

改良二相系格子ボルツマン法による固体壁面上における 三次元液滴衝突挙動解析

Numerical Simulation of Three-Dimensional Collision Problem of Droplets on Solid Surface
by the Improved Two-Phase Lattice Boltzmann Method

- 藤島亘平, 信州大院, 長野県長野市若里 4-17-1, E-mail : 17w4055c@shinshu-u.ac.jp
- 吉野正人, 信州大工, 長野県長野市若里 4-17-1, E-mail : masato@shinshu-u.ac.jp
- 鈴木康祐, 信州大工, 長野県長野市若里 4-17-1, E-mail : kosuzuki@shinshu-u.ac.jp

Kohei Fujishima, Graduate School of Science and Technology, Shinshu University, Nagano 380-8553
Masato Yoshino, Institute of Engineering, Academic Assembly, Shinshu University, Nagano 380-8553
Kosuke Suzuki, Institute of Engineering, Academic Assembly, Shinshu University, Nagano 380-8553

We calculate three-dimensional collision problems of liquid droplets on a solid surface by the improved two-phase lattice Boltzmann method with the wetting boundary condition. We calculate two benchmark problems to confirm the validity of the present method. First, we investigate the validity of the wetting boundary condition for various contact angles. As a result, we can obtain various static contact angles by changing the values of the gradient of the order parameter on the wall. Second, we calculate a glycerin droplet impinging on a solid surface, and it is found that the time variations of the droplet's diameter on the solid surface have a good agreement with available experimental results.

1. 緒言

液滴の固体壁面への衝突は、エンジン内の燃料噴射やインクジェットプリンタ、噴霧塗装など、機械工学分野において多く見られる現象である。固体壁面衝突時の液滴の挙動を各用途に従って制御するためには、その液滴の挙動を詳細に把握することが非常に重要である。しかし、上記のような固体壁面に衝突する液滴の挙動は時間・空間スケールが非常に小さい現象であり、実験による観測が困難である。そのため、数値計算による研究が盛んに行われている。

液滴の固体壁面衝突に関する既存の研究例として、Tanaka ら⁽¹⁾は Inamuro ら⁽²⁾が提案した高密度の二相系格子ボルツマン法 (Lattice Boltzmann Method : 以下, LBM) に, Briant ら^(3,4)が提案した濡れ性境界条件を導入し, 固体壁面に衝突する液滴の二次元計算をしている。この研究では, 単一液滴の固体壁面衝突の計算において, 衝突に関するパラメータと固体壁面上での濡れ面積の直径 (以下, 濡れ直径) の時間変化の関係を調べている。また, 異なる濡れ性の条件において, 壁面にあらかじめ付着させた液滴に別の液滴を真上から衝突させ, 液滴同士の混合具合やその挙動について調べている。しかし, Tanaka ら⁽¹⁾の計算では, 計算負荷の問題から, 気相と液相の密度比について実現象よりも小さい値でしか計算しておらず, また, 二次元計算に留まっていることから, 実現象を完全に再現できているとは言い難い。

数値計算手法の観点では, 近年, Inamuro ら^(5,6)によって従来の二相系 LBM⁽²⁾を改良した新しい二相系 LBM が提案された。この改良二相系 LBM は, 従来にも増して簡単なアルゴリズムで安定かつ高速に高密度比の気液二相流を計算でき, また, 界面張力の計算方法に CSF (Continuous Surface Force) モデル⁽⁷⁾を用いることが特徴である。

そこで本研究では, Inamuro ら⁽⁶⁾によって提案された改良二相系 LBM をもとにした手法により, より高密度比の液滴の固体壁面衝突時の挙動を三次元計算により

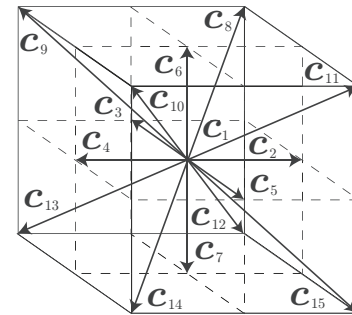


Fig. 1: Three-dimensional 15-velocity model.

明らかにすることを目的とした。

2. 数値計算手法

本研究では改良二相系 LBM⁽⁶⁾を用いた。以下の物理量はすべて, 代表長さ L , 粒子の代表速さ c , 時間スケール $t_0 = L/U$ (U : 流れの代表速さ), 基準 order parameter ϕ_0 , および代表密度 ρ_0 を用いて無次元化したものである⁽⁶⁾。また, 添え字 L および G はそれぞれ液相および気相を示す。

2.1 CSF モデルを用いた改良二相系格子ボルツマン法

本手法では, 従来の二相系 LBM⁽²⁾と同様に, LKS (Lattice Kinetic Scheme)⁽⁸⁾を用いる。LKS では緩和時間を 1 とするため, 速度分布関数を用いることなく巨視的変数である密度 ρ , 圧力 p , 流速 \mathbf{u} を求めることができる。格子気体モデルとして, Fig. 1 に示す 3 次元 15 速度モデルを用いる。この速度モデルの粒子速度 \mathbf{c}_i ($i = 1, 2, 3, \dots, 15$) は以下のように与えられる。

$$[\mathbf{c}_1, \mathbf{c}_2, \mathbf{c}_3, \mathbf{c}_4, \mathbf{c}_5, \mathbf{c}_6, \mathbf{c}_7, \mathbf{c}_8, \mathbf{c}_9, \mathbf{c}_{10}, \mathbf{c}_{11}, \mathbf{c}_{12}, \mathbf{c}_{13}, \mathbf{c}_{14}, \mathbf{c}_{15}] = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & -1 & 0 & 0 & 1 & 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 1 & 1 & 1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 \end{bmatrix}. \quad (1)$$

二相を識別する order parameter ϕ の求め方は従来の二相系 LBM⁽²⁾ と同様であり、時刻 t における格子点 \mathbf{x} 上の order parameter ϕ の時間発展式は以下ようになる。

$$\phi(\mathbf{x}, t + \Delta t) = \sum_{i=1}^{15} f_i^{\text{eq}}(\mathbf{x} - \mathbf{c}_i \Delta x, t), \quad (2)$$

ここで、 Δx は格子間隔、 Δt は時間刻み幅（仮想粒子が隣の格子点まで移動する時間）であり、 f_i^{eq} は次式で表される局所平衡分布関数である。

$$\begin{aligned} f_i^{\text{eq}} = & H_i \phi + F_i \left[p_0 - \kappa_f \phi \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_\alpha^2} - \frac{\kappa_f}{6} \left(\frac{\partial \phi}{\partial x_\alpha} \right)^2 \right] \\ & + 3E_i \phi c_{i\alpha} u_\alpha + E_i \kappa_f G_{\alpha\beta}(\phi) c_{i\alpha} c_{i\beta} \\ & + E_i C \frac{\partial P_{\alpha\beta}}{\partial x_\beta} c_{i\alpha} \Delta x. \end{aligned} \quad (3)$$

上式において、

$$\left. \begin{aligned} E_1 = 2/9, E_2 = E_3 = E_4 = \dots = E_7 = 1/9, \\ E_8 = E_9 = E_{10} = \dots = E_{15} = 1/72, \\ H_1 = 1, H_2 = H_3 = H_4 = \dots = H_{15} = 0, \\ F_1 = -7/3, F_i = 3E_i \quad (i = 2, 3, 4, \dots, 15), \end{aligned} \right\}, \quad (4)$$

$$p_0 = \phi T \frac{1}{1 - b\phi} - a\phi^2, \quad (5)$$

$$G_{\alpha\beta}(\phi) = \frac{9}{2} \frac{\partial \phi}{\partial x_\alpha} \frac{\partial \phi}{\partial x_\beta} - \frac{3}{2} \frac{\partial \phi}{\partial x_\gamma} \frac{\partial \phi}{\partial x_\gamma} \delta_{\alpha\beta}, \quad (6)$$

$$P_{\alpha\beta} = \left[p_0 - \kappa_f \phi \nabla^2 \phi - \frac{\kappa_f}{2} |\nabla \phi|^2 \right] \delta_{\alpha\beta} + \kappa_f \frac{\partial \phi}{\partial x_\alpha} \frac{\partial \phi}{\partial x_\beta}, \quad (7)$$

ここで、 $\alpha, \beta, \gamma = x, y, z$ (総和規約に従う) であり、 $\delta_{\alpha\beta}$ はクロネッカーのデルタ、 a, b, T は、order parameter ϕ の最大および最小値を決める自由パラメータである。式(3)における κ_f は界面の厚さに関する定数である。また、式(7)の $P_{\alpha\beta}$ は order parameter ϕ の計算に使われる流体の圧力テンソルである。さらに、式(3)における C は ϕ の拡散に関わるモビリティ θ_M (移流項を含む Cahn–Hilliard 方程式の拡散係数を調整するパラメータ) に関係する定数で、次式の関係がある。

$$\theta_M = \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{3} C \right) \Delta x. \quad (8)$$

各相の密度 ρ は、従来の手法⁽²⁾ とは異なり、各相を明確に分離するための閾値 ϕ^* を用いず、次のように決定する。

$$\rho = \begin{cases} \rho_G, & \phi = \phi_{\min}, \\ \frac{\Delta \rho}{2} \left[\sin \left(\frac{\phi - \bar{\phi}}{\Delta \phi} \pi \right) + 1 \right] + \rho_G, & \phi_{\min} < \phi < \phi_{\max}, \\ \rho_L, & \phi = \phi_{\max}, \end{cases} \quad (9)$$

ここで、 ϕ_{\max}, ϕ_{\min} は各タイムステップにおける ϕ の最大値、最小値であり、 $\Delta \rho = \rho_L - \rho_G$ 、 $\Delta \phi = \phi_{\max} - \phi_{\min}$ 、

$\bar{\phi} = (\phi_{\max} + \phi_{\min})/2$ である。また、各相の粘性係数 μ は、次式で与えられる。

$$\mu(\mathbf{x}, t) = \frac{\rho(\mathbf{x}, t) - \rho_G}{\rho_L - \rho_G} (\mu_L - \mu_G) + \mu_G. \quad (10)$$

次に、圧力 p を求める手順について説明する。圧力の計算に関しては、数回の反復計算を行うことでより数値安定性を高めている。この反復計算を行うことで音速を上昇させ、非圧縮性からの誤差を抑える。以下に圧力の反復計算手順を示す。

- (i) $p_0 = p(\mathbf{x}, t)$ とする。
- (ii) 反復 l 回目の圧力 p_l が分かっているものとし、それから反復 $(l+1)$ 回目の圧力を次のように求める。

$$\begin{aligned} p_{l+1}(\mathbf{x}) = & p_l(\mathbf{x}) \\ & + \frac{\omega(\mathbf{x}, t)}{3} \sum_{i=1}^{15} [\Delta P_{i,l} + g_i^{\text{eq}}(\mathbf{x} - \mathbf{c}_i \Delta x, t)], \end{aligned} \quad (11)$$

ここで、 $\Delta P_{i,l}$ は密度の異なる二相流に対する圧力の微分項であり、以下で与えられる。

$$\begin{aligned} \Delta P_{i,l} = & \frac{3}{2} E_i \left[\frac{1}{\rho(\mathbf{x} - \mathbf{c}_i \Delta x, t)} + \frac{1}{\rho(\mathbf{x}, t)} \right] \\ & \times [p_l(\mathbf{x} - \mathbf{c}_i \Delta x) - p_l(\mathbf{x})]. \end{aligned} \quad (12)$$

この反復を n 回まで繰り返す。

- (iii) $p(\mathbf{x}, t + \Delta t) = p_n(\mathbf{x})$ として時刻 $t + \Delta t$ における圧力を求める。

ここで、 ω は音速を調整するパラメータであり、次式で与えられる。

$$\omega(\mathbf{x}, t) = 1 + \frac{\rho(\mathbf{x}, t) - \rho_G}{\rho_L - \rho_G} (\omega_{\max} - 1), \quad (13)$$

ここで、 ω_{\max} は $\rho_G \leq \omega_{\max} \leq \rho_L$ を満たす定数である。

g_i^{eq} は従来の手法⁽²⁾ から圧力項および界面張力に関する項を除いたものであり、次式で与えられる。

$$\begin{aligned} g_i^{\text{eq}} = & E_i \left[3c_{i\alpha} u_\alpha - \frac{3}{2} u_\alpha u_\alpha + \frac{9}{2} c_{i\alpha} c_{i\beta} u_\alpha u_\beta \right. \\ & \left. - 3c_{iz} \left(1 - \frac{\rho_G}{\rho} \right) g \Delta x \right]. \end{aligned} \quad (14)$$

ここで、 g は重力加速度である。

また、流速 \mathbf{u} は式(14)を用いて、以下に示す時間発展式により求める。

$$\begin{aligned} \mathbf{u}(\mathbf{x}, t + \Delta t) = & \sum_{i=1}^{15} \mathbf{c}_i [\Delta P_i(\mathbf{x}, t + \Delta t) + g_i^{\text{eq}}(\mathbf{x} - \mathbf{c}_i \Delta x, t)] \\ & + 3A_u E_i \mathbf{c}_i \cdot \{ \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) - \mathbf{u}(\mathbf{x} - \mathbf{c}_i \Delta x, t) \} \\ & + 3E_i c_{i\alpha} V_\alpha(\mathbf{x}, t) \\ & - \frac{1}{6} (1 - A_u(\mathbf{x}, t)) \lambda (\Delta x)^4 \nabla^2 (\nabla^2 \mathbf{u}(\mathbf{x}, t)) \\ & + \frac{1}{\rho(\mathbf{x}, t)} \mathbf{F}_{\text{sv}}(\mathbf{x}, t) \Delta x, \end{aligned} \quad (15)$$

ここで、式 (15) の ΔP_i は式 (12) において $l = n$ としたものである。また、 V_α を含む項は正しい粘性項を回復するために必要な項であり、 V_α は次式で表される。

$$V_\alpha = \frac{1}{\rho} \frac{\partial \mu}{\partial x_\beta} \left(\frac{\partial u_\beta}{\partial x_\alpha} + \frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\beta} \right) \Delta x \quad (16)$$

さらに、 A_u は粘度を調整するパラメータであり、次式により求まる。

$$\mu = \frac{1}{6} \rho (1 - A_u) \Delta x. \quad (17)$$

式 (15) の λ は計算の安定性に関わるパラメータであり、 $\lambda = \mathcal{O}(1)$ である。また、 \mathbf{F}_{sv} は、CSF モデル (7) から導かれる界面張力 σ に関する体積力であり、次式で与えられる。

$$\mathbf{F}_{sv}(\mathbf{x}, t) = \sigma \chi(\mathbf{x}, t) \frac{\nabla \rho(\mathbf{x}, t)}{\Delta \rho} \frac{\rho(\mathbf{x}, t)}{\langle \rho \rangle}, \quad (18)$$

ここで、 $\langle \rho \rangle = (\rho_L + \rho_G)/2$ である。また、 χ は曲率を表しており、次式により求まる。

$$\chi(\mathbf{x}, t) = -\nabla \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}, t), \quad (19)$$

ここで、式 (19) における \mathbf{n} は法線方向の単位ベクトルであり、次式で表される。

$$\mathbf{n}(\mathbf{x}, t) = \frac{\nabla \rho(\mathbf{x}, t)}{|\nabla \rho(\mathbf{x}, t)|}. \quad (20)$$

式 (3), (6), (7), (15), (16), (18), (19), および (20) における微分は、以下の差分近似を用いる。

$$\frac{\partial \psi}{\partial x_\alpha} \approx \frac{1}{10\Delta x} \sum_{i=2}^{15} c_{i\alpha} \psi(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta x), \quad (21)$$

$$\nabla^2 \psi \approx \frac{1}{5(\Delta x)^2} \left[\sum_{i=2}^{15} \psi(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta x) - 14\psi(\mathbf{x}) \right]. \quad (22)$$

2.2 滑りなし境界条件

LKS は、巨視量 \mathbf{u} および p の境界条件について、差分法や有限要素法で用いられるような境界条件をそのまま用いることが出来る。固体静止壁面上には、滑りなし境界条件を適用し、流速 \mathbf{u} は、

$$\mathbf{u} = \mathbf{0}, \quad (23)$$

とする。また、圧力 p は、

$$\frac{\partial p}{\partial n} = 0, \quad (24)$$

とする。ここで、 n は固体壁面に垂直な方向を示す。

2.3 濡れ性境界条件

本計算では、Briant ら (3, 4) によって提案された濡れ性境界条件の導入法を用いて、固体壁面の濡れ性を考慮した。

Cahn (9) によると、固体壁面の自由エネルギーは以下のように定義される。

$$\Psi_s = \int \Phi_s(\rho_s) dS, \quad (25)$$

ここで、 ρ_s は固体壁面上の流体の密度、 S は固体表面の面積である。さらに、 $\Phi_s(\rho_s)$ を ρ_s についてべき乗展開し、一次のオーダーの項まで選ぶと $\Phi_s = -\phi_{s1}\rho_s$ となる (10, 11)。なお、 ϕ_{s1} は濡れ性ポテンシャル (9) を表す。したがって、系全体のエネルギーは次式で与えられる。

$$\Psi_b + \Psi_s = \int \left[\psi(T, \rho) + \frac{1}{2} \kappa_f (\nabla \rho)^2 \right] dV - \phi_{s1} \rho_s, \quad (26)$$

ここで、式 (26) 中の被積分関数第 1 項はバルクがもつ自由エネルギーを、第 2 項は界面がもつ自由エネルギーを表している。式 (26) の系全体の自由エネルギーを最小にする条件から、以下の濡れ性境界条件が与えられる。

$$\frac{\partial \rho}{\partial n} = -\frac{\phi_{s1}}{\kappa_f}, \quad (27)$$

ここで、 n は固体壁面に垂直な方向を示す。式 (27) の右辺は、固体壁面の濡れ性に応じて決まる値であるため、LBM では固体壁面の法線方向 n の密度勾配を規定することにより固体壁面の濡れ性を表現する。

ところで、式 (27) は密度に対する微分であるので、以下の式を用いて order parameter ϕ の微分に変換し、濡れ性境界条件を適用する。ここで、添え字 k は壁に垂直な方向の格子点番号を意味し、 $k = 0$ は固体壁面上の格子点を表す。

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial n} \right|_{k=0} = \frac{\phi_{\max} - \phi_{\min}}{\rho_L - \rho_G} \frac{\partial \rho}{\partial n} \quad (28)$$

$$= -\frac{\phi_{\max} - \phi_{\min}}{\rho_L - \rho_G} \frac{\phi_{s1}}{\kappa_f}, \quad (29)$$

上式は、濡れ性境界条件が order parameter ϕ に関する Neumann 条件であることを意味している。つまり、濡れ性境界条件は、 $\partial \phi / \partial n$ をパラメータとして与えることで表現される。静的接触角 $\theta_S [\text{deg}]$ と $\partial \phi / \partial n$ は、

$$\begin{cases} \frac{\partial \phi}{\partial n} < 0 & \text{for } \theta_S < 90^\circ, \\ \frac{\partial \phi}{\partial n} = 0 & \text{for } \theta_S = 90^\circ, \\ \frac{\partial \phi}{\partial n} > 0 & \text{for } \theta_S > 90^\circ, \end{cases} \quad (30)$$

の関係がある。さらに、Briant ら (3) は壁面近傍の微分に関して、経験的に以下の近似式を用いている。まず、壁面上の二階微分には以下の差分近似を用いる。

$$\left. \frac{\partial^2 \phi}{\partial n^2} \right|_{k=0} \approx \frac{1}{2\Delta x} \left(-3 \left. \frac{\partial \phi}{\partial n} \right|_{k=0} + 4 \left. \frac{\partial \phi}{\partial n} \right|_{k=1} - \left. \frac{\partial \phi}{\partial n} \right|_{k=2} \right). \quad (31)$$

一方、壁面の一つ隣の格子 ($k = 1$) の一階および二階微分には、二次精度の中心差分近似を用いる。さらに、その隣の格子 ($k = 2$) の一階微分には以下の式を用いる。

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial n} \right|_{k=2} \approx \frac{3\phi|_{k=2} - 4\phi|_{k=1} + \phi|_{k=0}}{2\Delta x}. \quad (32)$$

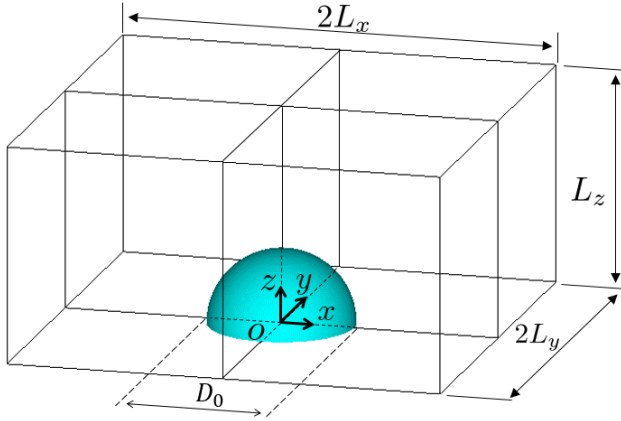


Fig. 2: Computational domain of a droplet on a solid surface.

つまり、本計算では差分近似を行う際に、できるだけ壁面上の格子点 ($k = 0$) における値を用いることにした。

先で述べたように、LKS では差分法や有限要素法で用いられるような境界条件をそのまま用いることが出来る。しかし、固体壁面上の order parameter ϕ を式 (28) によって計算すると、質量の保存が良くないことがわかった。そこで、本研究では質量保存性を保つために、mirror 条件を参考に固体壁面上の order parameter ϕ を求めた。下壁面を例に挙げると、壁面上の order parameter $\phi(\mathbf{x}, t + \Delta t)$ を式 (2) で求める際に未知となる $f_i^{\text{eq}}(\mathbf{x} - \mathbf{c}_i \Delta x, t)$ を、mirror 条件より、

$$\begin{cases} f_6^{\text{eq}}(\mathbf{x} - \mathbf{c}_6 \Delta x, t) = f_7^{\text{eq}}(\mathbf{x} - \mathbf{c}_7 \Delta x, t), \\ f_8^{\text{eq}}(\mathbf{x} - \mathbf{c}_8 \Delta x, t) = f_{12}^{\text{eq}}(\mathbf{x} - \mathbf{c}_{12} \Delta x, t), \\ f_9^{\text{eq}}(\mathbf{x} - \mathbf{c}_9 \Delta x, t) = f_{13}^{\text{eq}}(\mathbf{x} - \mathbf{c}_{13} \Delta x, t), \\ f_{10}^{\text{eq}}(\mathbf{x} - \mathbf{c}_{10} \Delta x, t) = f_{14}^{\text{eq}}(\mathbf{x} - \mathbf{c}_{14} \Delta x, t), \\ f_{11}^{\text{eq}}(\mathbf{x} - \mathbf{c}_{11} \Delta x, t) = f_{15}^{\text{eq}}(\mathbf{x} - \mathbf{c}_{15} \Delta x, t), \end{cases} \quad (33)$$

と仮定する。このようにして、未知の $f_i^{\text{eq}}(\mathbf{x} - \mathbf{c}_i \Delta x, t)$ を仮定することで、固体壁面上の order parameter $\phi(\mathbf{x}, t + \Delta t)$ を式 (2) により求める。

2.4 数値計算の手順

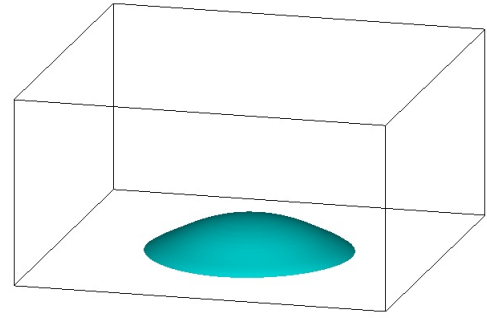
改良二相系 LBM の計算アルゴリズムを以下にまとめる。

Step 1. 従来の二相系 LBM (2) と同様に、式 (2) を用いて order parameter $\phi(\mathbf{x}, t + \Delta t)$ を求める。このとき、固体壁面上では、未知である $f_i^{\text{eq}}(\mathbf{x} - \mathbf{c}_i \Delta x, t)$ は mirror 条件より値を仮定し、式 (2) により order parameter $\phi(\mathbf{x}, t + \Delta t)$ を求める。また、式 (9), (17) より $\phi(\mathbf{x}, t + \Delta t)$ を用いて、各相の密度 $\rho(\mathbf{x}, t + \Delta t)$ と粘性係数 $\mu(\mathbf{x}, t + \Delta t)$ を求める。

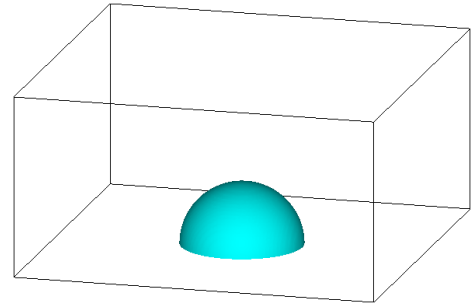
Step 2. 式 (11) – (12) を用いて圧力 $p(\mathbf{x}, t + \Delta t)$ を反復的に計算する。

Step 3. 更新された圧力の情報を用いて、式 (15) から流速 $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t + \Delta t)$ を求める。

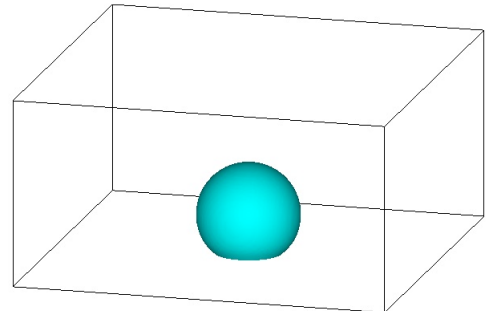
Step 4. $t = t + \Delta t$ として 1 タイムステップ進め、Step 1 に戻る。



(a)



(b)



(c)

Fig. 3: Droplet shapes at steady state for (a) $\partial\phi/\partial z|_{z=0} = -2.50 \times 10^{-2}$, (b) $\partial\phi/\partial z|_{z=0} = 0.00$ and (c) $\partial\phi/\partial z|_{z=0} = 2.50 \times 10^{-2}$.

3. 液滴の静的接触角の検証

本手法では、固体壁面において order parameter ϕ に関する Neumann 条件を規定することで壁面の濡れ性境界条件を表現している。そこで、本章では様々な $\partial\phi/\partial n$ の値の計算を行い、静的接触角に関する検証を行った。

3.1 計算条件

Fig. 2 に示すような $2L_x \times 2L_y \times L_z$ の計算領域 ($2L_x = 120\Delta x, 2L_y = 120\Delta x, L_z = 60\Delta x$) において、 $(x, y, z) = (0, 0, 0)$ を中心とする直径 D_0 の半球状の液滴を配置する。ただし、以下の計算では、計算負荷低減のため、 $x = 0$ および $y = 0$ の境界に鏡面境界条件を適用し、 $x \geq 0$ および $y \geq 0$ となる大きさ $L_x \times L_y \times L_z$ の領域のみを実際の計算領域とした。 $z = 0$ および $z = L_z$ の面を濡れ性を

考慮したすべりなし境界条件, その他の面を鏡面境界条件とした.

パラメータの値を $D_0 = 40\Delta x$, $\rho_L = 800$, $\rho_G = 1$, $\mu_L = 6.26 \times 10^{-1}\Delta x$, $\mu_G = 1.97 \times 10^{-3}\Delta x$, $\sigma = 1.71 \times 10^{-4}\Delta x$, $g\Delta x = 0$ とした. また, 圧力計算の反復回数は 2 回, $\omega_{\max} = 200$, $\lambda = 1$, $\theta_M = 0.01\Delta x$ とする. その他の計算パラメータは, $a = 1$, $b = 1$, $T = 2.93 \times 10^{-1}$, $\kappa_f = 0.06(\Delta x)^2$ とする. このとき, $\phi_{\max} = 4.031 \times 10^{-1}$, $\phi_{\min} = 2.638 \times 10^{-1}$ である.

これらの条件に対して, $\partial\phi/\partial z|_{z=0} = 0$ として, σ を $2500\Delta t \geq \sigma \geq 7500\Delta t$ にかけて線形的に印加した後, $t = 10000\Delta t$ まで計算し平衡状態の液滴を作成する. その後, $t = 10001\Delta t$ から $t = 11000\Delta t$ にかけて任意の $\partial\phi/\partial z|_{z=0}$ を値を線形的に付加させる. 本計算では, $\partial\phi/\partial z|_{z=0} = -2.50 \times 10^{-2} \sim 2.50 \times 10^{-2}$ の間で値を変化させて計算を行った.

3.2 検証

本計算結果の典型的な例として $\partial\phi/\partial z|_{z=0} = -2.50 \times 10^{-2}, 0.00, 2.50 \times 10^{-2}$ に対する定常状態の液滴の様子を Fig. 3 に示す. この図より, (a) $\partial\phi/\partial z|_{z=0} = -2.50 \times 10^{-2}$ では壁面に濡れ広がる液滴の様子から壁面が親水性となっており, 反対に (c) $\partial\phi/\partial z|_{z=0} = 2.50 \times 10^{-2}$ では, 壁面にはじかれる液滴の様子から壁面が疎水性となっていることが定性的にわかる. 中間の値である (b) $\partial\phi/\partial z|_{z=0} = 0.00$ では液滴が半球状のままであることがわかる.

また, 各 $\partial\phi/\partial z|_{z=0}$ の値に対する本計算結果を Fig. 4 に示す. この図において, 横軸は $\partial\phi/\partial z|_{z=0}$, 縦軸は静的接触角 θ_S [deg] である. 点は本計算結果, 実線は Young の法則⁽¹²⁾ から得られた理論値である. この結果から, $\partial\phi/\partial z|_{z=0} < 0$ では $\theta_S < 90^\circ$ となり壁面が親水性に, $\partial\phi/\partial z|_{z=0} > 0$ では $\theta_S > 90^\circ$ となり壁面が疎水性になることがわかる. さらに, $30^\circ \leq \theta_S \leq 120^\circ$ では本計算結果が理論値と良く一致していることがわかる.

以上の結果より, $\partial\phi/\partial z|_{z=0}$ の値を変化させることで, $30^\circ \leq \theta_S \leq 120^\circ$ の静的接触角が再現可能であることがわかった.

4. 固体壁面に衝突する単一液滴の妥当性検証

液滴と濡れ性境界条件を適用した固体壁面の相互作用に関する本計算の妥当性を調べるために, 単一液滴が壁面に衝突する場合について, 液滴の濡れ直径, 動的接触

角および接触線の移動速度の時間変化を, Sikalo ら⁽¹³⁾ による実験結果と比較した.

4.1 計算条件

Fig. 5 に示すような $2L_x \times 2L_y \times L_z$ の計算領域 ($2L_x = 100\Delta x, 2L_y = 100\Delta x, L_z = 60\Delta x$) において, $(0, 0, L_z/2)$ を中心とする直径 D_0 の液滴を配置する. ただし, 以下の計算では, 計算負荷低減のため, $x = 0$ および $y = 0$ の境界に鏡面境界条件を適用し, $x \geq 0$ および $y \geq 0$ となる大きさ $L_x \times L_y \times L_z$ の領域のみを実際の計算領域とした. $z = 0$ および $z = L_z$ の面を濡れ性を考慮したすべりなし境界条件, その他の面を鏡面境界条件とした. 以下では, 上記計算領域において, 直径 $D_0 (= 2R)$ の液滴が, 静的接触角 θ_S となるような固体壁面へ衝突速度 V_0 で衝突する場合を想定している. なお, 重力加速度は $-z$ 方向に作用し, その大きさを g とした.

Sikalo ら⁽¹³⁾ の実験結果と比較するため, 気相として空気, 液相としてグリセリンを想定し, パラメータの値を $D_0 = 40\Delta x$, $V_0 = 5.22 \times 10^{-4}, 7.05 \times 10^{-4}$, $\rho_L = 800$, $\rho_G = 1$, $\mu_L = 6.26 \times 10^{-1}\Delta x$, $\mu_G = 1.97 \times 10^{-3}\Delta x$, $\sigma = 1.71 \times 10^{-4}\Delta x$, $g\Delta x = 1.52 \times 10^{-10}$, $\theta_S = 90^\circ$ ($\partial\phi/\partial n = 0.00$) とし, 壁面衝突時の液滴の挙動において重要であるとされる二つの無次元数, ウェーバー数 $We = \rho_L D_0 V_0^2 / \sigma$ およびレイノルズ数 $Re = \rho_L D_0 V_0 / \mu_L$ が $(We, Re) = (51, 27), (93, 36)$ の 2 ケースの計算を行った. その他の計算パラメータは前問題と同様である. 本計算では液相と気相の密度比が Sikalo らの実験条件とわずかに異なるが, We, Re が一致するように液相粘度 μ_L , 界面張力 σ を変化させている.

これらの条件に対して, 前問題と同様にして平衡状態の液滴を作成する. 次に, $100\Delta t$ にかけて線形的に速度を印加させ, 液滴が下壁面に接するまで一定の速度 V_0 を与え続ける.

4.2 検証

本計算結果と Sikalo ら⁽¹³⁾ による実験結果を Fig. 6 に示す. この図において, 横軸は無次元時間 (衝突時の時刻を 0 としている), 縦軸は無次元濡れ直径 d/D_0 , 動的接触角 θ_D および接触線の移動速度 \dot{U} であり, 実線は本計算結果, 点は Sikalo らによる実験結果である. なお, 実験結果の物理量はすべて有次元量を用いて整理されているため, Fig. 6 では, 本計算結果を有次元系に変換して表示している.

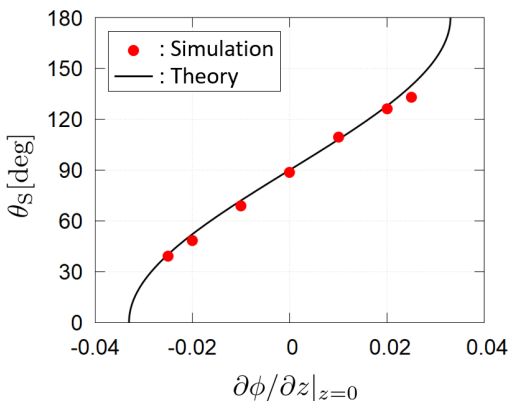


Fig. 4: Static contact angles for various $\partial\phi/\partial z|_{z=0}$.

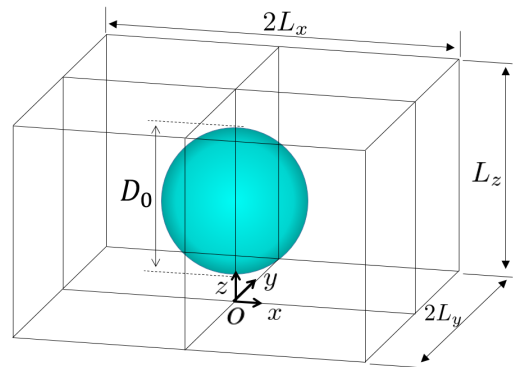
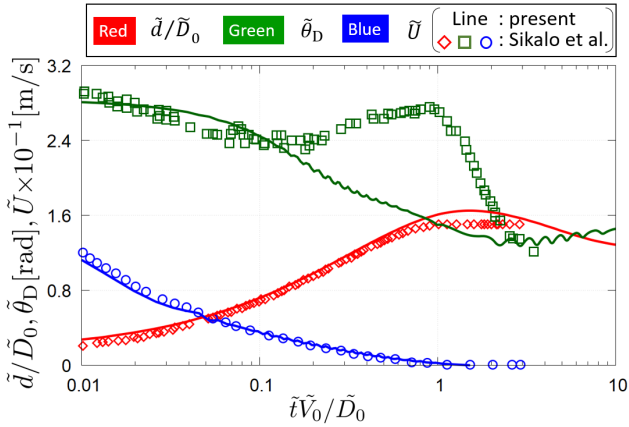
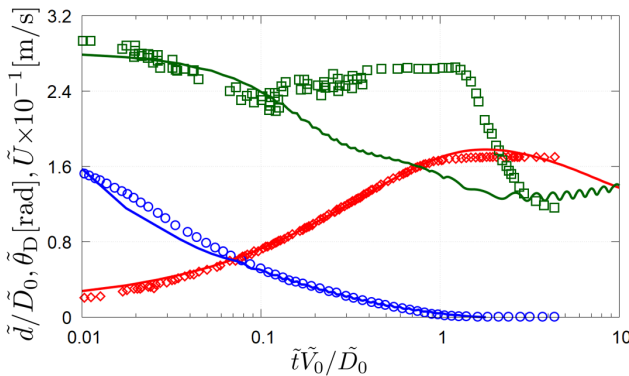


Fig. 5: Computational domain of droplet impact on a solid surface.



(a)



(b)

Fig. 6: Time variations of the spread diameter ratio \tilde{d}/\tilde{D}_0 , dynamic contact angle $\tilde{\theta}_D$ and contact line velocity \tilde{U} : (a) $We = 51, Re = 27$; (b) $We = 93, Re = 36$.

Fig. 6 から、(a) と (b) のいずれのケースにおいても、無次元濡れ直径 \tilde{d}/\tilde{D}_0 および接触線の移動速度 \tilde{U} はよく一致していることがわかった。また、動的接触角 $\tilde{\theta}_D$ についても、変化の仕方やタイミングに違いが見られるものの、初期の値や収束値はよく一致しており、いずれの計算結果も液滴挙動の傾向を捉えられていることがわかった。したがって、本計算では、固体壁面衝突時の液滴の動的な挙動が再現可能であると考えられる。なお、動的接触角 $\tilde{\theta}_D$ の挙動の差異については、本計算で用いた濡れ性境界条件により、固体壁面上での静的接触角を一定値に強制せざるを得ないために、動的接触角の測定を壁面から少し離れた点で行っていること（付録 A 参照）が原因として考えられる。

5. 結言

改良二相格子ボルツマン法⁽⁶⁾に、Briant ら^(3,4)が提案した濡れ性境界条件を適用し、本計算手法の妥当性を検証した結果、以下の結論が得られた。

- ・ 本手法の濡れ性境界条件の妥当性を確かめるため、様々な $\partial\phi/\partial n$ の値に対して固体壁面上の液滴の計算を行ったところ、 $\partial\phi/\partial n$ の値に応じて静的接触角 θ_S が変化し、静的接触角 θ_S が $30^\circ \leq \theta_S \leq 120^\circ$ の範囲で親水性および疎水性の固体壁面を再現可能であることがわかった。

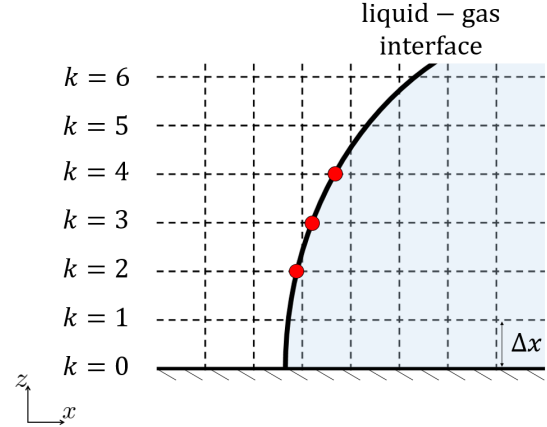


Fig. 7: Points used to calculate the dynamic contact angle θ_D .

- ・ 単一液滴が固体壁面に衝突する場合について、液滴の濡れ直径、動的接触角、接触線の移動速度の時間変化を Sikalo ら⁽¹³⁾の実験結果と比較したところ、動的接触角の時間変化に差異があるものの、濡れ直径、接触線の移動速度の時間変化はよく一致しており、Sikalo ら⁽¹³⁾の実験結果の傾向を捉えている。よって、本計算は単一液滴の固体壁面衝突時の挙動を再現可能であることがわかった。

付録 A 動的接触角の測定方法

本付録では、第 3 節における動的接触角 θ_D の測定方法について説明する。Fig. 7 のような固体壁面上の界面を考える。ここで、 k は界面の測定点を表す。本研究では、 $k = 2$ での接線の傾きを 3 点片側差分近似から求めることにより、動的接触角 θ_D を式 (34) のように定義した。

$$\theta_D = -\arctan\left(\frac{2\Delta x}{-x|_{k=4} + 4x|_{k=3} - 3x|_{k=2}}\right). \quad (34)$$

測定点 k の選び方については、出来るだけ壁面に近いものを選んだ方がよいが、例えば、 $k = 0, 1, 2$ のように壁面に近すぎる組み合わせを選んだ場合、濡れ性境界条件として静的接触角 θ_S を固体壁面上で強制しているため、 θ_D は常に θ_S に近い値になってしまう。そこで、本研究では、動的接触角 θ_D を求める際に用いる測定点 k の組み合わせとして、Sikalo ら⁽¹³⁾の実験結果と良い一致を示した、 $k = 2, 3, 4$ を選んだ。

参考文献

- (1) Tanaka, Y., Washio, Y., Yoshino, M. and Hirata, T., “Numerical simulation of dynamic behavior of droplet on solid surface by the two-phase lattice Boltzmann method,” *Comput. Fluids*, 40 (2011), pp. 68–78.
- (2) 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.*, 198 (2004), pp. 628–644.

- (3) Briant, A. J., Papatzacos, P. and Yeomans, J. M., "Lattice Boltzmann simulations of contact line motion in a liquid-gas systems," *Philos. Trans. R. Soc. Lond. A*, 360 (2002), pp. 485–495.
- (4) Briant, A. J., Wangner, A. J. and Yeomans, J. M., "Lattice Boltzmann simulations of contact line motion. I. Liquid-gas systems," *Phys. Rev. E*, 69 (2004), 031602.
- (5) Inamuro, T., Yokoyama, T., Tanaka, K. and Taniguchi, M., "An improved lattice Boltzmann method for incompressible two-phase flows with large density differences," *Comput. Fluids*, 137 (2016), pp. 55–69.
- (6) Inamuro, T., Echizen, T. and Horai, F., "Validation of an improved lattice Boltzmann method for incompressible two-phase flows," *Comput. Fluids*, (2018), in press.
- (7) Brackbill, J. U., Kothe, D. B. and Zemach, C., "A continuum method for modeling surface tension," *J. Comput. Phys.*, 100 (1992), pp. 335–354.
- (8) Inamuro, T., "A lattice kinetic scheme for incompressible viscous flows with heat transfer," *Philos. Trans. R. Soc. Lond. A*, 360 (2002), pp. 477–484.
- (9) Cahn, J. W., "Critical point wetting," *J. Chem. Phys.*, 66 (1977), pp. 3667–3672.
- (10) Gennes, P. G., "Wetting: Statics and dynamics," *Rev. Mod. Phys.*, 57 (1985), pp. 827–863.
- (11) Seppacher, P., "Moving contact lines in the Cahn-Hilliard theory," *Int. J. Eng. Sci.*, 34 (1996), pp. 977–992.
- (12) Young, T., "An essay on the cohesion of fluids," *Philos. Trans. R. Soc. Lond. A.*, 95 (1805), pp. 65–87
- (13) Sikalo, S., Tropea, C. and Ganić, E. N., "Dynamic wetting angle of a spreading droplet," *Exp. Therm. Fluid Sci.*, 29 (2005), pp. 795–802.
- (14) Lee, M. W., Kang, D. K., Yoon, S. S. and Yarin, A. L., "Coalescence of two drops on partially wettable substrates," *Langmuir*, 28 (2012), pp. 3791–3798.