

# 保存型 Allen–Cahn 方程式を導入した改良二相系格子ボルツマン法の 液滴二体衝突問題への適用

Application of the Improved Two-Phase Lattice Boltzmann Method with Conservative Allen–Cahn Equation to Collision Dynamics of Binary Liquid Droplets

- 宮津 尚希, 信州大院, 〒 380-8553 長野市若里 4-17-1, E-mail : 18w4071j@shinshu-u.ac.jp  
 吉野 正人, 信州大工, 〒 380-8553 長野市若里 4-17-1, E-mail : masato@shinshu-u.ac.jp  
 鈴木 康祐, 信州大工, 〒 380-8553 長野市若里 4-17-1, E-mail : kosuzuki@shinshu-u.ac.jp

Naoki Miyatsu, Graduate School of Science and Technology, Shinshu University, Nagano 380-8553  
 Masato Yoshino, Institute of Engineering, Academic Assembly, Shinshu University, Nagano 380-8553  
 Kosuke Suzuki, Institute of Engineering, Academic Assembly, Shinshu University, Nagano 380-8553

Binary collisions of liquid droplets are simulated by the improved two-phase lattice Boltzmann method with the conservative Allen–Cahn (C-A-C) equation. It is found that even when the droplets collide symmetrically, their behavior is asymmetrical and therefore non-physical due to the numerical error of the C-A-C equation. In this study, we attempt three methods to solve this problem. First, we tried to remove small droplets and bubbles in an artificial way, but it is difficult to completely remove small droplets and bubbles, and the non-physical behavior is not suppressed. Next, we changed the magnitude of the anti-diffusion term in the C-A-C equation. It is found that the non-physical behavior is suppressed by increasing the magnitude of the anti-diffusion term. Finally, we calculated with a higher spatial resolution. It is found that the non-physical behavior is slightly suppressed but the computational cost significantly increases.

## 1. 緒言

液滴の衝突は、雲の成長・消滅やエンジン内の燃料噴射など、日常の様々な場面に見られる現象である。この現象を理解するためには液滴の相互作用の詳細な把握が必要である。しかし、特にマイクロスケールの液滴の衝突については、実験による観測が困難な場合も多い。そのため、数値シミュレーションによる解析が有効であると考えられる。

マイクロスケールの系における気液二相流の計算手法として、Inamuro ら<sup>(1)</sup>は、改良二相系格子ボルツマン法（以下、二相系 LBM）を提案している。この手法は、精度よく計算できる界面張力の範囲が広い上、従来にも増してアルゴリズムが簡単で安定かつ高速に高密度比の気液二相流計算が行えることが特長であり、今後様々な現象への適用が期待されている。

この改良二相系 LBM では、保存型拡散界面モデルとして Cahn–Hilliard (C-H) 方程式が用いられており、系全体の質量保存性に優れる一方で、直径が  $10\Delta x$  以下 ( $\Delta x$ : 格子間隔) の小さな液滴の収縮や消滅といった問題点があった。この問題点の解決策として、C-H 方程式の代わりに保存型 Allen–Cahn (C-A-C) 方程式を用いる方法が挙げられる。C-A-C 方程式は系全体の質量保存性に加え、気液各相の質量保存性に優れる保存型拡散界面モデルとして、近年注目されている<sup>(2, 3)</sup>。C-A-C 方程式を導入した二相系 LBM での計算について、蓬萊ら<sup>(4, 5)</sup>は、静止液滴については直径が  $5\Delta x$  程度の小さな液滴も維持可能であることを報告している。一方で、液滴二体衝突問題のような動的な系の計算では、微小液滴の高速移動や対称性の瓦解など、非物理的挙動が生じてしまうことも報告している。

そこで本研究では、C-A-C 方程式を導入した改良二相系 LBM を液滴二体衝突問題に適用し、その際、補正などを加えることで非物理的挙動を抑制し、動的な系にお

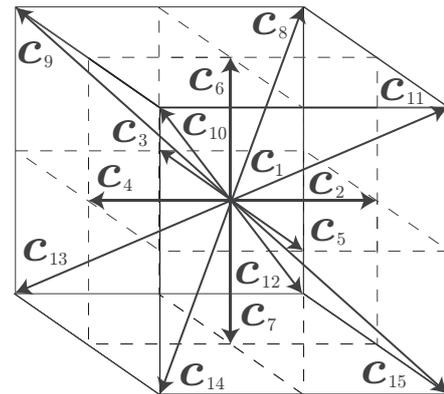


Fig. 1: Three-dimensional 15-velocity model.

いても実用可能な計算手法に改良することを目的とした。

## 2. 計算手法

本研究では、Inamuro らによって提案された改良二相系 LBM<sup>(1)</sup>をベースに、保存型拡散界面モデルとして C-A-C 方程式を導入した蓬萊の計算手法<sup>(5)</sup>を使用した。以下の物理量はすべて、代表長さ  $\hat{L}$ 、粒子の代表速さ  $\hat{c}$ 、時間スケール  $\hat{t}_0 = \hat{L}/\hat{U}$  ( $\hat{U}$ : 流れの代表速さ)、基準 order parameter  $\hat{\phi}_0$ 、および代表密度  $\hat{\rho}_0$  を用いて無次元化したものである。また、添え字 L および G は、それぞれ液相および気相を示す。

### 2.1 保存型 Allen–Cahn 方程式を導入した改良二相系格子ボルツマン法

本手法では LKS (Lattice Kinetic Scheme)<sup>(6)</sup>を用いる。LKS では緩和時間を 1 とするため、速度分布関数を用いることなく巨視的変数である密度  $\rho$ 、圧力  $p$ 、流速  $\mathbf{u}$  を求

めることができる。また、格子気体モデルとして、Fig. 1 に示す 3 次元 15 速度モデルを用いる。この速度モデルの粒子速度  $\mathbf{c}_i$  ( $i = 1, 2, 3, \dots, 15$ ) は以下のように与えられる。

$$[\mathbf{c}_1, \mathbf{c}_2, \mathbf{c}_3, \mathbf{c}_4, \mathbf{c}_5, \mathbf{c}_6, \mathbf{c}_7, \mathbf{c}_8, \mathbf{c}_9, \mathbf{c}_{10}, \mathbf{c}_{11}, \mathbf{c}_{12}, \mathbf{c}_{13}, \mathbf{c}_{14}, \mathbf{c}_{15}] = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & -1 & 0 & 0 & 1 & 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 1 & 1 & 1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 \end{bmatrix}. \quad (1)$$

保存型拡散界面モデルとして C-H 方程式を用いている Inamuro らの手法<sup>(1)</sup>とは、局所平衡分布関数  $f_i^{\text{eq}}$  を用いて二相を識別する order parameter  $\phi$  を求める部分および  $\phi$  の値と  $\rho$  の対応関係の部分が異なるが<sup>2</sup>、それ以外の計算過程は共通である。時刻  $t$  における格子点  $\mathbf{x}$  上の  $\phi$  の時間発展式は以下ようになる。

$$\phi(\mathbf{x}, t + \Delta t) = \sum_{i=1}^{15} \{f_i^{\text{eq}}(\mathbf{x} - \mathbf{c}_i \Delta x, t) + AE_i [\phi(\mathbf{x}, t) - \phi(\mathbf{x} - \mathbf{c}_i \Delta x, t)]\}, \quad (2)$$

ここで、 $\Delta t$  は時間刻み幅（仮想粒子が隣の格子点まで移動する時間）であり、 $A$  はモビリティを決定するパラメータである。また、 $f_i^{\text{eq}}$  は次式で表される局所平衡分布関数である。

$$f_i^{\text{eq}} = E_i \phi (1 + 3c_{i\alpha} u_\alpha) + 3E_i c_{i\alpha} n_\alpha M \theta. \quad (3)$$

上式において、

$$E_1 = 2/9, E_2 = E_3 = E_4 = \dots = E_7 = 1/9, \\ E_8 = E_9 = E_{10} = \dots = E_{15} = 1/72, \quad (4)$$

$$n_\alpha = \frac{\partial \phi}{\partial x_\alpha} / \sqrt{\left(\frac{\partial \phi}{\partial x_\gamma}\right)^2}, \quad (5)$$

$$\theta = \frac{1 - 4\phi^2}{W}, \quad (6)$$

$$M = \frac{1}{6}(1 - A)\Delta x, \quad (7)$$

ここで、 $\alpha, \beta, \gamma = x, y, z$  (総和規約に従う) であり、 $W$  は界面厚さを決めるパラメータ、 $M$  はモビリティと呼ばれる拡散係数に相当するパラメータである。また、各相の密度  $\rho$  は次のように決定する。

$$\rho = \begin{cases} \rho_G, & \phi = \phi_{\min}, \\ \frac{\phi - \phi_{\min}}{\phi_{\max} - \phi_{\min}}(\rho_L - \rho_G) + \rho_G, & \phi_{\min} < \phi < \phi_{\max}, \\ \rho_L, & \phi = \phi_{\max}, \end{cases} \quad (8)$$

ここで、 $\phi_{\max}, \phi_{\min}$  は、それぞれ  $\phi$  の最大値、最小値である。また、各相の粘性係数  $\mu$  は、次式で与えられる。

$$\mu = \frac{\phi - \phi_{\min}}{\phi_{\max} - \phi_{\min}}(\mu_L - \mu_G) + \mu_G. \quad (9)$$

次に、圧力  $p$  を求める手順について説明する。圧力の計算に関しては、数回の反復計算を行うことでより数値安定性を高めている。この反復計算を行うことで音速を上昇させ、非圧縮性からの誤差を抑える。以下に圧力の反復計算手順を示す。

- (i)  $p_0 = p(\mathbf{x}, t)$  とする。
- (ii) 反復  $l$  回目の圧力  $p_l$  がわかっているものとし、それから反復  $(l + 1)$  回目の圧力を次のように求める。

$$p_{l+1}(\mathbf{x}) = p_l(\mathbf{x}) + \frac{\omega(\mathbf{x}, t)}{3} \sum_{i=1}^{15} [g_i^{\text{eq}}(\mathbf{x} - \mathbf{c}_i \Delta x, t) + \Delta P_{i,l}(\mathbf{x}, t)], \quad (10)$$

ここで、 $\Delta P_{i,l}$  は密度の異なる二相流に対する圧力の微分項であり、以下で与えられる。

$$\Delta P_{i,l}(\mathbf{x}, t) = \frac{3}{2} E_i \left[ \frac{1}{\rho(\mathbf{x} - \mathbf{c}_i \Delta x, t)} + \frac{1}{\rho(\mathbf{x}, t)} \right] \times [p_l(\mathbf{x} - \mathbf{c}_i \Delta x) - p_l(\mathbf{x})]. \quad (11)$$

この反復を  $n$  回まで繰り返す。

- (iii)  $p(\mathbf{x}, t + \Delta t) = p_n(\mathbf{x})$  として時刻  $t + \Delta t$  における圧力を求める。

なお、式 (10) における  $\omega$  は音速を調整するパラメータであり、次式で与えられる。

$$\omega(\mathbf{x}, t) = \frac{\rho(\mathbf{x}, t) - \rho_G}{\rho_L - \rho_G} (\omega_{\max} - \rho_G) + \rho_G, \quad (12)$$

ここで、 $\omega_{\max}$  は  $\rho_G \leq \omega_{\max} \leq \rho_L$  を満たす定数である。また、局所平衡分布関数  $g_i^{\text{eq}}$  は、次式で与えられる。

$$g_i^{\text{eq}} = E_i \left[ 3u_\alpha c_{i\alpha} - \frac{3}{2} u_\alpha u_\alpha + \frac{9}{2} u_\alpha u_\beta c_{i\alpha} c_{i\beta} \right]. \quad (13)$$

流速  $\mathbf{u}$  は式 (13) を用いて、以下に示す時間発展式により求める。

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t + \Delta t) = \sum_{i=1}^{15} \mathbf{c}_i \{g_i^{\text{eq}}(\mathbf{x} - \mathbf{c}_i \Delta x, t) + \Delta P_i(\mathbf{x}, t + \Delta t) + 3A_u(\mathbf{x}, t) E_i \mathbf{c}_i \cdot [\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) - \mathbf{u}(\mathbf{x} - \mathbf{c}_i \Delta x, t)] + 3E_i c_{i\alpha} V_\alpha(\mathbf{x}, t)\} - \frac{1}{6} (1 - A_u(\mathbf{x}, t)) \lambda (\Delta x)^4 \nabla^2 (\nabla^2 \mathbf{u}(\mathbf{x}, t)) + \frac{1}{\rho(\mathbf{x}, t)} \mathbf{F}_{\text{sv}}(\mathbf{x}, t) \Delta x, \quad (14)$$

ここで、式 (14) の  $\Delta P_i$  は式 (11) において  $l = n$  としたものである。また、 $V_\alpha$  は次式より求められる。

$$V_\alpha = \frac{1}{\rho} \frac{\partial \mu}{\partial x_\beta} \left( \frac{\partial u_\beta}{\partial x_\alpha} + \frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\beta} \right) \Delta x, \quad (15)$$

さらに、 $A_u$  は動粘度を調整するパラメータであり、次式により求まる。

$$\nu(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{6} (1 - A_u(\mathbf{x}, t)) \Delta x. \quad (16)$$

式 (14) の  $\lambda$  は計算の安定性に関わるパラメータであり、 $\lambda = \mathcal{O}(1)$  である。また、 $\mathbf{F}_{\text{sv}}$  は、CSF モデル<sup>(7)</sup> から導

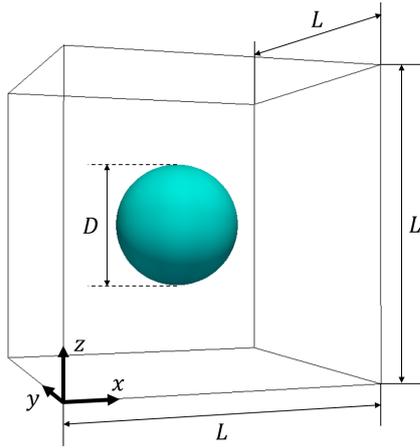


Fig. 2: Computational domain and definition of variables.

かれる界面張力  $\sigma$  に関する体積力であり、次式で与えられる。

$$\mathbf{F}_{sv} = \sigma \chi(\mathbf{x}, t) \frac{\nabla \rho(\mathbf{x}, t)}{\Delta \rho} \frac{\rho(\mathbf{x}, t)}{\langle \rho \rangle}, \quad (17)$$

ここで、 $\Delta \rho = \rho_L - \rho_G$ 、 $\langle \rho \rangle = (\rho_L + \rho_G)/2$  である。また、 $\chi$  は曲率を表しており、次式により求まる。

$$\chi(\mathbf{x}, t) = -\nabla \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}, t), \quad (18)$$

ここで、式 (18) における  $\mathbf{n}$  は法線方向の単位ベクトルであり、次式で表される。

$$\mathbf{n}(\mathbf{x}, t) = \frac{\nabla \rho(\mathbf{x}, t)}{|\nabla \rho(\mathbf{x}, t)|}. \quad (19)$$

式 (5), (14), (15), および (19) における微分は、以下の差分近似を用いる。

$$\frac{\partial \psi}{\partial x_\alpha} \approx \frac{1}{10\Delta x} \sum_{i=2}^{15} c_{i\alpha} \psi(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta x), \quad (20)$$

$$\nabla^2 \psi \approx \frac{1}{5(\Delta x)^2} \left[ \sum_{i=2}^{15} \psi(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta x) - 14\psi(\mathbf{x}) \right]. \quad (21)$$

### 3. 数値計算例

改良二相系 LBM に C-A-C 方程式を導入した蓬葉の計算手法<sup>(5)</sup>を用いて、静止系・動的な系の計算をそれぞれ行い、本手法の長所・短所を改めて明らかにする。

#### 3.1 静止液滴

静止系の数値計算例として、単一静止液滴の計算を行い、液滴直径の時間変化を観察することで、本手法の質量保存性を検証する。

計算条件として、Fig. 2 に示すような一辺  $L$  の立方体計算領域内に、直径  $D$  の液滴を領域中心に配置する。境界条件は、領域の全面に周期境界条件を適用した。本計算では、 $L = 96\Delta x$ 、液相密度  $\rho_L = 800$ 、気相密度  $\rho_G = 1$ 、液相粘度  $\mu_L = 8.0 \times 10^{-1}\Delta x$ 、気相粘度  $\mu_G = 1.6 \times 10^{-2}\Delta x$ 、

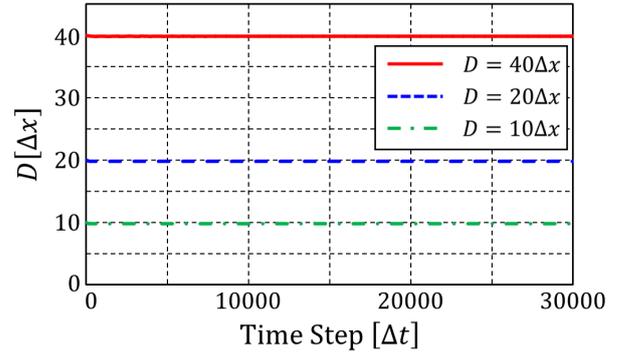


Fig. 3: Time variations of the diameter of droplets.

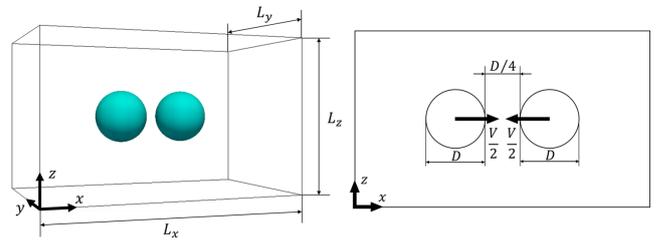


Fig. 4: Computational domain and definition of variables.

界面張力  $\sigma = 4.0 \times 10^{-1}\Delta x$  とし、液滴直径  $D$  を  $40\Delta x$ ,  $20\Delta x$ ,  $10\Delta x$  の 3 パターンについて計算を行った。また、 $M = (1/60)\Delta x$ ,  $W = 4$ ,  $n = 2$ ,  $\omega_{\max} = \rho_L/2$ ,  $\lambda = 1$  とし、order parameter  $\phi$  の上限下限をそれぞれ  $\phi_{\max} = 0.5$ ,  $\phi_{\min} = -0.5$  とした。 $\sigma$  は  $\Delta t \leq t \leq 100\Delta t$  にかけて線形的に印加し、 $t = 30000\Delta t$  までの液滴直径の時間変化を観測した。

液滴の直径の時間変化の様子を Fig. 3 に示す。Fig. 3 より、いずれの大きさの液滴においても長時間直径が保たれていることがわかる。 $t = 30000\Delta t$  における、設定直径に対する液滴直径維持率 [%] はそれぞれ、 $D = 40\Delta x$  のとき 99.6%,  $20\Delta x$  で 99.1%,  $10\Delta x$  で 97.6% であった。

以上の結果より、本手法の静止系の計算における質量保存性の高さが確認された。

#### 3.2 液滴二体衝突

動的な系の数値計算例として、二体液滴の衝突計算を行い、液滴の挙動を観察することで、本手法による計算の課題を明らかにする。

Fig. 4 に示す  $L_x \times L_y \times L_z$  の計算領域内に、直径が  $D$  の 2 つの液滴を  $D/4$  だけ離して配置し、相対衝突速さ  $V$  で正面衝突させる。境界条件は、領域の全面に周期境界条件を適用した。この系の支配パラメータは、液相と気相の密度比 ( $\rho_L/\rho_G$ )、液相と気相の粘度比 ( $\mu_L/\mu_G$ )、液相基準のウェーバー数  $We = \rho_L DV^2/\sigma$ 、および液相基準のキャピラリー数  $Ca = \mu_L V/\sigma$  である。本計算では、 $\rho_L/\rho_G = 941.6$ ,  $\mu_L/\mu_G = 333.3$ ,  $We = 100$ , および  $Ca = 0.5$  とした。ここで、計算領域は  $L_x \times L_y \times L_z = 5D \times 3D \times 3D$  であり、その他のパラメータを  $D = 40\Delta x$ ,  $V = 1.0 \times 10^{-2}$ ,  $\rho_L = 941.6$ ,  $\rho_G = 1$ ,  $\mu_L = 1.88\Delta x$ ,

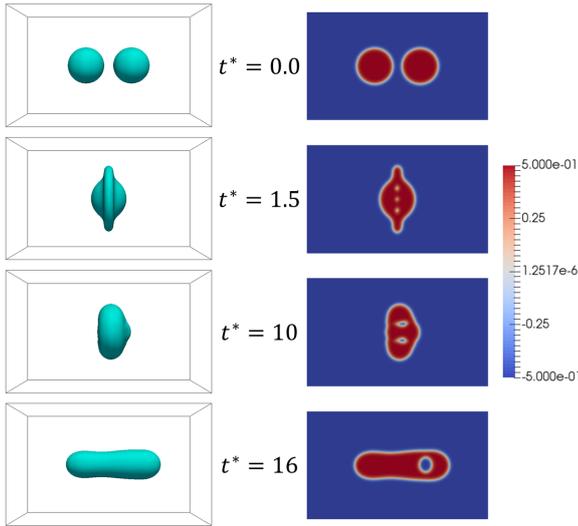


Fig. 5: Time evolutions of the droplet shape (left) and the order parameter  $\phi$  profile on  $y = L_y/2$  (right) for  $We = 100$  and  $Ca = 0.5$  ( $t^* = tV/D$ ).

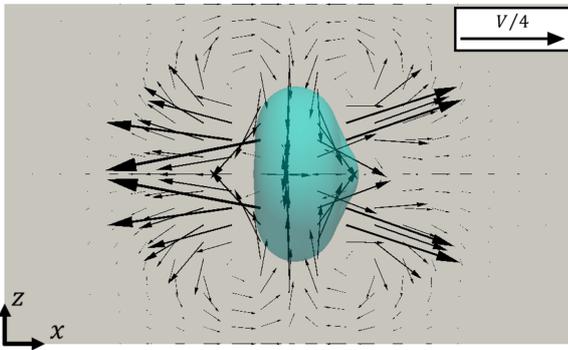


Fig. 6: Velocity vectors and droplet shape on  $y = L_y/2$  at  $t^* = 10$  for  $We = 100$  and  $Ca = 0.5$  ( $t^* = tV/D$ ). The length of the vectors is normalized by the relative speed  $V$  (inset).

$\mu_G = 5.65 \times 10^{-3} \Delta x$ ,  $\sigma = 3.77 \times 10^{-2} \Delta x$  とした。

液滴の挙動および中心断面における  $\phi$  の様子を Fig. 5 に示す。Fig. 5 より、液滴が衝突し円盤状に広がった後、収縮する際に液滴全体が  $x$  軸正の方向に伸長し、最終的に領域に対して左右非対称な形状になることがわかる。次に、 $t^* = 10$  における中心断面の流れ場の様子を Fig. 6 に示す。Fig. 6 より、流れ場の対称性も崩れていることがわかる。

以上の結果より、本手法の動的な系の計算では、非物理的な挙動が見られることがわかった。

#### 4. 非物理的挙動に対する対策

3.2 節より、液滴二体衝突計算では、左右の対称性が崩れるなど、非物理的挙動が見られることがわかった。そこで、3 パターンのアプローチによって、この非物理的挙動の抑制を試みた。

##### 4.1 微小液滴・気泡に対する補正

液滴二体衝突計算における非物理的な挙動の原因として、蓬萊ら<sup>(4, 5)</sup>は、液滴衝突時に生じる数値計算上の丸め誤差の蓄積を挙げている。そこで、微小液滴・気泡を補正することで非物理的挙動を抑制することを考えた。

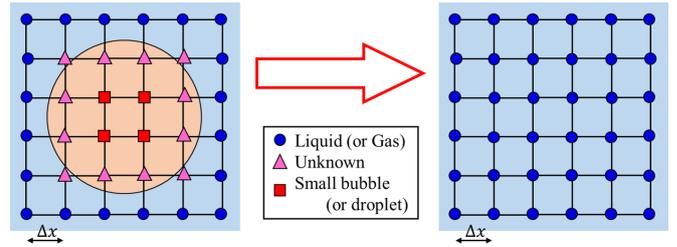


Fig. 7: A schematic illustration of how to remove small bubbles (or droplets).

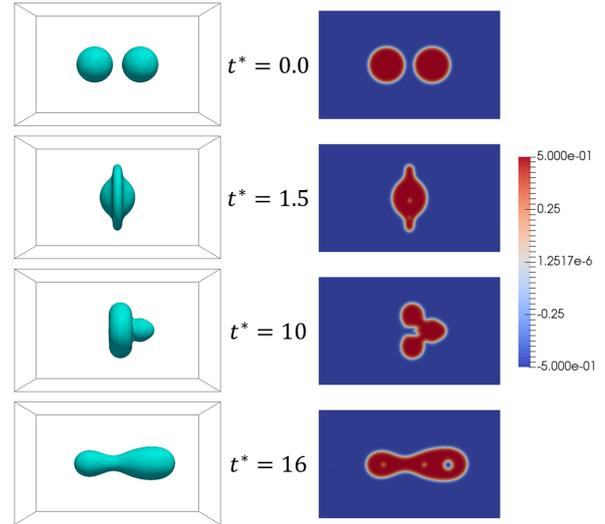


Fig. 8: Time evolutions of the droplet shape (left) and the order parameter  $\phi$  profile on  $y = L_y/2$  for  $We = 100$ ,  $Ca = 0.5$  and  $\alpha = 0.3$  ( $t^* = tV/D$ ).

##### 4.1.1 対策方法

補正すべき微小液滴・気泡を周辺の相と同一化することで消滅させ、非物理的挙動の抑制を試みた。補正に際し、液滴衝突時に液滴間に生じる微小気泡の直径を測定したところ、約  $3\Delta x \sim 4\Delta x$  相当であることがわかった。よって、直径  $4\Delta x$  以下の微小液滴・気泡を補正対象とした。

次に、微小気泡部の  $\phi$  を測定したところ、気相相当の  $\phi = \phi_{\min}$  には達しておらず、完全な気相ではないことがわかった。そこで、新たに微小液滴・気泡判別用パラメータ  $\alpha < 1$  を定義し、 $\phi_{\max}$  (or  $\phi_{\min}$ )  $\times \alpha$  を基準値として、局所的に  $\phi$  が基準値に達していない部分を微小液滴・気泡と判別することとした。

補正の方法を、簡単のため 2 次元的に表したものを Fig. 7 に示す。まず直径  $4\Delta x$  程度の液滴・気泡への対策として、 $6 \times 6 \times 6$  の格子点を想定し、中心部の  $2 \times 2 \times 2$  の格子点がいずれも  $6 \times 6 \times 6$  の格子点の外壁面上の相の基準値を下回る（上回る）ならば、中心部の  $4 \times 4 \times 4$  の格子点を全て外壁面の相と同一化する。これは、直交格子上に存在する球状の液滴・気泡の外部と内部の条件より、球全体を補正するための方法である。例えば、 $6 \times 6 \times 6$  の格子点の外壁面上の  $\phi$  が全て  $\phi_{\max}$  付近（液相）であり、中心部の  $2 \times 2 \times 2$  の格子点がいずれも  $\phi \leq \phi_{\max} \times \alpha$  を満たす（微小気泡）とき、中心部の  $4 \times 4 \times 4$  の格子点の  $\phi$  を  $\phi = \phi_{\max}$  に補正する。同時に  $3\Delta x$  以下の液滴・気泡への対策として、 $5 \times 5 \times 5$  の格子点も想定し、同様

に微小液滴・気泡の補正を行った。

#### 4.1.2 計算結果および考察

基準値を決定するパラメータ  $\alpha$  を  $0.3 \leq \alpha \leq 0.4$  の範囲で変化させ、補正を加えて 3.2 節と同様の計算を行った。計算結果の一例として、 $\alpha = 0.3$  の時の中心断面における  $\phi$  の様子を Fig. 8 に示す。Fig. 8 と Fig. 5 を比較すると、補正により液滴衝突時 ( $t^* = 1.5$ ) に生じる微小気泡をいくつか消滅させることができたが、依然として微小気泡は残っており、対称性の瓦解もあまり改善が見られないことがわかった。他の  $\alpha$  の結果においても、同様に多少の微小液滴・気泡消滅を確認したが、非物理的挙動の改善には至っておらず、また、 $\alpha$  の値の大小による結果の変化にも法則性は見られなかった。

以上の結果より、微小液滴・気泡の完全な消滅は今回の方法では困難であり、また、補正を加えても非物理的挙動も抑制されないことがわかった。

#### 4.2 反拡散項に対する検討

C-A-C 方程式では、拡散成分と反拡散成分の人工的なバランスにより、系全体および気液各相の質量保存性が保たれている<sup>(2)</sup>。そこで、拡散成分と反拡散成分のバランスについて再度検討を行うことにより、非物理的挙動の抑制を試みた。

##### 4.2.1 対策方法

C-A-C 方程式で  $\phi$  が満たすべき方程式は、以下のような移流拡散方程式である。

$$Sh \frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_\alpha} (\phi u_\alpha) = - \frac{\partial J_\alpha}{\partial x_\alpha}, \quad (22)$$

ここで、 $Sh$  はストローハル数であり、 $J_\alpha$  は以下の式で表される  $\phi$  の流束である。

$$J_\alpha = -M \left( 1 - \frac{1}{|\nabla \phi|} \frac{1 - 4\phi^2}{W} \right) \frac{\partial \phi}{\partial x_\alpha}. \quad (23)$$

式 (23) の括弧内第一項が拡散成分、第二項が反拡散成分にあたる。今回、この拡散・反拡散間のバランスについて検討するため、定数パラメータ  $C_{\text{anti}}$  を定義し、 $\phi$  の流束を新たに、

$$J'_\alpha = -M \left( 1 - \frac{1}{C_{\text{anti}} |\nabla \phi|} \frac{1 - 4\phi^2}{W} \right) \frac{\partial \phi}{\partial x_\alpha}, \quad (24)$$

として、いくつかの  $C_{\text{anti}}$  について 3.2 節と同様の計算を行った。

##### 4.2.2 計算結果および考察

$C_{\text{anti}}$  を  $0.5 \leq C_{\text{anti}} \leq 5.0$  の範囲で変化させ計算を行った。計算結果の例として  $C_{\text{anti}} = 2.0$  および  $0.75$  の結果を Fig. 9 に示す。Fig. 9 と Fig. 5 を比較すると、 $C_{\text{anti}} = 2.0$  では左右の対称性は大きく崩れたままであるが、 $C_{\text{anti}} = 0.75$  では対称性がやや崩れている程度で、検討前よりも非物理的挙動が抑制されていることがわかる。 $C_{\text{anti}} = 0.5$  では計算が安定せず、早い段階で計算が発散してしまった。また、 $C_{\text{anti}} = 5.0$  では拡散成分が支配的となり、液滴の質量が大きく消失してしまった。

以上の結果より、反拡散成分を増大させることにより、

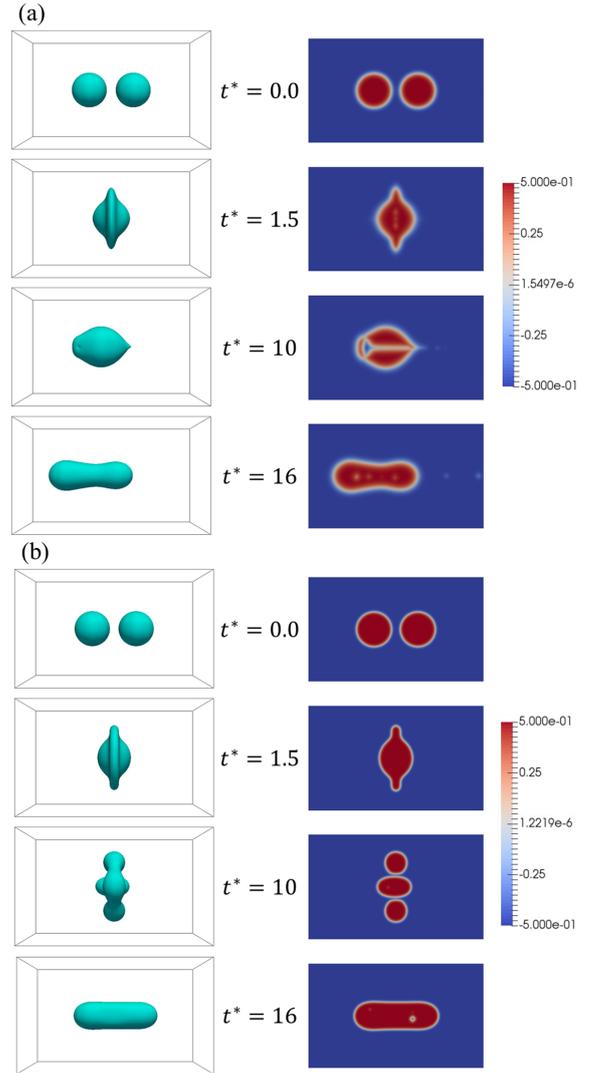


Fig. 9: Time evolutions of the droplet shape (left) and the order parameter  $\phi$  profile on  $y = L_y/2$  for  $We = 100$  and  $Ca = 0.5$ : (a)  $C_{\text{anti}} = 2.0$ ; (b)  $C_{\text{anti}} = 0.75$  ( $t^* = tV/D$ ).

非物理的挙動がいくらか抑制されることがわかった。しかし、数値安定性の問題から、設定できる  $C_{\text{anti}}$  の範囲には制限があることもわかった。

#### 4.3 空間解像度の向上

4.1 節でも述べたように、非物理的挙動の原因として、精度よく計算できない大きさの微小液滴・気泡の維持が挙げられる<sup>(4, 5)</sup>。そこで、空間解像度を向上させることにより、液滴衝突時に生じる微小液滴・気泡の計算精度を向上させ、非物理的挙動の抑制を試みた。

##### 4.3.1 対策方法

空間解像度を 1.5 倍に向上させ計算を行った。計算条件として液滴直径を  $D = 60\Delta x$  に変更し、計算安定性のために相対速度を  $V = 1.0 \times 10^{-2}/1.5^2$  に変更した。それに伴い、液相粘度、気相粘度および界面張力をそれぞれ  $\mu_L = 1.26\Delta x$ ,  $\mu_G = 3.77 \times 10^{-3}$ ,  $\sigma = 1.11 \times 10^{-2}$  とした。その他のパラメータおよび計算条件は 3.2 節と

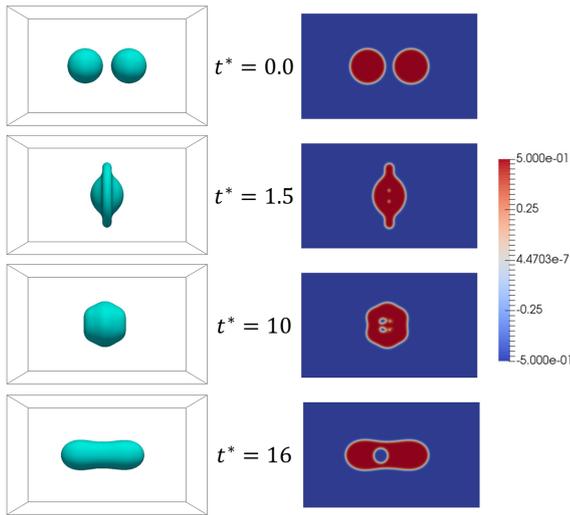


Fig. 10: Time evolutions of the droplet shape (left) and the order parameter  $\phi$  profile on  $y = L_y/2$  (right) for  $We = 100$  and  $Ca = 0.5$  ( $t^* = tV/D$ ).

同様とした。

#### 4.3.2 計算結果および考察

計算結果を Fig. 10 に示す。Fig. 10 と Fig. 5 を比較すると、空間解像度の向上により、非物理的挙動がいくらか抑制されていることがわかる。しかし、対策方法でも述べたように、空間解像度を向上させた計算では、計算安定性のために液滴速度を減少させる必要があり、より多くの計算資源を必要とする。そのため、非物理的挙動の完全な解決や実用化という観点からは、まだ課題が多いことが現状である。

## 5. 結言

保存型 Allen–Cahn 方程式を導入した改良二相系格子ボルツマン法<sup>(5)</sup>を用いて数値計算を行った結果、以下のことがわかった。

- ・ 単一静止液滴の計算では、どの大きさの液滴においても直径が長時間維持され、本手法の高い質量保存性が示された。
- ・ 液滴二体衝突の計算では、左右の対称性が崩れるなど、非物理的な挙動が発生するため、実用化に向けては改良が必要である。

液滴二体衝突の計算で発生する非物理的挙動の抑制のため、3 パターンのアプローチにより課題解決を試み、以下の結論が得られた。

- ・ 微小液滴・気泡に対する補正を行うことで課題解決を試みたが、微小液滴・気泡の完全な消滅には至らず、非物理的挙動も抑制されなかった。
- ・ C-A-C 方程式の拡散成分と反拡散成分のバランスについて検討を行ったところ、反拡散成分を増大させることで非物理的挙動がある程度抑制された。
- ・ 空間解像度を向上させて計算を行ったところ、非物理的挙動はやや抑制されたが、計算安定性の観点から、更なる解像度の向上や実用化に向けては、計算資源の課題がある。

## 参考文献

- (1) Inamuro, T., Echizen, T. and Horai, F., “Validation of an improved lattice Boltzmann method for incompressible two-phase flows,” *Comput. Fluids*, 175 (2018), pp. 83-90.
- (2) Chiu, P.-H. and Lin, Y.-T., “A conservative phase field method for solving incompressible two-phase flows,” *J. Comput. Phys.*, 230 (2011), pp. 185-204.
- (3) Geier, M., Fakhari, A. and Lee, T., “Conservative phase-field lattice Boltzmann model for interface tracking equation,” *Phys. Rev. E*, 91 (2015), 063309.
- (4) 蓬萊, 中神, 稲室, “改良二相系格子ボルツマン法における保存型拡散界面モデルの検討,” 第 32 回数値流体力学シンポジウム (2018), F09-3.
- (5) 蓬萊, “改良二相系格子ボルツマン法における保存型拡散界面モデルの検討,” 京都大学修士論文 (2019).
- (6) Inamuro, T., “A lattice kinetic scheme for incompressible viscous flows with heat transfer,” *Phil. Trans. R. Soc. Lond. A*, 360 (2002), pp. 477-484.
- (7) Brackbill, J. U., Kothe, D. B. and Zemach, C., “A continuum method for modeling surface tension,” *J. Comput. Phys.*, 100 (1992), pp. 335-354.