第 14 回数値流体力学シンポジウム
F06-4

二相流体シミュレーションにおける格子ボルツマンモデルの検討

Examination of Lattice Boltzmann Model in Two-Phase Fluid Simulation

高田尚樹，工技院資環研，〒305-8569 茨城県つくば市小野川 16-3, takada@nire.go.jp
冨山明男，神戸大・院，〒657-8501 神戸市灘区六甲台町 1-1, tomiyama@mech.kobe-u.ac.jp
細川茂雄，神戸大・院，〒657-8501 神戸市灘区六甲台町 1-1, hosokawa@mech.kobe-u.ac.jp
Naoki TAKADA, Mech. Eng. Lab., AIST, 1-2,Namiki, Tsukuba, Ibaraki 305-8564, JAPAN, takada@nire.go.jp
Akio TOMIYAMA, Dep.Eng.,Kobe Univ.,1-1 Rokkodai,Nada,Kobe657-8501,JAPAN,tomiyama@mech.kobe-u.ac.jp
Shigeo HOSOKAWA, Dep.Eng.,Kobe Univ.,1-1 Rokkodai,Nada,Kobe657-8501,JAPAN,hosokawa@mech.kobe-u.ac.jp

In this study, a lattice Boltzmann two-phase fluid model is examined, in which macroscopic fluid motions result from collision and translation of particles and the interface can be reproduced in a self-organizing way by repulsive interaction. We included the buoyancy terms due to the density difference in the lattice Boltzmann equations, and simulated single- and two-bubble motions. In three dimensions, the surface tension was satisfied with the Laplace's law and controllable with a parameter. The simulation of two-bubble interaction showed that the leading bubble takes a shape of skirt as the trailing one approaches due to its wake formation, and they coalesce into a single bubble eventually, where the liquid films between bubbles break up and move with gas phase flow.

1．はじめに

格子ボルツマン法(Lattice Boltzmann Method, LBM) [(1),(2)]は，流体塊を構成する仮想的な流体粒子の衝突と並進の反復からマクロスケールの流動現象を模擬する統計力学的な計算手法である．LBM の特徴の 1 つは，粒子間の反発作用の導入により，界面を境界条件なしに自己組織的に再現できることであり，多相流体モデルの提案や液滴や気泡の運動の数値解析に関する研究結果が数多く報告されている[(3)-(6)]．我々はこれまで Swift らの二相流体モデル(Binary Fluid Model)[(2)]に浮力を考慮して気泡運動を計算し，VOF 法の結果や実験式との比較から妥当な結果を得ている[(7)]．本報では，気泡運動の計算結果を示しながら、LBM の二相流体モデルが持つ粘性や拡散、表面張力の効果とそれらの調節パラメータの関係、および界面の合一・分裂挙動等を検討する．

2．LBM の二相流体モデル

LBM の流体粒子は，3 次元の場合，単位長さの辺を持つ立方格子で一様に離散化された空間内で,1 ﾀｲﾑｽﾃｯﾌﾟ(時間幅Δt)間に別の格子点へ移動するか，格子点上に静止する．本計算では，格子線に沿う速さ 2 の速度ベクトル $\mathbf{e}_{1,i}$ $(i=1〜6)$ と対角方向に速さ $\sqrt{3}$ の $\mathbf{e}_{2,i}$ (i = 1〜8) [(8)]を扱う(**Fig.1**). LBM は，時刻 t,格子点 $\mathbf{r}$ における速度毎の粒子集団の粒子数密度を，統計確率的な衝突および並進過程から求める．

本研究で用いる Binary Fluid Model[(3)-(4)]は，自由エネルギー関数の導入によって，臨界点近傍における二相共存の平衡状態を定義できる．二相流体は A・B2 成分の粒子から構成され,各粒子数密度 n_A と n_B の和 $n = n_A + n_B$，およびその差 $\Delta n = n_A - n_B$ を用いてマクロスケールの二相流体を表現する．各相は,A・B 成分の粒子のいずれかをより多く含み，Δn の符号によって識別される．一方，数密度の和 n は， 流れ場全体に渡ってほぼ一定で，圧力に比例する．これら数密度の変数は，粒子速度に関する粒子数密度の分布関数 $f_{l,i}(t,\mathbf{r})$ および $g_{l,i}(t,\mathbf{r})$ によって次式で定義される($l=1,2$).

$$n = \sum_{l,i} f_{l,i}(t,\mathbf{r}) = \sum_{l,i} f_{l,i}^{eq}(t,\mathbf{r}) \tag{1}$$

$$\Delta n(t,\mathbf{r}) = \sum_{l,i} g_{l,i}(t,\mathbf{r}) = \sum_{l,i} g_{l,i}^{eq}(t,\mathbf{r}) \tag{2}$$

上付き添字 eq は平衡状態における関数であることを示す．流速 $\mathbf{u}$ は，$f_{l,i}(t,\mathbf{r})$ から求められる．

$$\mathbf{u} = \sum_{l,i} f_{l,i}(t,\mathbf{r})\mathbf{e}_{l,i}/n = \sum_{l,i} f_{l,i}^{eq}(t,\mathbf{r})\mathbf{e}_{l,i}/n \tag{3}$$

流体粒子は，数密度と運動量を保存するように各格子点で同時に衝突した後，別の格子点に移動する．この一連の運動による粒子速度分布の時間発展は， $f_{l,i}$ および $g_{l,i}$ について次式で表される[(6)].

$$f_{l,i}(t+\Delta t,\mathbf{r}+\mathbf{e}_{l,i}\Delta t) = f_{l,i}(t,\mathbf{r}) - \frac{f_{l,i}(t,\mathbf{r}) - f_{l,i}^{eq}(t,\mathbf{r})}{t_1} \tag{4}$$

$$g_{l,i}(t+\Delta t,\mathbf{r}+\mathbf{e}_{l,i}\Delta t) = g_{l,i}(t,\mathbf{r}) - \frac{g_{l,i}(t,\mathbf{r}) - g_{l,i}^{eq}(t,\mathbf{r})}{t_2} \tag{5}$$

上式右辺第 2 項は，格子 BGK モデルと呼ばれ，分布関数が衝突によってそれぞれ緩和時間 $t_1\Delta t$ $t_2\Delta t$ をかけて瞬時局所の平衡状態 $f_{l,i}^{eq}$ および $g_{l,i}^{eq}$ へ近づくことを表す．

本モデルの自由エネルギー関数は，以下の圧力テンソル P_{ab} および化学ポテンシャル差 Δm を与える．

$$P_{ab} = Pd_{ab} + k\left(\frac{\partial n}{\partial x_a}\frac{\partial n}{\partial x_b} + \frac{\partial \Delta n}{\partial x_a}\frac{\partial \Delta n}{\partial x_b}\right) \tag{6}$$

$$P = nT - k\left(n\nabla^2 n + \Delta n\nabla^2\Delta n\right) - \frac{k}{2}\left(|\nabla n|^2 + |\nabla \Delta n|^2\right) \tag{7}$$

$$\Delta m = -T_C\frac{\Delta n}{n} + \frac{T}{2}\ln\left(\frac{n+\Delta n}{n-\Delta n}\right) - k\nabla^2(\Delta n) \tag{8}$$

ここで，κは表面張力の調整パラメータ，T および T_C は流体温度(定数)および臨界温度(流体は $T_C>T$ で二相に分離)である．2 つの量(6)および(8)は，次式のように平衡分布関数に組み込まれ，巨視的な流れ場の圧力と二相分布が式(4)および(5)によって再現される.

$$\sum_{l,i} f_{l,i}^{eq} e_{l,i,a} e_{l,i,b} = n u_a u_b + P_{ab} \tag{9}$$

$$\sum_{l,i} g_{l,i}^{eq} e_{l,i,a} e_{l,i,b} = \Delta n u_a u_b + \Gamma \Delta m\, d_{ab} \tag{10}$$

Copyright © 2000 by JSCFD

(Γ :Mobility パラメータ, d_{ab} :クロネッカーのデルタ)

3．シミュレーション結果と考察

本報では，我々が 3 次元に拡張した Binary Fluid モデル[(7)]を用いた気泡運動の数値シミュレーションを取り上げる．尚，対象の二相流体の密度比は約 3 であり，便宜上軽い相を気体と呼ぶ．密度比が小さいのは, Binary Fluid モデルが臨界点よりわずかに低い温度の気液二相流体に対応するためである．

Morton 数等の無次元数を決める際，表面張力は前もって Laplace 則に従って求めた．また浮力の効果は，$\Delta n(t,\mathbf{r})<0$ の流体領域を気相とみなし，$f_{l,i}$ を鉛直上方，$g_{l,i}$ を重力方向へ増やす浮力項を式(4),(5)右辺に加えることで実現される．

本研究では，二相流 LBM の適用性を検討するため，まず相変化のない流れ場を対象としている．しかし，本来気液相変化を熱力学的に扱う Binary Fluid モデルは，次式に示されるように Δ*n* に関する巨視的な拡散効果を自然に含む．

$$\frac{\partial \Delta n}{\partial t}+\frac{\partial \Delta n u_a}{\partial x_a}=q\left[\Gamma\nabla^2(\Delta m)-\frac{\partial}{\partial x_a}\left(\frac{\Delta n}{n}\frac{\partial P_{ab}}{\partial x_b}\right)\right] \quad (11)$$

$$q=(t_2-1/2)\Delta t \quad (12)$$

そこで，我々は各計算で上式右辺を無視できるようにΓを試験計算によって調節し，気泡体積を一定に維持している．

まず, 3 次元モデルの表面張力を検討するため, 静止流体中での単一気泡の半径 R と気泡内部の圧力増加を計算した．**Fig.2** に示すように，圧力増分は曲率 1/R に対して直線的に比例して Laplace 則を満たしている．また，パラメータκの増加に従って直線の勾配が大きくなることから，表面張力はコントロール可能であることもわかる．

次の **Fig.3** には，円管内の静止液中を上昇する単一気泡を示す(Morton 数 M=2.21×10^{-3}, Eotvos 数 Eo=77.8). 図(a)の場合，管径 D=37.5，気泡等価直径 d_b=20.9 に対して LBM での終端速度 U_T が 0.0524 となり，実験式

$$U_T/U_{T\infty}=1.13\exp\left[-d_b/D\right] \quad (13)$$

($U_{T\infty}$:無限静止液中での終端速度，Grace の線図より 0.0812)[(9)]の予測値 0.0512 に近い．同様に，より小さな直径比 d_b /D=0.294 の場合(図(b))にも，LBM の計算値 U_T=0.0683 は，式(11)に基づく経験値 0.0684 に良く一致する．

Fig.4 は，円管内を上昇する直列2 気泡の垂直断面内速度分布と界面形状である．(a)は Morton 数 M=56.6, Eotvos 数 Eo=25.5,気泡径と管径の比 d_b/D=0.233, (b)は M=59.3, Eo=62.4, d_b /D=0.318 である．(a)の場合，気泡間の液膜はその外周側で切れた後で気泡内部の流れに乗って上昇するのに対して, (b)の場合には液膜はより大きく変形してその中心と外周で切断されて下降している．

本研究では Δn=0 の位置を界面とみなして気泡形状を描いたが，関数 Δn の値は気液二相間で負から正の値へ4～5 格子点に渡って変化している(**Fig.5**)．よって，本二相流体モデルで気泡合体時の液膜挙動を評価するためには，Δn の界面厚さを考慮して界面を描くこと，および十分な数の格子点を用いることが必要であると考えられる(本計算の気泡径は約 20 格子点)．**Fig.6** には,静止液で満たされた円管内の壁近傍に置かれた気泡の挙動解析結果を示す．図(a)の M=186.0, Eo=108.0，気泡と円管の直径比 d_b /D=0.358 の場合，気泡は Weber 数 We 5.22 に相当する速度で上昇しながら管中心軸に向かって移動するのに対して，気泡径がその半分 ((b) M=186.0, Eo=27.0, d_b /D=0.179)になると，ほとんど変形せずに管壁付近を上昇する．本結果は，大きな気泡が管中央を通るという実現象を定性的によく再現しており，LBM が気泡挙動における壁の効果を評価できることを示している．

最後に，本モデルの拡散効果について述べる．関数Δ*n* の拡散 (式 (11) 右辺) は，分布関数 g_a 中の非平衡量 $g_a^{neq}=g_a-g_a^{eq}$ に起因し，次式から導出される(下付添え字 *a* は粒子速度の一般的識別子).

$$d(\Delta n)=-\Delta t\left(1-\frac{1}{2t_2}\right)\sum_a\frac{\partial g_a^{neq}e_{aa}}{\partial r_a} \quad (14)$$

そこで,拡散効果を打ち消すために静止粒子の格子ボルツマン方程式(5)の右辺に $d(\Delta n)$ を加え，静止した気泡の形状を計算した. Fig.7(b)に示されるように時間が経過しても気泡体積は一定に保たれ，巨視的な拡散量と LBM の粒子の非平衡分布量が式(14)によって関連付けられることが確認できる．

4．まとめ

本報では、界面を自己組織的に再現できる格子ボルツマン法(LBM)を気泡挙動の数値シミュレーションを通して検討した. まず, 3 次元 Binary Fluid モデルは, Laplace 則を満たし, かつパラメータで調節可能な表面張力を有することがわかった．単一気泡の円管内運動の計算では，実験式の値と一致する終端速度が得られ，LBM が気泡運動に壁の影響を適切に評価できることを確認した．一方，円管内の直列 2 気泡の計算では，合体時の液膜挙動が流れ場の条件により異なる結果が得られ，界面の厚さを考慮して界面位置を決める必要性を指摘した．また，管内における気泡の横運動においても実現象と定性的に一致し，本モデルの拡散効果が流体粒子の非平衡分布量から予測できることを数値的に確かめた. 以上から，LBM は二相流体シミュレーションで妥当な結果を与える一手法であると思われる．

参考文献

(1) Chen,S. and Doolen, G.D., *Annu.Rev.Fluid Mech..*, **30**, 329 (1998).

(2) McNamara,G. and Zanetti,G., *Phys.Rev.Lett.* **61**,2332(1988).

(3) Swift, M.R. et al.: *Phys.Rev.Lett.*, **75**, 830 (1995).

(4) Swift, M.R. et al, *Phys. Rev*. **E**, **54** 5041(1996).

(5) Shan, X.W. and Chen, H.D., *Phys.Rev*., **E 49**, 2941 (1994).

(6) Kato, Y. et al.: *Int.J.Modern Phys.*, **C 8**, 843 (1997).

(7) Takada, N., et.al., *Comp.Pyhs.Communications* **129**, 233 (2000).

(8) Chen,S. et al, *J.Stat.Phys.*,**68**, 379(1992).

(9) Crift, R. et al : *Bubbles, Drops, and Particles*,(Academic Press Inc., 1978) 234.

Copyright © 2000 by JSCFD

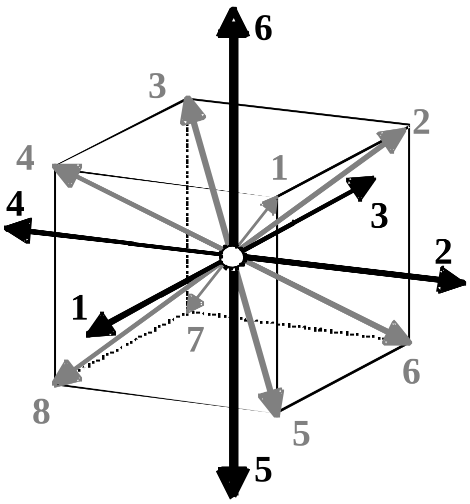


Fig.1 A particle velocity vector set on unit cubic lattice in 3D LBM. Black arrows: speed=2, Gray-color arrows: speed= $\sqrt{3}$. The numbers denote indices of moving direction.

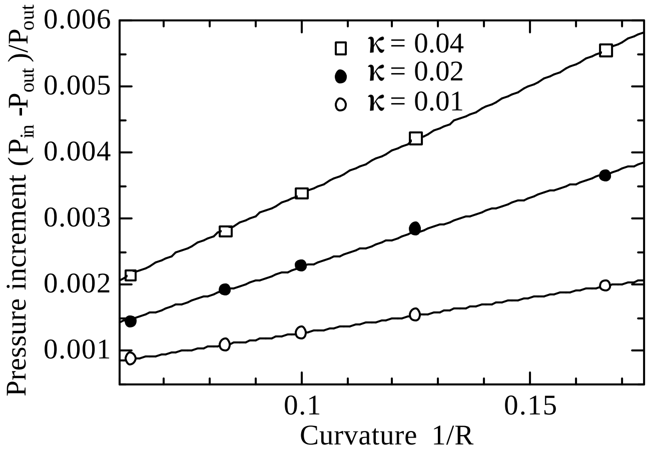
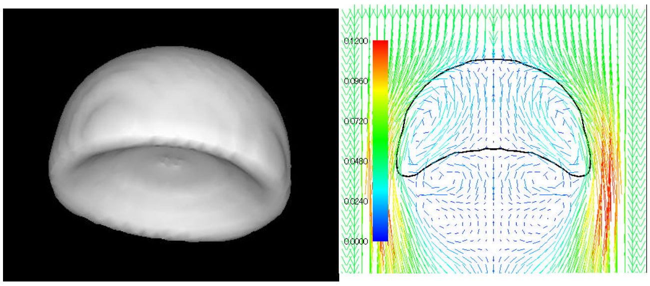
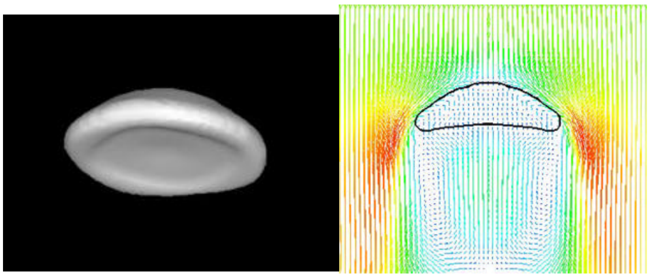


Fig.2 Pressure increment inside bubble for radius R and parameter k in 3D binary fluid model.

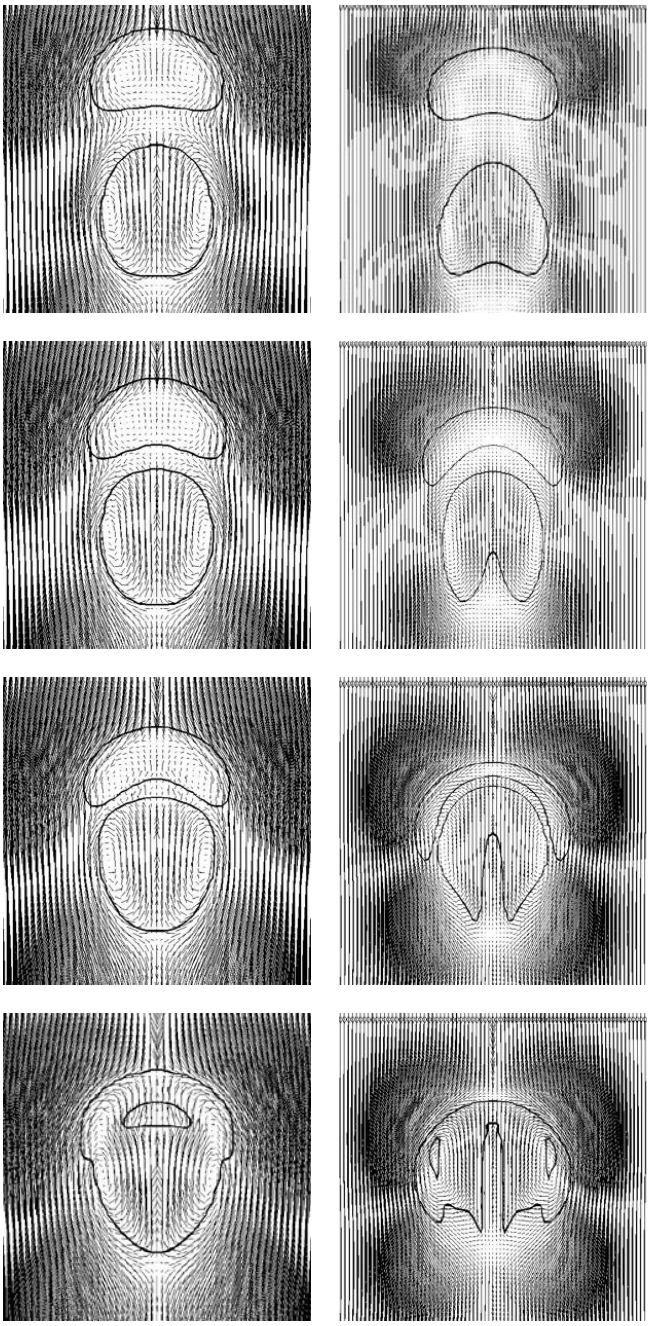


(a) d_b/D=0.577, U_T=0.0524



(b) d_b/D=0.294, U_T=0.0683

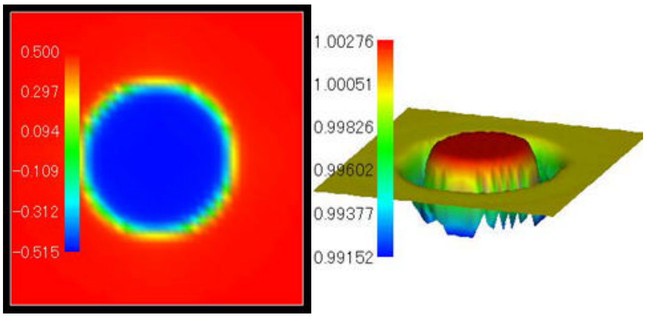
Fig.3 Shapes of single bubble and the flow velocity vectors on vertical cross section in circular tubes filled with stagnant liquid under gravity. M=2.21×10^{-3}, Eo=77.8.



(a) M=56.6, Eo=25.5, d_b/D =0.233

(b) M=59.3, Eo=62.4, d_b/D=0.318

Fig.4 Shape of two bubbles and the flow velocity vectors on vertical cross section in tube.

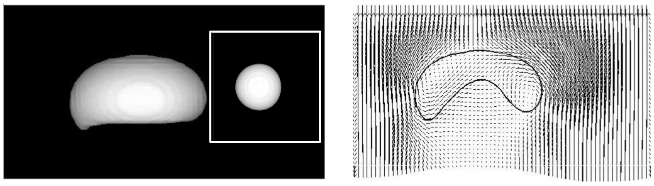


(a) Number density difference function Δn

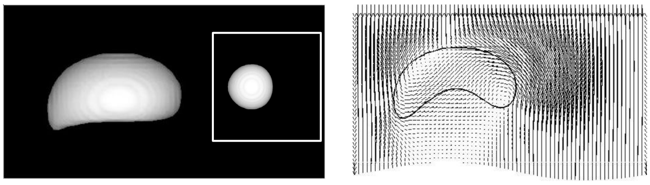
(b) Total number density n

Fig.5 The macroscopic variables in the LBM binary fluid model for a spherical-shaped bubble.

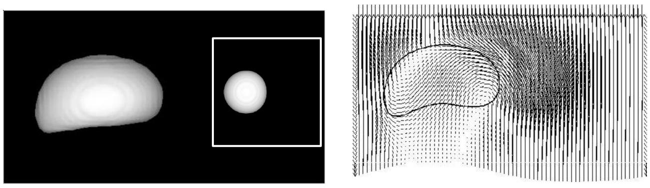
Copyright © 2000 by JSCFD



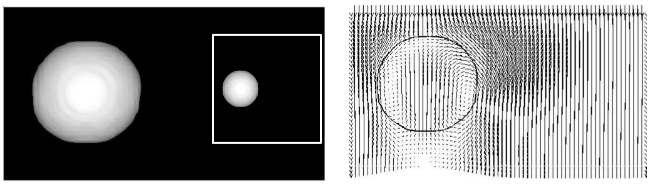
1700 time steps



900 time steps

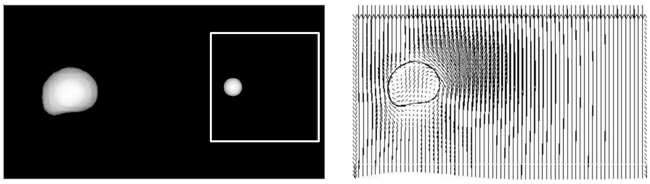


500 time steps

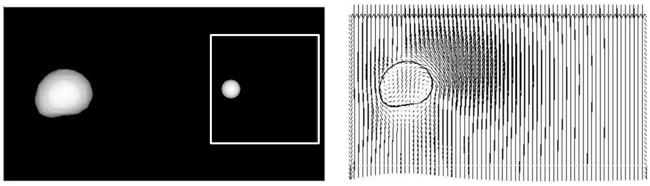


100 time steps

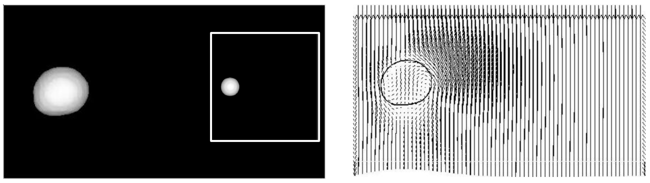
(a) M=186.0, Eo=108.0, d_b/D=0.358, We 5.22



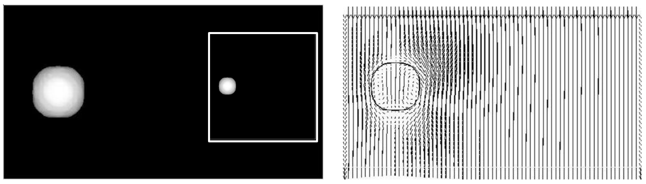
1700 time steps



900 time steps



500 time steps

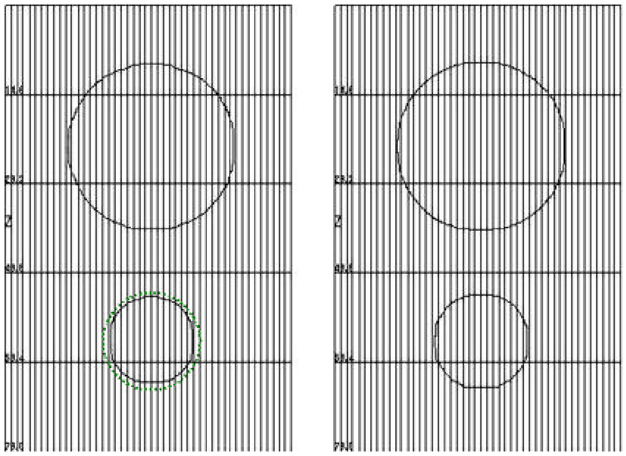


100 time steps

(b) M=186.0, Eo=27.0, d_b/D=0.179, We 0.919

Fig.6 Effect of wall on single bubble motion in circular tube.

Bubble shape (left) and flow velocity (right).



(a) Normal binary-fluid LBE (b) LBE with additional term.

Fig.7 Shape of two bubbles and the flow velocity vectors on vertical cross section in tube after 7000 time steps.

The broken line in (a) denotes initial shape of small bubble.

Copyright © 2000 by JSCFD