

非混和二相流体格子ボルツマンモデルの検討

Study on Immiscible Two-phase Fluid Lattice Boltzmann Model

高田尚樹, 産業技術総合研究所, 〒305-8569 茨城県つくば市小野川 16-1, naoki-takada@aist.go.jp
Naoki TAKADA, National Inst. Advanced Industrial Sci.&Tech., 16-1, Onogawa, Tsukuba, Ibaraki 305-8569, JAPAN.

An immiscible two-phase fluid model in the lattice Boltzmann method (LBM) is presented, 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. The lattice Boltzmann equations based on the binary fluid model possess two kinds of corrective terms, which are related to mass densities of two phases and conservation of volume. The latter is space-differential calculation of non-equilibrium components in the distribution functions of particles. Three-dimensional motions in a tube under gravity are simulated to verify the extended model. The result of two-bubble interaction showed that they approached due to wake formation by the leading bubble and the liquid film between them broke up eventually around center of horizontal cross section, where its curvature reached maximum value. It proves qualitative validity of the model proposed for immiscible two-phase flow simulations.

1. はじめに

格子ボルツマン法(Lattice Boltzmann Method, LBM)^{(1),(2)}は, 仮想粒子が繰り返す衝突と並進を通してマクロスケールの流体现象を創発的に模擬する統計力学的モデル化手法である. LBM の特徴の一つは, 多相流体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, 液滴や気泡の合体分裂挙動を捕らえるのに有効であるため, 多相流体モデルの提案や数値シミュレーション結果が数多く報告されている⁽³⁾⁻⁽⁸⁾. 著者もこれまで, 自由エネルギーを導入したSwiftらのBinary Fluid Model⁽⁵⁾を用いて密度比の小さい二相流体運動を計算し2次元VOF法との比較から妥当な結果を得た他, そのモデルを3次元に拡張し, 気泡(液滴)の接近・合体過程を再現している^{(9),(10)}. 自由エネルギーBinary Fluid(FEBF)モデルは, 臨界点近傍の相変化を熱力学的に正しく再現するものであるが, 非混和二成分系の二相流体には適せず, 流体を構成する2成分の粒子数密度の和および差を変数とするために密度比が大きい二相流体運動を再現することが困難である. そこで, 本研究では, Binary Fluid Model を拡張して, 相変化のない Immiscible な流体に適用して各相の体積を一定に保つ方法, および質量密度を厳密に考慮する方法を提案し, それらの妥当性を検討する.

2. 自由エネルギー-Binary Fluid (FEBF) Model

仮想粒子の運動は, 離散的な速度 $\mathbf{c}_a$ (a :識別子)を持つ粒子の割合(数密度)を表す速度分布関数を用いて統計力学的に記述される. 3次元の場合, 一般的な粒子の速度分布は, 静止状態を含む15種類の速度成分から成る⁽⁹⁾. LBM は, これら粒子の速度分布を時刻 t , 空間格子点 $\mathbf{r}$ において計算する.

Swift らが提案した二相流体モデル⁽⁵⁾は, 自由エネルギーの導入によって臨界温度 T_C より低い温度 T で共存する気液系二相の平衡状態を定義できる. その熱力学的モデルの1つである Binary Fluid Model では, 各相は2成分 A, B の粒子いずれかをより多く含む流体として表され, 各粒子の数密度 n_A, n_B の和 $n=n_A+n_B$ と差 $\Delta n=n_A-n_B$ が, 分布関数 $f_a(t, \mathbf{r})$ および $g_a(t, \mathbf{r})$ を用いて流速 $\mathbf{u}$ とともに定義される(eq.平衡状態).

$$n \begin{pmatrix} 1 \\ \mathbf{u} \end{pmatrix} = \sum_a f_a \begin{pmatrix} 1 \\ \mathbf{c}_a \end{pmatrix} = \sum_a f_a^{eq} \begin{pmatrix} 1 \\ \mathbf{c}_a \end{pmatrix} \quad (1)$$

$$\Delta n = \sum_a g_a = \sum_a g_a^{eq} \quad (2)$$

n は圧力に比例し, 各相で正および負の値を取る Δn は相分布を表す. 粒子の衝突と並進による分布関数の時間発展は, 標準的な時空間の離散化(時間刻み 1, 空間格子幅 1)と格子BGK衝突演算モデルを採用すると次の方程式で記述される.

$$f_a(t+1, \mathbf{r}+\mathbf{c}_a) = f_a(t, \mathbf{r}) - (f_a - f_a^{neq})/\tau_1 \quad (3)$$

$$g_a(t+1, \mathbf{r}+\mathbf{c}_a) = g_a(t, \mathbf{r}) - (g_a - g_a^{neq})/\tau_2 \quad (4)$$

式(3)は流速および圧力, 一方の式(4)は二相流体の分布および界面形状の時空間発展を与える. 両式の右辺第2項は, 各分布関数が衝突によって時間 τ_1 および τ_2 をかけて平衡状態 f_a^{eq} および g_a^{eq} に達することを意味する.

$$f_a^{eq} = n [A_a + B_a \mathbf{c}_a \cdot \mathbf{u} + C_a (\mathbf{c}_a \cdot \mathbf{u})^2 + D_a \mathbf{u} \cdot \mathbf{u}] + G_{a\beta}^{(a)} c_{a\alpha} c_{a\beta} \quad (5)$$

$$g_0^{eq} = \Delta n - \Gamma \Delta \mu \sum_{a \neq 0} B_a + \Delta n D_0 \mathbf{u} \cdot \mathbf{u} \quad (6)$$

$$g_a^{eq} = \Gamma \Delta \mu B_a + \Delta n [B_a \mathbf{c}_a \cdot \mathbf{u} + C_a (\mathbf{c}_a \cdot \mathbf{u})^2 + D_a \mathbf{u} \cdot \mathbf{u}] \quad (7)$$

ここで, Γ は Mobility (易動度) と呼ばれ, 二相間での粒子 $A \cdot B$ の移動のしやすさを表すパラメータである. 一般には易動度が大きくなると計算は数値的に安定になることが経験的にわかっており, 本研究では1から5の範囲で Γ を決定している. $\Delta \mu$ は化学ポテンシャル差であり, 表面張力のパラメータ κ でもって以下のように与えられる.

$$\Delta \mu = -T_C \frac{\Delta n}{n} + \frac{T}{2} \ln \left(\frac{1+\Delta n/n}{1-\Delta n/n} \right) - \kappa \nabla^2 (\Delta n) \quad (8)$$

また, パラメータ A_a, B_a, C_a, D_a は, 式(3),(4)が流れの支配方程式を適切に再現するよう決定され, テンソル $G_{a\beta}^{(a)}$ は, A_a とともに表面張力を考慮した圧力テンソル $P_{a\beta}$ を導く⁽¹⁰⁾.

$$P_{a\beta} = \sum_a (n A_a + G_{a\beta}^{(a)}) c_{a\alpha} c_{a\beta} \quad (9)$$

$$P_{a\beta} = P \delta_{a\beta} + \kappa \left(\frac{\partial n}{\partial r_\alpha} \frac{\partial n}{\partial r_\beta} + \frac{\partial \Delta n}{\partial r_\alpha} \frac{\partial \Delta n}{\partial r_\beta} \right) \quad (10)$$

$$P = nT - \kappa \left(n \nabla^2 n + \Delta n \nabla^2 \Delta n + \frac{|\nabla n|^2 + |\nabla \Delta n|^2}{2} \right) \quad (11)$$

3. 非混和二相流計算のための FEBF Model の改良

上述の自由エネルギー-Binary Fluid Model は, 臨界点近傍の

相変化による各相の体積の増減を捉えることができるが、Immiscible な 2 成分流体や臨界点から大きく離れた場合には適していない。また、式(3)および(4)は、流体を構成する 2 成分 A・B の粒子数密度の和および差に関する時間発展を解くものであり、異なる質量密度を持つ二相流体の運動を厳密には再現していない。本研究では、以上の 2 点を改善するため、Binary Fluid Model において、相変化がない Immiscible な流体に適用して体積を一定に保つ方法、および質量密度を考慮する方法を以下で述べる。また、表面張力と界面厚さの調整に関する改良についても述べる。

3. 1 二相体積の調整スキーム

FEBF モデルの格子ボルツマン方程式(LBE)(4)は、次のような Δn に関する移流拡散方程式を再現している。

$$\frac{\partial \Delta n}{\partial t} + \frac{\partial \Delta n u_\alpha}{\partial r_\alpha} = \theta \frac{\partial}{\partial r_\alpha} \left(\Gamma \frac{\partial \Delta \mu}{\partial r_\alpha} - \frac{\Delta n}{n} \frac{\partial P_{\alpha\beta}}{\partial r_\beta} \right) \quad (12)$$

$$\theta = \tau_2 - 1/2 \quad (13)$$

上式(12)は、Chapman-Enskog の方法に基づいて式(4)を微小パラメータ ε の 2 次オーダーまで展開して得られる次式、

$$\begin{aligned} \frac{\partial g_a^{eq}}{\partial t} + \mathbf{c}_a \cdot \nabla_1 g_a^{eq} + \left(1 - \frac{1}{2\tau_2} \right) \left[\frac{\partial g_a^{(1)}}{\partial t_1} + \mathbf{c}_a \cdot \nabla_1 g_a^{(1)} \right] \\ = - \left[g_a^{(1)} + g_a^{(2)} \right] / \tau_2 \end{aligned} \quad (14)$$

を全ての粒子速度について総和したものに等しい。ここで、微分項の下付添字および分布関数の上付添字は、 ε の次数を示す。式(12)右辺の拡散項は、本来 FEBF モデルが再現する気液相変化から派生し熱力学的に適切であるが、相変化を伴わず体積割合が一定である二成分二相流体では現れないものである。そこで本研究では、 Δn の拡散現象がメソスケールにおける式(14)の左辺第 3 項に起因することに注目し、静止粒子の LBE(4)の右辺に以下のような非平衡成分の空間偏微分項を加えることによって二相の体積を保存する。

$$\delta g_{0(1)} = \left(1 - \frac{1}{2\tau_2} \right) \sum_a \mathbf{c}_a \cdot \nabla (g_a - g_a^{eq}) \quad (15)$$

尚、式(14)および(15)では、以下の条件が考慮されている。

$$\Delta n \mathbf{u} = \sum_a g_a^{eq} \mathbf{c}_a \quad (16)$$

$$\sum_a g_a^{(1)} = 0 \quad (17)$$

$$\frac{\partial g_a^{eq}}{\partial t_1} + \mathbf{c}_a \cdot \nabla_1 g_a^{eq} = - \frac{1}{\tau_2} g_a^{(1)} \quad (18)$$

また、 Δn を移流する際に非圧縮性を考慮するため、上式と同様に静止粒子に関する LBE(4)の右辺に次の項を加える。

$$\delta g_{0(2)} = \Delta n (\nabla \cdot \mathbf{u}) \quad (19)$$

3. 2 質量密度の効果

流れ場の速度や圧力は式(3)から与えられるので、流体運動に質量密度の効果を反映させるため、同式右辺に次の項を外力の場合と同様の形式で追加する。

$$\delta f_a = \left(1 - \frac{1}{m_k} \right) B_a T \mathbf{c}_a \cdot \nabla n \quad (20)$$

ここで、 m_k は k 相の質量密度 ρ_k を定義する係数である。

$$\rho_k = m_k n \quad (21)$$

今回の計算では、液相($k=L$)では $m_L=1$ として、式(17)を気相側($\Delta n < 0$ の領域)のみに与えている。尚、上式中の空間微分は、通常の差分式もしくは粒子速度に基づく次の総和に置き換えられ得る⁽⁵⁾。

$$\frac{\partial Q}{\partial r_\alpha} \equiv \sum_a B_a Q(\mathbf{r} + \mathbf{c}_a) c_{a\alpha} \quad (22)$$

3. 3 表面張力と界面厚さの調整

オリジナルの FEBF モデルは、圧力テンソル(式(10))と化学ポテンシャル差(式(8))を 1 つの自由エネルギー関数から導くため、表面張力 σ と界面厚さは共通のパラメータ κ によって同時に決定される。本研究では FEBF モデルの柔軟性をより高めるため、両者を別々に調整できるように、圧力と化学ポテンシャルに対してそれぞれ異なるパラメータ κ_1 および κ_2 を与える。 σ は、Laplace 則もしくは平面状の界面に関する次式、

$$\sigma = \kappa_1 \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{\partial \Delta n}{\partial r} \right)^2 dr \quad (23)$$

から求められる。ここで r は界面に垂直な方向の座標である。一方、界面厚さは κ_2 にほぼ線形に比例する。

圧力と化学ポテンシャルのパラメータ分離は、本来の熱力学的な定義から離れているが、実際の計算では、分布関数 f_a が圧力場を与え、 g_a が二相の体積分布を決定するというように役割が分かれており、今回は相変化の流れを対象としないことなどから、この改良で得られる計算結果は妥当であると考えられる。

4. 計算結果

ここで、上記の提案方法に基づく 3 次元気泡挙動の計算結果を示す。壁および流入の境界条件には、単相流と同様の局所平衡仮定の設定手法を用いている⁽¹¹⁾。まず、一様なせん断流れ場における気泡の変形挙動を Fig.1 に示す。本計算では、初期に直径 $d_B=16$ の気泡が 1 辺 $D=43$ 格子の正方断面を持つ矩形管内の静止液中に置かれ、計算開始とともに管壁を移動させてせん断速度場が形成される。二相の密度比および粘性比はともに 1.25、上下壁の移動速度 $U_w=0.01$ 、動粘度 $\nu_L=\nu_G=0.333$ であり、系を代表する無次元数である Reynolds 数および Capillary 数は、次のように定義される。

$$\text{Re} = \frac{2U_w(d_B/2)^2}{\nu_L D}, \quad \text{Ca} = \frac{\rho_L U_w \nu_L d_B}{\sigma D} \quad (24), (25)$$

図(a)および(b)は、表面張力 σ の異なる 2 条件 ($\kappa_1=0.02, 0.01$)における時間変化の結果を示す。ともに $\text{Re}=9.37 \times 10^{-2}$ 、 $\kappa_1=\kappa_2$ であり、 Ca がそれぞれ 0.308, 0.611 に相当する。(a)に比べて σ がより小さい場合(b)には、気泡はより速くより細長い楕円体に変形する傾向にあることがわかる。

次に、静止液中における重力下での 3 次元気泡挙動計算の結果を示す。この計算では、界面厚さパラメータ κ_2 は、式(10)および(11)における表面張力パラメータ $\kappa_1=0.02$ の半分の値に設定され、気泡径を 20 格子、密度比および粘性比 4 ($m_G=0.25$, 両相で $\tau_1=0.66$)とし、Eötvös 数 10.3, Morton 数 0.03

の流れ場を扱う。

Fig.2 は、垂直断面における単一気泡の形状と静止座標系から見た流速分布である。初期には球形であった気泡は、約 500 タイムステップ後に曲率が小さい底面を持って体積と形状をほぼ一定に保ちながら上昇した。Fig.3 に示される直列 2 気泡の結果では、界面の曲率が大きい中心軸付近で液相が周囲に排除され、気泡の接近により薄くなった液膜が切れて合一が生じていることから、式(20)で導入した方法は二相の質量密度の違いを気相間の液体挙動に適切に反映していると考えられる。

5. おわりに

本報では、二相流体界面を容易に模擬できる計算手法である LBM において、Swift らの Binary Fluid Model を拡張して Immiscible な二相流体に適用するため、体積を一定に保つ方法、および流体運動に質量密度の効果を反映させる方法を提案し、気泡挙動の 3 次元計算を行った。計算結果では、気泡体積が一定に保たれ、密度比 1.25 および 4 の条件で数値安定性が確保されることを示されたことから、提案された拡張方法は妥当であると考えられる。また、表面張力と界面厚さを個別に与えるパラメータ設定方法も、気泡界面の形状と挙動を従来のモデル同様に再現可能であることが定性的に確認された。今後は、さらに計算結果の定量的な比較によって拡張方法を検証する予定である。

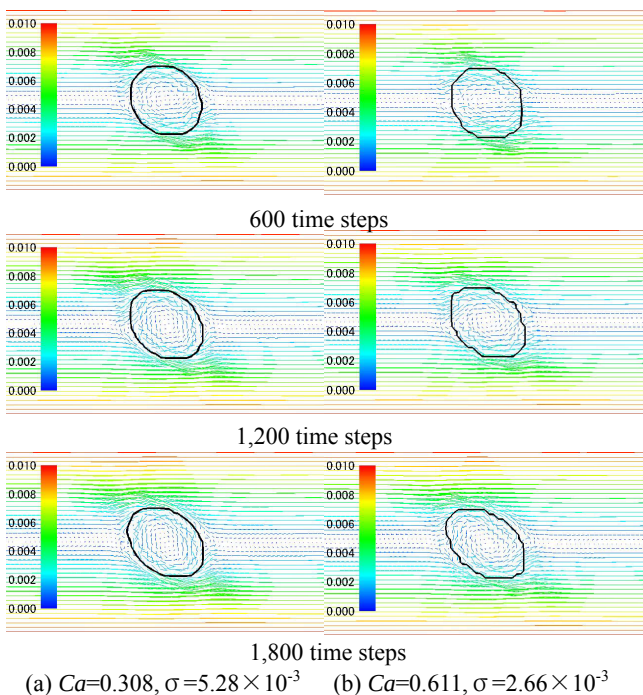


Fig.1 Deformation of three-dimensional bubble by uniform shear flow in a rectangular tube. Above figures shows snapshots of interfacial profile and flow velocity on a vertical cross section

参考文献

(1) McNamara, G. and Zanetti, G., "Use of the Boltzmann equation to simulate lattice-gas automata," *Phys. Rev. Lett.* **61** (1988), pp.2332-2335.

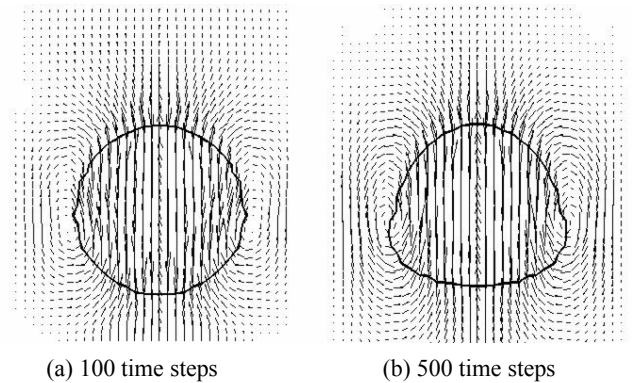


Fig.2 Bubble shape and flow velocity on vertical cross section.

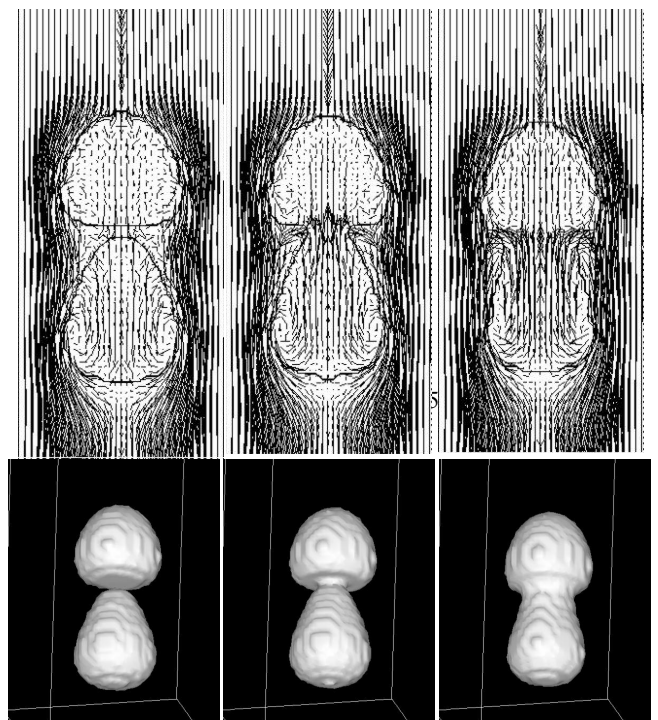


Fig.3 Two-bubble interaction. Bubble shape and flow velocity on vertical cross section (upper figures), and bubble surface (lower ones) at intervals of 200 time steps.

(2) Chen, S. and Doolen, G.D., "Lattice Boltzmann Method for Fluid Flows," *Annu. Rev. Fluid Mech.*, **30** (1998), pp.329-364.
(3) Grunau, D., Chen, S., and Eggert, K., "A Lattice Boltzmann model of Immiscible Fluids," *Phys. Fluids, A* **5**(1993), pp.2557-2562.
(4) Shan, X.W. and Chen, H.D., "Simulation of non-ideal gases and liquid-gas phase transitions by the lattice Boltzmann equation," *Phys. Rev. E* **49** (1994), pp.2941-2948.
(5) Swift, M.R., Orlandini, E., Osborn, W.R. and Yeomans, J.M., "Lattice Boltzmann Simulations of liquid-gas and binary fluid systems," *Phys. Rev. E*, **54** (1996), pp.5041-5052.
(6) Inamuro, T., Konishi, N., and Ogino, F., "A Galilean invariant model of the lattice Boltzmann method for multiphase fluid flows using free-energy approach," *Comput. Phys. Commun.* **129** (2000), pp.32-45.
(7) Kono, K., Ishizuka, T., Tsuda, H., and Kurosawa, A., "Application of lattice Boltzmann model to multiphase flows

- with phase transition,” *Comput.Phys.Commun.* **129** (2000), pp.110-120.
- (8) Seta, T., Kono, K., Martinez, D., and Chen, S., “Lattice Boltzmann Scheme for Simulating Two-Phase Flows,” *JSME Int.J.* **43**(2000), pp.305-313.
- (9) Takada, N., Misawa, M., Tomiyama, A., and Fujiwara, S., “Numerical Simulation of Two- and Three-Dimensional Two-Phase Fluid Motion by Lattice Boltzmann Method,” *Comput. Phys. Commun.*, **129**(2000), pp.233-246.
- (10) Takada, N., Misawa, M., Tomiyama, A., and Hosokawa, S., “Simulation of Bubble Motion under Gravity by Lattice Boltzmann Method,” *J. Nuclear. Sci. Tech.* **38** (2001), pp.330-341.
- (11) Takada, N. and Tsutahara, M., " Evolution of viscous flow around a suddenly rotating circular cylinder in the lattice Boltzmann method," *Computers and Fluids* **27**(1998), pp.807-828,.
-