

# 固体面に衝突する液滴による濡れ挙動を再現する非浸透条件緩和モデルの検討

## Relaxation model of impermeability condition to reproduce wetting behavior by impinging droplet

- 川上 耕平, 関大院, 大阪府吹田市山手町 3-3-35, E-mail: k907328@kansai-u.ac.jp  
山本 恭史, 関西大, 大阪府吹田市山手町 3-3-35, E-mail: yamayasu@kansai-u.ac.jp  
Kohei Kawakami, Graduate School of Science and Engineering, Kansai University,  
3-3-35, Yamate-cho 3-chome, Suita, Osaka  
Yasufumi Yamamoto, Kansai University, 3-3-35, Yamate-cho 3-chome, Suita, Osaka

In this study, high-speed wetting behavior by a droplet impinging on a solid surface was simulated. A relaxation model of impermeability condition was newly incorporated in the contact line movement model using GNBC-front-tracking method and rolling belt model. This model assumes a surface layer on the solid surface, and allows to have a vertical velocity on the wall. Therefore, the velocity toward the wall in the immediate vicinity of the wall surface for rolling motion can be expressed. We compared simulation results with experimental data for validation of the model. The proposed model can express a wide range of wetting behavior from low-speed wetting to high-speed wetting. The present numerical simulation can reproduce experiment results under various conditions and the model was confirmed to be versatile.

### 1. 緒言

気液界面が固体壁に接する“濡れ”現象は塗装や沸騰、潤滑などに影響を与えており多くの工業装置に関わっている。そのため、メカニズムの理解やモデリングは非常に重要である。

流体力学において、一般的に固体面は滑り無し境界として表すが、滑り無し境界では接触線が動かず接触線近傍の粘性応力が発散する。このような接触線移動問題に対して様々なモデルが提案されている。VOF法を用いて固体壁に衝突する液滴の濡れ振舞いをシミュレートしたŠikalら<sup>(1)</sup>は、接触線移動速度を含む経験式を用いて動的接触角を求めている。VOF法では、セル中心のスカラーを輸送するだけなので、接触線は勝手に移動してしまう。また、Yokoiら<sup>(2)</sup>は実験で観測された角度を動的角度として用いているが、速度の正負によって変わるだけのほぼ一定角度で動的というものではない。MuradogluとTasoglu<sup>(3)</sup>はFront-tracking法を用いて接触線移動問題に対する計算を行った。界面位置を陽に表現するので、接触線位置も陽に表現することになる。滑り無し条件を与えると接触線マーカーは一切動かなくため、接触線移動の表現には閾値という物理的に意味の不明確な値を用いている。Yamamotoら<sup>(4)</sup>が提案したGNBC-Front-trackingは動的接触角から接触線移動速度を随時求めることで、分子の滑りによる低速な濡れ挙動を妥当に表現できるが、液塊の新たな接触による高速な濡れを再現できない。Kitaら<sup>(5)</sup>は高速な濡れを再現するために、GNBC-Front-trackingと液塊回転モデルを併用した接触線移動モデルを開発した。しかし、接地を判定する閾値や、モデルの切替という数値計算上の追加操作が必要となる。そこで本研究は、現状再現が難しい高速な濡れのシミュレーションモデルを、液塊回転モデルに非浸透条件を緩和した壁面境界条件を新たに考慮することで開発し、その妥当性を検証した。

### 2. 計算手法

#### 2-1 Front-tracking (FT) 法

界面要素で計算される情報を矩形格子に分配し、気体・液体等の複数の流体を含む系を密度・粘度が場所によって異なる1つの流体として取り扱う方法である。マーカー情報からどの格子点がどちらの流体かを識別する指標関数を計算する。界面は近似デルタ関数の影響で4格子の幅でぼかされる。本研究では軸対称円筒

座標系におけるスタッガード格子で計算を行った。 $x$ は径方向(水平)で $y$ は軸方向(鉛直)とする。

#### 2-2 GNBC-Front-tracking

分子移動レベルの低速な濡れによる移動を表現するGNBC-Front-tracking法における無次元の接触線速度 $Ca$ は次式で表せる。

$$Ca = \chi(\cos\theta_s - \cos\theta_d) \quad (1)$$

ここで、 $\theta_s$ 、 $\theta_d$ はそれぞれ静的および動的接触角、 $\chi$ は無次元の滑りやすさを表すパラメータである。上式は、ヤング式の不釣り合いが生じた場合に、接触角をつり合い角度に近づけるように滑り速度を生じさせることを表す。接触線近傍の本来はマイクロな速度分布をFT法の近似デルタ関数 $\delta$ により4格子幅で表現し、式(2)のように壁面上速度として与える。以下、GNBCモデルと呼ぶ。

$$u_{i+\frac{1}{2}} = Ca \frac{\sigma}{\mu} \delta(x_{i+\frac{1}{2}} - x_{cl}) \quad (2)$$

ここで、 $x_{i+\frac{1}{2}}$ は格子点、 $x_{cl}$ は接触線の位置である。また、 $\sigma$ は表面張力、 $\mu$ は粘度である。

#### 2-3 液塊回転モデル

Riobooら<sup>(6)</sup>は液滴衝突現象では時間によって支配要因が変わることを示した。衝突直後の高速な濡れでは、接触線上側の慣性の大きな流体塊が接触線を乗り越え、新たに壁面と接触することで接触線の位置が高速に進む。Kitaら<sup>(5)</sup>は高速な濡れを再現するために液塊回転モデルを開発した。壁から閾距離以内に入った接触線近傍のマーカーを新たな接触線マーカーとして置換することで接触線の移動を表現する。しかし、その閾値は物理的に意味が不明確である。また、このモデルは壁面の濡れ性(静的接触角)によらないので、濡れ性の影響が支配的になる低速な濡れを表現できない。そのため、慣性がなくなった時点でモデルを無効にする操作が必要となる。

#### 2-4 非浸透条件緩和モデル

LukyanovとPryer<sup>(7)</sup>はMDシミュレーションで観測された液塊の固体面上での回転をマクロな有限要素解析で再現するために、壁面の流体の非浸透条件を緩和した壁面境界条件を提案した。固

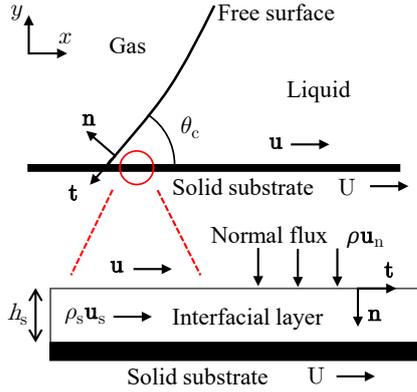


Fig. 1 Schematic of the interfacial layer.

体表面に表層を仮定し壁垂直方向の速度を持つような表現を可能にする(Fig. 1). 表層内の質量保存式は以下の式で表せる.

$$\frac{\partial \rho_s}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_s \mathbf{u}_s) = \rho \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} \quad (3)$$

ここで,  $\rho_s$ ,  $\rho$  はそれぞれ単位面積および単位体積あたりの密度であり,  $\mathbf{u}_s$  は  $\rho_s$  を輸送する速度である.

表層を仮定し壁面上に壁垂直方向の速度(浸透速度)を与えることで, 非浸透条件では表現しきれない壁面ごく近傍の壁面に向かう速度を表現できる. 本研究ではこの境界条件を用いたモデルを非浸透条件緩和モデルとする. 式(3)から浸透速度  $\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}$  を求める. これにより, 壁面近くのマーカーが回転運動により壁面に向かう速度が表現できると考える.

非浸透条件緩和モデルを適用するにあたり, 液塊回転モデルでの閾値を, 物理的に意味の不明確な値ではなく壁表面(高さ 0)とできる. 浸透速度が小さい値であればマーカーが壁面内に入り込まず, 液塊回転モデルにより接触線が移動することはないため, 自動的に液塊回転モデルが無効な状態に切り替わると期待できる.

浸透速度により固体面上のマーカーが壁面内に入り込んだ時は, 隣り合う壁内部と壁外部の 2 点から壁面上に内挿し, その位置を新たな接触線とする. また, 固体面上のマーカーが壁面から離れた時は, 壁面近傍の 3 点から界面を多項式近似し, その曲線と壁面との交点の位置を接触線とすることで接触線の移動を表現した.

## 2-5 非浸透緩和モデルの実装方法

式(3)を円筒座標系で表すと次式になる.

$$\frac{\partial \rho_s}{\partial t} + \frac{1}{x} \frac{\partial x \rho_s u_s}{\partial x} = -\rho v \quad (4)$$

上式において, 単位面積あたりの密度  $\rho_s$  と  $\rho_s$  を輸送する速度  $u_s$  はどのような値を用いるか検討が必要なパラメータである. そこで, 以下に示す 2 つのモデルを考えた.

### (1) モデル A

まず, 検討が必要であるパラメータを次のように仮定した.

仮定①:  $\rho_s$  は流体の密度  $\rho$  と表層の厚さ  $h_s$  を乗じたものとする.

$$\rho_s = h_s \rho \quad (5)$$

密度  $\rho$  に長さの次元を持つ  $h_s$  を乗じ, 単位面積当たりの密度にした.

仮定②: 表層の厚さ  $h_s$  は格子幅  $\Delta$  と等しいとする.

$$h_s = \Delta \quad (6)$$

FT 法は密度を近似デルタ関数により 4 格子幅にぼかしているため, 格子解像度によって表層の厚さは変わると考えた.

仮定③:  $u_s$  は壁から 1 格子目の  $x$  方向の速度とする.

$$u_{s,i+\frac{1}{2}} = u_{i+\frac{1}{2},1} \quad (7)$$

これは, 表層に最も近い位置の格子の速度を与えている.

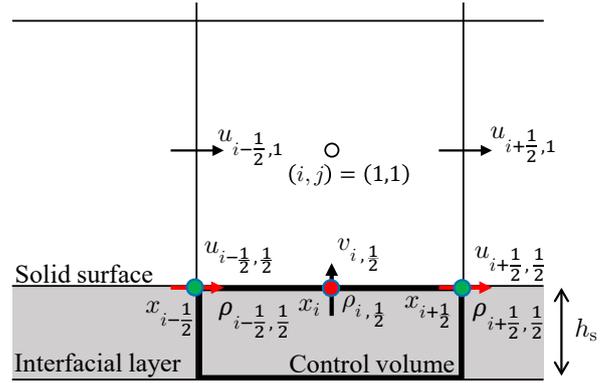


Fig. 2 Grid points for new boundary condition.

また, 境界条件式の簡単化を図るために式の変形を行った. 式(4)の左辺第 2 項を分解すると, 式(8)を得る.

$$\frac{\partial \rho_s}{\partial t} + u_s \frac{\partial \rho_s}{\partial x} + \frac{\rho_s}{x} \frac{\partial x u_s}{\partial x} = -\rho v \quad (8)$$

左辺第 1 項と第 2 項を密度の実質微分  $D\rho_s/Dt$  と表すと

$$\frac{D\rho_s}{Dt} + \frac{\rho_s}{x} \frac{\partial x u_s}{\partial x} = -\rho v \quad (9)$$

仮定①で  $\rho$  が非圧縮ならば密度の実質微分は  $D\rho_s/Dt = 0$  となり

$$v = -\frac{h_s}{x} \frac{\partial x u_s}{\partial x} \quad (10)$$

式(10)を離散化式で表すと,

$$v_{i,\frac{1}{2}} = -\frac{h_s}{x_i} \frac{x_{i+\frac{1}{2}} u_{i+\frac{1}{2},1} - x_{i-\frac{1}{2}} u_{i-\frac{1}{2},1}}{\Delta} \quad (11)$$

となる. 式(11)で求まる  $v$  を壁面上の浸透速度として与える. 式(11)の各変数の定義位置は Fig.2 に示すとおりである.

### (2) モデル B

後述のようにモデル A では格子解像度に依存する結果となったため, 以下の改良を試みた. まず, 仮定③の  $u_s$  が格子解像度によって変わらないように壁面上の  $x$  方向の速度と変更した.

仮定③:  $u_s$  は壁面上の  $x$  方向の速度(式(2)による)とする.

$$u_{s,i+\frac{1}{2}} = u_{i+\frac{1}{2},2} \quad (12)$$

また, 式(4)を簡略化し計算を行うと,  $u_s$  の与え方にも依存してしまうため, 式を簡略化せず密度変化の影響を考慮して計算を行う. 式(4)を離散化すると, 次式になる.

$$v_{i,\frac{1}{2}}^{(n+1)} = \frac{1}{\rho_{i,\frac{1}{2}}^{(n+1)}} \left\{ -h_s \frac{\rho_{i,\frac{1}{2}}^{(n+1)} - \rho_{i,\frac{1}{2}}^{(n)}}{\Delta t} - \left( \frac{h_s}{x_i} \frac{x_{i+\frac{1}{2}} \rho_{i+\frac{1}{2},2}^{(n)} u_{i+\frac{1}{2},2}^{(n)} - x_{i-\frac{1}{2}} \rho_{i-\frac{1}{2},2}^{(n)} u_{i-\frac{1}{2},2}^{(n)}}{\Delta} \right) \right\} \quad (13)$$

式(13)で求まる  $v$  を壁面上の浸透速度として与える. 式(13)のそれぞれのパラメータの定義位置は Fig.2 に示す.

なお, 仮定②の与え方によって異なる計算結果が得られることが確認されたため, 最も妥当な結果となった以下の値を採用した.

仮定②: 表層の厚さ  $h_s$  は格子幅  $\Delta$  の 0.5 倍とする.

$$h_s = 0.5 \Delta \quad (14)$$

## 3. 計算対象

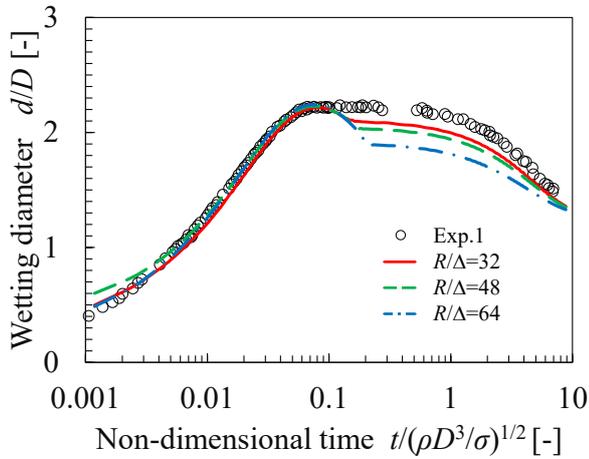
Šikalo ら<sup>1)</sup>の液滴を固体面に衝突させる実験を対象とする. 実験条件の詳細は Table 1 に示している. いずれの条件も液滴直径  $D$  は 2.45mm である. また, 使用した液体の物性値を Table 2 に示す.

Table 1 List of experiments.

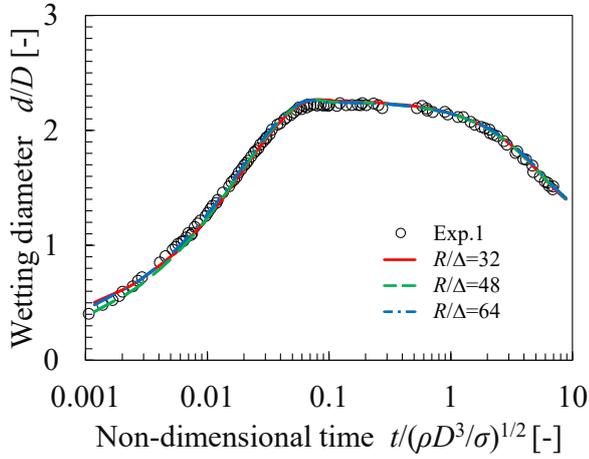
Exp.	Liquid	Solid	Impact velocity $U$ [m/s]	$\theta_s$ [ $^\circ$ ]
Exp.1	Glycerin	Wax	4.1	93
Exp.2	Glycerin	Glass	4.1	15
Exp.3	Glycerin	Wax	1.41	93
Exp.4	Glycerin	Glass	1.41	15
Exp.5	Glycerin	Wax	1.04	93
Exp.6	Glycerin	Glass	1.04	15
Exp.7	Water	Wax	1.64	100

Table 2 Physical properties of liquids.

Liquid	Density $\rho$ [kg/m $^3$ ]	Surface tension $\sigma$ [kg/m $^3$ ]	Viscosity $\mu$ [Pa·s]
Glycerin	1220	0.063	0.116
Water	996	0.073	0.001



(a) Model A

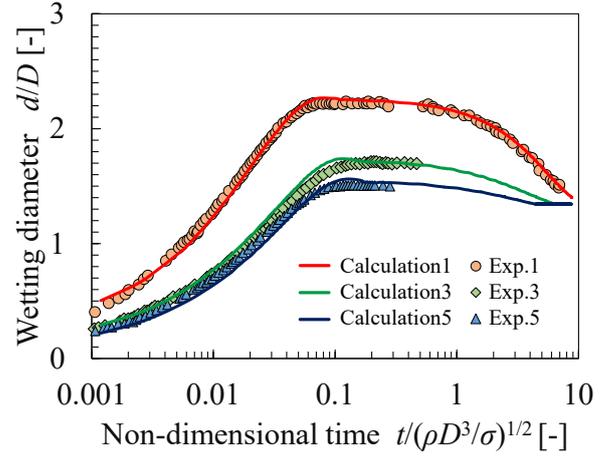


(b) Model B

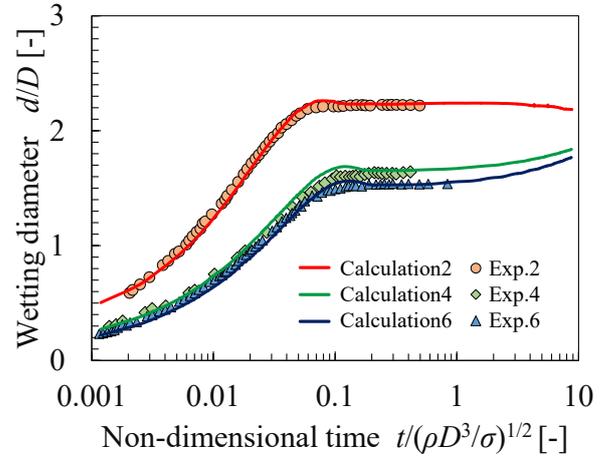
Fig. 3 Effect of grid resolution.

#### 4. 計算条件

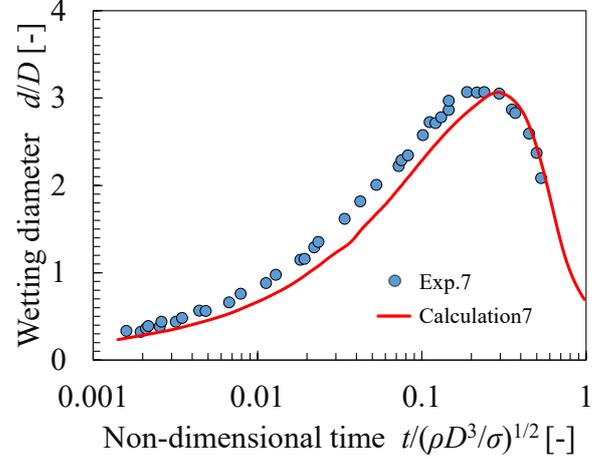
固体面はGNBCモデルによる滑り速度と、非浸透条件緩和モデルにより浸透速度を持つ。外側境界は自由流境界である。格子解像度は液滴半径 $R$ を基準とし $R/\Delta$ で表す( $\Delta$ は格子幅)。 $R/\Delta$ は32, 48, 64と設定し、格子数 $N_x \times N_y$ はそれぞれ $256 \times 256$ ,  $384 \times 384$ ,  $512 \times 512$ を用いた。また、格子解像度に応じて時間刻み $\Delta t$ [s]はそれぞれ $1.0 \times 10^{-6}$ ,  $5.0 \times 10^{-7}$ ,  $5.0 \times 10^{-7}$ とした。液滴の挙動範囲内の格子を等間隔格子、外側の格子は不等間隔格子を用いた。液滴が固体面に衝突した瞬間からの経過時間を $t$ 、濡れ直径は $d$ として表す。



(a) Exp.1,3,5



(b) Exp.2,4,6



(c) Exp.7

Fig. 4 Change of wetting diameter with respect to time by Model B.

#### 5. 計算結果と考察

Fig. 3 (a) にモデル A で Exp.1 の条件を計算した結果を示している。横軸は無次元時間 $t/\sqrt{\rho D^3/\sigma}$ 、縦軸は無次元濡れ直径 $d/D$ である。濡れ直径 $d$ は壁面近傍の指標関数から求めている。濡れ直径が短時間で急激に拡がり、その後時間をかけて収縮するような挙動を定性的に再現できた。しかし、格子解像度により計算結果が大きく変わった。これは壁から1格子目の $x$ 方向の速度の壁からの距離が格子解像度によって変わることが原因と考える。どの格子解像度においても、最も濡れ広がる頃までは再現できているようにみえるのは、濡れ直径を指標関数から求めているためである。

解像度を上げると $u_s$ はより壁に近い小さいものとなるため、式(10)から求まる浸透速度も小さくなる。その結果、液塊回転モデルによる置換が進まず、接触線マーカーは指標関数から外挿される位置よりも進んでいない。それが低速になった時点から違いとして表れている。

Fig. 3 (b) はモデル B で Exp.1 の条件を計算した結果を示している。格子解像度によらず実験を定性的に再現できている。式(4)の左辺各項の大きさを評価したところ、 $\partial \rho_s / \partial t$ が支配的であり FT 法で 4 格子幅でぼかした界面領域での質量保存を考慮したことで液塊の回転が妥当に表現できたと考える。よって、式(4)を簡略化せず用いることが適当であると言える。

さらに、モデル B の汎用性を確認するために Šikalo ら<sup>(1)</sup>の全ての実験条件で計算を行った。Fig. 4 はそれぞれの条件における実験結果と格子解像度 $R/\Delta = 32$  で計算した結果を比較したグラフである。低速な濡れから高速な濡れまでの幅広い現象を表現できおり、いずれの条件も実験の再現性は非常に高い。このことから作成したモデルは高い汎用性を持つと言える。

## 6. 結言

高速な濡れを表現するため、非浸透条件緩和モデルを開発した。その結果、以前までの問題であった閾値の調整を無くし、高速な濡れと低速な濡れのモデルを自動的に切り替えることができるようになった。また、様々な条件においても実験を再現することができ、汎用性のあるモデルであることが確認できた。

## 謝辞

本研究は JSPS 科研費 19K04178 の助成を受けた。

## 参考文献

- (1) Š. Šikalo, H.-D. Wilhelm, I.V. Roisman, S. Jakirlić and C. Tropea, “Dynamic contact angle of spreading droplets: experiments and simulations”, *Phy. Fluids*, Vol. 17, (2005), 062103.
- (2) K. Yokoi, D. Vadhilo, J. Hinch, I. Hutchings, “Numerical studies of the influence of the dynamic contact angle on a droplet impacting on a dry surface”, *Phy. Fluids*, Vol. 21, (2009), 072102.
- (3) M. Muradoglu, S. Tasoglu, “A front-tracking method for computational modeling of impact and spreading of viscous droplets on solid walls”, *Computers & Fluids*, Vol. 39, (2010), pp. 625-625.
- (4) Y. Yamamoto, K. Tokieda, T. Wakimoto, T. Ito, K. Katoh, “Modeling of the dynamic wetting behavior in a capillary tube considering the macroscopic-microscopic contact angle relation and generalized Navier boundary condition”, *Int. J. Multiphase Flow*, Vol. 59, (2014), pp. 106-112.
- (5) Y. Kita, Y. Yamamoto, T. Ito, T. Wakimoto, K. Katoh, “Moving Contact Line Models for Numerical Simulation of a Drop Impact onto Solid Surface - Switching the Moving Contact Line Models -”, *The 12th International Symposium on Fluid Control, Measurement and Visualization*, Nara, Japan, OS6-01-3, (2013).
- (6) R. Rioboo, M. Marengo, C. Tropea “Time evolution of liquid drop impact onto solid, dry surfaces”, *Experiments in Fluids*, Vol. 33, (2002), pp. 112-124.
- (7) A.V. Lukyanov, T. Pryer, “Hydrodynamics of Moving Contact Lines: Macroscopic versus Microscopic”, *Langmuir*, Vol. 33, (2017), pp. 8582-8590.