# 液滴衝突の数値的研究 (界面の大変形及び動的接触角を伴う自由界面流れの計算手法)

## Numerical studies of droplet impacting (A numerical method of free surface flows with largely deformed interfaces and dynamic wetting)

横井 研介 (Kensuke YOKOI) カーディフ大学 (Cardiff Univ.)

We numerically study droplet impacting and splashing on dry and flat surfaces. The numerical method consists of a coupled level set and volume-of-fluid (CLSVOF) framework, the tangent hyperbola for interface capturing/weighed line interface calculation (THINC/WLIC) method, the constrained interpolation profile-conservative semi-Lagrangian (CIP-CSL) method, volume/surface integrated average based multi moment method (VSIAM3), and a continuum surface force (CSF) model. The numerical framework can reproduce a droplet deposition case quantitatively and a droplet splashing case at least qualitatively. Our numerical results have shown that the dynamic contact angle plays a very important role in droplet behaviours on dry surfaces. If we use a sensible simplified dynamic contact angle model, the predicted time dependence of droplet behaviour is poorly reproduced. The result shows that precise

Keywords: droplet impacting, droplet splashing, dynamic contact angle, level set method, CLSVOF, THINC/WLIC method.

## 1. はじめに

液滴の固体表面への衝突は、100年以上前から多くの研 究者によって調べられている[1]。また非常に多くの実用問題 とも関連がある(例えば、スプレーペイント、スプレークーリ ング、インジェクター、インクジェット、航空機などへの着 氷、など)[2]。液滴衝突の研究は、物理学的な意義だけでなく、 液滴衝突に関連する技術全般に貢献できる可能性がある。

液滴の衝突は、身近な研究対象であるにも関らず、その物 理的メカニズムは現代においてもあまり良く分かっていない。 具体的に言えば、どのような条件の時に液滴が吸着し、跳ね 返り、スプラッシュするかは現代の科学を持ってしても分か っていない。分かっていない理由は、液滴と固体の相互作用、 特に固体表面をパラメータ化することが困難であることが主 な理由である。例えば流体(ニュートニアン流体)であれば、密 度、粘性、表面張力等により容易にパラメータ化することが 出来る。しかしながら固体表面をどのようにパラメータ化す るかは非常に難しい問題である。液滴と固体表面の相互作用 は、固体表面の粗さ(凸凹)、接触角、化学的な状態、電気的状 態に依存する非常に複雑な問題である。また、問題は複雑な だけでなく、個々のプロセスと液滴の関係もまだ良く分かっ ていない。このような状況で、どのように液滴と固体の相互 作用を特徴付けるかを本稿で議論する。本稿では動的な接触 角に注目することにより、液滴と固体表面の相互作用を効果 的に特徴付けることが出来る可能性があることを数値シミュ レーションにより示す。

本稿では数値的研究の解説を行うが、本稿にあるような計 算を行うこと自体が一種のチャレンジでもある。自由界面流 れの計算手法についても、本稿内で詳細を説明する。計算手 法の選択については、様々な議論があるが、著者はシンプル な直交格子(図1)を使う方法が複雑な自由界面流れの計算に非 常に有効であると考えている。また界面の追跡のためにラグ ランジアン的な手法(界面に粒子を配置する方法など)を使う ことは一切せず、すべてをオイラー的に扱う方法(静的な格子 点上の値のみを用いて計算を行う方法)を用いる。このような 方法を使うメリットは

- 格子を生成する必要が無いこと。
- 界面の大変形、トポロジーの変化を容易に(特別な処理なしに)扱えること。
- コーディングが比較的容易になること。並列化も容易。
- 計算機との相性がよく、計算機性能を(大規模計算、小規 模計算に関わらず)比較的簡単に引き出すことが出来る こと。GPGPU(General-purpose computing on graphics processing units、グラフィックカード)上での効率的な 計算も可能である。
- 高精度な計算手法を容易に用いることが出来ること。
- マルチグリッドなどの高速ソルバーを容易に用いること が出来ること。

シンプルな直交格子を使う方法にはいくつかの短所もある。 例えば、アダプティブメッシュの様に局所的に解像度を上げ ることが出来ない。また、計算領域に任意形状の構造物があ るような場合を直交格子はあまり得意としていない等。しか しながら、直交格子をベースにした手法は、スプラッシュや 微粒化の計算にはシンプルな直交格子を用いる手法が適して いると考えている。

## 2. 計算手法

本章では計算手法の詳細を出来る限り詳細に説明する。 本稿では、以下の手法をベースに2相流の計算手法を構成する[3,4]。

- 界面捕獲法: CLSVOF (coupled level set and volume-of-fluid)法 [5]。VOF法の代わりにTHINC/WLIC法 [6,7]を用いた。
- 対流項の計算手法: CIP-CSL (constraint interpolation profile-Conservative Semi-Lagrange) 法[8]。
- 流体計算手法: VSIAM3 (volume/surface integrated average based multi-moment method)[9]。
- 表面張力の計算法: CSF (continuum surface force) モ デル[10]。
- 接触角の計算: Sussmanにより提案された手法を用いた [11]。

個々の計算手法の詳細は以下のサブセクションで説明する。

### 2.1 計算グリッド

計算格子には前にも述べたように直交格子を用いる。変数 は図2のように定義する。速度(u,v)は格子の中心及び格子 の辺上に定義する。残りの変数、圧力p、VOF 関数C、level

set 関数 *Ψ* は、 すべて 格子の 中心にの み 定義 する (VOF 関数、

level set 関数に関しては後で説明する)。格子の中心に定義 される変数は、セル平均値として

$$u_{i,j} = \frac{1}{\Delta x \Delta y} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \int_{y_{j-1/2}}^{y_{j+1/2}} u(x, y) dx dy$$
(1)

定義される。辺上の値は、各々の境界平均値として

$$u_{i-1/2,j} = \frac{1}{\Delta y} \int_{y_{i-1/2,j-1/2}}^{y_{i-1/2,j+1/2}} u(x,y) dy$$
(2)

$$u_{i,j-1/2} = \frac{1}{\Delta x} \int_{x_{i-1/2,j-1/2}}^{x_{i+1/2,j-1/2}} u(x, y) dx$$
(3)

定義される。このように同一の物理量を異なるモーメント(変数)として二つ以上用いる手法をマルチモーメント法[9]と呼ぶ(マルチモーメントのとり方は、今回の例に限らず変数とその微係数など無数に存在する)。またこの様なグリッドをマルチモーメントグリッド(Mグリッド)と呼ぶ。セル内の面積(2D)、体積(3D)を $\Omega$ 、その外周を $\Gamma$ と定義する。

このグリッドは、他のグリッドシステムに対して大きなメ リットがある。図2を見れば分かるように速度の定義点の数 が圧力と比較して2次元では3倍、3次元では4倍となって いる。そしてこの3-4倍定義されている速度変数は対流項の 計算にフル活用され(CIP-CSLのセクションで詳細を説明す る)、対流項の計算精度の向上に多大に貢献する。多くの実用 問題ではレイノルズ数が比較的高く、対流項の計算精度が計 算の質に非常に大きく影響する。本計算が他の計算に対して 異なっている最大の理由はこの部分にある。またこの計算手 法の計算コストは従来の手法(MAC法、プロジェクション)とほ とんど変わらない。対流項の計算は陽的な計算手法を使って いるためその計算コストは陰的に計算する必要のある圧力の 計算に比較して非常に少ない。非圧縮性流体の計算において は圧力ポアソンの計算が計算量の大半(80-90%程度)を占め るが、本計算手法では圧力の定義点の数は従来の手法と変わ らないため、実質計算コストの増加は無視できるレベルであ る。今後実用問題の計算にはマルチモーメントの概念を取り 入れた手法が広く使われるようになるのではないかと考えて いる。

### 2.2 界面捕獲法

界面捕獲には、VOF法[12]と level set 法[13]を組み合わせ

て用いる CLSVOF 法を用いる。VOF 法は、多くの種類があ り一概には言えないが、VOF 法の一つである VOF/PLIC (Piecewise Linear Interface Calculation)法[12]は非常に高い 界面追跡(捕獲)精度を持ち、計算効率も高く、更に液体の体 積の保存性を保証できる非常に優れた手法であるが、表面張 力の計算に必要な界面の曲率の計算を不得意としている。一 方で level set 法は、曲率の計算を得意としているが、界面捕 獲精度及び液体体積の保存性に問題がある[14]。両者の良い所 だけをとり、両者のデメリットを隠蔽できる手法が CLSVOF 法である。

## 2.2.1 VOF法(THINC/WLIC法)

VOF 法は簡単に説明すれば、VOF 関数 ( $C_{i,j}$ : 各々の格子を 液体が占める割合)を用いて、直交格子上に界面を表現する 手法である。ある格子が完全に液体中にある場合は、VOF 関数 の値は1、完全に気体中にある場合は0、液面が格子を横切 る場合は、液体の占める割合に応じて、0から1までの値を とる。時間発展は、移流方程式に従う。

$$\frac{\partial \chi}{\partial t} + \nabla \cdot (u\chi) - \chi \nabla \cdot u = 0 \tag{4}$$

2次元の場合、補完関数 $\chi(x, y)$ とVOF 関数の関係は以下の ように定義される。

$$C_{i,j} = \frac{1}{\Omega_{i,j}} \iint_{\Omega_{i,j}} \chi(x, y) dx dy$$
(5)

 $C_{i,j}$ は次元分割を使って以下のように更新する。ここでは2次元のケースについて説明する。

$$C_{i,j}^{*} = C_{i,j}^{n} - \frac{F_{x,i+1/2,j}^{n} - F_{x,i-1/2,j}^{n}}{\Delta x}$$

$$+ C_{i,j}^{n} \frac{u_{i+1/2,j} - u_{i-1/2,j}}{\Delta x} \Delta t,$$

$$C_{i,j}^{n+1} = C_{i,j}^{*} - \frac{F_{y,i,j+1/2}^{*} - F_{y,i,j-1/2}^{*}}{\Delta y}$$

$$+ C_{i,j}^{n} \frac{u_{i,j+1/2} - u_{i,j-1/2}}{\Delta y} \Delta t,$$
(6)
(7)

ここで、 $F_{x,i+1/2,j}$ は(i+1/2,j)面をx方向に横切るフラックス、

 $\Delta v$ 

$$F_{x,i+1/2,j} = -\int_{x_{i+1/2,j}}^{x_{i+1/2,j}-u_{i+1/2,j}\Delta t} \chi_{is,j}(x,y) dx,$$
(8)

$$F_{y,i,j+1/2}^{*} = -\int_{y_{i,j+1/2}}^{y_{i,j+1/2}-v_{i,j+1/2}\Delta t} \chi_{i,js}^{*}(x,y) dy$$
(9)

$$is = \begin{cases} i & \text{if } u_{i+1/2,j} \ge 0\\ i+1 & \text{if } u_{i+1/2,j} < 0, \end{cases}$$
(10)

$$js = \begin{cases} j & \text{if } v_{i,j+1/2} \ge 0\\ j+1 & \text{if } v_{i,j+1/2} < 0. \end{cases}$$
(11)

ここで、添え字の\*はx方向の計算後の値を基にした物理量 を示す。VOF 法は界面再構築のアルゴリズム (PLIC, SLIC (Simple Line Interface Calculation), WLIC (Weighted Line Interface Calculation)など)を用いて補完関数  $\chi(x, y)$ を構 築し、数値拡散を起こさず、保存を満たすように界面を時間

#### 発展させることが出来る。

本稿では、VOF 法の代わりに THINC/WLIC 法を界面追跡 に用いる。VOF/PLIC は界面の追跡に関しては、非常に優れ た手法であるが、コーディングが非常に難しい(特に3次元) という問題がある。そこでコーディングが非常に容易であり、 尚且つ VOF/PLIC とほぼ等価(僅かに劣る)の結果を出せる THINC/WLIC 法を本稿では採用する。

補完関数 χ(x, y)を構築することは容易ではない。例えば 表現したい界面形状が図3(a)だとして、実際の数値計算で保 持している値はその体積率(VOF 関数)だけである(図3(b))。 この体積率の情報だけから界面をどのように再構築するかが VOF 法の重要なポイントであり、様々なアルゴリズム(SLIC、 PLIC、WLIC など)が提案されている。SLIC は図4(a) に示さ れるように格子の辺に平行なラインにより界面を再構築する 方法である。PLIC は、有限の勾配を持つラインをベースに界 面を再構築する方法である。PLIC は非常に精度の良い方法で あるが、コーディングが非常に煩雑な方法である。少し考え ると分かるが、界面を表現するラインが格子のどの辺を横切 るかによってフラックスの計算法が変化するため、全てのケ ースをもれなくコードに組み込む必要がある。2次元のコーデ ィングははそれほど難しくはないが、3次元は非常に煩雑にな る。そのような理由から精度に若干問題のある SLIC もまだ使 われている。SLIC のコーディングは非常に簡単である。

WLICは、PLICと同程度の結果を出せる方法であるが、コ ーディングはSLICの様に簡単な手法である。WLICはSLIC の様に格子の辺に沿った界面を使うが、x軸とy軸両方に沿っ た2つ(3次元は3つ)の界面を重み付けして用いる手法であ る(図5)。この重み付け関数に界面の向きの情報を取り入れ ることができ、PLICに迫る界面追跡を実現できる。しかしな がら個々の界面は格子の辺と平行なためフラックスの計算は シンプルなままであり、コーディングの簡易性は維持されて いる。2の形式は

$$\chi_{i,j}(x, y) = \omega_{x,i,j} \chi_{x,i,j} + \omega_{y,i,j} \chi_{y,i,j}$$
  
となる。ここで $\omega_{x,i,j}, \omega_{y,i,j}$ は重み付け関数、 $\chi_{x,i,j}$ は y 軸と  
平行な界面、 $\chi_{y,i,j}$ は x 軸と平行な界面である。重み関数の選  
択には様々な選択肢があるが、本稿では以下の形式を用いた。

$$\boldsymbol{\omega}_{x,i,j} = \frac{\left| \boldsymbol{n}_{x,i,j} \right|}{\left| \boldsymbol{n}_{x,i,j} \right| + \left| \boldsymbol{n}_{y,i,j} \right|},\tag{12}$$

$$\boldsymbol{\omega}_{y,i,j} = \frac{\left| \boldsymbol{n}_{y,i,j} \right|}{\left| \boldsymbol{n}_{x,i,j} \right| + \left| \boldsymbol{n}_{y,i,j} \right|}.$$
(13)

ここで、 $n_x$ , $n_y$ は界面の単位法線ベクトルの x 成分と y 成分 である。この単位法線ベクトルの計算には 3x3 の格子の VOF 関数を用いる(単純な中心差分を使うと精度が大幅に低下する)。

$$n_{x,i,j} = \frac{\left(n_{x,i+1/2,j+1/2} + n_{x,i-1/2,j+1/2} + n_{x,i+1/2,j-1/2} + n_{x,i-1/2,j-1/2}\right)}{4}$$
(14)

$$n_{y,i,j} = \frac{\left(n_{y,i+1/2,j+1/2} + n_{y,i-1/2,j+1/2} + n_{y,i+1/2,j-1/2} + n_{y,i-1/2,j-1/2}\right)}{4}$$

$$n_{x,i+1/2,j+1/2} = \frac{\left(C_{i+1,j} - C_{i,j} + C_{i+1,j+1} - C_{i,j+1}\right)}{2\Delta x} \tag{16}$$

$$_{,j+1/2} = \frac{\left(C_{i,j+1} - C_{i,j} + C_{i+1,j+1} - C_{i+1,j}\right)}{2\Delta y}$$
(17)

VOF 法は界面を表現する関数に 0, 1 の階段関数を用いる が、THINC 法[6]では 0, 1 の値をとるスムースな Tanh 関数 を用いる。詳細は、文献[6,7]を見て頂きたい。THINC/WLIC のサンプルプログラムも Web 上で公開されている[7]。

 $n_{y,i+1/2}$ 

#### 2.2.2 Level set 法(CLSVOF)

Level set 法は、界面を level set 関数( $\psi$ )の等値面(通常ゼロの等値面)として表現する方法である。Level set 関数には通常、距離関数を用いる。定義は、全領域で $|\nabla \cdot \psi|=1$ を満たし、界面では $\psi = 0$ となる関数である。一次元での例を図6(左上)に示す。

Level set 法の利点は、界面の法線ベクトルが界面だけでな く、界面周辺を含む全領域で定義できていることである。表 面張力の計算では、界面の曲率 *K* が必要となるが、曲率を求 めるには界面の法線ベクトル **n** の発散

$$\kappa = \nabla \cdot \mathbf{n}$$
 (18)  
を計算する必要がある。Level set 法では、level set 関数の

を計算する必要がある。Level set 法では、level set 関数の 勾配

$$\mathbf{n} = \frac{\nabla \psi}{|\nabla \psi|} \tag{19}$$

を用いることにより、界面周辺の法線ベクトルを精度よく計 算することができ、結果として曲率も精度よく計算すること ができる。VOF 法では界面の上でしか法線ベクトルが計算でき ず、法線ベクトルの発散を精度よく計算することが出来ない。 この点が level set 法の優位な点であるが、level set 法には VOF 法とは対照的に界面の追跡精度と液体の体積保存性に問 題がある。

そこでCLSVOF法は、界面の追跡(移動)に関してはすべてVOF 法に任せ、界面の法線ベクトルや曲率が必要な時に level set 関数を補助的に用いる手法である。具体的な手続きとしては、 VOF 関数によって示される界面の位置を元に level set 関数を 構築するだけである。この level set 関数は、表面張力、接 触角などの計算に使われるが、VOF 関数に直接的に影響するこ とは無いため、CLSVOF 法は level set 法の問題である界面の 追跡精度、保存性の問題とも無縁である。

物質(気体、液体)識別のための密度関数 Ød (図6右上)は、

ヘビサイド関数 $H_{\alpha}$  (図 6 中央)を用いれば容易に計算することが出来る。

$$\phi_d = H_{\alpha}(\psi) \tag{20}$$

$$H_{\alpha}(\psi) = \begin{cases} 0 & \text{if } \psi < -\alpha \\ \frac{1}{2} \left[ 1 + \frac{\psi}{\alpha} + \frac{1}{\pi} \sin\left(\frac{\pi\psi}{\alpha}\right) \right] & \text{if } |\psi| \le \alpha \\ 1 & \text{if } \psi > \alpha \end{cases}$$
(21)

ここで、 $2\alpha$  は界面の厚みである。厚みは現実には存在しない数値的なものであるが、直交格子上でスムースな界面を表現するためには若干のスムーシングが必要である。本稿ではすべての計算に $\alpha = 1.5\Delta x$ を用いている。物質によって異なるパラメータ、密度 $\rho$ や粘性係数 $\mu$ は以下のように計算される。

$$\rho = \rho_{liquid}\phi_d + \rho_{air}(1 - \phi_d) \tag{22}$$

$$\mu = \mu_{liquid}\phi_d + \mu_{air}(1 - \phi_d) \tag{23}$$

 $\phi_d$ の代わりに VOF 関数Cを用いても構わないが、本稿では  $\phi_d$ を用いる。

### 2.3 支配方程式

支配方程式には連続の式と表面張力、重力項を含むナビエ ストークス方程式を用いる。本計算は有限体積法をベースと した手法を用いるため支配方程式を積分形式で書く。

$$\int_{\Gamma} \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}_{c} dS = 0$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} \mathbf{u} dV + \int_{\Gamma} \mathbf{u} (\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}_{c}) dS$$
(24)
(25)

$$= -\frac{1}{\rho} \int_{\Gamma} p \mathbf{n}_{c} dS + \frac{1}{\rho} \int_{\Gamma} (2\mu D) \cdot \mathbf{n}_{c} dS + \frac{1}{\rho} \mathbf{F}_{sf} + g$$

 $\mathbf{D} \equiv 0.5(\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T)$ 、 $\mathbf{F}_{sf}$ は表面張力、gは重力である。 これらの支配方程式はフラクショナルステップ法をベースと

する VSIAM3 を使って計算される。 支配方程式け以下のように時間分割される

$$\mathbf{u}^{t+\Delta t} = f^{NA4} f^{NA3} f^{NA2} f^{NA1} f^{A}(\mathbf{u}^{t})$$

(1)対流項( $f^A$ )

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} \mathbf{u} dV + \int_{\Gamma} \mathbf{u} (\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}_{c}) dS = 0$$
<sup>(27)</sup>

(26)

(2)粘性項(f<sup>NA1</sup>)

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} u dV = \frac{1}{\rho} \int_{\Gamma} (2\mu D) \cdot n_c dS$$
(28)

(3)表面張力項(f<sup>NA2</sup>)

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} u dV = \frac{1}{\rho} F_{sf}$$
<sup>(29)</sup>

(4)重力項(*f*<sup>NA3</sup>)

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} u dV = g \tag{30}$$

(5) 圧力勾配項と連続の式 (プロジェクションステップ)

$$\int_{\Gamma} \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}_{c} dS = 0 \tag{31}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} u dV = -\frac{1}{\rho} \int_{\Gamma} \rho n_{c} dS$$
(32)

以下に各々の項をどのように計算するかを説明する。

## 2.4 CIP-CSL法(対流項)

CIP-CSL 法は保存方程式

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} \phi dV + \int_{\Gamma} \phi(\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}_{c}) dS = 0$$
(33)

の解法である。ここで $\phi$ は任意のスカラー値である。CIP-CSL 法にはいくつかの種類が存在するが、ここでは最もシンプル な CIP-CSL2 法の説明をする。本稿の計算もすべて CIP-CSL2 を用いて行った。まず、一次元のケースについて説明する。 CIP-CSL では、セル平均値と境界平均値を用いる。一次元の 場合は、図7に示されるように、一つの格子間 $(x_{i-1/2}, x_{i+1/2})$ の間には3つの値 $(\phi_{i-1/2}, \phi_i, \phi_{i+1/2})$ が定義されている。従っ て格子間を2次の補完関数 $\Phi(x)$ 

 $\Phi_{i}(x) = a_{i}(x - x_{i-1/2})^{2} + b_{i}(x - x_{i-1/2}) + \phi_{i-1/2} \quad (34)$ を使って補完することが出来る。ここで、

$$a_{i} = \frac{1}{\Delta x^{2}} \left( -6\phi_{i} + 3\phi_{i-1/2} + 3\phi_{i+1/2} \right)$$
(35)

$$b_{i} = \frac{1}{\Delta x} (6\phi_{i} - 4\phi_{i-1/2} - 2\phi_{i+1/2})$$
(36)

である。この補完関数を用いてセル平均値とセル境界の値の 両方を更新する。セル境界の値は一次元では点の値であるた め微分形式の支配方程式を用いて

$$\frac{\partial\phi}{\partial t} + u\frac{\partial\phi}{\partial x} = -\phi\frac{\partial u}{\partial x}$$
(37)

有限差分法の一種であるセミラグランジアン法により値を更 新する。

$$\phi_{i-1/2}^{*} = \begin{cases} \Phi_{i-1}(x_{i-1/2} - u_{i-1/2}\Delta t) & \text{if } u_{i-1/2} \ge 0, \\ \Phi_{i}(x_{i-1/2} - u_{i-1/2}\Delta t) & \text{if } u_{i-1/2} < 0, \end{cases}$$
(38)

$$\frac{\partial\phi}{\partial t} = -\phi^* \frac{\partial u}{\partial x}.$$
(39)

セル平均値 $\phi_i$ は積分形式の支配方程式を用いて有限体積法により値を更新する。

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{x+1/2}} \phi dx = -\frac{1}{\Delta x} (F_{i-1/2} - F_{i+1/2})$$
(40)

ここで
$$F_{i_{-1/2}}$$
は $x_{i_{-1/2}}$ を通過するフラックスである。

$$F_{i-1/2} = \begin{cases} -\int_{x_{i-1/2}}^{x_{i-1/2}-u_{i-1/2}\Delta t} \Phi_{i-1}(x) dx & \text{if } u_{i-1/2} \ge 0, \\ -\int_{x_{i-1/2}}^{x_{i-1/2}-u_{i-1/2}\Delta t} \Phi_{i}(x) dx & \text{if } u_{i-1/2} < 0. \end{cases}$$
(41)

多次元のケースには次元分割法を用いる。まず一元のソル バーを x 方向に用いると、 $(\phi_{i-1/2,j}, \phi_{i,j}, \phi_{i+1/2,j})$ が

更新される。しかしながら、上記の一次元ソルバーでは  $(\phi_{i,j-1/2}, \phi_{i,j+1/2})$ を更新することが出来ない。これらの値を 更新する方法は色々考えられるが、ここではシンプルな TEC(Time evolution converting)法

$$\phi_{i,j-1/2}^{*} = \phi_{i,j-1/2}^{n} + 0.5(\phi_{i,j}^{*} - \phi_{i,j}^{n} + \phi_{i,j-1}^{*} - \phi_{i,j-1}^{n})$$
 (42)  
を用いる。ここで $\phi_{i,j}^{*}$ は x 方向の一次元ソルバーにより更新  
された値である。

## 2.5 粘性項

粘性項にはスタンダードな有限体積法を用いる。まずセル 平均値を更新し、セル境界の値は、TEC法を用いて更新する。

### 2.6 CSF モデル(表面張力)

表面張力の計算には標準的な手法である CSF モデルを用いる。表面張力は本来、表面力

$$F_{sf} = \sigma \kappa n$$
 (43)  
として定義される ここで  $\sigma$  け表面張力係数  $\kappa$  け界面の曲

率である。本手法では表面力である表面張力を体積力として、 密度関数を用いて以下のように計算する。

$$\mathbf{F}_{\rm sf} = \boldsymbol{\sigma} \boldsymbol{\kappa} \boldsymbol{\nabla} \boldsymbol{\phi}_d, \tag{44}$$

ここで、 $abla \phi_d$ は、ヘビサイド関数(21)の微分と Level set 関

数を用いて以下のように計算する。

$$\nabla \phi_{d} = \begin{cases} \frac{1}{2} \left[ \frac{1}{\alpha} + \frac{1}{\pi} \cos\left(\frac{\pi \psi}{\alpha}\right) \right] \frac{\nabla \psi}{|\nabla \psi|} & \text{if } |\psi| \le \alpha \\ 0 & \text{if } \psi > \alpha. \end{cases}$$
(45)

## 2.7 プロジェクション法(圧力勾配と連続の式)

圧力勾配の式(32)の発散をとり連続の式(31)と連立させる と以下の圧力ポアソン方程式

$$\nabla \cdot \frac{1}{\rho} \int_{\Gamma} p^{n+1} \mathbf{n}_{c} dS = \frac{1}{\Delta t} \int_{\Gamma} \mathbf{u}^{*} \cdot \mathbf{n}_{c} dS$$
(46)

が得られる。ここで $\mathbf{u}^*$ は $f^{NA3}$ を計算した後の速度である。 ポアソン方程式は前処理付きの BiCGSTAB 法により計算する。ポアソンの残差ノルムの許容誤差は $10^{-10}$ とした。

圧力ポアソンの計算にヤコビ法やSOR法などの伝統的な手 法が現在も使われているようであるが、二相流の計算ではそ の計算効率は桁違いであり、前処理つきの共役勾配法系の手 法を使うことが望ましい。著者の知る限りでは、現在の所、 マルチグリッド法を前処理にした共役勾配法系の手法が最速 である(計算コストは格子数のオーダーとなる)。大規模計算に はマルチグリッド法は必須であると考えている。

速度 $(u_{i-1/2,i}, v_{i,i-1/2})$ は

$$u_{i-1/2,j}^{n+1} = u_{i-1/2,j}^{*} - \frac{1}{\rho_{i-1/2,j}^{n+1}} \frac{p_{i,j}^{n+1} - p_{i-1,j}^{n+1}}{\Delta x} \Delta t$$
(47)

$$v_{i,j-1/2}^{n+1} = v_{i-1/2,j}^{*} - \frac{1}{\rho_{i,j-1/2}^{n+1}} \frac{p_{i,j}^{n+1} - p_{i,j-1}^{n+1}}{\Delta y} \Delta t$$
(48)

により更新される。その他の速度変数(モーメント)は TEC に より更新される。

## 2.8 接触角 2.8.1 接触角のコーディング

接触角を計算に取り入れる方法には Mark Sussman により 開発された手法を用いる[11]。この手法の特長は、トリプルラ イン(気体、液体、固体が接触するライン)を陽的に見つける必 要が無いことにある。2次元計算ではトリプルラインは点で あるため、陽的にトリプルラインの位置を見つけ出すことも 出来るが、3次元ではトリプルラインはラインとなり陽的に 扱うことは非常に難しくなる。3次元計算への拡張性を考慮 して本手法を選択した。

この手法では、界面(VOF 関数と level set 関数)を接触角の 境界条件を満たすように固体内に仮想的に外挿する(図8)。そ して、その仮想的な界面を実際の気液界面と考えて表面張力 を計算することにより、接触角の効果が計算に取り入れられ る。

界面は以下の方程式を固体内で計算することにより固体内 に外挿される。

$$\frac{\partial \psi}{\partial \tau} + \mathbf{u}_{\text{extend}} \cdot \nabla \psi = 0 \tag{49}$$

ここで $\tau$ は人工的な時間であり $\Delta \tau = 0.5\Delta x$ とした。

$$\mathbf{u}_{\text{extend}} = \begin{cases} \frac{\mathbf{n}_{\text{wall}} - \cot(\boldsymbol{\pi} - \boldsymbol{\theta})\mathbf{n}_2}{\left|\mathbf{n}_{\text{wall}} - \cot(\boldsymbol{\pi} - \boldsymbol{\theta})\mathbf{n}_2\right|} & \text{if } \mathbf{c} < \mathbf{0} \\ \frac{\mathbf{n}_{\text{wall}} + \cot(\boldsymbol{\pi} - \boldsymbol{\theta})\mathbf{n}_2}{\left|\mathbf{n}_{\text{wall}} + \cot(\boldsymbol{\pi} - \boldsymbol{\theta})\mathbf{n}_2\right|} & \text{if } \mathbf{c} > \mathbf{0} \\ \mathbf{n}_{\text{wall}} & \text{if } \mathbf{c} = \mathbf{0} \end{cases}$$
(50)

ここで
$$\mathbf{n}_{wall}$$
は固体内部への単位法線ベクトル、 $\boldsymbol{ heta}$ は接触角、

$$\mathbf{n}_{1} = -\frac{\mathbf{n} \times \mathbf{n}_{\text{wall}}}{\left|\mathbf{n} \times \mathbf{n}_{\text{wall}}\right|} \tag{51}$$

$$\mathbf{n}_{2} = -\frac{\mathbf{n}_{1} \times \mathbf{n}_{\text{wall}}}{\left|\mathbf{n}_{1} \times \mathbf{n}_{\text{wall}}\right|} \tag{52}$$

(53)

 $c = n \cdot n_2$ 

この移流方程式の解法にはバイリニア補完[17]を用い、収束す るまで計算する。接触角に関する計算は固体内への仮想的な 界面の外挿という形で行われ、計算領域内の物理量は一切修 正しないため、液体体積の保存性などにも全く影響を与えな い。

#### 2.8.2 動的接触角

図9は、2.28mmの水滴がシランでコーティングされた基板上に 1m/s の速度で衝突した時の動的接触角の測定結果である[4]。ここで $U_{CL}$ はトリプルラインの速度である。水滴が広がっている時の速度を正とした。

動的接触角はまだ良く理解されておらず、計算に使えるような理論も存在しない。そのため本稿では、この測定結果を そのまま近似して数値シミュレーションに用いる。近似式に は

$$\theta(\mathbf{U}_{\mathrm{CL}}) = \begin{cases} \min[\theta_e + \left(\frac{Ca}{k_a}\right), \theta_{mda}] & \text{if } \mathbf{U}_{\mathrm{CL}} \ge 0, \\ \max[\theta_e + \left(\frac{Ca}{k_r}\right), \theta_{mdr}] & \text{if } \mathbf{U}_{\mathrm{CL}} < 0, \end{cases}$$
(54)

を用いた[4]。ここで、 $\theta_e$ は平衡角、 $Ca \equiv \mu U_{CL} / \sigma$ 、 $k_a k_r$ は動的前進角、動的後退角に関するパラメータ、 $\theta_{mda} \theta_{mdr}$ は 動的接触角の最大値と最小値である。図 9 から分かるように 動的接触角には最大値と最小値が存在している。それらの角 度を $\theta_{mda} \theta_{mdr}$ とした。一方で $U_{CL}$ 、Caが低いところでは、 動的接触角はカーブを描いている。そこでこの部分に関して は、経験則( $Ca = k(\theta - \theta_e)^3$ )を用いて近似した。 $\theta_e$ は実 験による測定値を用いた。上記の測定結果に関しては、  $\theta_{mda} = 114^\circ$ 、 $\theta_{mdr} = 52^\circ$ 、 $\theta_e = 90^\circ$ 、 $k_a = 9.0 \times 10^{-9}$ 、  $k_r = 9.0 \times 10^{-8}$ を用いた。

### 3. 計算結果

図10は、図9の水滴衝突の実験と計算結果の比較である。 ここでパラメータには、液体、気体双方に定量的な値を用いた。  $\rho_{liquid} = 1000 \text{ kg/m}^3$ 、 $\rho_{air} = 1.25 \text{ kg/m}^3$ 、  $\mu_{liquid} = 1.0 \times 10^{-3} \text{ Pa} \cdot \text{s}$ 、 $\mu_{air} = 1.82 \times 10^{-5} \text{ Pa} \cdot \text{s}$ 、  $\sigma = 7.2 \times 10^{-2} \text{ N/m}$ 、重力加速度 9.8 m/s<sup>2</sup>、初期の水滴の 直径 2.28 mm、衝突スピード1.0 m/s。計算は軸対称を仮 定して 2 次元の円柱座標系を用いて行った。計算格子は 100x100 を用いた。図11は液滴の接触面の直径の時間発展 を実験と比較したものであるが定量的な一致を示しているこ とが分かる。図12は異なる解像度(50x50,200x200)を用いて 同様の計算を行った結果である。メッシュ解像度に対する収 束性を示している。

水滴の振る舞いが動的接触角に対して、どれほどセンシテ ィブであるかを調べる。動的接触角の代わりに、全てのトリ プルラインスピードに対して平衡角 90°を使った結果を図1 3に示す。接触角以外のパラメータは全て図11の計算と同 じであるが、本来の水滴の振る舞いとは全く異なる振る舞い を示す。もう一つの例として図14の動的接触角のモデルを 使った計算結果が図15である。図14の動的接触角のモデル の測定結果からのずれは僅かであるが、その影響が直径の予 測に確実に影響していることが分かる。液滴の振る舞いは接 触角に対して非常にセンシティブであり、また液滴と固体の 振る舞いを特徴付けるには平衡角だけでは全く不十分である ことを本計算は示している。

ここからはスプラッシュの計算結果を紹介する。図16は スプラッシュの実験結果[15]と比較した結果である。ここで初 期の水滴の直径は1.86mm、衝突スピードは2.98m/sである。 動的接触角は、[15]の実験では測定されていないため平衡角の 163°を全てのトリプルラインスピードに対して用いた(著者 の知る限りでは、動的接触角の測定を伴ったスプラッシュの 実験結果は存在していない)。従って本計算の接触角は動的前 進角に対して最大で17°のエラーを含んでいる可能性がある。 本計算ではトリプルラインが後退する状況は扱わないため動 的後退角に関するエラーは本計算に一切影響しない。計算格 子数は192x192x48である。様々な要因により定量的な議論 をすることは難しいが(実験の写真が不鮮明であること、動的 接触角が測定されていないこと、計算結果の可視化の視点(実 験のカメラ位置)によって見え方が変わることなど)、少なくと も定性的には現象を再現できていると考えている。

異なる解像度(128x128x32, 256x256x64)を用いて同様の計 算を行った結果を図 17 に示す。上記と同様の理由により、高 解像度の結果が実験に近づいているかどうかは判別できない が、解像度を変えても現象が大きく変わることはなく、一定 の収束性を見せている。192x192x48 程度の格子数でもスプラ ッシュの大まかな振る舞いを定性的に議論出来るレベルの計 算が出来ていると考えている。

図18は、256x256x68の結果を上から見たこところである が、本計算がスプラッシュ(水滴の分裂やスパイク)を良く捕ら えていることが分かる。

図19は、図16の計算の液体の体積の時間発展をプロットしたものである。初期の体積を1として規格化している。

本計算では、体積のエラーは最大でも10<sup>-10</sup>以下であった。 VOF法では、体積の保存性を破る要因は、丸め誤差と圧力ポ アソン方程式の許容誤差(速度場の発散に関する誤差)以外

にない。本計算ではポアソンの残差ノルムの許容誤差を10<sup>-10</sup> 以下に設定しているため非常に高い保存性を実現することが 出来る。

図20は5つの水滴が衝突する様子を計算したものである。 複数の水滴の衝突もロバストに計算することが出来る。ここ でロバストとは、厳しい条件を与えても計算が破綻しないこ とを意味する。現在までの著者の経験では、本計算コードを 用いた計算は、数学的、物理的に間違った条件を与えない限 り(圧力ポアソンの収束を含む)、計算が破綻することは無く、 安定に計算することが出来る。 水滴衝突の数値的研究を行った。数値計算手法は CLSVOF 法、THINC/WLIC 法、CIP-CSL 法、VSIAM3、CSF モデル により構成される。本計算手法は水滴衝突(デポジション、ス プラッシュ)の実験を再現することが出来る。また本計算手法 は非常にロバストである。本シミュレーションの結果、動的 接触角が固体と液体の相互作用を特徴付けることが出来るこ とが分かった。

固体と液滴の相互作用は様々な応用問題があるが、現在の ところ、動的接触角は限られた分野でしか注目/計測されてい ない。動的接触角に注目することにより、固体と液滴の相互 作用の理解、予測精度を高めることが出来ると考えられる。

今後は、噴霧などを含む様々な実用問題に挑戦してゆきたいと考えている。また実用問題への応用を念頭に、スーパー コンピューターや GPGPU 上での大規模計算などを行ってゆ く予定である。直交格子をベースにした手法は、GPU 上でも 効率的に計算を行うことが出来る[16]。

#### 謝辞

本稿で紹介した計算の一部は、地球シミュレーターセンタ ー及び京都大学基礎物理学研究所の計算機を使って行われた。 ここに謝意を表明する。

## 文 献

- (1)A.M. Worthington, A study of splashes, Longmans, Green, and Co., (1908).
- (2)A.L. Yarin, Drop impact dynamics: splashing, spreading, receding, bouncing, 38, 159 (2006).
- (3)K. Yokoi, A numerical method for free-surface flows and its application to droplet impact on a thin liquid layer, J. Sci. Comput. **35**, 372 (2008).
- (4)K. Yokoi, D. Vadillo, J. Hinch, I. Hutchings, Numerical studies of the influence of the dynamic contact angle on a droplet impacting on a dry surface, Phys. Fluids, 21, 072102 (2009).
- (5)M. Sussman and E. G. Puckett, "A coupled level set and volume-of-fluid method for computing 3D and axisymmetric incompressible two-phase flows," J. Comput. Phys. 162, 301 (2000).
- (6) F. Xiao, Y Honma and T. Kono, "A simple algebraic interface capturing scheme using hyperbolic tangent function," Int. J. Numer. Methods Fluids, 48, 1023 (2005).
- (7) K. Yokoi, "Efficient implementation of THINC scheme: A simple and practical smoothed VOF algorithm," J. Comput. Phys. 226, 1985 (2007). サンプ ルプログラムがhttp://www.kensuke.biz/kensukeで公開 されている。
- (8) T. Yabe, F. Xiao, and T. Utsumi, "Constrained interpolation profile method for multiphase analysis," J. Comput. Phys. 169, 556 (2001).
- (9) F. Xiao, A. Ikebata, and T. Hasegawa, "Numerical simulations of freeinterface fluids by a multi integrated moment method," Comput. Struct. 83, 409 (2005).
- (10) J. U. Brackbill, D. B. Kothe, and C. Zemach, "A continuum method for modeling surface tension," J. Comput. Phys. 100, 335 (1992).
- (11) M. Sussman, "An adaptive mesh algorithm for free surface flows in general geometries," in *Adaptive Method of Lines*, Chapman & Hall/CRC, Boca Raton, (2002).

#### 4. おわりに

- (12) R. Scardovelli and S. Zaleski, "Direct numerical simulation of free-surface and interfacial flow," Annu. Rev. Fluid Mech. 31, 567 (1999).
- (13) M. Sussman, P. Smereka, and S. Osher, "A level set approach for capturing solution to incompressible two-phase flow," J. Comput. Phys. 114, 146 (1994).
- (14) K. Yokoi, Numerical method for complex moving boundary problems in a Cartesian fixed grid," Phys. Rev. E 65, 055701(R) (2002).
- (15) P. Tsai, S. Pacheco, C. Pirat, L. Lefferts, L. and D. Lohse, Drop impact upon micro-and nanostructured

superhydrophobic surfaces, Langmuir, 25(20), 12293 (2009).

- (16) 杉原健太、青木孝之、大規模高次精度移流計算の複数 GPUによる高速化と強スケーラビリティ、日本計算工学 会論文集、複数GPUによる気液2相流の大規模シミュレ ーション、第24回数値流体力学シンポジウム(2010).
- (17) K. Yokoi, Numerical method for a moving solid object in flows, Phys. Rev. E, 67, 045701(R).



Fig.1 A schematic figure of a Cartesian grid.



Fig.2 Grid used in 2D case.  $u_{i,j}, v_{i,j}, p_{i,j}, C_{i,j}, \psi_{i,j}$  are defined at the cell center.





Fig.3 Schematic figure of two dimensional volume fractions. The dark part and the white part represent the regions of  $\chi(x, y) = 1$  and  $\chi(x, y) = 0$ ,



Fig.4. Interface reconstruction by the SLIC method and the PLIC method.



Fig.5. Interface reconstruction by the WLIC method.



Fig.8. Contact angle implementation. The dash line represents the imaginary interface in the solid.



Fig.9. A measurement of dynamic contact angle (dots) with an approximation (line).



Fig.10. A comparison between a numerical result (left) and the experiment (right). The snapshots were not obtained from the same experiment in which the dynamic contact angle and the diameter were measured, although the conditions are as similar as possible. This is because the experiment to measure contact angle and diameter captures only the right hand side of the droplet in order to increase the resolution around the triple line.



Fig.11. Time evolution of the contact patch diameter.



Fig.12. Time evolution of the contact patch diameter.



Fig.13. Numerical result using the equilibrium angle.



Fig.14. A simplified dynamic contact angle model (line).



Fig.15. Time evolution of the contact patch diameter.



Fig.16. A comparison between a numerical result of droplet splashing and the experiment [15]. The grid resolution is 192x192x48.



Fig.17. Numerical results of droplet splashing using 128x128x32 and 256x256x64.



Fig.18. The top view of the result of 256x256x64.



Fig.19. Test result of volume conservation.



Fig.20. A numerical result of five droplets impacting onto a dry surface (left: side view, right: top view).