

平成 30 年 6 月 3 日現在

機関番号：14401

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2015～2017

課題番号：15K17974

研究課題名(和文)動的濡れの数理モデル

研究課題名(英文)Mathematical modeling of dynamic wetting

研究代表者

大森 健史(Omori, Takeshi)

大阪大学・工学研究科・助教

研究者番号：70467546

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,300,000円

研究成果の概要(和文)：固体壁面上における動的濡れについて、チャンネル内二相流の Navier-Stokes-Cahn-Hilliard 方程式系による解析および分子動力学法による解析により調べ、壁面直上に形成される微視的な動的接触角と計測方法により異なる見かけの動的接触角の関係を明らかにした。これは、既往研究の議論では常に曖昧さの残る問題で、動的濡れの数理モデル構築において大きな妨げとなっていたものである。

研究成果の概要(英文)：The relationship between the microscopic and apparent dynamic contact angles was elucidated by means of continuum dynamics (Navier-Stokes-Cahn-Hilliard equations) simulation and molecular dynamics simulation, where the fluids were confined between two solid walls. In the present study, both the microscopic and apparent dynamic contact angles were measured in a well-controlled and unambiguous way, which is essential to the true understanding of dynamic wetting.

研究分野：流体工学

キーワード：濡れ 数値流体力学 分子動力学 Navier境界条件 Cahn-Hilliardモデル

## 1. 研究開始当初の背景

濡れを伴う流れの予測には、動的接触角を与える何らかの数理モデルが必要である。最も単純なものは固体表面物性および流体物性のみで決まるような静的接触角を動的接触角と等しいとして与えるものであるが、この考えが正しくないことは近年の分子動力学法 (MD) を用いた解析によって明らかになっている (Qian ら, 2003、申請者, 2013、2014)。なお、本調書では、流体界面が固気液 (もしくは固液液) の接触線で固体面となす角を (微視的) 接触角とよび、可視化などの実験観測によって得られる「見かけの接触角」とは区別する。流動解析のための壁面境界条件を与えるものとしては微視的レベルでのモデルが必要となる。

近年、Afkhami ら (2009) や Sui ら (2013) は Navier-Stokes (NS) 方程式に基づく数値流体力学 (CFD) を用いた解析において、接触角そのものではなく「接触線を含む計算格子第一点での見かけの接触角」を動的に与えるモデルを提案している。彼らのモデルは動的接触角を定数として固定はしていないように見えるが、Cox (1986) の理論解を援用しているため、実際には、壁面上での動的接触角として静的接触角を与えた多数の既往手法と計算コスト上の優位性を除けば実質的に同値である。Yamamoto ら (2014) は Afkhami や Sui とは異なる思想により Cox の理論解において微視的接触角を固定しない手法を提案しているが、フィッティングに用いている毛細管における実験結果の不確かさのためか、得られた数値解析の結果には明瞭な説明の困難な点が含まれている。

数理モデル構築のためには検証用の計測データが必要である。動的接触角の計測法としては、Yamamoto らのような実験的なもののほか、近年本格的に利用されるようになった MD によるものがあるが、両者とも時空間スケールに関する制約が厳しい。Qian ら (2003) は Cahn-Hilliard-van der Waals 拡散界面モデルを用いた CFD 解析 (NS-CH 法) が MD 解析結果をよく再現することを示し、現実的な計算コストで動的接触角を「計測」する道を拓いた。Wu ら (2010) は Qian らの解析をさらに進め、壁面に不均一性があり非平衡性が強い場合においても NS-CH 法が MD による解析結果をよく再現することを示している。

動的接触角のモデルとしてよく知られているものに Hoffman 則がある。このモデルは簡便で使いやすいものの、見かけの接触角を含む様々な実験結果をまとめたものに過ぎないため適用範囲が明らかでないのが問題である。多くの壁面表面には不均一性があり、実用性のあるモデル構築のためにはそのことを考慮する必要がある。不均一壁面上での動的接触角は一般的には非定常となるが、不均一のスケールが流動のスケールに比べて

小さい場合 (多くの実用的な場合に当てはまると考えられる) には、ほぼ定常な微視的動的接触角 (実効動的接触角) が現れることが Wu らの研究で明らかになっている。実験的経験則 (つまり不均一壁面上で行われた実験データに基づいている) である Hoffman 則によって与えられる接触角は、この実効動的接触角と関係づけられると予想されるが、その点についての研究例はまだない。濡れを伴う流動の予測を行う際に壁面の不均一性に関する微視的情報を逐一与えることは非現実的であるので、代表的なスケール値によって整理された動的接触角のモデルをつくることの意義は大きい。

## 2. 研究の目的

濡れを伴う流動の制御は重要な問題であるが、制御の前提となる信頼性の高い予測技術がそのような流れに対して確立していない。従来多くの研究で動的接触角として採用されているような静的接触角やマクロな見かけの接触角では壁面から受ける応力を正しく与えることができない。本研究では (微視的) 動的接触角の数理モデルを一般に壁面には不均一性があるという点に留意して構築する。モデリングに際しては (不均一な) 固体壁面上の流れを分子スケールの情報に基づく解析により「計測」する。スケール依存性を分子動力学法で定量的に評価しながら Cahn-Hilliard-van der Waals 拡散界面法を解析に用いるという構想によりメゾスコピックな要素を考慮した動的接触角モデルを再定義する。

動的接触角の起源については長年の論争があるが、分子論による考察と実験観測による考察が大きくスケールの異なる対象について無秩序に行われていることが現象の包括的理解の妨げとなっている。ミクロとマクロを繋ぐ考察が動的濡れのモデリングに際しては重要であると考えられる。

MD 解析に基づいて物性値を決定した NS-CH 方程式系には平滑な固体表面での流体の滑りや界面張力の変化といった分子レベルの情報が含まれている。NS-CH 方程式系を用いた CFD 解析により壁面不均一性のようなメゾスコピックな要素がマクロな流動にもたらす影響を系統的に調べることができる。一般に不均一な固体表面上で起きる動的濡れ現象を理解し、モデルするためには NS-CH 方程式系を中心としてミクロとマクロの両側を見るという本研究の構想が有効である。MD 解析結果から物性値などのマクロ量を抽出する研究については近年において多くの例があるが、全てにおいてマニュアル化されているわけではなく、応力の評価方法など注意すべき点もある。特に固体表面上でのすべり係数を混相について調べた研究例はまだ少なく、本研究には大きな意義があると考えられる。

### 3. 研究の方法

平衡および非平衡の MD 解析により、界面張力や滑り摩擦係数といった各種物性値を計測するほか、界面のレベルセットを抽出することにより微視的動的接触角と接触線移動速度の関係を直接的に計測する。解析系には、条件を制御しやすく CFD 解析への展開も容易な平行平板間流れを選ぶ。MD 解析により得られた物性値を用いて Cahn-Hilliard-van der Waals 拡散界面法で解析を行い、微視的動的接触角と見かけの動的接触角を同時計測する。この計測結果に基づいて動的接触角モデルを再定義し、Hoffman 則を始めとした既往実験式の「正しい」理解を提示する。

本研究では、微視的動的接触角と見かけの動的接触角の違いに着目しており、図 1 に示す通り、微視的接触角は壁面から分子スケールの近傍で定義されている。

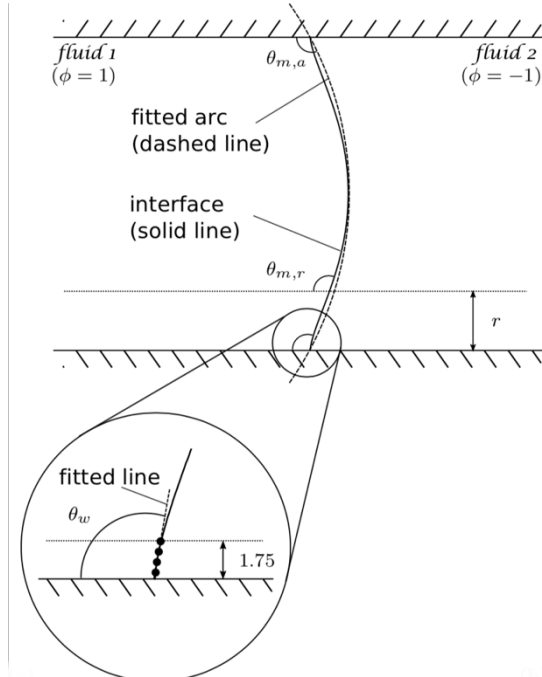


図 1：微視的動的接触角と見かけの動的接触角の定義  
 (「主な発表論文等」雑誌論文 3 より)

### 4. 研究成果

- (1) 平衡 MD 解析から滑り摩擦係数を同定する新規な手法を提案した。これまでよく用いられてきた Bocquet と Barrat による手法では、有限系では滑り摩擦係数を正しく算出することができなかったが、本手法ではこの問題点を解決した。
- (2) MD 解析から瞬時的な界面のレベルセットを抽出することにより、微視的動的接触角と接触線移動速度の関係を調べたところ、前進接触角と後退接触角では接触線移動速度への依存性が異なることがわかった。このことを MD 解析結果によって直接的に示したのは本研究が初めてである。
- (3) CFD (Cahn-Hilliard-van der Waals 拡散

界面法) 解析により、見かけの動的接触角と微視的動的接触角では接触線速度依存性が全く異なることを示した。Hoffman 則をはじめとした既往の動的接触角モデルは全て実験式であり、見かけの動的接触角が対象であると考えなければならない。界面の円弧近似から求めた見かけの動的接触角のコサインは接触線速度に対して線形になるべきであり、このことは壁面の不均一性には拠らないことを示した。

### 5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文](計 3 件)

- (1) S. Nakaoka, Y. Yamaguchi, T. Omori and L. Loly, Molecular dynamics analysis of the friction between a water-methanol liquid mixture and a non-polar solid crystal surface, *The Journal of Chemical Physics*, 146, 174702 (2017).
- (2) S. Nakaoka, Y. Yamaguchi, T. Omori and L. Joly, Extraction of the solid-liquid friction coefficient between a water-methanol liquid mixture and a non-polar solid crystal surface by Green-Kubo equations, *Mechanical Engineering Letters*, 3, 17-00422 (2017).
- (3) T. Omori and T. Kajishima, Apparent and microscopic dynamic contact angles in confined flows, *Physics of Fluids*, 29, 112107 (2017).

[学会発表](計 9 件)

- (1) T. Omori and T. Kajishima, Dynamic contact angle in narrow slit pores, 7th European-Japanese Two-Phase Flow Group Meeting, 2015 年 10 月
- (2) 兼子、大森、梶島、気液界面近傍をヒービング運動する翼に働く流体力の数値解析、第 29 回数値流体力学シンポジウム、2015 年 12 月
- (3) 足立、大森、梶島、上昇気泡からの高シユミット数条件下における物質輸送の数値解析、日本機械学会関西支部第 91 期定時総会講演会、2016 年 3 月
- (4) 前田、大森、梶島、Diffuse-Interface 法による微小流路内の移動接触線を伴う二相流の解析、日本機械学会関西支部第 91 期定時総会講演会、2016 年 3 月
- (5) 大森、前田、小林、梶島、微小流路内の二相流における見かけの動的接触角と局所の動的接触角、日本混相流学会混相流シンポジウム、2016 年 8 月
- (6) T. Omori and T. Kajishima, Apparent and Actual Dynamic Contact Angles in

Confined Two-Phase Flows, DFD16  
Meeting of The American Physical  
Society, 2016/11.

- (7) 小林、大森、山口、梶島、接触線を含む  
流れの流体力学的記述に関する考察（分  
子動力学法による解析結果の適切な平均  
化法について）、日本流体力学会年会、  
2017年8月
- (8) 小川、山口、大森、香川、中島、藤村、  
平衡、非平衡の分子動力学解析による固  
液間摩擦係数の抽出、日本流体力学会年会、  
2017年8月
- (9) 菊池、楠戸、古田、山口、大森、香川、  
中島、藤村、平滑な固液界面の界面張力：  
付着仕事と Bakker の方程式の関係、日本  
流体力学会年会、2017年8月

#### 6. 研究組織

##### (1) 研究代表者

大森 健史 (Takeshi Omori)  
大阪大学・大学院工学研究科・助教  
研究者番号：70467546

##### (2) 研究分担者

( )

研究者番号：

##### (3) 連携研究者

( )

研究者番号：

##### (4) 研究協力者

( )