

# GNBC-Front-tracking 法による角を考慮した動的な濡れのシミュレーション

## Dynamic wetting simulation considering corners by GNBC-Front-tracking method

- 平下 尚悟, 関大院, 大阪府吹田市山手町 3 丁目 3 番 3 5 号, E-mail: k007014@kansai-u.ac.jp  
山本 恭史, 関西大, 大阪府吹田市山手町 3 丁目 3 番 3 5 号, E-mail: yamayasu@kansai-u.ac.jp  
Shogo Hirashita, Graduate School of Science and Engineering, Kansai University,  
3-3-35, Yamate-cho, Suita-shi, Osaka  
Yasufumi Yamamoto, Kansai University, 3-3-35, Yamate-cho, Suita-shi, Osaka

In this study, we tried to express wettability of the wall with a corner by GNBC, which is a contact line movement model, to reproduce the interface getting over the corner and pinning. When there are corners on the solid surface, the behavior of the interface is completely different depending on the wettability. We examined how to set the boundary conditions on the wall near a corner. We also examined how to determine which surface has a contact line when a contact line exists at the corner. A droplet ejected from a small-outer-diameter nozzle was simulated. It was confirmed that the GNBC can reproduce different contact line behaviors, pinned at or getting over the corner, depending on the wettability.

### 1. 緒言

気体と液体が混在する混相流において、微小な液滴を考えると重力や慣性力の効果より界面張力が支配的である。そのようなスケールでは濡れ性の影響が顕著に表れる。そこで当研究室では分子レベルのシミュレーションに基づいた接触線移動モデルである GNBC を用いることによって高精度に濡れ現象を再現してきた。例えば、Yamamoto ら<sup>(1)</sup>は Front-tracking 法に GNBC を組み込み、毛細管内を上昇する界面挙動を再現した。

しかし、実際の工業製品等は滑らかな固体面のみで構成されていない。そこで本研究では角に着目する。Chang ら<sup>(2)</sup>は濡れ性の良いノズルと悪いノズルから液滴を流入させた際の液滴生成の過程を観察した。それによると濡れ性が良い場合、濡れ広がりによって接触線が角を乗り越えてノズルの外側壁面を上昇する様子が報告されている。一方、濡れ性が悪い場合は、ピン止めされ角を乗り越えない。Takada ら<sup>(3)</sup>は Phase-field 法を用いて凹凸な固体表面上を転がる液滴の挙動を再現した。それにより表面凹凸形状により接触線移動を制御し、液滴の挙動を制御できる可能性が報告されている。

そこで本研究では高精度な接触線移動モデルである GNBC を用いて角を表現し、角によって生じる濡れ性の違いをシミュレーションによって再現することを目的とする。本稿では、角を表現するための境界条件の取り扱いや接触線が角にあるときの処理方法について詳細に記述する。

### 2. 計算手法

#### 2-1 計算対象

本研究では、ノズルから液滴を噴出する様子をシミュレーションする。計算はノズルの中心を対称軸とする軸対称円筒座標系で行う。半径方向に  $x$  軸をとり、鉛直方向に  $y$  軸をとる。本研究では  $x$  方向速度を  $u$  とし、 $y$  方向速度を  $v$  とする。

#### 2-2 Front-tracking 法 (FT 法)

Fig.1 に Front-tracking 法の概略図を示す。FT 法では界面をマーカーで追跡して、マーカーが構成する線分要素により界面情報である接線ベクトル、法線ベクトルを算出する。そして法線ベクトルを基に指標関数を各矩形格子上で求め、気体・液体等の複数の流体を含む系を、粘度・密度が場所によって異なる 1 つの流体として扱う。

FT 法を用いる利点は、界面をマーカーの線分要素で表現するた

め、曲率を用いずに界面を構成するマーカーの接線ベクトルから界面張力による影響が求められる。それにより三相会合点近傍においても界面形状の仮定を用いずに不都合なく求められることである。そのため、濡れを伴う計算では経験式を用いずに動的接触角を表すことができる。

界面のマーカー速度  $\mathbf{u}_s$  は重み関数を用いて、周辺格子速度から補間して求める。

$$\mathbf{u}_s(\mathbf{x}_s) = \sum_{|\mathbf{x}_{i,j} - \mathbf{x}_s| < 2\Delta} D(\mathbf{x}_{i,j} - \mathbf{x}_s) \mathbf{u}(\mathbf{x}_{i,j}) \Delta^2 \quad (1)$$

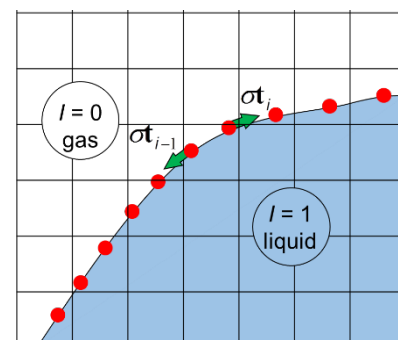
重み関数  $D$  には Peskin<sup>(4)</sup>の近似デルタ関数  $d$  を各方向の積として用いる。

$$d(x_i - x_{cl}) = \frac{1}{4\Delta} \left\{ 1 + \cos \left( \pi \frac{x_i - x_{cl}}{2\Delta} \right) \right\} \quad (2)$$

ここで  $\Delta$  は格子幅である。

#### 2-3 一般化ナビエ境界条件 (GNBC)

固体面上に滑り無し境界条件を課すと、接触線すなわち固体表面に存在する気液界面のマーカーが動かなくなるため、接触線移



- : Front marker
- $I$  : Indicator function
- $\mathbf{t}_i$  : The unit tangent at the marker point

Fig.1 Front-tracking method for interfacial effect and indicator

動モデルを用いる。接触線に滑り速度を与えるため、Qian ら<sup>6)</sup>によって考案された一般化ナビエ境界条件 (GNBC) を用いる。これは接触線近傍の粘性応力に加えて非平衡ヤング応力に比例すると考えられたものである。

接触線移動モデルにより接触線に滑り速度を与えると、接触線近傍の粘性応力は非平衡ヤング応力に比べ十分小さくなるため、Yamamoto ら<sup>6)</sup>は GNBC の滑り抵抗を非平衡ヤング応力のみと簡略化した。そのとき、無次元の接触線移動速度  $Ca$  は

$$Ca = \chi(\cos \theta_s - \cos \theta_d) \quad (3)$$

で表される。 $\theta_s$ 、 $\theta_d$  はそれぞれ、静的および動的接触角であり、 $\chi$  は無次元滑りパラメータである。式(1)の補間によって、接触線のマーカーがこの速度になるように、近傍の壁面上格子点の速度をデルタ関数で分配して表現する。

$$u_{slip(i)} = Ca \frac{\sigma}{\mu} d(x_i - x_{cl}) \quad (4)$$

で表される。ノズルの側面の場合は、

$$v_{slip(j)} = Ca \frac{\sigma}{\mu} d(y_j - y_{cl}) \quad (5)$$

となる。ここで  $x_{cl}$ 、 $y_{cl}$  は接触線位置、 $x_i$ 、 $y_j$  は格子座標であり、接触線の位置が格子に対してどのような相対位置にあっても式(3)の滑り速度を表現できる。ただし、そのために、式(2)の近似デルタ関数を用いて無理矢理 4 格子幅に広げるため、その範囲に角がある場合は特別な扱いをする必要がある。

### 3. 壁面と角の境界条件の設定方法

#### 3-1 角における接触線位置の判断

本研究では GNBC を用いているが、この接触線移動モデルは 1 次元的な速度を与えるものであり、本研究の目的である角を乗り

越えて濡れ広がる様子を再現するためには何らかの判断基準によって速度を与える方向を切り替える必要がある。

そこで本研究では接触線が角にある場合に限って、接触線の位置がどちらに属するのかを判断する基準を設けた。Fig.2 に判断方法の概略図を示す。鉛直面からの動的な接触角を  $\theta_d$ 、水平面からの動的な接触角を  $\theta_{fd}$  とする。

(a) のように水平面からの動的な接触角  $\theta_{fd}$  が水平面からみた静的な接触角  $\theta_s$  よりも小さい場合は、接触線が鉛直面にあるとする。このとき滑り速度は鉛直方向のみに生じ、水平方向には生じない。一方で、(b) のように水平面からの動的な接触角  $\theta_{fd}$  が水平面からみた静的な接触角  $\theta_s$  よりも大きい場合は、接触線が水平面にあるとする。このとき滑り速度は水平方向のみに生じ、鉛直方向には生じない。(a) から (b) に推移することで接触線に与える滑り速度が鉛直方向から水平方向に切り替わり、角を乗り越えるような接触線の移動が表現できる。

#### 3-2 速度境界条件

本研究では、ノズル上を濡れ広がる液滴を表現するために滑りを考慮した境界条件を用いる必要がある。特にノズルの角近傍での境界条件を考える場合、滑りを表現するための境界条件と固体面を表現するための非浸透条件が共存してしまい表現できなくなる。そこで本研究では、角近傍におけるマーカー速度補間を無理なく行うために新たに 2 次元配列  $v_m$  を用いる。

まず角近傍かそうでない場合について説明する。本研究では、滑り速度を近似デルタ関数を用いて 4 格子幅で拡散しているために、滑りを表現するために接触線位置から  $\pm 2$  格子が必要である。本研究では、 $\pm 2$  格子以内に角を表す格子が存在する場合を角近傍とし、それ以外を角近傍でないとしてそれぞれ境界条件を設定した。その詳細を以下に示す。

#### ・角近傍でない場合

Fig.3 に角から離れた平面部における境界条件の与え方を示す。ここでは鉛直な壁面を例として考える。流体に隣接する格子では、流体の速度場を計算するための境界条件に界面を表すマーカーを計算するための増加分を考慮する必要がある。ここで流体の速度場を計算するための境界条件には、GNBC によって滑り速度が達成されるように固体内セルの速度を以下のように与える。ここで格子番号  $iw$  は固体内の特定のセル (流体に隣り合う格子) を指す。

$$v_{iw,j} = -v_{iw-1,j} + 2v_{slip(j)} \quad (6)$$

Yamamoto ら<sup>6)</sup>によると壁面に一点に働く力を 4 格子に無理矢理分配し重み付き平均にすると、重み関数の性質により滑り速度の値が  $3/4$  倍される。そこで本研究で流体速度計算のための境界条件から、ずれる分だけを  $v_m$  で表し、マーカー速度の補間の計算の際に加算することで対応するようにした。マーカー速度の補間に必要な壁面内の仮想セルの速度は以下となる。

$$v_{iw,j} = -v_{iw-1,j} + 2\frac{4}{3}v_{slip(j)} \quad (7)$$

$$v_{iw+1,j} = -v_{iw-2,j} + 2\frac{4}{3}v_{slip(j)} \quad (8)$$

これを、流体計算に用いる分と、マーカー補間に追加する分に分けて表現すると以下となる。

$$v_{iw,j} = -v_{iw-1,j} + 2v_{slip(j)} \quad (9)$$

$$v_{iw+1,j} = 0 \quad (10)$$

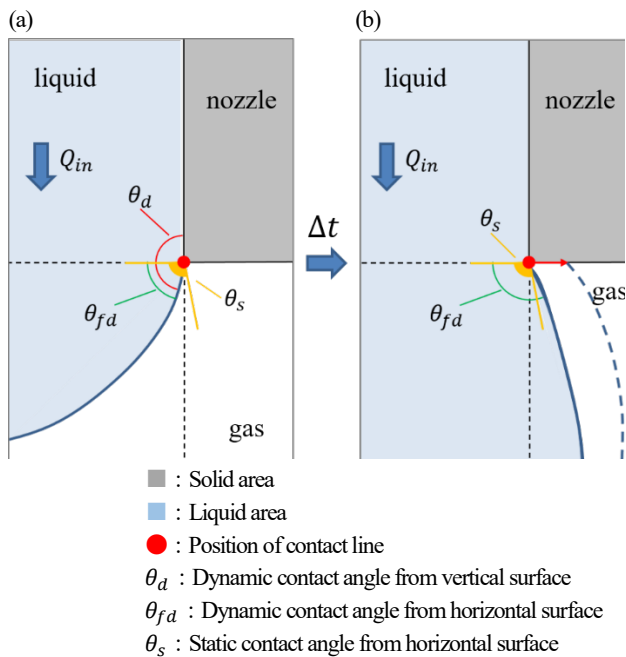


Fig.2 Treatment of contact line position. (a) Contact line on the vertical surface, (b) Contact line on the horizontal surface.

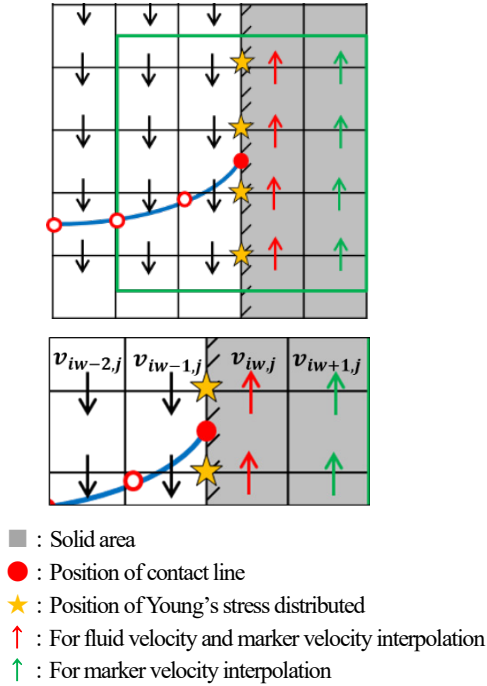


Fig.3 Boundary condition considering slip velocity at the flat

$$v_m(iw,j) = \frac{2}{3} v_{slip(j)} \quad (11)$$

$$v_m(iw+1,j) = -v_{(iw-2,j)} + 2\frac{4}{3} v_{slip(j)} \quad (12)$$

#### ・角近傍の場合

Fig.4 に角近傍における境界条件の与え方を示す。接触線が角の格子にある場合と角から 1 格子分離した格子に接触線がある場合の 2 パターンを示している。Fig.4 のような y 方向速度を考えると、接触線が角近傍にある場合に非浸透条件を満たしつつ、マーカーに滑りを満足に与えられるような境界条件の設定は困難である。そこで本研究では、 $v_m$  を利用して、それぞれを満足できるように考えた。また接触線位置が角の格子から 1 格子離れた格子であるかどうかで、格納する必要がある値の場所が変化するためパターンごとに丁寧に処理する必要がある。

(a) のように接触線が角の格子にある場合、固体外セルにマーカー速度を補間するための 2 次元配列を用意する。流体の速度場を求めるための境界条件には非浸透条件( $v_{(iw,LY)} = 0$ )を与える。LY はノズルの下面に位置する固体セルの格子番号である。一方、マーカー速度の補間には鉛直面の滑りを 4 格子幅で表現するため、2 次元配列に以下のデータを用意して、流体速度と合わせて使用する。

$$v_m(iw,LY) = -v_{iw-1,LY} + 2\frac{4}{3} v_{slip(LY)} \quad (13)$$

$$v_m(iw+1,LY) = -v_{iw-2,LY} + 2\frac{4}{3} v_{slip(LY)} \quad (14)$$

$$v_m(iw+1,LY-1) = -v_{iw-2,LY-1} + 2\frac{4}{3} v_{slip(LY-1)} \quad (15)$$

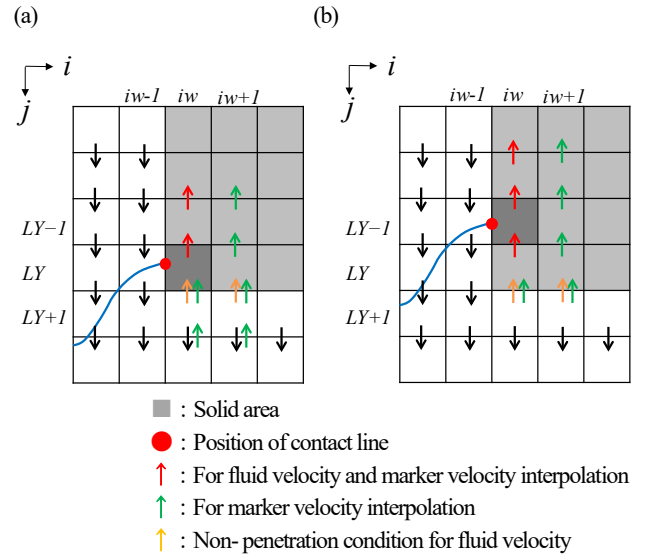


Fig.4 Boundary condition considering slip velocity at the near corner. (a) Contact line at the corner grid, (b) Contact line at the grid away one grid from the corner.

$$v_m(iw+1,LY-2) = -v_{iw-2,LY-2} + 2\frac{4}{3} v_{slip(LY-2)} \quad (16)$$

分配先が流体内部となる場合、滑り速度の分のみを考慮する。

$$v_m(iw,LY+1) = 2\frac{4}{3} v_{slip(LY+1)} \quad (17)$$

$$v_m(iw+1,LY+1) = 2\frac{4}{3} v_{slip(LY+1)} \quad (18)$$

一方で、(b) のように角の格子から 1 格子離れた格子に接触線がある場合は、流体内部セルに値を与える必要がないので、(13)(14) の形で対応できる。

#### 4. 計算条件

Chang ら<sup>(2)</sup>の実験を参考に、ノズルの寸法を内径 0.8mm、外径

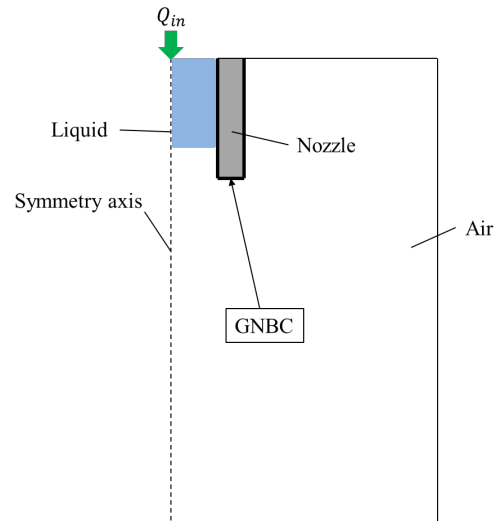
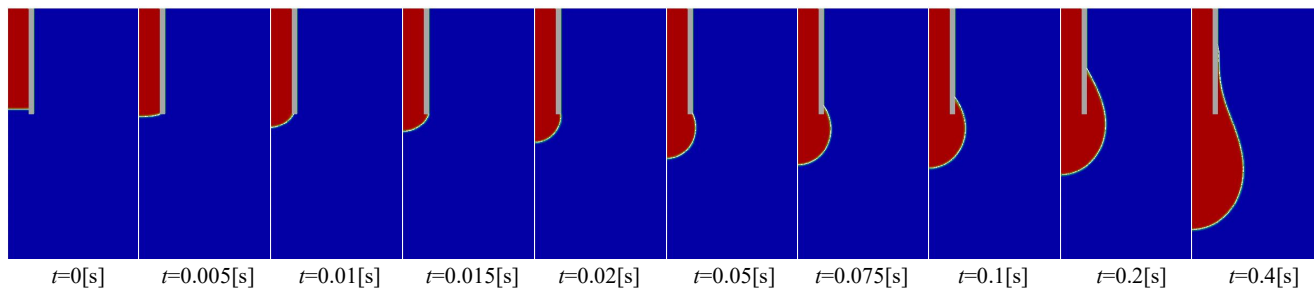
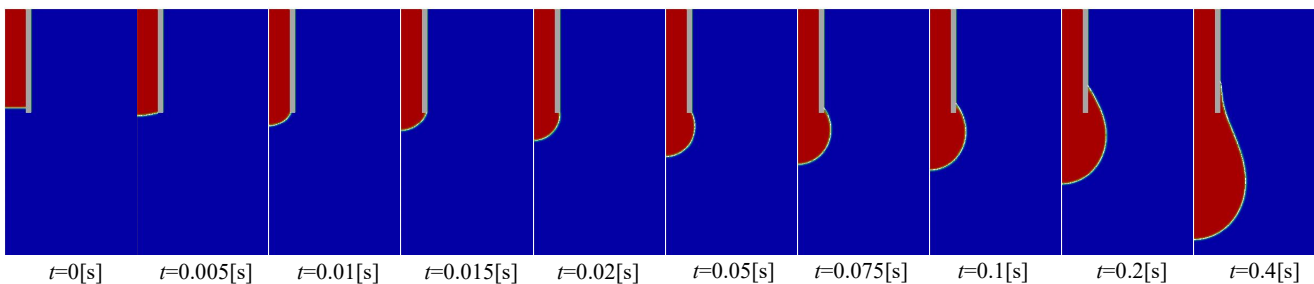


Fig.5 Calculation configuration



(a) Calculation result when static contact angle equal  $10^\circ$



(b) Calculation result when static contact angle equal  $30^\circ$

Fig.6 Calculation result of good wettability

1.0mm, 厚み 0.1mm, 長さを 2mm とし,  $4\text{mm} \times 15.36\text{mm}$  の計算領域を設定する. Fig.5 に計算対象の図を示す. Fig.5 に示すように GNBC をノズル周りの壁面に組み込む. そしてノズルより実験と同等の流入速度  $50\text{mL/h}$  で液体を流出させる. 液体には動粘度が  $10\text{cSt}$  であるシリコンオイルを仮定する. 密度は  $930.0\text{kg/m}^3$ , 粘度は  $1.0 \times 10^{-3}\text{Pa}\cdot\text{s}$ , 表面張力は  $20.1 \times 10^{-3}\text{N/m}$  とする. 静的接触角  $\theta_s$  は濡れ性が良い場合として  $10^\circ$ ,  $30^\circ$  の 2 パターンで計算を行った. 一方で濡れ性が悪い場合として  $100^\circ$ ,  $130^\circ$  の 2 パターンで行った.

### 5. 計算結果

Fig.6 に濡れ性が良い場合である静的接触角  $10^\circ$ ,  $30^\circ$  の計算結果を示す. Fig.6 において, 赤の領域が液体を, 青の領域が空気を, 灰色部分がノズルを表している.

Fig.6 の計算結果では, 接触線がノズルの内側壁面を滑り, 角に到達すると接触線に与えられる滑り速度が切り替わりノズルの水平面部分を濡れ広がっているのが確認できる. その後, 接触線がノズルの外側の角まで移動し, 角でしばらく接触線が停滞し, ある程度液滴が成長するに伴って  $y$  軸方向に滑り速度が与えられ, 接触線が上昇していく様子が確認できる. このように接触線がノズルの壁面に沿って移動していることより, 滑り速度が角で不都合なく切り替わっていることが示された. 静的接触角が  $10^\circ$  と  $30^\circ$  の計算結果を比較すると,  $10^\circ$  の方がより接触線移動が速く, 角に差し掛かるのも早いことが確認できた. 一方で  $30^\circ$  は  $10^\circ$  に比べると接触線移動が遅く, そのため液滴の最下部が  $t=0.4\text{s}$  のときに  $30^\circ$  の方が低い位置にあり, 液滴が早く落下することが示唆される. このように GNBC を用いることで静的接触角の違いを表現できたと考えられる.

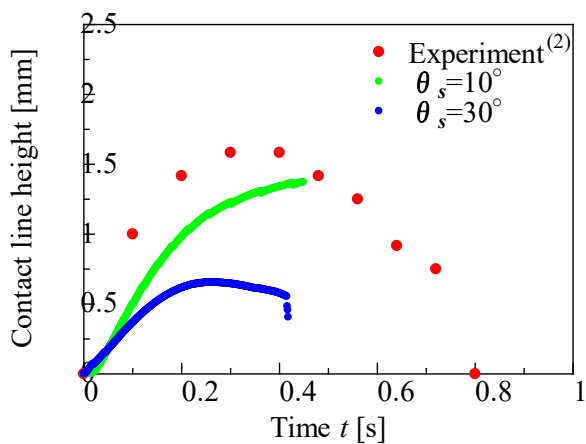


Fig.7 Contact line height from the corner ( $\chi = 0.01$ ), experimental data by Chang et al (2).

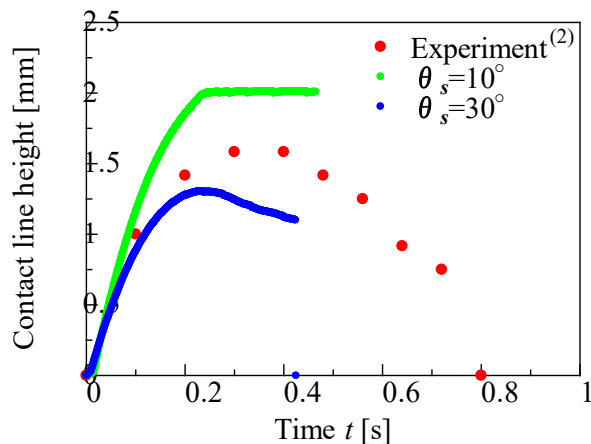
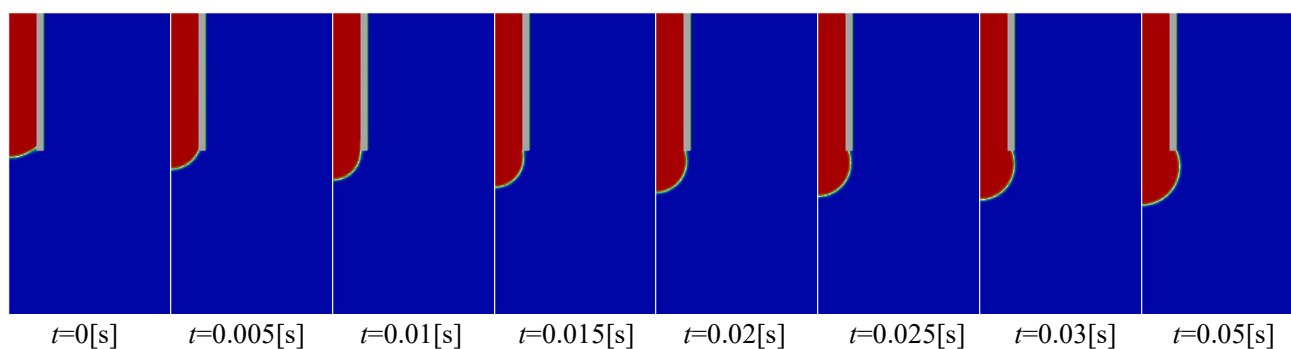
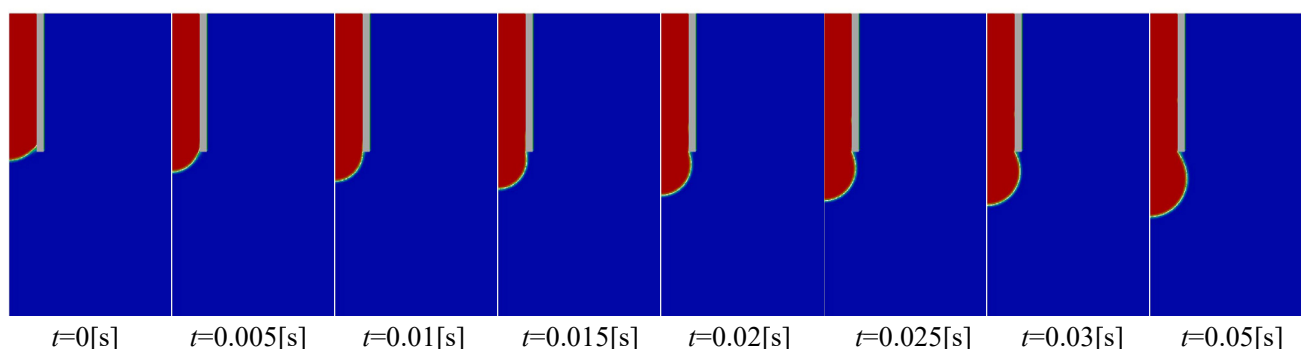


Fig.8 Contact line height from the corner ( $\chi = 0.05$ ), experimental data by Chang et al (2).



(a) Calculation result when static contact angle equal 100°



(b) Calculation result when static contact angle equal 130°

Fig.9 Calculation result of poor wettability

ノズルの水平面部と外壁がなす角からの接触線位置の  $y$  方向距離を接触線高さとする。接触線高さの推移を Fig.7 に示し、実験結果との比較を行う。シミュレーションにおける時刻は、滑り速度が  $y$  軸方向に与えられたときを 0s としてシフトした。Fig.7 に示したグラフより、静的接触角にかかわらず実験よりも濡れ広がっていないことが確認された。この原因として、ノズルの厚みが実験で用いたものよりも分厚い可能性が考えられる。厚みが大きいことによって、液滴生成の際に水平面を接触線が移動している際も液滴が成長し続ける。これにより実験よりも早い段階で重力の影響が支配的になってしまっていると考えられる。GNBC では、濡れ性の時間応答特性を滑りパラメータ  $\chi$  で表しているのので、 $\chi$  を 0.01 から 5 倍の 0.05 に変更して応答をよくしてみた。Fig.8 に  $\chi = 0.05$  のときの接触線高さの推移を示す。10° の計算結果では接触線が領域の端まで到達してしまった。30° の計算結果では実験に近い値を得ることができた。この結果より滑りパラメータと静的接触角の値を調整することで角を考慮した上で実験値に近い値を得ることが期待できる。

Fig.9 に濡れ性が悪い場合である静的接触角 100°, 130 の結果を示す。100° の計算結果では、接触線が一時的に角に留まり、ある程度液滴が大きくなるに伴ってゆっくりと水平面を接触線が移動していく様子が確認できた。その後、外壁面と水平面が成す角に留まりながら液滴が成長していく様子が確認できた。濡れ性が良い場合と異なりノズルの外壁を接触線が上昇するようなことはなかった。一方で、さらに濡れ広がりにくい 130° の計算結果では、接触線が内壁面側の角に到達し、その後接触線が角にピン止めされた状態で液滴が成長する様子が確認できた。このように角度によって接触線の挙動が異なる様子を再現できた。

以上のことから、GNBC を用いて角を表現しつつ、また角があることによって生じる静的接触角ごとの接触線の挙動の違いが再現できたと考える。

## 6. 結言

GNBC を用いて角を含む壁面における接触線移動を表現し、角があることによって生じる濡れ性の違いを再現するために、角の境界条件の設定方法などを提案した。角によって生じる濡れふるまいの違いを再現することができた。

マーカー速度を補間するために新たな 2 次元配列を用いたことで、角近傍において流体の速度場を求める境界条件とマーカー速度補間用の速度の両方を同時に表現することができた。計算結果より角近傍においても滑り速度が満足に与えられていることから GNBC を用いて角を表現でき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) Y. Yamamoto, T. Ito, T. Wakimoto, K. Katoh, "Numerical simulations of spontaneous capillary rises with very low capillary numbers using a front-tracking method combined with generalized Navier boundary condition", *Int. J. Multiphase Flow*, Vol.51, pp22-32, (2013).
- (2) B. Chang, G. Nave, S. Jung, "Drop formation from a wettable nozzle", *Commun. Nonlinear Sci. Numer. Simulat.*, Vol.17, pp2045-2051, (2012)
- (3) N. Takada, J. Matsumoto, S. Matsumoto, K. Kurihara, "Phase-field model-based simulation of two-phase fluid motion on partially wetted and textured solid surface", *J. Comput. Sci.*, Vol.17, pp315-324,

- (2016).
- (4) C. S. Peskin, "The immersed boundary method", *Acta Numerica*, Vol.11, pp479-517, (2002).
  - (5) T. Qian, X. Wang, P. Sheng, "Molecular scale contact line hydrodynamics of immiscible flows", *Phys. Rev. E*, Vol.68, (2003), 016306.
  - (6) 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, pp106-112, (2014).