

令和 6 年 6 月 2 日現在

機関番号：11301

研究種目：研究活動スタート支援

研究期間：2022～2023

課題番号：22K20397

研究課題名（和文）複雑構造周りにおける液滴蒸発後の溶質膜形状制御因子の解明

研究課題名（英文）Elucidation of factors controlling solute membrane shape formed after droplet evaporation around complex structures

研究代表者

杉本 真 (SUGIMOTO, Makoto)

東北大学・工学研究科・助教

研究者番号：60966852

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 2,200,000円

研究成果の概要（和文）：本研究では、固気液三相の温度場をシミュレート可能なフェーズフィールド格子ボルツマン法の開発を試みた。しかしながら、気液界面において非物理的な熱輸送が生じることが判明した。この問題は気液界面での圧力と界面張力の不均衡に起因する非物理的な速度場によるものと考えられ、非物理的な速度場が熱エネルギー輸送方程式の移流項に代入されることで、非物理的な熱輸送を誘起していることがわかった。そこで、問題解決の第一歩として、移流項を含まない拡散方程式を解くための格子ボルツマン法の開発を行った。開発手法を応用して、電磁ポテンシャルの定常拡散方程式を解くことで、導電性気液混相流のシミュレーションを可能にした。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究で開発した数値シミュレーション手法を用いて、交流ティグ溶接における溶融電極の飛散現象の解明を行った。ティグ溶接において用いられるタングステン電極は、溶融して飛散することが知られている。タングステン電極の放出は電極の消耗を早め、さらに放出されたタングステン液滴が溶接部に混入することで溶接品質の低下を招く。本研究では、数値シミュレーションによって流体運動を再現しながら、液滴飛散の力学なメカニズム解明を試みた。シミュレーション結果より、液滴の飛散には液柱のくびれた部分に作用する電磁気力と界面張力が重要な役割を果たすことがわかった。本知見は、溶接技術の向上に資すると期待される。

研究成果の概要（英文）：The initial goal of this study was to develop a phase-field lattice Boltzmann method for simulating the temperature field of solid-gas-liquid three phases. However, it was found that an unphysical heat transport occurs at the gas-liquid interface. This problem is considered to be caused by an unphysical velocity field due to the imbalance between pressure and interfacial tension at the gas-liquid interface. The unphysical velocity field induces the unphysical heat transport by substituting it into the advection term of the thermal energy transport equation. As a first step to solve the problem, a lattice Boltzmann method for solving the diffusion equation without the advection term was developed. The developed method can be applied to simulate electrically conductive gas-liquid multiphase flows by solving the steady-state diffusion equation for the electromagnetic potential.

研究分野：流体工学

キーワード：気液混相流 格子ボルツマン法 フェーズフィールドモデル 熱物質輸送 電磁気力

1. 研究開始当初の背景

コーヒーなどの不揮発性溶質を含む液滴は蒸発すると、図1に示すようなリング状の溶質膜を残す。これはリングステインと呼ばれ、液滴表面の蒸発速度分布に起因する液滴内対流によって、液滴の接触線付近に溶質が輸送されることで形成される。機能性材料を揮発性スプレーやインクジェット技術により製膜する場合、リングステインは性能のばらつきの原因となるため、膜形状の制御が求められる。一方で、リングステインはコロイド結晶の三次元積層構造作成にも応用されており (Velikov, K. P., Science, 296(5565), 106-109 (2002)), 外力場による溶質膜形状制御についての研究 (Eral, H. B. et al., Soft Matter, 7, 4954 (2011)) も行われている。



図1 リングステイン

溶質膜の形状制御因子は成膜過程において非定常的に変化し、成膜するターゲットの構造にも左右されるため、最終的に形成される膜形状の予測は困難である。例えば有機ELディスプレイのインクジェット画素作成ではキャビティ、紙への印刷では繊維に成膜するため、応用先のデバイスに応じた溶質膜形状制御因子の解明、ならびに膜形状予測が可能な数値解析ツールが必要となる。具体的には、複雑形状を有する固相表面に同時に滴下した複数の液滴の変形および濡れ広がり、液滴内部の溶質濃度分布、さらには溶媒の蒸発や気相中の溶媒分布、固気液の温度場を含む包括的な移動現象論的解析ツールが必要となる。

複雑構造周りの流れ場の計算に適した流体の数値シミュレーション手法として、格子ボルツマン法が挙げられる。格子ボルツマン法は、流体を仮想的な粒子の集合体とみなし、それらの衝突と並進を繰り返し計算することで流れ場を計算する手法である。仮想粒子の衝突計算は局所性が高いため、本手法はスーパーコンピュータを用いた大規模並列計算にも適している。さらに、仮想粒子を任意の情報伝達キャリアとしてみなすことで、様々な移流拡散方程式の計算に応用が可能である利点を有している。格子ボルツマン法を気液混相流のシミュレーションに適用するために、様々なモデルとのカップリングが行われてきた。とりわけフェーズフィールドモデルは、気液界面を有限の厚さを持つ三次元領域として表現するため、気液界面を陽に追跡する必要がなく、変形・分離・合体を伴う気液界面挙動を容易に取り扱うことが可能である。本モデルをカップリングしたフェーズフィールド格子ボルツマン法を用いて、我々はこれまでに、発泡多孔体構造の内部への液滴浸潤現象の再現 (杉本, 他 2 名, 日本機械学会論文集, 86(883), 20-00014 (2020)) や、等温場における平板上の蒸発液滴のシミュレーション (Sugimoto, M. et al., Phys. Rev. E, 103(5), 053307 (2021)) について成功を収めている。しかしながら、複雑構造周りにおける気液二相流、固気液三相の熱輸送および気液間の相変化等の包括的なシミュレーション手法は未だ存在せず、その開発が求められている。

2. 研究の目的

フェーズフィールド格子ボルツマン法に基づく、固気液三相の温度場、気相中の溶媒濃度場、液相中の溶質濃度場、気液間の相変化の全てを同時に解析可能な汎用解析ツールの開発を第一の目的とした。さらに、開発した手法を用いて、複雑構造周りにおける蒸発液滴の大規模シミュレーションを実施し、三次元溶質膜の形状制御因子を解明することを第二の目的とした。

3. 研究の方法

フェーズフィールドモデルでは、相を区別する秩序変数の移流拡散方程式を解くことで気液界面が捕獲される。本研究では秩序変数の移流拡散方程式として、計算コストが低く、かつ安定的に計算可能な保存型 Allen-Cahn 方程式を用いた。格子ボルツマン法の衝突演算にはキュムラントモデルを用いることで、流れ場計算の安定性を高めた。本手法をベースとして、第一に気液間で熱伝導率および熱容量の異なる気液二相の熱輸送をシミュレートするための格子ボルツマン法を実装し、精度検証として壁面非接触三次元液滴の移流計算を実施した。

4. 研究成果

(1) 気液二相の熱輸送計算のためのフェーズフィールド格子ボルツマン法

気液間で熱伝導率および熱容量の異なる、壁面非接触三次元液滴の移流計算を行った。その結果、気液界面において非物理的な熱輸送が生じることが判明した。この問題はラプラス圧と気液間圧力差との間の不均衡に起因する非物理的な速度場によるものであると考えられ、この非物理的な速度場が熱エネルギーの移流拡散方程式の移流項に代入されることで、非物理的な熱輸送を誘起していることがわかった。そこで研究方針を一部変更し、この問題の解決に向けた第一歩として、移流項を含まない拡散方程式を解くための格子ボルツマン法の開発を行い、交流ティグ溶接における電極飛散現象の解明を試みた。

(2) 交流ティグ溶接における電極飛散現象の解明

ティグ溶接はアーク溶接の一種であり、タングステン電極と母材との間で高温かつ導電性を有するアークプラズマを発生させることにより母材を溶融し、接合する溶接法である。近年、交流ティグ溶接において、溶融したタングステン電極が液滴として飛散する現象が実験的に捉えられた (Iida, K. et al., Sci. Rep., 13(1), 12210 (2023))。タングステン液滴の放出は電極の消耗を早め、さらに放出されたタングステン液滴が溶接部に混入することで溶接品質の低下を招くため、電極からの液滴飛散のメカニズム解明ならびに抑制が必要である。Iidaらは実験結果に基づいて電極内での気泡生成、電極表面での気泡破裂、界面張力による液相表面の隆起、電磁気力による液柱の伸長と破断という一連のプロセスを経て液滴が放出されると推察した。しかしながら、これらの流体運動を支配する電磁気力、界面張力、圧力の実験による計測は困難である。したがって、数値シミュレーションによって流体運動を再現しながら、液滴飛散の力学的なメカニズム解明が必要となる。

(1)で開発した手法において、移流項を除くことで拡散方程式を解くことができ、拡散方程式を反復計算して定常解を得ることで、電磁ポテンシャル場（電位場とベクトルポテンシャル場）を解くことができる。本研究では、得られた電磁ポテンシャル場から求めた電磁気力を Navier-Stokes 方程式に外力項として加えることで、導電性気液混相流のためのフェーズフィールド格子ボルツマン法を開発し、上述の液滴放出プロセスのうち、界面張力によって隆起した気液界面を初期場として、シミュレーションを実施した。

図2に気液界面の瞬間像を示す。ここで、計算領域の $-z$ 方向境界（液相側）で高電位、 $+z$ 方向境界（気相側）で低電位となるように境界条件を与え、液相側に気相よりも高い導電率を与えた。図2より、計算初期に配置した波面の凸部が伸長することで液柱が形成され（図2(b),(c)）、その後液柱がくびれて破断することで液滴が生成されることが確認された（図2(d),(e)）。Iidaらによる実験においても同様の挙動が確認されており、本研究で開発した手法を用いることで液滴飛散現象を再現できることが確認された。

図3に液柱伸長時の y 方向の中心断面における電流経路と力の分布を示す。ここで黒色の実線は気液界面、赤色の実線は電流経路、矢印は各力のベクトルを表す。図3より、液相側の境界から流入する電流は導電率の高い液相領域を流れようとし、波面の頂点に電流が集中することがわかる。図中の黒色の枠線内の領域では、界面張力と圧力勾配よりも大きな電磁気力が作用することが確認された。これにより、波面の凸部の伸長には電磁気力が大きく寄与することがわかった。図4に液滴放出直前における力の分布を示す。図4より、伸長して細くくびれた液相領域において、電流がさらに集中すること、ならびに界面曲率が大きいことに起因して、気液界面から液柱の中心軸に向かって大きな電磁気力と界面張力が作用していることがわかる。これらの力によって液柱が破断し、液滴が生成することがわかった。

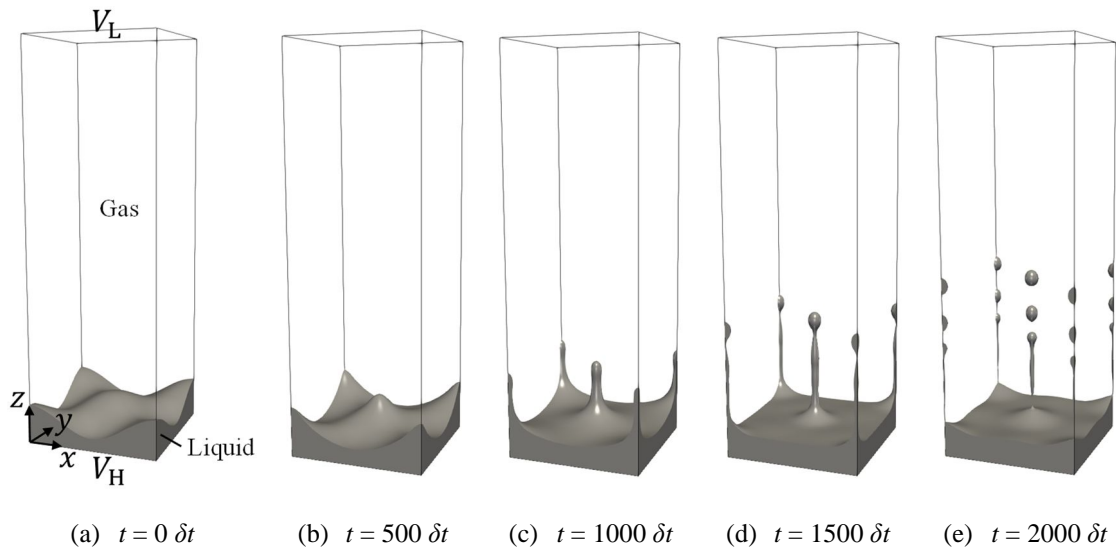


図2 開発手法によって得られた気液界面の瞬間像

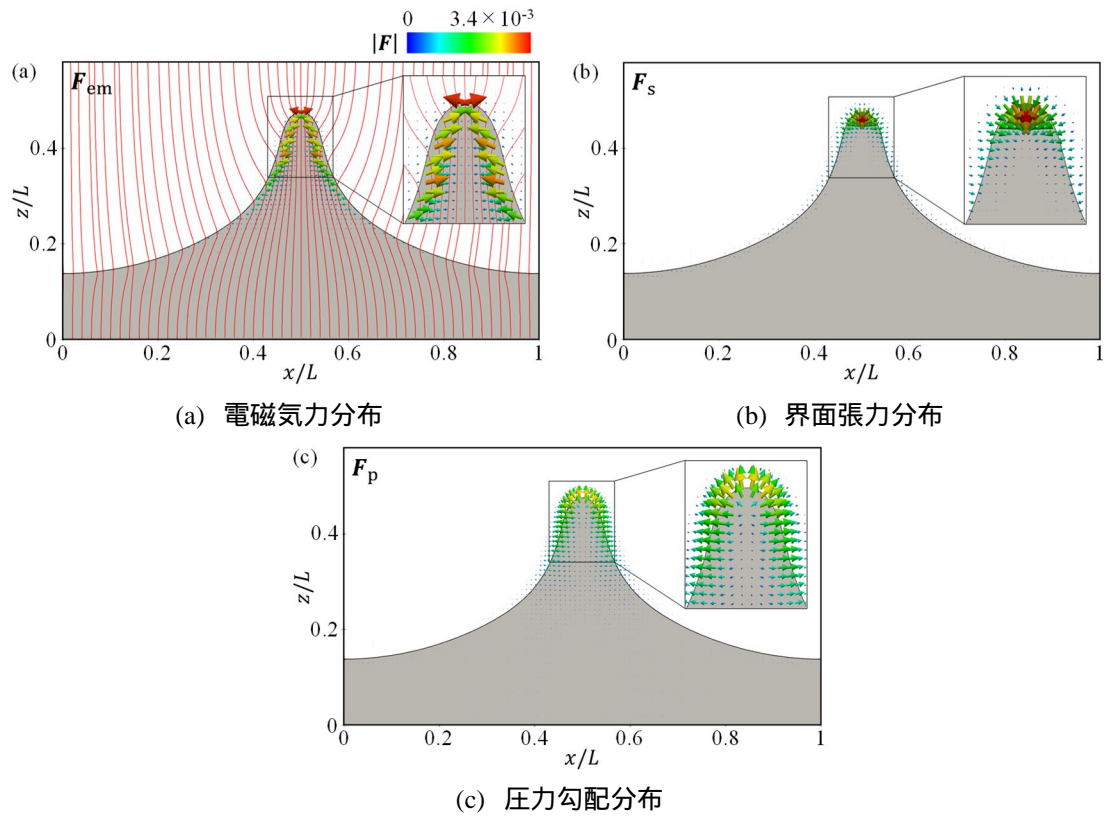


図3 液柱伸長時の電流経路と力の分布

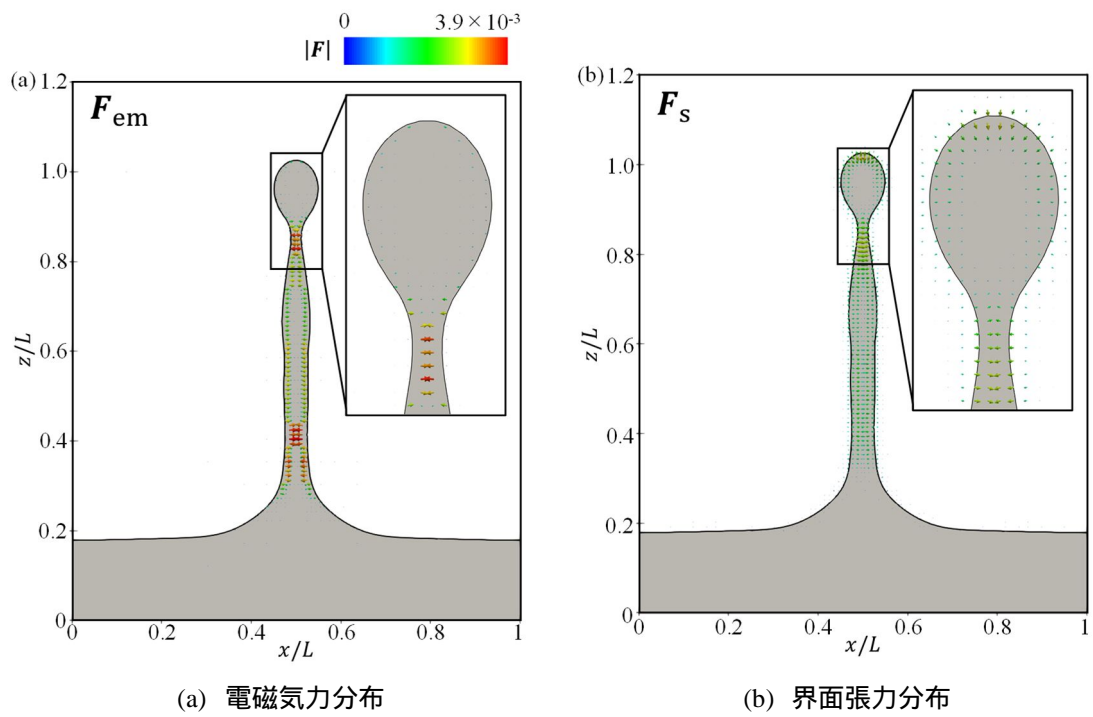


図4 液滴放出直前の力の分布

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計0件

〔学会発表〕 計5件（うち招待講演 1件 / うち国際学会 2件）

1. 発表者名 Makoto Sugimoto, Kengo Toyama, Tatsuya Miyazaki, Masayuki Kaneda, Kazuhiko Suga, Masaya Shigeta
2. 発表標題 Development of Thermal Lattice Boltzmann Method in Transforming Liquid
3. 学会等名 The 5th International Union of Materials Research Societies International Conference of Young Researchers on Advanced Materials (IUMRS-ICYRAM2022) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 杉本 真
2. 発表標題 気液混相流の格子ボルツマンモデリングおよび複雑構造周りの流体挙動解析
3. 学会等名 第35回LBM研究会（招待講演）
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 杉本 真, 金田 昌之, 須賀 一彦
2. 発表標題 Phase-field法における表面張力モデルおよび差分スキームの検討
3. 学会等名 日本機械学会東北支部 第58期総会・講演会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Makoto Sugimoto, Masayoshi Mizutani, Naoki Takano, Masaya Shigeta
2. 発表標題 Lattice Boltzmann Simulation of Liquid Infiltration into Microscale Porous Structure
3. 学会等名 ASME-JSME-KSME Joint Fluids Engineering Conference 2023 (AJK FED2023) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 杉本 真, 茂田 正哉
2. 発表標題 フェーズフィールド - 格子ボルツマン法によるティグ溶接中の溶融電極飛散現象の数値解析
3. 学会等名 第264回溶接法研究委員会
4. 発表年 2024年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織			
氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)		備考

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関