

動的接触角を考慮した斜面を流れ落ちる液滴のシミュレーション

A simulation of droplets with dynamic contact angles running down on a flat slope

- 菊田 大輔, 東工大, 東京都目黒区大岡山 2-12-1-I7-3, kikuta@sim.gsic.titech.ac.jp
青木 尊之, 東工大, 東京都目黒区大岡山 2-12-1-I7-3, taoki@gsic.titech.ac.jp
松下 真太郎, 東工大, 東京都目黒区大岡山 2-12-1-I7-3, matsushita@sim.gsic.titech.ac.jp
Daisuke KIKUTA, Tokyo Institute of technology, 2-12-1-I7-3 Ookayama, Meguro-ku, Tokyo
Takayuki AOKI, Tokyo Institute of technology, 2-12-1-I7-3 Ookayama, Meguro-ku, Tokyo
Shintaro MATSUSHITA, Tokyo Institute of technology, 2-12-1-I7-3 Ookayama, Meguro-ku, Tokyo

We have simulated droplets running down on an inclined plane as gas-liquid two-phase flows. The numerical method consists of a weakly compressible scheme and a method coupled Phase-field model with Level Set method for capturing gas-liquid interfaces. We have proposed a manner which introduces adhesion force into a simulation based on Fumidge's equation for simulating droplets sticking to an inclined plane. In addition, we have adopted Tanner's law for a dynamic contact angle model with experimental data. As a result, it has been confirmed that the behavior of droplets running down on an inclined plane in our simulation is reasonable in comparison with real phenomena and we have checked the validity of the manner for adhesion force and the dynamic contact angle model.

1. はじめに

流体现象を支配する Navier-Stokes 方程式は非線形偏微分方程式であり、特殊な条件下では解析解を得ることができるが、一般には解析解を得ることができないとされている。そこで、支配方程式をコンピュータで数値的に解くことで流体现象を解析する Computational Fluid Dynamics(CFD)が計算機の恩恵を受けながら発展を遂げてきた。気体と液体が混ざり合う現象を取り扱う気液二相流の解析では、両者の物性値が異なることによって気液界面が不連続面となるため、CFD による解析の中でも難しいとされている。そのため現在も課題が多く残っており、研究が進められている。

本研究では気液二相流の解析として、斜面を流れ落ちる液滴を取り扱う。液滴の挙動をシミュレーションによって再現することが可能になれば、撥水制御が必要な窓やインクジェット技術などの様々な産業への応用が期待できる。

液滴の挙動においては接触角が非常に重要となる。接触角とは、固体表面上の液滴が表面に対して成す角度のことであり、固体表面の濡れ性の指標として用いられている。また、接触角は液滴が静止している場合の静的接触角と運動している場合の動的接触角に大きく分けることができる。

静的接触角には液滴前端の前進接触角と液滴後端の後退接触角が異なる接触角ヒステリシスと呼ばれる現象があり、本研究では重要な現象となる。斜面に吸着する小さな液滴を身近に観察することができるが、これは接触角ヒステリシスによって表面張力が重力とつり合った結果によるものである。Fumidge⁽¹⁾や Carre⁽²⁾らによって力のつり合い式が理論的に定式化されているものの、連続体近似の数値シミュレーションに吸着力を導入する手法についての議論はこれまで不十分であった。しかし、液滴の挙動を忠実に再現するためには液滴の斜面への吸着は必要不可欠であるため、本研究では Fumidge の式を数値計算に適用する手法を提案する。

動的接触角は液滴の挙動を決定する重要な要因の一つであり、液滴が斜面を流れ落ちるときには動的接触角の影響を大きく受ける。動的接触角は実験・理論ともに多くの議論がなされているが、固体表面の微小な構造や物性値などのミクロな要因から大きな影響を受けるため、動的接触角を流体力学で統一的に取り扱うことは極めて困難である。そこで現在は経験則や流体力学の潤滑理論から得られる動的接触角の式に対して、実験データからフィッティングして得た固体表面に関する係数を掛けることで固体表面の影響を考慮する手法が多くとられている。他にも分子動力学と流体力学を用いて動的接触角を求めるようなマルチスケールな研究も進められているが、現在のところミリメートルオーダーである流体现象にナノスケールの分子動力学を適用させることは困難とされている。

本研究では気液二相流の解析において、今回提案する Fumidge の式に基づく液滴の吸着力のモデルと Yokoi らによって提案された Tanner 則に基づく動的接触角のモデル⁽³⁾を組み合わせることで斜面を流れ落ちる液滴をシミュレーション上で再現することを試みる。

2. 数値計算手法

2.1 流体の支配方程式

圧縮性流体の支配方程式を用いた場合、クーラン数が音速に律速され時間刻みを小さく設定する必要があるため、低マッハ数領域の流体解析において多くの場合は非圧縮性流体の支配方程式が用いられる。一方で高解像度の気液二相流の解析においては通常と異なり、非圧縮流体の計算に必要な圧力の Poisson 方程式の反復計算の収束性が悪化してしまい、膨大な計算時間を要することが知られている。完全陽解法による計算は GPU を用いることで効率的に並列化され、計算の高速化が期待できるため、反復計算を必

要としない完全陽解法による圧縮性流体の計算の方が高速に計算できると考えられる。そこで、本研究では次に示す圧縮性流体の支配方程式を用いる。

$$\rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = -\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \rho \mathbf{g} + \mathbf{f}_s \quad (1)$$

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

ここで、 \mathbf{u} は流体の速度、 p は圧力、 ρ は密度、 μ は粘性係数、 $\boldsymbol{\tau}$ は粘性テンソル、 \mathbf{g} は重力加速度、 \mathbf{f}_s は表面張力、 C_s は音速を表す。粘性テンソル $\boldsymbol{\tau}$ には非圧縮性 Newton 流体の構成式を用いる。

一流体近似によって気液二相流の解析を行うため、式(1)、(2)において密度と粘性係数は次のように定義する。

$$\rho \triangleq \phi \rho_L + (1 - \phi) \rho_V, \quad \mu \triangleq \phi \mu_L + (1 - \phi) \mu_V \quad (3)$$

ここで ρ_L 、 ρ_V はそれぞれ液体と気体の密度、 μ_L 、 μ_V は液体と気体の粘性係数である。 ϕ は次の節で述べる秩序変数であり、ある位置において液相が占める割合を表す。

離散化手法としては、式(1)、(2)の時間発展に三次精度三段 Runge-Kutta 法、移流項に三次精度 WENO、式(1)の圧力項と粘性項、式(2)の速度の発散項に二次精度中心差分法をそれぞれ用いる。

2.2 界面捕獲の式

本研究では界面捕獲法のひとつである Phase-field 法を用いる。Phase-field 法では、秩序変数 ϕ を用いて気体と液体を識別する。 ϕ は液相で $\phi = 1$ 、気相で $\phi = 0$ 、有限な幅を持つ液相と気相の境界(界面)で $0 < \phi < 1$ の滑らかな値をとる。秩序変数の時間発展は流束項付き保存形 Allen-Cahn 方程式⁽⁴⁾

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u} \phi) = \bar{\gamma} \left[\varepsilon \nabla \cdot (\nabla \phi) - \nabla \cdot \left\{ \phi (1 - \phi) \frac{\nabla \phi}{|\nabla \phi|} \right\} \right] \quad (4)$$

を解くことで求められる。ここで、 ϕ は秩序変数、 \mathbf{u} は式(1)で求められた流体の速度、 $\bar{\gamma}$ はモビリティに関する係数、 ε は界面幅に関する係数である。式(4)では秩序変数の移流項だけでなく右辺の拡散項・逆拡散項が存在し、秩序変数のプロファイルを一定に保つ作用があるため、VOF 法などの他の手法に対して過剰な界面の分離を防ぐことができる。また、保存形の式であることから有限体積法を用いることで秩序変数の保存性も保障される。

一方、流束項付き保存形 Allen-Cahn 方程式では計算の経過とともに界面の形状が四角に近づく傾向があり、界面の法線ベクトルと曲率を正確に計算することができないという問題がある。そこで、本研究では界面の形状を正確に表すことのできる Level Set 法を用いて界面の法線ベクトルと曲率を計算する。

Level Set 法では符号付き距離関数である Level Set 関数 ψ を用いて気体と液体を識別する。液相で $\psi > 0$ 、気相で $\psi < 0$ 、気相と液相の境界で $\psi = 0$ という値をとる。Level Set 関数の時間発展は、移流方程式

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \psi = 0 \quad (5)$$

を解くことで求められる。ここで、 ψ は Level Set 関数、 \mathbf{u} は式(1)で求められた流体の速度である。Level Set 関数は距離関数であるため、厳密には $|\nabla \psi| = 1$ を常に満している必要

があるが、式(5)で移流させる場合は数値粘性などにより計算の経過とともに $|\nabla \psi| = 1$ を満たさなくなってしまう。そこで、ある時間ステップ毎に再初期化と呼ばれる処理を数十ステップ程行う。この処理では、再初期化の式

$$\frac{\partial \psi}{\partial \tau} = -\frac{\psi}{\sqrt{\psi^2 + \delta^2}} (|\nabla \psi| - 1) \quad (6)$$

を用いて更新を行うことで、 $|\nabla \psi| = 1$ を満たすように Level Set 関数を再構成する。ここで、 τ は Level Set 関数を再構成するための仮想的な時間、 δ はスムージングのためのパラメータであり、本研究では $\delta = |\nabla \psi| \Delta x$ とした。

以上から、保存性に優れる Phase-field 法から得た秩序変数によって気液界面の位置を求め、界面形状の正確性に優れる Level Set 法から得た Level Set 関数によって気液界面の法線ベクトルと曲率を求める。整合性を図るため、両者の式を連成する必要があるが、本研究では式(4)における法線ベクトル $\nabla \phi / |\nabla \phi|$ を Level Set 関数から求めた $\nabla \psi$ に置き換え、式(6)の再初期化においては秩序変数による界面位置に基づいた $\psi_0 = \varepsilon \ln\{\phi / (1 - \phi)\}$ を初期条件として用いることにより両者の連成を行う。

離散化手法としては、式(4)では有限体積法を用いて、移流項の流束に三次精度の MUSCL 内挿、秩序変数と Level Set 関数の勾配に二次精度中心差分法を用いる。式(5)の移流項には三次精度 WENO、式(4)-(6)において時間発展はすべて三次精度三段 Runge-Kutta 法を用いる。

2.3 表面張力のモデル

本研究では Yokoi によって提案された Level Set Based density-scaled balanced continuous surface モデル⁽⁵⁾を用いる。このモデルでは界面に作用する面積力である表面張力が体積力として有限幅の界面近傍に与えられ、次のように表面張力が表される。

$$\mathbf{f}_s = \gamma_{LV} \kappa \nabla H_\alpha^{SC} \quad (7)$$

ここで、 γ_{LV} は気液の表面張力、 κ は界面の曲率である。曲率 κ は次に示すように Level Set 関数 ψ から計算される。

$$\kappa = -\nabla \cdot (\nabla \psi) = -\Delta \psi \quad (8)$$

また、 H_α^{SC} は密度スケールされた近似 Heaviside 関数であり、次のように表される。

$$H_\alpha^{SC} = \begin{cases} 0 & (\psi < -\alpha) \\ \frac{1}{4} \left(1 + \frac{\psi}{\alpha} + \frac{1}{\pi} \sin\left(\frac{\pi\psi}{\alpha}\right) \right) & (|\psi| \leq \alpha) \\ 1 & (\psi > \alpha) \end{cases} \quad (9)$$

ここで α は界面の幅の大きさである。離散化手法としては、式(8)の Level Set 関数のラプラシアンに四次精度中心差分法を用いる。

2.4 動的接触角の導入

動的接触角の導入には Yokoi らによって提案された次の式⁽³⁾を用いる。

$$\theta_d = \begin{cases} \min \left[\theta_e + \left(\frac{\mu U_{CL}}{\gamma_{LV} k_a} \right)^{\frac{1}{3}}, \theta_{mda} \right] & (U_{CL} \geq 0) \\ \max \left[\theta_e + \left(\frac{\mu U_{CL}}{\gamma_{LV} k_r} \right)^{\frac{1}{3}}, \theta_{mdr} \right] & (U_{CL} < 0) \end{cases} \quad (10)$$

ここで k_a 、 k_r は実験データをフィッティングして得られ

るパラメータ, θ_e は平衡状態の接触角, θ_{mda} は最大の前進接触角, θ_{mdr} は最小の後退接触角である. 式(10)は次に示す Tanner 則⁽⁶⁾に基づいて定式化が行われている.

$$Ca = k(\theta_e - \theta_d)^3 \quad (11)$$

$$Ca \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\mu U_{CL}}{\gamma_{LV}} \quad (12)$$

ここで Ca はキャピラリー数で, k は固体表面の物性に依存するパラメータ, θ_e は平衡状態の接触角, θ_d は動的接触角, U_{CL} は液滴の接触線における速度である. 式(11), (12) から動的接触角と接触線の速度の関係式に変形すると

$$\theta_d = \theta_e + \left(\frac{\mu U_{CL}}{\sigma k} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (13)$$

となる. キャピラリー数が小さいとき, 図 1 に示す Yokoi らの実験の結果⁽³⁾と式(13)の形がよく一致する. 一方で, キャピラリー数が大きくなると, 動的接触角は一定の値をとることが図 1 より分かる. これは慣性力が表面張力に対して支配的になったことを示している.

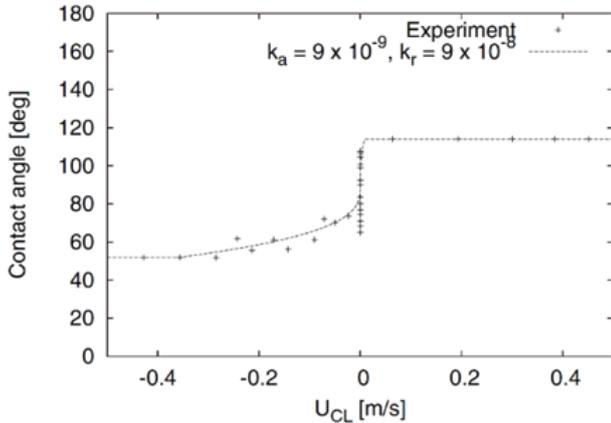


Fig. 1 An experimental data of contact angles vs. contact line velocity. The dotted line is an interpolation curve and we can obtain the value of k_a , k_r from this curve. This figure is quoted from the thesis published by Yokoi et al⁽³⁾.

以上を踏まえて, 式(10)ではすべてのキャピラリー数に対応するため, キャピラリー数が小さい領域では式(13)を採用し, 動的接触角の値が最大の前進接触角または最小の後退接触角の値に達した場合, その値で一定になるとしている. k_a , k_r は図 1 のような実験データでフィッティングして得られた曲線の傾きを決める係数から決定される. その他, 平衡状態の接触角, 最大の前進接触角, 最小の後退接触角も実験のデータに基づいて決定する. 式(10)は水平面に衝突する液滴に関して, 液滴の直径の時間変化を実験とシミュレーションで比較して検証されており, 十分な格子を用いた場合に良い結果が得られることが確かめられている.

続いて, 式(10)で求められた動的接触角を数値計算上で導入する手法について述べる. 本研究では Sussman によって提案された手法⁽⁷⁾を用いる. この手法では境界条件となる仮想点上の Level Set 関数 ψ_{HALO} を次の移流方程式

$$\frac{\partial \psi_{HALO}}{\partial \tau'} + (\mathbf{d}_{ext} \cdot \nabla) \psi_{HALO} = 0 \quad (14)$$

により時間発展させることで, 境界条件で表される固体表

面と液滴の接触角が θ となるような Level Set 関数が仮想点上に外挿される. 式(8)で計算される壁面最近傍の曲率は四次精度中心差分法を用いた場合仮想点を二つ参照するため, 適切に Level Set 関数が仮想点上に外挿されていれば, 式(7)の表面張力において接触角が考慮される. ここで, τ' は外挿するための仮想的な時間である. \mathbf{d}_{ext} は固体表面に対して接触角 θ を成す単位ベクトルであり, 次のように求められる.

$$\mathbf{d}_{ext} = \begin{cases} \frac{\mathbf{n}_w - \frac{\mathbf{n}}{\tan(\pi - \theta)}}{|\mathbf{n}_w - \frac{\mathbf{n}}{\tan(\pi - \theta)}|} & (s < 0) \\ \frac{\mathbf{n}_w + \frac{\mathbf{n}}{\tan(\pi - \theta)}}{|\mathbf{n}_w + \frac{\mathbf{n}}{\tan(\pi - \theta)}|} & (s > 0) \\ \mathbf{n}_w & (s = 0) \end{cases} \quad (15)$$

$$\mathbf{n} = \frac{\mathbf{n}_s \times \mathbf{n}_w \times \mathbf{n}_w}{|\mathbf{n}_s \times \mathbf{n}_w \times \mathbf{n}_w|}, \quad s = \mathbf{n}_s \cdot \mathbf{n} \quad (16)$$

ここで, \mathbf{n}_w は固体表面の法線ベクトル, \mathbf{n}_s は界面の法線ベクトルである.

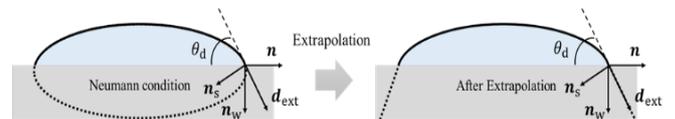


Fig. 2 An outline figure of extrapolation of Level Set function in HALO area. The left-hand side figure denotes a Neumann boundary condition for Level Set function and the right-hand side one denotes a boundary condition after extrapolation by Eq. (14).

本研究では Level Set 関数の境界条件として Neumann 条件を用いているため, 図 2 の左側のように Level Set 関数で表される液滴のプロファイルは壁面境界で対称となっており, 接触角が 90 度しか考慮されない. 一方で式(14)により外挿を行うことで, 図 2 の右側のように仮想点上の液滴のプロファイルが接触角に沿うように形成され, 90 度以外の接触角を表現できる.

離散化手法は式(14)の時間発展に三次精度三段 Runge-Kutta 法, 移流項と界面の法線ベクトルを求めるための Level Set 関数の勾配に二次精度中心差分を用いる.

2.5 壁への吸着力の導入

われわれは小さな液滴が斜面に吸着している様子を身近に見ることができるが, この現象をシミュレーションで再現するためには液滴が静止しているときの前進接触角と後退接触角の差である接触角ヒステリシスを正確に評価する必要がある. 本研究では Furmidge の式⁽¹⁾

$$\frac{mg \sin \alpha}{w} = \gamma_{LV}(\cos \theta_r - \cos \theta_a) \quad (17)$$

を用いて接触角ヒステリシスを評価し, 斜面に吸着する液滴を再現する手法を提案する. 式(17)において, m は液滴の質量, α は斜面の傾斜角, w は液滴を長方形で仮定した

ときの幅, γ_{LV} は気体と液体の表面張力, θ_a は前進接触角, θ_r は後退接触角である. *Furmidge* は液滴の着液形状を長方形で仮定し, 液滴が微小変位 dl だけ移動した時の表面張力と重力の仮想仕事の原理

$$\gamma_{LV} w dl \cos \theta_r - \gamma_{LV} w dl \cos \theta_a = mg \sin \alpha dl \quad (18)$$

から式(17)を導出している. 他にも着液形状を円で仮定した場合の *Carre* の式²⁾などもあるが, 本研究では他の式より比較的良好な結果が得られた *Furmidge* の式を採用した.

続いて, 本研究で提案する数値計算に適用可能な定式化について述べる. はじめに, 二次元の場合について述べる. 式(17)において, 幅 w を液滴の直径 $2r$ に等しいとして, $w = 2r$ を代入すると,

$$\frac{mg \sin \alpha}{2r} = \gamma_{LV} (\cos \theta_r - \cos \theta_a). \quad (19)$$

一つの液滴を計算する場合は質量をパラメータとして与えることができるため, 式(19)を直接用いることができるが, 本研究では計算領域に存在する多数の液滴に対して本手法を適用させるため, 一つ一つの液滴の質量 m を個別に求める必要がある. 境界条件として課される接触角はスタガード格子の場合各セル中心で局所的に求められるため, 質量も同様に各セル中心で局所的に求める必要がある. そこで, 各セル中心で求められた気液境界の曲率半径がそのセルから最も近い液滴の半径に等しいと仮定して質量を推定する. 液滴を半球とすれば, 質量は気液境界の曲率半径 R を用いて次のように推定される.

$$m = \frac{\rho_L \frac{4\pi R^3}{3}}{2} = \rho_L \frac{2\pi R^3}{3}. \quad (20)$$

式(20)と $r = R$ を式(19)に代入して, $\cos \theta_r - \cos \theta_a$ について解くと,

$$\cos \theta_r - \cos \theta_a = \frac{\pi \rho_L g \sin \alpha}{3\gamma_{LV}} R^2 \quad (21)$$

静的接触角の方位角 ϕ に関する関数を次のように仮定する. 方位角 ϕ は前進角方向を 0 rad として定義する.

$$\theta_e(\phi) = \theta_{e,\alpha=0} + \frac{\Delta\theta}{2} \cos \phi. \quad (22)$$

ここで, $\Delta\theta \triangleq \theta_a - \theta_r$ であり, θ_e は斜面における静的接触角, $\theta_{e,\alpha=0}$ は壁面が水平 (傾斜角 $\alpha = 0 \text{ rad}$) の場合の静的接触角である. 式(22)より

$$\theta_a = \theta_e(0) = \theta_{e,\alpha=0} + \frac{\Delta\theta}{2}, \quad \theta_r = \theta_e(\pi) = \theta_{e,\alpha=0} - \frac{\Delta\theta}{2}. \quad (23)$$

式(23)を式(21)に代入して, 加法定理を用いて整理すると,

$$2 \sin \theta_{e,\alpha=0} \sin \frac{\Delta\theta}{2} = \frac{\pi \rho_L g \sin \alpha}{3\gamma_{LV}} R^2 \quad (24)$$

接触角ヒステリシス $\Delta\theta$ について解くと,

$$\Delta\theta = 2 \sin^{-1} \left(\frac{\pi \rho_L g \sin \alpha}{2 \sin \theta_{e,\alpha=0}} R^2 \right) \quad (25)$$

となるので, 式(22)に式(25)を代入して,

$$\theta_e(\phi) = \theta_{e,\alpha=0} + \sin^{-1} \left(\frac{\pi \rho_L g \sin \alpha}{2 \sin \theta_{e,\alpha=0}} R^2 \right) \cos \phi. \quad (26)$$

ここで, $\cos \phi$ は Level Set 関数 ψ から得た気液境界の法線ベクトルと重力方向の単位ベクトルの内積から次のように求められる.

$$\cos \phi = -(\nabla\psi) \cdot \left(\frac{\mathbf{g}}{|\mathbf{g}|} \right). \quad (27)$$

式(27)を式(26)に代入すれば, 重力と釣り合うための静的接触角の式

$$\theta_e = \theta_{e,\alpha=0} - \left[(\nabla\psi) \cdot \left(\frac{\mathbf{g}}{|\mathbf{g}|} \right) \right] \sin^{-1} \left(\frac{\pi \rho_L g \sin \alpha}{2 \sin \theta_{e,\alpha=0}} R^2 \right) \quad (28)$$

を得る. 以上から, 重力と釣り合うための静的接触角は各セルで気液境界の法線ベクトル $\nabla\psi$ と曲率半径 R を計算することで求めることができる.

実際は, ある一定の傾斜角 α で液滴の質量を増加させていくと, やがて液滴は壁面を滑り出す. この液滴の壁面への吸着の限界は, 入力値の最小値を出力する *min* 関数を用いることで実現される. 液滴が滑り出すときの最大質量を m_{\max} とすると, このときの最大接触角ヒステリシスは式(19)から

$$\cos \theta_{r,\max} - \cos \theta_{a,\max} = \frac{m_{\max} g \sin \alpha}{2\gamma_{LV}} \left(\frac{3m_{\max}}{2\pi\rho_L} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (29)$$

となる. ここで, 液滴の半径 r_{\max} は半球を仮定して, $r_{\max} = (3m_{\max}/2\pi\rho_L)^{1/3}$ である. 得られた最大接触角ヒステリシスを用いて *min* 関数で接触角ヒステリシスを制限すると, 二次元の場合の静的接触角の式は次のようになる.

$$\theta_e = \theta_{e,\alpha=0} - \left[(\nabla\psi) \cdot \left(\frac{\mathbf{g}}{|\mathbf{g}|} \right) \right] \sin^{-1} \left[\frac{\min \left[\frac{\pi \rho_L g \sin \alpha}{3\gamma_{LV}} R^2, \frac{m_{\max} g \sin \alpha}{2\gamma_{LV}} \left(\frac{3m_{\max}}{2\pi\rho_L} \right)^{\frac{1}{3}} \right]}{2 \sin \theta_{e,\alpha=0}} \right] \quad (30)$$

三次元の場合は, 気液境界が表面で表されるため, 曲率 κ が最大曲率 κ_{\max} と最小曲率 κ_{\min} の和で表される.

$$\kappa = \kappa_{\max} + \kappa_{\min} \quad (31)$$

液滴の形状を半径 r の半球で仮定すると対称性から $\kappa_{\max} = \kappa_{\min} = 1/r$ であり, 曲率半径 R と半球の半径 r の関係は

$$\kappa = \frac{1}{R} = \kappa_{\max} + \kappa_{\min} = \frac{1}{r} + \frac{1}{r} = \frac{2}{r} \quad (32)$$

となる. したがって三次元の場合の静的接触角の式は次のようになる.

$$\theta_e = \theta_{e,\alpha=0} - \left[(\nabla\psi) \cdot \left(\frac{\mathbf{g}}{|\mathbf{g}|} \right) \right] \sin^{-1} \left[\frac{\min \left[\frac{\pi \rho_L g \sin \alpha}{3\gamma_{LV}} (2R)^2, \frac{m_{\max} g \sin \alpha}{2\gamma_{LV}} \left(\frac{3m_{\max}}{2\pi\rho_L} \right)^{\frac{1}{3}} \right]}{2 \sin \theta_{e,\alpha=0}} \right] \quad (33)$$

以上から, 本研究では式(30)または(33)から求められた液滴の静的接触角を式(10)における平衡状態の接触角とする. そうすることにより液滴が静止した際に式(30)または(33)が自動的に適用される. 式(30)または(33)を用いることで, 最大質量より質量の小さい液滴に対しては式(28)が適用され, 力のつり合いで壁面に吸着する. 最大質量より質量の大きい液滴に対しては接触角ヒステリシスが式(29)で得ら

れる値で制限され、重力が表面張力による吸着力よりも大きくなり液滴は滑り出す。

液滴と気体の物性値が同じでも、壁面の形状や物性値が異なる場合、壁面に吸着できる液滴の最大質量は異なる。マクロな流体力学の視点からはこのような壁面のミクロな影響を計算で評価ができないため、式(30)、(33)では人工的に最大質量に対しての大小によって液滴の吸着と滑りを制御している。すなわち、ここでは壁面の形状や物性値などの情報はすべて最大質量に含まれることになる。

3. 検証計算

本章では式(33)で表される液滴の壁面へ吸着するための静的接触角により、液滴の吸着と滑り始めを再現できるかを検証する。液滴は半径 $r = 1.0\text{mm}$ の半球として、計算領域は $2.5 \times 5.0 \times 15.0\text{mm}$ 、格子点数は $50 \times 100 \times 300$ で一格子の辺の長さを $5.0 \times 10^{-2}\text{mm}$ 、計算時間は実時間で $t = 0 \sim 2\text{sec}$ 、斜面は垂直面($\alpha = 90\text{deg}$)、重力は垂直下方向に 9.8m/sec^2 とした。その他物性値は $\gamma_{LV} = 72.0 \times 10^{-3}\text{N/m}$ 、 $\rho_L = 1000.0\text{kg/m}^3$ 、 $\rho_V = 1.2\text{kg/m}^3$ 、 $\mu_L = 1.0 \times 10^{-3}\text{Pa} \cdot \text{sec}$ 、 $\mu_V = 1.8 \times 10^{-5}\text{Pa} \cdot \text{sec}$ 、 $\theta_{e,\alpha=0} = 90\text{deg}$ とした。初期条件は速度、圧力ともに 0m/sec 、 0Pa とし、境界条件は速度に Non-slip 条件、圧力、密度、秩序変数に Neumann 条件を用いた。最大質量を半径 $r = 2.0\text{mm}$ の液滴に設定した場合(Case A)と半径 $r = 0.5\text{mm}$ の液滴に設定した場合(Case B)について比較を行った。図 3 にそれぞれの結果を示す。赤色の液滴が Case A で、青色の液滴が Case B を表している。図 3 より液滴の質量が最大質量を超えない場合は壁面に吸着し、最大質量を超える場合は滑り始めることが確認できた。またここでは液滴の質量をパラメータとして与えていないため多数の液滴に対しても同時に適用することが可能である。

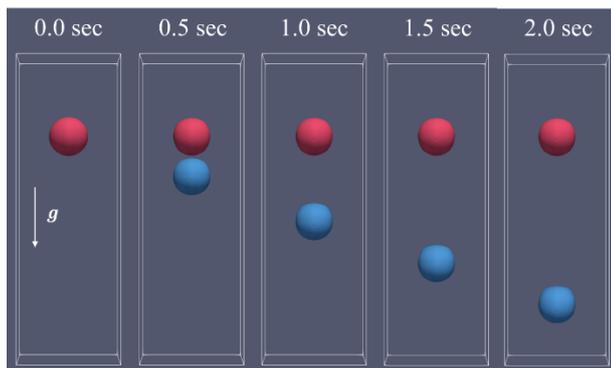


Fig. 3 Snapshots of Case A and Case B in $t=0 \sim 2\text{sec}$. The red droplet is Case A and surface tension and gravity are balanced by hysteresis of contact angles in Eq. (28). Therefore it sticks to a vertical wall. The blue one is Case B and hysteresis of contact angles is limited by Eq. (29), then it run down on a vertical wall.

4. 液滴のシミュレーション

本章では重力下で斜面を流れ落ちる液滴のシミュレーションを行う。図 4 のように計算領域を $100.0 \times 100.0 \times 5.0\text{mm}$ として、格子点数を $1000 \times 1000 \times 50$ で一格子の辺の長さを 0.1mm とした。計算時間は実時間で $t = 0 \sim 0.125\text{sec}$ 、斜面は垂直面、重力は鉛直下向きに 9.8m/sec^2 とした。その他物性値は検証計算と同様の値を用いた。初期条件として、250 個の半球でモデル化された半径 $0.8 \sim 3.5\text{mm}$ の液滴をランダムに配置し、上部の液滴のみに初期速度 2.0m/sec を下

向きに与え、他の液滴は 0m/sec 、圧力はすべて 0Pa とした。境界条件は検証計算と同様である。また、計算には単一の GPU(Tesla V100)を用いた。

図 5 に物理時間 $t = 0, 0.025, 0.05, 0.075, 0.1, 0.125\text{sec}$ におけるシミュレーションの結果を示す。シミュレーションでは液滴が前方の液滴と衝突し合体しながら斜面を流れ落ちる様子を確認することができた。一方で $t = 0.075\text{sec}$ において流れ落ちる比較的大きな液滴の後方から小さな液滴が分離している様子も確認することができる。動的接触角の導入により、現実に近い液滴の挙動を再現すること可能となった。吸着力については、格子点数が不十分で液滴の着液形状を十分に再現できておらず、時間の経過とともにゆっくりと滑り落ちてしまった。したがって、更に高解像度の計算を行う必要がある。

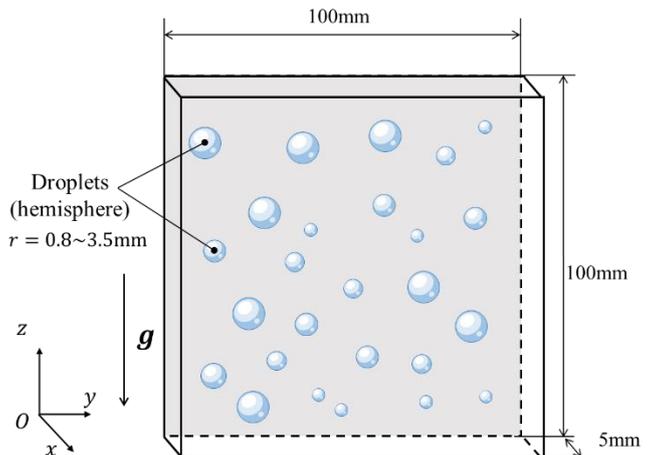


Fig. 4 Settings of a simulation of droplets on a vertical wall. The size of computing domain is set as $100.0 \times 100.0 \times 5.0\text{mm}$ and it has $1000 \times 1000 \times 50$ grid points. The radius of droplets is given as $0.8 \sim 3.5\text{mm}$ randomly. The position of them is also decided randomly. The number of droplets is 250.

5. まとめ

本研究では壁面への吸着力と動的接触角を考慮して斜面を流れ落ちる液滴のシミュレーションを行った。動的接触角の導入により流れ落ちる液滴は前方の液滴と衝突し成長してやがて後方から分離していくという現実で見られる液滴の挙動を再現することができた。吸着力は単一の液滴に適用可能であることを確認したが、液滴の大きさと比較して十分広い計算領域を用いた計算では格子解像度が不十分となり、吸着を十分に再現することができなかった。したがって、今後は MPI を用いた複数 GPU による計算や AMR 法を用いることで高解像度の計算を行う。また、液滴が斜面を流れ落ちる速度を実験データと比較し定量的に本研究で用いたモデルの妥当性を検討する。

謝辞

本研究は科学研究費補助金・基盤研究 (S) 課題番号 19H05613 「自由界面を含む混相流の革新的数値流体シミュレーション」、学術大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点 (JHPCN) 課題番号 jh190054 から支援を頂いた。計算には東京工業大学学術国際情報センターのスパコン TSUBAME3.0 を利用させて頂いた。記して謝意を表す。

参考文献

- (1) C. G. L. Furmidge, Studies at phase interfaces I. The sliding of liquid drops on solid surfaces and a theory for spray retention, *Journal of colloid science*, Vol 17, (1962), pp309-324.
- (2) A. Carre, M.E.R. Shanahan, Drop Motion on an inclined plane and evaluation of hydrophobia treatments to glass, *The Journal of Adhesion*, Vol 49,(1995), pp 177-185.
- (3) Kensuke Yokoi, Damien Vadlillo, John Hinch, and Hutchings, Numerical studies of the influence of the dynamic contact angle on a droplet impacting on a dry surface, *Physics of fluid*, Vol. 21, (2009), pp.072102-7
- (4) Pao-Hsiung Chiu, Yan-Ting Lin., A conservative phasefield method for solving incompressible two-phase flows, *Journal of Computational Physics*, Vol. 230, (2011), pp.185-204.
- (5) Kensuke Yokoi., A density-scaled continuum surface force model within a balanced force formulation. *Journal of Computational Physics*, Vol. 278, (2014), pp.221-228.
- (6) L. Tanner, The spreading of silicon oil drops on horizontal surfaces, *Journal of Physics D*, Vol 12, (1979),1473.
- (7) Mark Sussman., An Adaptive Mesh Algorithm for Free Surface Flows in General Geometries, Chapman and Hall/CRC, (2001).

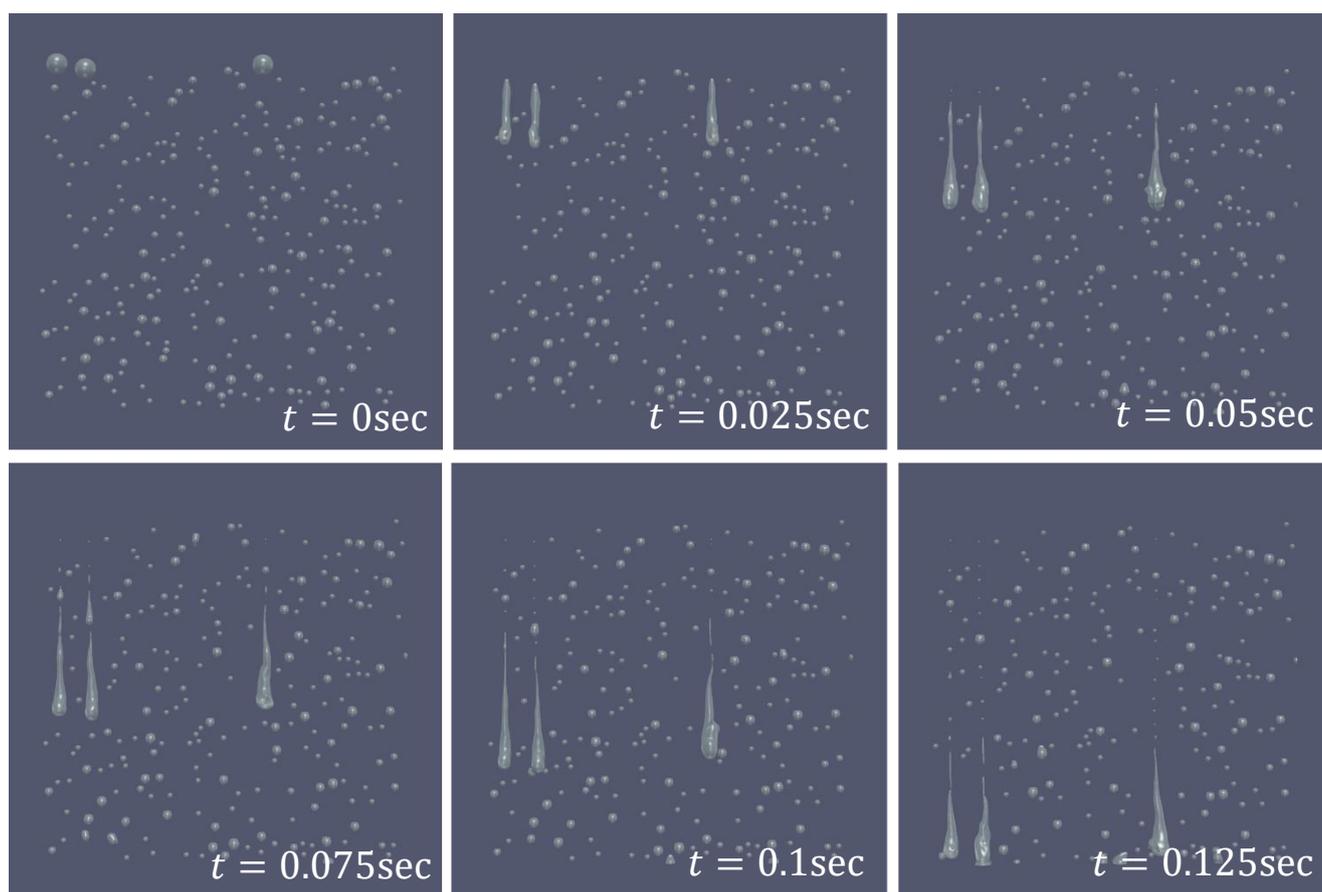


Fig. 5 Snapshots of the simulation of droplets running down on a vertical wall in $t = 0 \sim 0.125$ sec. We can observe a droplet running down collides with another droplet and both of two coalesce together. From $t = 0.075$ sec, we can observe separation of droplets in a rear end of droplets running down.