SOLA-VOF 法による板上液滴形状の数値解析*

Numerical Analysis of Shape of Liquid Droplet
on Solid Surface with SOLA-VOF Method

村上 幸一** 野村 信福** 篠塚 正光***

MURAKAMI Koichi NOMURA Shinfuku SHINOZUKA Masamitsu

Abstract The purpose of this report is to predict the shape of the droplet on a solid surface through numerical analysis. The shape of the droplet is determined by the equilibrium of the forces of gravity and surface tension. The two-dimensional cylindrical droplet is analyzed numerically by SOLA(solution algorithm)-VOF(volume of fluid) method using the contact angle as the initial condition. The curvature of the droplet surface was calculated from the position of marker particles put on the droplet surface, subsequently, the droplet shape is obtained with high accuracy. The droplet shape on a solid surface predicted by this method is in good agreement with the photograph of the droplet as well as the contact angle. As the inclination angle of solid surface gets larger, both the front side angle and the back side angle of the droplet gradually changed, until finally, the droplet slipped along the slope. The droplet shape could be satisfactorily simulated by use of the SOLA-VOF method.

Key Words : Liquid Droplet, Numerical Analysis, SOLA-VOF Method, Contact Angle, Surface Tension

1. 緒言

液滴を水平な固体表面におくと、液が完全にぬれない場合を除いて液滴はある接触角をもって固体表面と接触する。接触角はYoung[1]によって最初に導入され、接触角の測定によって固液界面のぬれやすさや固液の界面張力を類推することが可能となる[2]。液滴を置いた平面を傾けていくと液滴は接触角を変えながら変形しやがてすべり落ちる[3]。液滴が動いているときには2種類の接触角が観察され、液滴がすべり始めるときに前進していく方の接触角は前進接触角、後方のものは後退接触角とよばれている。この現象は水滴が窓ガラスを伝って落ちるときなどによく見られる。板上

液滴の研究は各種伝熱機器の高性能化の見地から機器内の凝縮液滴の挙動を明らかにするために、あるいは、車のフロントガラスに付着・移動する雨粒の挙動の把握と雨天走行時の安全対策上重要である。

板上液滴の挙動は解析的には固体面に置かれた液滴が時間と共に移動変形する移動境界を取り扱う問題の一つである。富山ら[4]はSOLA-VOF法を用いて液体中を上昇する単一気泡の挙動を詳細に解析しているが、界面の曲率の見積もり精度が悪いこの方法を、表面張力が支配的である板上液滴の解析にそのまま用いるのは難しい。表面張力が大きな影響を及ぼすような現象では界面の取り

* 1997.10.29 受付

** 愛媛大学工学部 〒790-0826 松山市文京町3
TEL(089)927-9720(ダイヤルイン) FAX(089)927-9744

*** ㈱住友重機械工業 〒799-1362 愛媛県東予市石田157

扱い如何によっては数値不安定性が発生しやすくなるので界面形状の認識方法が問題となる。塩田ら[5]はSMAC法を用いて下向き固体壁面に付着する懸垂液滴の挙動を解析しているが、液滴と壁との間には薄膜があると仮定し、懸垂液滴と壁との接触角を考慮していない。

自由表面を含む流れ解析としてはこれまでにSOLA-VOF法[6]やSMAC法[7]、ABMAC法[8]などを使って数多く行われ、近年になってCIP法[9]が有力な解析方法として注目されてきているが、板上液滴の挙動を接触角を考慮にいれて取り扱った例はほとんどない。特に、斜面上での液滴の接触角は一定値ではなく板の傾斜角により変化し、これが液滴の形状に大きな変化を及ぼす。また、液滴が斜面をすべり始める傾斜角は液滴の断面積と接触角に大きく依存する[10]。

そこで本研究では、二相流の解析に実績のあるSOLA-VOF法を用いて水平板及び傾斜板上にある主として静止液滴の形状を、液滴と壁との接触角が自由に变化できるようにして数値的に解き、接触角と液滴の形状の関係について詳細に調べた。界面認識精度を向上させるために自由表面の曲率は、マーカー粒子を用いてその座標位置から計算した。さらに解析で得た液滴形状及び接触角の板の傾斜による違いを、実際の水滴の写真と比較検討し本解析手法の妥当性を検証した。

2. 解析方法

2.1. 解析系

解析は斜面上にある液滴をFig.1に示すように傾斜角 θ_s の斜面を x 軸、斜面に垂直方向を y 軸とする2次元座標で模擬した。実際の液滴は3次元的なものであり、液滴と傾斜面との接触点にはそれぞれ異なった接触角が対応しているが、ここでは計算機のメモリと計算時間の節約、境界条件の取扱いと界面の曲率の計算の簡便さを考えて2次元筒状液滴とした。解析では板上液滴の解析手法を示し、実際の液滴形状と比較検討することに重点を置いた。計算格子は等方メッシュとし、液滴は非圧縮粘性流体として解析を行った。

解析にあたっては液滴の初期形状の断面半径 r_o 、代表速度 U_o には重力の影響によって液滴表面に誘起される水面波の速度 $\sqrt{2gr_o}$ を用いて、無次元化の置換を行った。

Fig.1 Coordinate System

$$\begin{aligned} \frac{x}{r_o} &\rightarrow x, & \frac{y}{r_o} &\rightarrow y, & \frac{u}{U_o} &\rightarrow u \\ \frac{v}{U_o} &\rightarrow v, & t \frac{U_o}{r_o} &\rightarrow t, & \frac{p}{\rho U_o^2} &\rightarrow p \\ g \frac{r_o}{U_o^2} &\rightarrow g \end{aligned} \quad (1)$$

以降、各物理量は無次元数とする。(1)の無次元数によって連続の式、運動量保存式は以下のように与えられる。

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0 \quad (2)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{1}{Re} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) + g_x \quad (3)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} = -\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{1}{Re} \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right) + g_y \quad (4)$$

ここで、 t は時刻、 u 、 v および g_x 、 g_y はおのこの x 、 y 方向の速度成分と重力加速度成分である。また Re は ν を動粘性係数として

$$Re = \frac{r_o U_o}{\nu}$$

で表される。

解析の手法は(2)式および(3)、(4)式をSOLA-VOF法[6][11]アルゴリズムにしたがって液相のみを解いた。セル内での液の含有率を示す関数 F を用いて液の移動、界面の形状を計算した。離散化式には時間項に前進差分、空間項には中心差分を採

Fig. 2 Typical mesh cell

用した。格子系はFig. 2に示すようなスタガード・メッシュ系であり、圧力は微小長さ Δx および Δy で定義されるセル (i, j) の中心で定義し、流速 u, v はセル・エッジで定められている。SOLA-VOF法の詳細は文献(6)に記述されているので省略する。

なお、計算にあたっては緩和係数に1.7を用い、収束条件は全ての格子で連続の式の不満足量である(2)式の左辺の絶対値が、0.001以下とした。

2.2. 表面セルにかかる力

自由表面を含むセル(界面セル)では液滴の表面の曲率半径 R を計算し、次式によって表面張力 σ による圧力 p_s を求めた。

$$p_s = \frac{\sigma}{R} = \frac{\sigma y''}{(1 + (y')^2)^{3/2}} \quad (8)$$

ここで、 y' 、 y'' はそれぞれ表面線の一階微分と、二階微分の値である。この p_s が界面セルにかかる圧力とした。本解析では表面張力が液滴の形状に大きく影響するので、 R には精度の高い計算法が必要になる。SOLA-VOF法では計算セル内の液の含有率を表す F 関数を用いて液面の高さや向き、および曲率が求められるが、この方法ではFig. 3(a)に示すように界面が角ばった認識をされ曲率の計算精度が悪くなる。この方法を、重力と表面張力による力が平衡する形に落ち着く板上液滴の解析に用いたが、後で述べる本解析に用いた空間分解能では解は得られなかった。そこで、Fig. 3(b)のように気液界面にマーカー粒子を配置し、その粒子の軌跡から表面形状を求める方法[12]によって曲率の計算を行った。配置された k と $k+1$ 番目の粒子に挟まれた位置 x における二階微分の値

(a) SOLA-VOF

(b) Marker particle method

Fig. 3 Shape of free surface

$y''(x)$ は

$$y''(x) = y''_{k-1} \frac{x_k - x}{l_k} + y''_k \frac{x - x_{k-1}}{l_k} \quad (9)$$

で表すことができる。ただし、 x_k, y_k は k 番目の粒子の座標位置、 y''_k は k での二階微分の値、 $l_k = x_k - x_{k-1}$ である。(9)式を積分すれば一階微分の値 $y'(x)$ と $y(x)$ の式が得られる。

$$y'(x) = -y''_{k-1} \frac{(x_k - x)^2}{2l_k} + y''_k \frac{(x - x_{k-1})^2}{2l_k} + c_1 \quad (10)$$

$$y(x) = -y''_{k-1} \frac{(x_k - x)^3}{6l_k} + y''_k \frac{(x - x_{k-1})^3}{6l_k} + c_1 x + c_2 \quad (11)$$

ただし、 c_1, c_2 は積分定数である。 $y(x_k) = y_k, y(x_{k-1}) = y_{k-1}$ から、 c_1 と c_2 を求め、曲線の連続性から連続した3点の座標位置と各点上における二階微分の値の関係式を得る。

Fig.4 Analytical Model

$$\frac{l_k}{6} y''_{k-1} + \frac{l_k + l_{k+1}}{3} y''_k + \frac{l_{k+1}}{6} y''_{k+1} = \frac{y_{k+1} - y_k}{l_{k+1}} - \frac{y_k - y_{k-1}}{l_k} \quad (12)$$

固液界面では、界面が壁と接する点以外にラグランジェ補間によって壁中に仮想点0を設け、この点での y''_0 の値を壁上の点1での y''_1 と等しいとして計算した。このとき(12)式は

$$\frac{3l_1 + 2l_2}{6} y''_1 + \frac{l_2}{6} y''_2 = \frac{y_2 - y_1}{l_2} - \frac{y_1 - y_0}{l_1} \quad (13)$$

となる。界面上に置かれた n 個のマーカー粒子によって(12)式、(13)式から y'' に関する n 元の線形1次連立方程式を解く。そして、壁と液滴表面が接する格子を含めて、界面格子と判断された全ての格子中にある表面線の中点の y' 、 y'' を計算し、(8)式から p_s を求める。この手法では、壁上の点(図

3(b)の点1)でも y' 、 y'' を求めているので、従来のSOLA-VOF法と違い壁と接触する液の角度の変化を容認している。

マーカー粒子は近傍の速度点から内挿によって求められる速度で移動する。計算過程で常に粒子は一つのセルに2から3個程度になるように調整した。なお、計算格子は正方形とし、格子数は落ち着いた液滴の y 方向の最大格子数が10になるように設定した。

2.3. 計算条件

本研究では板上の重力と表面張力による力の釣り合う形となる静止液滴の形状を求めることを主な目的としているので、板と液との境界はすべり境界条件($u_{i,1} = u_{i,2}, v_{i,2} = 0$)とし、板との接触角は固定せず変化できるようにしている。液滴の初期形状は傾斜角 θ_s と液滴の大きさによってFig.4に示すように3種類に分類した。傾斜角 θ_s が小さいときはFig.4(a)に示すような接触角 θ_i の弓形にした。 θ_s が小さく、液滴の断面積 S が大きいときにはFig.4(b)のように接触角 θ_i をもつ弓形と高さ h の長方形で構成される形状に設定した。 h は体積の大きい液滴が水平板上にある場合に、液の形状解析から(14)式によって見積もられる高さ[13]を限度に設定した。

$$h = \sqrt{\frac{2\sigma(1 - \cos\theta)}{\rho g}} \quad (14)$$

Fig.4(c)のように θ_s が大きいときは傾斜板との角度が前進接触角 θ_a の弓形と後退接触角 θ_r の接線と構成される形状にした。アクリル板上液滴の接触角 θ_i 、 θ_r 、 θ_a が接触角計を用いて液滴法と転落法で測定され、その実測値を初期条件として用いた。

液滴と平板間の壁面摩擦は考慮しなかった。水の動粘性係数を用いると界面に表面張力波が発生し解が周期的に変動したのでこれを抑えるために実際の値の約100倍の値を使用した。板上の静止液滴の形状は、重力と表面張力による力が平衡する形に落ち着くので、動粘性係数を増加しても差し支えない。

3. 解析結果および考察

実験に際し、板上に液滴を置くと、横幅と奥行きを約1:3にした。この液滴を上方から観

Fig.5 Shape of small liquid droplet on horizontal plate

察すると、板を傾けても奥行き方向の中央部に横幅の1.5倍程度のほぼ直線な気液界面と壁との接触線があるので、奥行き方向中央部では液滴形状の2次元性がほぼ保たれる。

3.1. 水平板上に置かれた液滴の形状

断面積が小さい場合 Fig.5は $\theta_s=0$ である水平平板上に置いたときに得られた液滴形状である。初期条件の接触角 θ_i は 70° である。断面積 S が 0.01cm^2 のときの解析液滴はなめらかな界面形状を示している。 0.01cm^2 の小さな液滴を置いた場合は液滴はほとんど変化せずに初期形状とほぼ同じ形になった。同図右側には写真撮影によって得られた断面形状を載せており、解析解が良好に液滴を表現できていることがわかる。断面積が 0.10cm^2 の場合は 0.01cm^2 のときとくらべて重力によって少し横に広がった形になる。 0.10cm^2 の液滴の経時変化をFig.6に示した。時間ステップは 1.0×10^{-3} であり、図中の(1)から(4)に示される数値は時間ステップ数である。液滴は初期形状の状態(1)から重力の作用によってつぶされるが(2)、表面張力によって復元し(3)、時間が30000ステップ以上では力が平衡して液滴は静止した(4)。

この液滴の最終形状の接触角を求めたところ、約 70° であり、初期条件と変わらなかった。そこで初期条件の接触角を変えて解析を行ってみた。Fig.7は初期形状と解析で求められた接触角 θ の値を調べた結果であり、図中の実線は初期に設定した接触角 θ_i である。 0.10cm^2 以下の液滴では θ は液滴の断面積によらず θ_i に一致している。

断面積が大きい場合 Fig.8は S が 0.19cm^2 から 0.95cm^2 の液滴を水平板上に置いた場合の液滴形状である。初期形状はFig.4(a)の接触角 $\theta_i = 70^\circ$ をもつ弓形と長方形を組み合わせた形状に置いて解

Fig.6 Deformation of droplet on horizontal plate

Fig.7 Relation between Contact Angle and Liquid Volume

析した。液滴の高さ h は式(14)から求めた 3.3mm を用いた。断面積が大きくなるにつれて液滴は重力の影響を受けて横長になり、 S が 0.50cm^2 では液の上面に水平な部分ができています。図中には接触角も載せてあるが、ほとんど変わっていない。 1.0cm^2 までの液滴について解析を行ったがこの傾向は変わらなかった。Fig.9は写真撮影による断面形状であり、接触角は実測値である。また、液滴の高さは平坦中央部の平均値である。実際の液滴形状はすべての断面積において形状が酷似している。そこで解析と実測から得られた液滴形状の比較を行った。Fig.10は液滴の断面積と液滴高さ h および横幅 b の関係をまとめたものである。図中の●印は実際の液滴の実測した h であり、縦線は測定誤差範囲を示している。液滴が大きくなる

Fig.8 Shape of large liquid droplet on horizontal plate

Fig.10 Relation between the shape and cross section

Fig.9 Shape of liquid droplet from photo.

にしたがって h は増加し、約3.2mmに収れんする。これは(14)式から得られる高さとはほぼ一致している。同様に b の実測値の○印も液滴の断面積の増加とともに大きくなっている。実線および破線で示される本解析結果はこれらの実験結果を良好に予測している。断面積の増加によって液滴は自重によってつぶれて変形するが、水平平板上の液滴は与えられた接触角に最も適応した形状となり、計算前後で接触角自身は大きく変わらない。

3.2. 傾斜板上にある液滴の形状

Fig.11は断面積 0.11cm^2 の液滴を $\theta_s=15^\circ$ の傾斜板上に置いた場合に液滴が静止するまでの経時変化をあらわしている。接触角計による測定から前進接触角 θ_a は 75° 、後退接触角 θ_r は 30° であったのでこれを初期条件に設定した。液滴は破線の初期状態(1)から前後に移動しながら接触角を変え(2)(3)、液滴下方先端の前側の接触角 θ_1 と後ろ側の接触角 θ_2 がそれぞれ 73° と 44° となったところで重力と表面張力の力の平衡が保たれて静止する(4)。傾斜角を上げて $\theta_s=35^\circ$ にした場合をFig.12に示す。前側の接触角はほとんど変化せず初期に与えた前進接触角のままであるが、後ろ側の接触角は時間とともに小さく尾を引いた形状になって傾斜板をすべり落ちてゆく。このときの θ_2 は 13° であり後退接触角 35° よりかなり小さい角度になる。液滴が移動を始めるときの傾斜板の角度を調べるために傾斜角が 25° と 30° の場合についても解析を行った。 θ_s が 25° では液滴は板上で静止し、 30° では液滴の前側がふくらんで板上をすべった。このことから、液滴は $25^\circ < \theta_s \leq 30^\circ$ の範囲ですべりを始めたといえる。

傾斜板上の液滴形状を明らかにするために断面積 $S=0.11\text{cm}^2$ の板上液滴の傾斜を水平から θ_s が 35° まで変えて解析したときの液滴形状をFig.13にまとめた。図中左の θ_s が 0° 、 3° 、 10° の解析

Fig.11 Stop on inclined plate

Fig.12 Slip on inclined plate

Fig.13 The shape of a small droplet on inclined plate

液滴は初期形状をFig.4(a)の左右対称形状にして計算した結果であり、右側の θ_s が $10^\circ \sim 35^\circ$ の解析液滴はそれぞれ初期形状をFig.4(c)の弓形形状にして解析を行った結果である。断面積が約 0.1cm^2 の液滴をアクリル板上に置いて板を傾けていったときの形状を写真撮影した結果を載せている。傾斜角度を種々変えて解析を行った結果、 $0^\circ \leq \theta_s \leq 3^\circ$ の範囲ではの初期形状を左右対称形に置いた場合に実際の液滴形状をうまく模擬した。 $15^\circ \leq \theta_s \leq 30^\circ$ の範囲では初期形状に θ_a と θ_r を与えて解析した場合により一致が得られる。液滴の形状変化が小さいときはただ一つの接触角を与える単純な弓形モデルで解析可能であるが、傾斜角度が大きくなると後ろ側の接触角が大きく変化するので、前進と後退接触角を与えるモデルで解析する必要がある。一方、 $5^\circ < \theta_s < 15^\circ$ では前側と後ろ側の壁との接触角 θ_1, θ_2 がともに大きく変化する領域であるために変形も大きく、この二つの初期条件のいずれでも満足のいく解は得られなかった。また、 $\theta_s = 35^\circ$ では写真から得られた θ_1 と比べて小さかった。解析では実際より大きな粘度を使用していることと、板との境界条件にすべり条件を使っているので板との粘着はないが、実際の液滴は滑落するときに壁面摩擦により前側がせりだしてしまうからである。

これまでの解析結果をFig.14に示し実測例と比較した。実測値と解析値の2つの接触角 θ_1 は $15^\circ \leq \theta_s \leq 25^\circ$ の範囲では実験値とよく一致している。 θ_s が大きくなると前側の接触角 θ_1 は前進接触角 θ_a に近い値になり、後側の接触角 θ_2 は後退接触角 θ_r に近づく。すべる直前の θ_s においては、これら2つの角度は液滴の力の平衡の式(15)[10]をほぼ満足している。

$$\sigma (\cos \theta_1 - \cos \theta_2) = \rho g S \cdot \sin \theta_s \quad (15)$$

ここで、 ρ は水の密度 1000kg/m^3 、 g は重力加速度 9.8m/s^2 である。

傾斜角が小さいときは左右対称の接触角をもつ形状に、大きいときは前進接触角と後退接触角をもつ形状におくことで精度のよい解析ができる。

4. 結言

自由表面の曲率の計算方法を、界面にマーカー粒子を配置してその座標位置から求める方法を適

Fig.14 Dependence of contact angle on angle of inclination of plate

用したSOLA-VOF法によって傾斜板上にある断面が円筒状の水滴形状を解析した。固液境界条件はすべり条件を用い、液滴の接触角は変化できるようにした。その結果、(i) 傾斜角の小さいときは接触角をもつ左右対称の弓形形状、(ii) 液滴断面積が大きいときは接触角をもつ弓形と長方形を組み合わせ、本論中の(14)式から求めた液滴高さに設定した形状、(iii) 傾斜角が大きいたときは前側に前進接触角、後ろ側に後退接触角をもつ形状、をそれぞれ初期液滴形状に用いることによって、水平からすべる直前の傾斜板までの静止液滴の形状と、さらにすべる状態の液滴後方の形状をよく模擬することができる。

NOMENCLATURE

c_1, c_2	: integral constant in eq.(10),(11)
$F_{i,j}$	: volume of fluid function
g	: gravitation acceleration
h	: height of droplet
$k, k \pm 1$	: indices of marker particles
$l, l + 1$	: calculational time cycle
p	: dimensionless pressure
p_s	: surface pressure of droplet
δp	: $= p^{(l+1)} - p^{(l)}$
r_o	: initial radius of droplet
Re	: Reynolds number $= r_o \cdot u_o / \nu$
S	: area of droplet
t	: dimensionless time
u	: dimensionless velocity

U_o : representative velocity
 v : dimensionless velocity
 x : dimensionless x coordinate
 y : dimensionless y coordinate
 θ_a : advancing contact angle
 θ_i : contact angle
 θ_r : receding contact angle
 θ_s : angle of inclination
 θ_1 : front side angle
 θ_2 : back side angle
 ν : kinematic viscosity of water
 ρ : density of water
 σ : surface tension

Subscripts

' : differential operator

参考文献

- (1) 小野 周, 表面張力, 共立出版, 71-85(1983).
- (2) 佐々木ら, 界面現象の基礎, 表面工学講座 3, 第3章, 朝倉書店(1973).
- (3) 庄司・張, 日本機械学会論文集 B編, 58-550, 1853-1859(1992).
- (4) 富山・宋・南川・坂口, 日本機械学会論文集 B編, 57-539, 2167-2173(1991-7).
- (5) 塩田・橋立・野中, 日本機械学会論文集 B編, 57-540, 2732-2739(1991-8).
- (6) Nichols, B.D., Hirt, C.W., and Hotchkiss, R.S., LA-8355(1980).
- (7) Amsden, A.A. and Harlow, F.M., LA-4370(1970).
- (8) Viece, J.A., J. Comput. phys., 8, 119-143 745(1971).
- (9) 矢部孝, 日本物理学会誌 47-1, 18-25(1992).
- (10) Furmidge, C.G.L., J. Colloid Sci., 17, 309-324(1962).
- (11) 高橋亮一, 応用数値解析, 朝倉書店, 170-186(1993).
- (12) Bart J. Daly, J. of Comput. Phys., 4, 97-117(1971).
- (13) Landau, L.D. and Lifshitz, E.M., Fluid Mechanics, 2nd edition, 239(1993).