と考察

### 4. 1 固体表面付着液滴の滑落

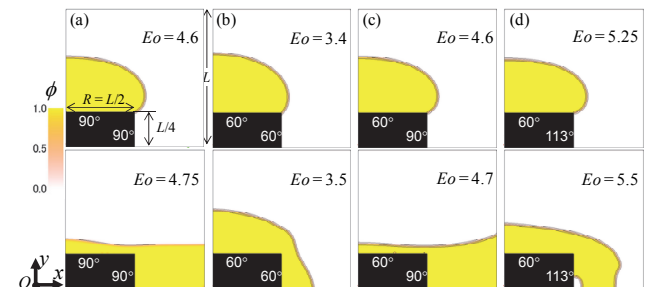


Fig. 1 Droplet on solid body under downward external forcing.

まず, 空間解像度を変化させて長方形物体に付着する2次元液

滴の滑落挙動のシミュレーション結果を検討した。静的接触角 $\theta_{w1} = 90^\circ$ の静止壁で囲まれる一辺 $L$ の計算領域内で、 $\theta_{w1}$ の上面と $\theta_{w2}$ の側面を持つ物体上に置いた初期半径 $R \cong L/2$ の四半円状液滴に下向外力 $\mathbf{G}$ を課した。 $L$ は幅 $\Delta x$ の正方セル 64, 128 または 256 個で等分割した。空気-水系で $R = 65\mu\text{m}$ の水滴を想定したが、二相の物性差の影響は微小空間・時間スケールで無視し得ると仮定して両相に同じ密度と粘性を与えた。

相の空間分布 (Fig. 1 で白色領域は $\phi=0$ を示す) から、 $\theta_{w2} = 60^\circ, 90^\circ, 113^\circ$ の各条件で無次元力 (エトベス数に相当)  $Eo = |\mathbf{G}|R^2/\gamma$  がある値を超えると滑落が生じ、側面が撥液性を増すに従い液滴は上部に留まる傾向が実験同様に確認された。また、空間をある一定セル数以上で分割する場合、解像度に依存せず滑落が再現され得ることも示された (Fig. 2)。

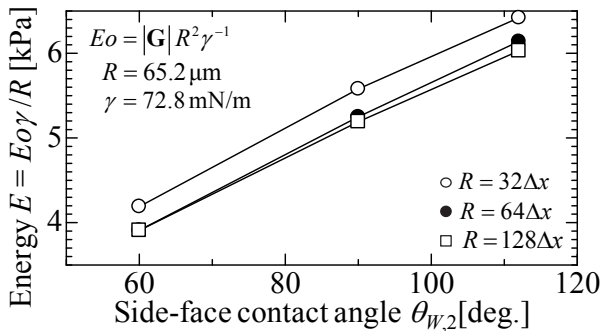


Fig. 2 Energy  $E = |\mathbf{G}|R = Eo\gamma/R$  needed for droplet spillover.

#### 4. 2 液滴挙動に対する物体角部と不均一濡れ性の効果

次に、角部の無い平滑物体面上の2次元液滴の移動性を、外力 $\mathbf{G}$ の無次元数 $Eo = 4.6$ 、空間解像度 $L = 256\Delta x$ において前出の物体上の液滴のものと比較した。平滑面の接触角は、液滴初期接地部分で $\theta_{w1} = 90^\circ$ 、右側部分で $\theta_{w3} \geq 90^\circ$ に設定した。Fig. 3に見られるように、 $\theta_{w3}$ が大きくなるにつれて液滴は右側へ拡張し難くなり、(d)  $\theta_{w3} = 150^\circ$ 、(e)  $168^\circ$ では扁平化しつつ初期配置面上に留まり続けた。以上から、上記 $Eo$ で $\theta_{w2} = 90^\circ$ の直方物体と同等の液滴に対するピン止め効果 (図(f)) を平滑面で実現するには撥液性条件 $\theta_{w3} \geq 150^\circ$ が必要になり得ることが確認された。

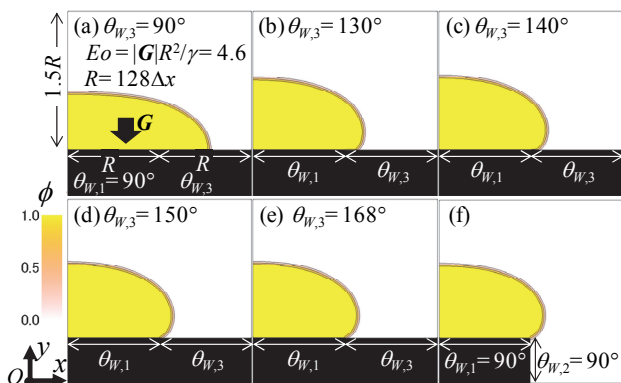


Fig. 3 Snapshot of droplet spreading over flat surface under  $\mathbf{G}$ .

#### 4. 3 テクスチャ表面上の液滴挙動

最後に、凹凸固体表面上での液滴挙動のシミュレーションについて述べる。3次元デカルト座標系 $(x, y, z)$ の計算領域を幅 $\Delta x = \Delta y = \Delta z$ の立方セル $202 \times 42 \times 32$ 個で一様分割し、 $y$ 方向両端と $z$ 方向上端の各境界に平坦固体壁面、 $x$ 方向各端に速度 $\mathbf{U}_m$ の連続相( $\phi=0$ )一様流入境界と一定圧力下の連続流出境界、 $z$ 方向下部に深さ $h = 4\Delta x$ と幅 $w_F$ の直線矩形溝が $x$ 方向に等間隔 $w_S (= w_F)$ と並ぶ凹凸壁面を設置した。初期条件では、連続相中で下部壁面の凸部に

接するように半径 $R = 16\Delta x$ の半球状液滴 (内部で $\phi=1$ ) を流入境界近傍に置いた。密度 $\rho = 998.2\text{kg/m}^3$ 、粘性 $\mu = 1\text{mPa}\cdot\text{s}$ 、界面張力 $\gamma = 3.28 \times 10^{-2}\text{N/m}$ 、 $R = 80\mu\text{m}$  (球等価直径 $d_D = 127\mu\text{m}$ )、 $|\mathbf{U}_m| = 8.31 \times 10^{-2}\text{m/s}$ の液液系 (無次元数 $Re = \rho|\mathbf{U}_m|d_D/\mu = 10.53$ 及び $Ca = \mu|\mathbf{U}_m|/\gamma = 2.53 \times 10^{-3}$ ) を想定し、前小節同様に $\rho$ と $\mu$ は両相で同一とした。左右及び凹凸壁面境界では、平坦面で静的接触角 $\theta_{w1} = 113^\circ$ を与える濡れ性条件を課し、上部壁面は連続相で完全に濡れるとした。

液滴 (Figs. 4 で界面は $\phi=1/2$ の等値面を表示) は、 $w_F = 4\Delta x, 6\Delta x$ の場合 (Figs. 4 (a), (b)) 連続相の流れに乗って動くが、溝形状がより広い場合 (Fig. 4 (c)  $w_F = 8\Delta x$ ) 溝に引っ掛かり静止している。また、液滴の移動速度は、若干であるが(a)の方が(b)よりも大きいことが図から確認される。以上の結果は、文献<sup>(35)</sup>による検討が必要であるものの、テクスチャ表面により液滴の挙動制御やサイズ分類等の流体操作が可能であることを定性的に示している。

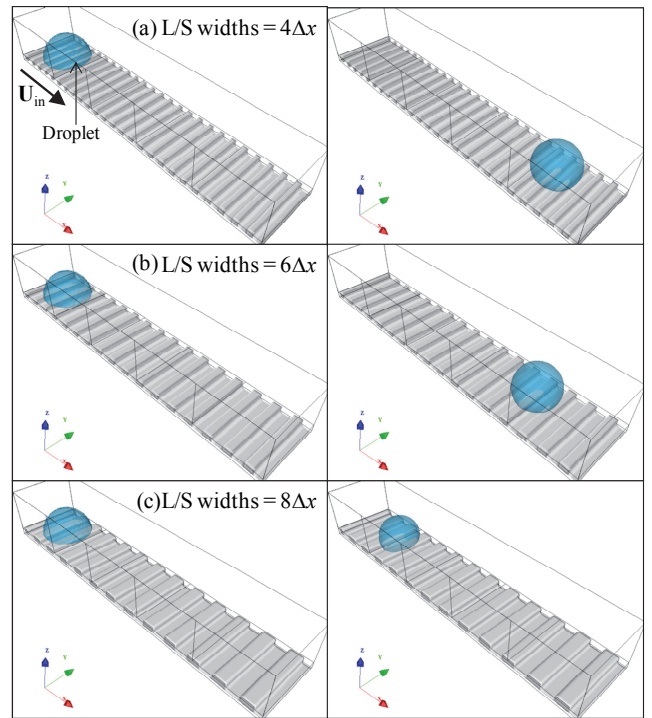


Fig. 4 Motion of single droplet in liquid flow on grooved solid surface with line and space widths  $w_S = w_F$ , and  $\theta_{w1} = 113^\circ$  on flat part, for  $Re = |\mathbf{U}_m|d_D/\nu = 10.53$  and  $Ca = \rho\nu|\mathbf{U}_m|/\gamma = 2.53 \times 10^{-3}$ : computational domain and initial condition (left column); snapshots at same moment  $t = 4.5 \times 10^4 \Delta t$  (dimensionless time  $t^* = t|\mathbf{U}_m|/d_D = 5.19$ , right column).

#### 5. 結言

本報では、MEMS デバイス・機能性表面部材・微細加工プロセス・自然環境等に見られる、表面の形状や濡れ性が不均一な物体上での微小流体粒子挙動の解明・予測を目的として、格子ボルツマン法と保存型レベルセット方程式に基づく二相流体界面追跡シミュレーション手法を概説した。また、液滴の滑落・スライド・溝付表面上挙動の試験的なシミュレーションを通して、微小テクスチャ表面濡れ性機能評価への本法の適用可能性を示した。さらに、それらシミュレーション結果から、固体表面の微細凹凸構造の利用により液滴や気泡等の流体粒子の挙動を制御可能であり、流体用途のデバイスや部材を高機能化可能であることも確認した。

#### 謝辞

上記成果は、日本学術振興会 (JSPS) 科研費基盤研究 (C) 課題 No. 26420128 「フェーズフィールドモデルに基づくマイクロ多孔質体内相変化二相流計算法の開発」での助成で得られたものであ

る。関係者各位に感謝申し上げます。

#### 参考文献

- (1) Kurihara, K., Takada, N., Takagi, H. and Maeda, R., "Capillary effect enhancement in plastic-pipette by nano-textured surface," The 40th International Conference on Micro and Nano Engineering (MNE2014), Lausanne, Switzerland, September 22–26, 2014, Abstract ID: 8263.
- (2) Kurihara, K., Suzuki, Y., Suto, K., Shiba, N., Nakano, T. and Tominaga, J., "Wettability control using large-area nanostructured film," *Microelectronic Engineering*, Vol. **87** (2010), pp. 1424–1427 (DOI: 10.1016/j.mee.2009.11.144).
- (3) Matsumoto, S., Takada, N. and Matsumoto, J., "Microfabrication process of cellular structures in hollow fiber-shaped substrates," *Transactions of the Japan Society of Mechanical Engineers Series C*, Vol. **76** (2010), pp. 1911–1913 (<http://ci.nii.ac.jp/naid/110007685434/>).
- (4) Miki, Y., Matsumoto, S., Takada, N., Kaneko, A. and Abe, Y., "Effects of flow rate on formation behavior of two-phase slug flow in a microchannel T-junction," *Japanese Journal of Multiphase Flow*, Vol. **27** (2014), pp. 591–598 (DOI: 10.3811/jjmf.27.591).
- (5) Takada, N., Matsumoto, J. and Matsumoto, S., "Prediction of two-phase slug flow patterns in microchannel with T-junction," *Japanese Journal of Multiphase Flow*, Vol. **28** (2014), pp. 32–38 (DOI: 10.3811/jjmf.28.32).
- (6) Lu, J., Takagi, H., Nakano, T. and Maeda, R., "Size-free MEMS-IC high-efficient integration by using carrier wafer with self-assembled monolayer fine pattern," *Proceedings of 2013 IEEE 63rd Electronic Components and Technology Conference (ECTC2013)* (2013), pp. 1508–1513.
- (7) Hirabayashi, M., Chen, Y. and Ohashi, H., "The lattice BGK model for the Poisson equation," *JSME Int. J. Ser. B Fluids Therm. Eng.*, Vol. **44** (2001), pp. 45–52 (DOI: 10.1299/jsmeb.44.45).
- (8) Inamuro, T., Ogata, T., Tajima, S. and Konishi, N., "A lattice Boltzmann method for incompressible two-phase flows with large density differences," *J. Comput. Phys.*, Vol. **198** (2004), pp. 628–644 (DOI: 10.1016/j.jcp.2004.01.019).
- (9) Kobayashi, K., Inamuro, T. and Ogino, F., "Numerical simulation of advancing interface in a micro heterogeneous channel by the lattice Boltzmann method," *J. Chem. Eng. Jpn.*, Vol. **39** (2006), pp. 257–266 (DOI: 10.1252/jcej.39.257).
- (10) Huang, J. J., Shu, C. and Chew, Y. T., "Lattice Boltzmann study of droplet motion inside a grooved channel," *Phys. Fluids*, Vol. **21** (2009), 022103, 11 pages (DOI: 10.1063/1.3077800).
- (11) Suzuki, K. and Inamuro, T., "Effect of internal mass in the simulation of a moving body by the immersed boundary method," *Comput. Fluids*, Vol. **49** (2011), pp. 173–187 (DOI: 10.1016/j.compfluid.2011.05.011).
- (12) Yoshino, M., Kobayashi, Y. and Tanaka, Y., "Numerical simulation of liquid penetration through spherical bodies with various types of wettability," *Japanese Journal of Multiphase Flow*, Vol. **26** (2013), pp. 499–506 (DOI: 10.3811/jjmf.26.499).
- (13) Seta T., Rojas, R., Hayashi, K. and Tomiyama, A., "Implicit-correction-based immersed boundary-lattice Boltzmann method with two relaxation times," *Phys. Rev. E*, Vol. **89** (2014), 023307, 22 pages (DOI: 10.1103/PhysRevE.89.023307).
- (14) Yoshida, H., Kobayashi, T., Hayashi, H., Kinjo, T., Washizu, H. and Fukuzawa, K., "Boundary condition at a two-phase interface in the lattice Boltzmann method for the convection-diffusion equation," *Phys. Rev. E*, Vol. **90** (2014), 013303, 10 pages (DOI: 10.1103/PhysRevE.90.013303).
- (15) Kobayashi, R., "Modeling and numerical simulations of dendritic crystal growth," *Physica D*, Vol. **63** (1993), pp. 410–423 (DOI: 10.1016/0167-2789(93)90120-P).
- (16) Anderson, D. M., McFadden, G. B. and Wheeler, A. A., "Diffuse-interface methods in fluid mechanics," *Annu. Rev. Fluid Mech.*, Vol. **30** (1998), pp. 139–165 (DOI: 10.1146/annurev.fluid.30.1.139).
- (17) Onuki, A., "Dynamic van der Waals theory," *Phys. Rev. E*, Vol. **75** (2007), 036304, 15pages (DOI: 10.1103/PhysRevE.75.036304).
- (18) 小山 敏幸, 塚田 祐貴, 材料組織弾性学と組織形成 – フェーズフィールド微視的組織弾性論の基礎と応用, 内田老鶴園, 2012.
- (19) 高木 知弘, 山中 晃徳, フェーズフィールド法 – 数値シミュレーションによる材料組織設計, 養賢堂, 2012.
- (20) 小山 敏幸, 高木 知弘, フェーズフィールド法入門 (計算力学レクチャーコース, 日本計算工学会 編), 丸善出版, 2013.
- (21) Takada, N., Matsumoto, J. and Matsumoto, S., "Phase-field model-based simulation of motions of a two-phase fluid on solid surface," *Journal of Computational Science and Technology*, Vol. **7** (2013), pp. 322–337 (DOI: 10.1299/jcst.7.322).
- (22) Takada, N., Matsumoto, J. and Matsumoto, S., "A diffuse-interface tracking method for the numerical simulation of motions of a two-phase fluid on a solid surface," *The Journal of Computational Multiphase Flows*, Vol. **6** (2014), pp. 283–298 (DOI: 10.1260/1757-482X.6.3.283).
- (23) Takada, N. and Tomiyama, A., "A numerical method for two-phase flow based on a phase-field model," *JSME Int. J. Ser. B Fluids Therm. Eng.*, Vol. **49** (2006), pp. 636–644 (DOI: 10.1299/jsmeb.49.636).
- (24) Takada, N., Matsumoto, J., Matsumoto, S. and Ichikawa, N., "Application of a phase-field method to the numerical analysis of motions of a two-phase fluid with high density ratio on a solid surface," *Journal of Computational Science and Technology*, Vol. **2** (2008), pp. 318–329 (DOI: 10.1299/jcst.2.318).
- (25) Matsumoto, J. and Takada, N., "Two-phase flow analysis based on a phase-field model using orthogonal basis bubble function finite element method," *Int. J. Comput. Fluid Dyn.*, Vol. **22** (2008), pp. 555–568 (DOI: 10.1080/10618560802238226).
- (26) Matsumoto, J., Takada, N. and Matsumoto, S., "One hundred million degree of freedom two-phase flow finite element method analysis using phase-field model," *Proceedings of the National Congress of Theoretical and Applied Mechanics (NCTAM)*, Japan, Vol. **60** (2011), Session ID: GS03-04 ([https://www.jstage.jst.go.jp/article/japannctam/60/0/60\\_0\\_251\\_article/](https://www.jstage.jst.go.jp/article/japannctam/60/0/60_0_251_article/)).
- (27) Sakakibara, T., Takaki, T. and Kurata, M., "Simulations of droplets falling on a solid surface using phase-field method," *Proceedings of the 5th Asia Pacific Congress on Computational Mechanics (APCOM) & the 4th International Symposium on Computational Mechanics (ISCM)* (2013), Paper ID **1381** ([http://www.sci-en-tech.com/apcom2013/APCOM2013-Proceedings/PDF\\_FullPaper/1381\\_Tetsuya\\_Sakakibara.pdf](http://www.sci-en-tech.com/apcom2013/APCOM2013-Proceedings/PDF_FullPaper/1381_Tetsuya_Sakakibara.pdf)).
- (28) Fukuta, M. and Yamamoto, Y., "Development of numerical analysis model for evaluating of boiling heat transfer," *Japanese Journal of*

- Multiphase Flow, Vol. **28** (2014), pp. 161–166  
(DOI: 10.3811/jjmf.28.161).
- (29) Inoue, Y., Ishida, K., Takada, N. and Hojo, M., "Reductions in anisotropic errors from implementation of phase-field wetting boundary condition for off-grid objects," *Int. J. Comput. Methods*, Vol. **12** (2015), 1550042, 15pages  
(DOI: 10.1142/S0219876215500425).
- (30) Chiu, P.-H. and Lin, Y.-T., "A conservative phase field method for solving incompressible two-phase flows," *J. Comput. Phys.*, Vol. **230** (2011), pp. 185–204 (DOI: 10.1016/j.jcp.2010.09.021).
- (31) Olsson, E. and Kreiss, G., "A conservative level set method for two phase flow," *J. Comput. Phys.*, Vol. **210** (2005), pp. 225–246  
(DOI: 10.1016/j.jcp.2005.04.007).
- (32) Tan, N., Aoki, T., Inoue, K. and Yoshitani, K., "Numerical simulation of two-phase flow driven by rotating object," *Transactions of the Japan Society of Mechanical Engineers, Series B*, Vol. **77** (2011), pp. 1699–1714 (DOI: 10.1299/kikaib.77.1699).
- (33) Sato, Y. and Niceno, B., "A new contact line treatment for a conservative level set method," *J. Comput. Phys.*, Vol. **231** (2012), pp. 3887–3895 (DOI: 10.1016/j.jcp.2012.01.034).
- (34) Beaucourt, J., Biben, T., Leyat, A. and Verdier, C., "Modeling breakup and relaxation of Newtonian droplets using the advected phase-field approach," *Phys. Rev. E*, Vol. **75** (2007), 021405, 8 pages (DOI: 10.1103/PhysRevE.75.021405).
- (35) 中島 章, 固体表面の濡れ制御, 内田老鶴圃, 2007.
-