

令和元年6月13日現在

機関番号：13201

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2016～2018

課題番号：16K06070

研究課題名(和文) サブミクロン凹凸表面上の微小液滴挙動のモデル化と計算技術の開発

研究課題名(英文) Numerical study for the effects of the submicron-scale surface roughness on the dynamic behavior

研究代表者

瀬田 剛 (SETA, Takeshi)

富山大学・大学院理工学研究部(工学)・准教授

研究者番号：50308699

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)：格子ボルツマン法にSmoothed Profile Methodを適用することで、撥水性または親水性を有する曲面上の液体挙動の解析が可能な計算手法を提案した。本手法では、滑りなしと浸透なしの境界条件に対応した関数と、質量フラックスと接触角に対する境界条件に対応した関数の2種類の関数を用いる。固体壁からのフラックスを考慮し、オーダー・パラメータと化学ポテンシャルに対するノイマン境界条件を設定可能にした。固体壁への漏れがなく、曲面状の液滴の接触角が適切に設定されることが、数値計算により実証された。任意形状の固体壁に対する法線ベクトルと液滴の接触角とを計算出来る単純なアルゴリズムを提供出来た。

研究成果の学術的意義や社会的意義

実験では計測が困難なサブマイクロスケールにおける空気・水系二相流挙動の数値実験により、現象論的なアプローチに基づくCassie-Baxterの法則等を実証する点に学術的な特色がある。医療用部材の防汚処理から電子基盤の高詳細化に至るまで、超撥水技術には大きな市場規模が期待されているが、摩擦等への耐久性の問題から十分な実用化に結びついていない。サブマイクロスケールでの超撥水現象を解析出来れば、計算と実験との両面から、表面構造の撥水効果への影響を効率的に検証でき、耐久性を考慮した最適な表面微細構造を導き出すことで、超撥水技術の向上と実用化への貢献が期待される。

研究成果の概要(英文)：The smoothed profile-lattice Boltzmann method is proposed to determine the contact line dynamics on a hydrophobic or a hydrophilic curved wall. Two types of smoothed indicator functions are introduced, namely a function that identifies the solid domain for non-slip and non-penetration conditions and a function that denotes the boundary layer for no mass-flux and the wetting boundary conditions. In order to implement the Neumann boundary conditions for the order parameter and the chemical potential, the fluxes from the solid surfaces are distributed to relevant physical variables through a smoothed profile. Several numerical investigations demonstrate the efficiency of the present method in calculating the contact angle of a droplet on curved surfaces with wall impermeability. The present model provides a simple algorithm to compute the surface normal vector and contact line dynamics on an arbitrarily shaped boundary by using a smoothed-profile.

研究分野：工学

キーワード：数値流体力学 超撥水 格子ボルツマン法 GPGPU

様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19、CK - 19 (共通)

### 1. 研究開始当初の背景

蓮の葉には、表面上に  $10\mu\text{m}$  と  $1\mu\text{m}$  の二種類のスケールの凹凸構造が存在することで、濡れ角が  $150$  度以上になる超撥水現象が発生することが知られている。超撥水効果は、細胞培養基材、燃料電池の排水、汚れの雨水によるセルフクリーニング、凍結防止等への応用が期待されている。撥水の原因には化学的因子と微細構造因子がある。微細構造因子を利用し、図1のようなサブマイクロスケールの規則的な凹凸面を基板上に作成し、撥水性を高める加工法について活発な研究が、なされている (Tian, Y. and Jiang, L., Nature Materials Vol.12, 291-292, 2013)。表面粗さを徐々に大きくしていくと、表面粗さが小さい間は、移動液滴の前進接触角は増大し、後退接触角は減少するが、表面粗さがある閾値を超えると、前進接触角と後退接触角が急激に増大する (Johnson R. E. and Dettre, R. H., Advances in Chemistry Series Vol.43, 136-144, 1964)。この接触角の急激な増加は、凹凸面の窪みがある大きさになると、突然、凹部に空気が閉じ込められ、エアポケットが生成され、撥水効果が増大するためと考えられている。空気の挙動が撥水効果へ重要な役割を果たしていることは古くから知られており、超撥水現象を正確に理解するためには、固体表面の化学的性質のみではなく、流体力学的見地に基づく固気液三相挙動の解明が重要である。

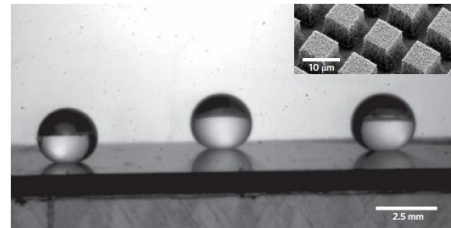


図1 サブマイクロ凹凸面の超撥水現象  
出典: Tian, Y. and Jiang, L., Nature Materials Vol.12, 291-292, 2013.

### 2. 研究の目的

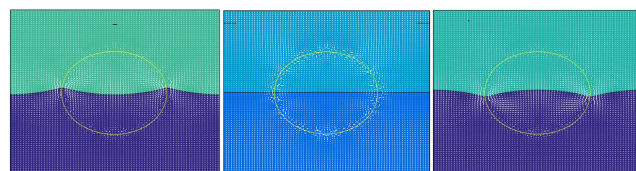
本研究では、実験による計測が困難なサブマイクロスケール凹凸表面上における空気・水系二相流挙動を高速、高精度に解析出来る計算技術の確立を目指す。Cassie-Baxter の法則等に代表される、現象論的なアプローチに基づく超撥水効果に関する理論を、サブミクロン凹凸構造を考慮した液滴挙動解析により実証することを目的とする。数値計算手法として、化学的因子に基づく濡れ性に界面拡散モデルを、微細突起物の凹凸面形状に埋め込み境界法または smoothed-profile method を、固気液三相系の計算に格子ボルツマン法を、 $20\text{mm} \sim 10\mu\text{m}$  までの異なるスケールの計算にマルチグリッド法を、並列処理に GPGPU (General-purpose computing on GPU) を用い、固気液三相系混相流解析に対する低コストで高速な計算技術の構築を目指す。

### 3. 研究の方法

サブマイクロスケール凹凸面を考慮した固気液三相系計算手法を、下記の ~ の手順に従い開発する。界面拡散モデル、埋め込み境界法、格子ボルツマン法を用い、濡れ性を考慮した固気液三相系解析手法を構築する。サブマイクロスケールの凹凸面とミリスケールの液滴とを同時に計算するため、マルチグリッド手法を適用する。GPGPU を活用し計算手法の高速化・並列化を行う。Cassie-Baxter の法則、表面粗さと濡れ角との関係に関する参照解、水滴の跳ね返りに関する可視化実験等と比較検証し、本計算手法の有効性を実証する。更に、構築した計算技術を用い、凹凸面への空気の閉じ込め過程や、ヒステリシス現象を引き起こす液体の固体表面への残存過程等を明らかにし、微視的な流体挙動による超撥水現象への影響を解明する。

### 4. 研究成果

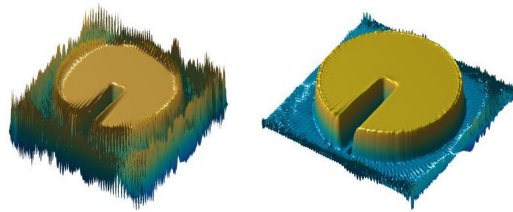
(1) 超撥水現象を再現するため、飽和フルオロアルキル基等のコーティングによる撥水作用の定式化に界面拡散モデルを用い、固体壁面上の微小突起物表面を埋め込み境界法 (Immersed Boundary Method, IBM) により設定した。IBM では、液滴挙動が解析されるオイラー座標系とは独立に、固体表面上にラグランジアン格子点が設定される。ラグランジアン格子点において設定された濡れ性の影響を受けて運動する液滴の挙動をオイラー座標上で解析可能な計算手法の構築が必要である。この問題に対し、オーダー・パラメータに関する勾配と、化学ポテンシャルに対する勾配とをフラックスに変換することで、異なる格子点間での固体壁の濡れ性による液滴への影響を適切に設定することに成功した。図2から、IBM によって設定された円柱周りにおいて、接触角が適切に設定されていることが分かる。



(a)  $\theta = 60^\circ$  (b)  $\theta = 90^\circ$  (c)  $\theta = 120^\circ$

図2 円柱周りの気液界面形状

(2) 接触角を適切に解析するために、気液界面を正確に捕捉する必要がある。しかし、図 3(a)に示されるように、Single Relaxation time (SRT) 衝突則を適用した界面拡散モデルでは、高ペクレ数に対し数値的不安定性が発生する問題があった。図 3(b)に示すように Two Relaxation Time (TRT) 衝突則と、誤差項を除去する補正項とを格子ボルツマン法に適用することにより、気液界面に発生する界面振動を効果的に除去することに成功した。



(a) SRT (b) TRT  
図 3 Zalesak's disk test

(3) 計算上、液滴が固体壁内へ浸透しないようにするため、陰解法に基づく IBM を用いた。陰解法を用いた場合、係数行列に対する数値的不安定性の問題から、固体表面上にラグランジュ点を均等かつ適切な距離で設定する必要がある。更に、IBM では、固体壁内部に仮想的な流体が存在するため、固体壁内部に存在する流体が液滴挙動に影響を及ぼし、濡れ性を適切に再現出来ない可能性がある。ラグランジュ点の設定が不要な Smoothed Profile Method に対し、外力の計算手法を修正することで、固体壁への流体の漏れを除去した。図 4 の上半分は従来手法による計算結果であり、円柱への漏れが観察される。図 4 の下半分の領域は、本手法による計算結果であり、円柱内への漏れが、完全に除去されていることが分かる。

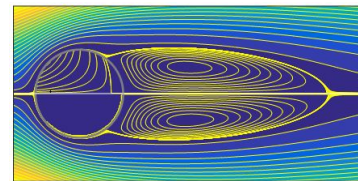


図 4 円柱周り流れ

(4) 提案した計算手法の有効性を検討するため、集束イオンビーム加工観察装置 (Focused Ion Beam, FIB) を用いて、精密加工によりシリコン上にサブマイクロスケールの凹凸面を製作し、超撥水現象の再現を試みた。矩形の凸部の一辺の大きさは  $10\mu\text{m}$  から  $0.5\mu\text{m}$ 、ピッチは  $1\mu\text{m}$  から  $0.32\mu\text{m}$  の 3 種類の凹凸面を  $160\mu\text{m} \times 120\mu\text{m}$  の範囲のシリコンウェハー上に作成した。凹部の深さは  $0.5\mu\text{m}$  である。FIB により超撥水面を製作したシリコンをステージの上に設置し、噴霧器により微小液滴を落下させた。図 5 に示す実験装置により、超撥水面上に落下した液滴の様子を高速カメラにより観察した。参考文献や理論式に基づき、撥水面として作用するはずの凹凸面を製作したが、シリコン上の水滴は、落下してから静止するまでに、大きく横に広がる様子を示し、撥水性を示すことはなかった (図 6(a), (b))。なお、飽和フルオロアルキル基等によるコーティング処理は施していない。凸部間のピッチを小さくし、水滴が凹部に入り込まない Cassie 状態に対応したサブマイクロ凹凸面を製作したが、撥水性は示されなかった。凸部の表面形状による接触角への影響を数値計算により検証した文献を参考に、凸部の形状を十字型に加工した微細凹凸面を製作したところ、超撥水現象を再現することが出来た (図 6(c), (d))。この十字は、縦  $0.66\mu\text{m}$  横  $0.66\mu\text{m}$  の範囲に対し、四隅から一辺が  $0.22\mu\text{m}$  の正方形を取り除いた形状になっている。凸部の表面形状により濡れ性が変化することが示され、三次元計算による超撥水現象の解明に対する有意義な情報を得ることが出来た。

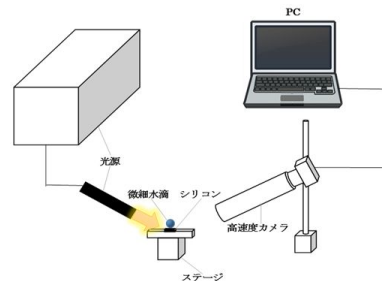


図 5 実験装置

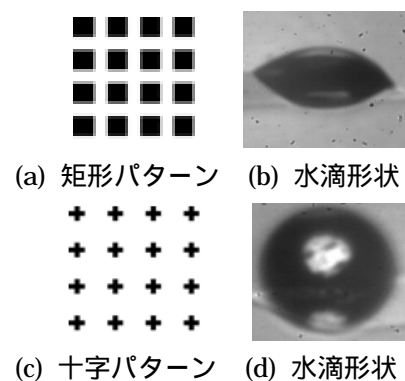


図 6 凸形状による接触角への影響

(5) 新たなプロファイル関数を導入することにより、曲面を有する構造体に対する濡れ性を、高速に解析できる計算モデルの構築に成功した。濡れ性は、オーダー・パラメータに関する勾配と、化学ポテンシャルに対する勾配とを制御することで、適切に設定されている。図 7 に示す球面周りの気液界面の計算結果から、曲面を有する構造体に対する濡れ性を、高速に解析可能な計算モデルの構築が出来た



(a)  $\theta = 60^\circ$  (b)  $\theta = 120^\circ$   
図 7 球周りの気液界面

ことが実証された。また、GPGPU による格子ボルツマン法の高速度化に成功した。数値計算において、微細凹凸面の計算モデルを作成し、液滴挙動を解析したが、Smoothed Profile Method では、固液界面幅が存在するため、凹凸面による液滴挙動への影響を再現できるだけの計算精度が得られなかった。固液界面幅が存在しない Interpolated Bounce-Back Scheme を用い、濡れ性の検討も行ったが、問題は解決されず、複雑境界形状に対する濡れ性の計算手法については今後の課題として残された。

## 5 . 主な発表論文等

[雑誌論文](計 6 件)

Kimura, H., Hayashi, K., Taniguchi, M., Hosoda, K., Fujita, A., Seta, T., Tomiyama, A., and Kohmura, E., Detection of Hemodynamic Characteristics Before Growth in Growing Cerebral Aneurysms by Analyzing Time-of-Flight Magnetic Resonance Angiography Images Alone: Preliminary results, World Neurosurgery, 査読あり, Vol.122, 2019, pp.e1439 - e1448

DOI: 10.1016/j.wneu.2018.11.081

瀬田剛、格子ボルツマン法による曲面境界を有する熱流動解析、計算数理工学論文集、査読あり、Vol.18、2018、pp.1 - 6

Seta, T., Hayashi, K., and Tomiyama, A., Analytical and numerical studies of the boundary slip in the immersed boundary-thermal lattice Boltzmann method, International Journal for Numerical Methods in Fluids, 査読あり, Vol.86, Issue 7, 2018, pp.454 - 490

DOI: 10.1002/flid.4462

瀬田剛、内山知実、高野登、熱流動解析に対する境界条件強制型 Smoothed Profile-Lattice Boltzmann Method の提案、計算数理工学論文集、査読あり、Vol.17、2017、pp.25 - 30

Seta T., Uchiyama, T., and Takano, N., Smoothed profile-lattice Boltzmann method for non-penetration and wetting boundary conditions in two and three dimensions, Computers and Fluids, 査読あり, Vol.159, 2017, pp.64 - 80

DOI:https://doi.org/10.1016/j.compfluid.2017.09.012

瀬田剛、界面拡散モデルに対する格子ボルツマン法への TRT 衝突則の適用、計算数理工学論文集、査読あり、Vol.16、2016、pp.25 - 30

[学会発表](計 12 件)

瀬田剛、格子ボルツマン法による曲面境界を有する熱流動解析、計算数理工学シンポジウム 2018

瀬田剛、流動解析に対する境界条件強制型 Smoothed Profile-Lattice Boltzmann Method の提案、日本計算数理工学会論文賞記念講演、第 35 回計算数理工学フォーラム

瀬田剛、格子ボルツマン法による回転円筒管内三次元自然対流動解析、日本混相流学会混相流シンポジウム 2018

瀬田剛、格子ボルツマン法による曲面境界を有する熱流動解析、第 55 回日本伝熱シンポジウム

瀬田剛、内山知実、高野登、熱流動解析に対する境界条件強制型 Smoothed Profile-Lattice Boltzmann Method の提案、計算数理工学シンポジウム 2017

瀬田剛、林公祐、富山明男、反復計算に基づく埋め込み境界-熱流動格子ボルツマン法の提案、第 31 回数値流体力学シンポジウム

瀬田剛、内山知実、高野登、Smoothed Profile - Lattice Boltzmann Method による濡れ性解析、日本混相流学会混相流シンポジウム 2017

Seta, T., Uchiyama, T., and Takano, N., Numerical Study of Wall Wettabilities by Immersed Boundary-Lattice Boltzmann Method, Third International Symposium on Multiscale Multiphase Process Engineering, 8-11, May 2017, Toyama, Japan

瀬田剛、界面拡散モデルに対する格子ボルツマン法への TRT 衝突則の適用、計算数理工学シンポジウム 2016

瀬田剛、内山知実、高野登、埋め込み境界 - 格子ボルツマン法による濡れ性の計算、日本機械学会第 94 期 流体工学部門講演会

瀬田剛、内山知実、高野登、Cahn-Hilliard 方程式に対する格子ボルツマン法の精度評価、日本機械学会第 29 回計算力学講演会

瀬田剛、濡れ性を考慮した埋め込み境界 - 格子ボルツマン法による液滴挙動解析、日本混相流学会混相流シンポジウム 2016

[図書](計 0 件)

[産業財産権]

出願状況(計 0 件)



名称：  
発明者：  
権利者：  
種類：  
番号：  
出願年：  
国内外の別：

取得状況（計 0 件）

名称：  
発明者：  
権利者：  
種類：  
番号：  
取得年：  
国内外の別：

〔その他〕  
ホームページ等

## 6. 研究組織

### (1) 研究分担者

研究分担者氏名：内山 知実  
ローマ字氏名：(UCHIYAMA, Tomomi)  
所属研究機関名：名古屋大学  
部局名：未来材料・システム研究所  
職名：教授  
研究者番号（8桁）：90193911

### (2) 研究協力者

研究協力者氏名：高野 登  
ローマ字氏名：(TAKANO, Noboru)

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属されます。