

# 格子ボルツマン法による2相流シミュレーション

## Simulation of Two Phase Flow by the Lattice Boltzmann Equation

廣川 雄一, 北陸先端大, 〒923-1292 石川県能美郡辰口町旭台 1-1, y-hiroka@jaist.ac.jp  
 松澤 照男, 北陸先端大情報科学センター, 〒923-1292 石川県能美郡辰口旭台 1-1, matuzawa@jaist.ac.jp  
 Yuichi HIROKAWA, School of Information Science, JAIST, Tatsunokuchi, Ishikawa 923-1292, JAPAN  
 Teruo MATSUZAWA, Center for Information Science, JAIST, Tatsunokuchi, Ishikawa 923-1292, JAPAN

LBM is a simple algorithm which consists of particle collision and movement. Since microscopic quantities spread only through particle movement and the government equation is effective on 1 grid-point at 1-timestep, it is possible to describe complex behavior easier than FDM by adding extra terms to the equation. Generally, two phase flow which involves surface tension uses pressure tensor for analysis of interaction between phase. In this research, we propose an algorithm for analyzing thermal two-component fluid without explicit surface tension.

### 1. 序論

格子ボルツマン法は希薄気体の解析を目的として格子ガス法を基にして発展した解析手法であり、現在では熱流動や気液2相流等の解析に用いられている。

格子ボルツマン法は粒子の並進及び衝突から成り立ち、局所的な物理量の拡散は粒子の移動により行われるために流れ場全体を記述する事なく流れ場の解析を行うことが出来る。この為、一般的な格子ボルツマン方程式に対し粒子の並進過程において外力項等を追加する事が可能である<sup>(1)</sup>。

また、格子ボルツマン法は陽解法であり各変数の依存性がない為高いベクトル化効率や並列化効率を得られるという利点が挙げられる。ベクトル化については Fujitsu VXE および Cray SV1 で良好な計算速度向上を得る事が出来た。

格子ボルツマン法による2相流は1種類の粒子による気液2相流の解析が良く行われているが、本研究では2種類の粒子により構成される流体を2種類の粒子同士が衝突する際に運動エネルギーを交換する事で相互作用する手法を提案し、重力場における2流体熱流動の解析を行う。

### 2. 2流体 LBGK モデル

2種類の粒子 f と h の粒子分布は2本の格子ボルツマン方程式(1), (2)によって記述され、2種類の粒子の運動は各粒子毎に独立して記述される。また、本手法は格子ボルツマンモデルに依存しないため格子ボルツマン方程式を自由に選択する事が可能である。

$$f_{si}(\vec{r} + \vec{e}_{si}\Delta t, t + \Delta t) - f_{si}(\vec{r}, t) = -\frac{1}{t_f} [f_{si}(\vec{r}, t) - f_{si}^{eq}(\vec{r}, t)] \quad \dots(1)$$

$$h_{si}(\vec{r} + \vec{e}_{si}\Delta t, t + \Delta t) - h_{si}(\vec{r}, t) = -\frac{1}{t_h} [h_{si}(\vec{r}, t) - h_{si}^{eq}(\vec{r}, t)] \quad \dots(2)$$

ここで  $t$  は単位時間、 $t_f, t_h$  は各粒子の衝突緩和係数、 $f_{si}(\vec{r}, t), h_{si}(\vec{r}, t)$  は位置  $\vec{r}$  , 時刻  $t$  における速度  $\vec{e}_{si}$  を持つ粒子分布を表す。速度及び粒子分布の添字  $i$  は粒子の速さ、 $s$  は方向を表す。また、 $f_{si}^{eq}(\vec{r}, t), h_{si}^{eq}(\vec{r}, t)$  は平衡状態の粒子分布でありこの平衡分布を通じて2種類の粒子の相互作用を考慮する。

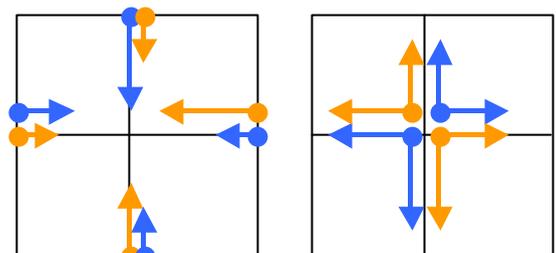
#### 2.1 2流体の相互作用

本研究では格子ボルツマンのモデルに依存しない汎用性のある相互作用法を提案する。

まず、粒子の並進過程において2種類の粒子は相互作用せず LBGK 方程式(1), (2)に基づき運動する。

(Left of Fig.1)

衝突過程において2粒子同士は衝突し運動エネルギーを交換する(Right of Fig.1)。まず、2種類の粒子を1種類の粒子とみなし、式(3), (4), (5)を用いて衝突前の局所物理量を求め、粒子の平衡分布を求める。この時に得られた平衡分布は式(6)で示されるように2粒子の平衡分布の総和になっているので、式(7), (8)より質量保存が成立するように各粒子の平衡分布を求める。



Particle Movement Particle Collision  
Fig.1 Interaction between binary components fluid

$$\mathbf{r}(\vec{r}, t) = \sum_{s,i} \{f_{si}(\vec{r}, t) + h_{si}(\vec{r}, t)\} \quad \dots(3)$$

$$\mathbf{r}(\vec{r}, t) \vec{u}(\vec{r}, t) = \sum_{s,i} \{f_{si}(\vec{r}, t) + h_{si}(\vec{r}, t)\} \vec{e}_{si} \quad \dots(4)$$

$$\mathbf{r}(\vec{r}, t) \left[ \frac{\vec{u}^2(\vec{r}, t)}{2} + T(\vec{r}, t) \right] = \sum_{s,i} \frac{1}{2} \{f_{si}(\vec{r}, t) + h_{si}(\vec{r}, t)\} \vec{e}_{si}^2 \quad \dots(5)$$

ここで  $\mathbf{r}(\vec{r}, t)$  は局所密度、 $\vec{u}(\vec{r}, t)$  は局所流速、 $T(\vec{r}, t)$  は局所温度である。式(3), (4), (5)は衝突前の2種類の粒子の総和による局所物理量を表す。

$$m_{si}^{eq}(\vec{r}, t) = f_{si}^{eq}(\vec{r}, t) + h_{si}^{eq}(\vec{r}, t) \quad \dots(6)$$

$$f_{si}^{eq}(\vec{r}, t) = \frac{m_{si}^{eq}(\vec{r}, t) \sum_{s,i} f_{si}(\vec{r}, t)}{\mathbf{r}(\vec{r}, t)} \quad \dots(7)$$

$$f_{si}^{eq}(\vec{r}, t) = \frac{m_{si}^{eq}(\vec{r}, t) \sum_{s,i} f_{si}(\vec{r}, t)}{\mathbf{r}(\vec{r}, t)} \quad \dots(8)$$

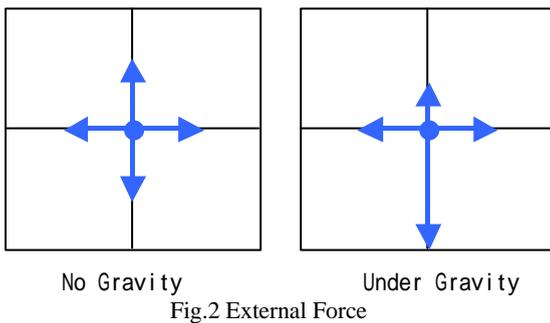
式(6)は式(3), (4), (5)を元に求めた 衝突後の2種類の平衡分布の総和を表す。式(7), (8)は衝突の前後で各粒子の質量保存が成立するように衝突前の各粒子の存在比から衝突後の各粒子の平衡分布を求める式である。

## 2.2 外力の導入

ボルツマン方程式は外力を考慮する事が可能だが、一般的な LBGK モデルでは外力を考慮してない。厳密な議論は困難であるが並進過程において外力を加える事により定性的に外力を考慮する事が可能である。

本研究では重力場を考える際に重力及び浮力により局所流速に影響が出るものと仮定した。外力を考慮した粒子分布は次の手法により求めた。また、この手法は2流体に限定される物ではなく LBGK 方程式全般に用いる事が出来る手法である。

1. 外力がない場合の局所物理量  $\rho, u, T$  を粒子分布から求めておく。(Left of Fig.2)
2. 次に外力の影響を考慮した流速  $u'$  を求める。
3.  $\rho, u'$  を基に  $T'$  を求める。
4.  $\rho, u', T'$  を用い平衡分布関数より平衡状態の粒子分布を求め、これを外力が無い時の粒子分布と置き換える。(Right of Fig.2)



このような手法を用いると、2粒子間に分子間力などが作用する場合、分子間力等を外力として捕らえることによってより複雑な2流体が解析出来る可能性が考えられる。

## 2.3 密度差による2相の分離

重力場において2種類の粒子に仮想的な密度差を設けた場合、密度の大きい粒子は鉛直下向きの力が大きく働く為に密度の小さい粒子を押し上げる様な流れが生じ、結果として各相の位置エネルギーを平均化する様に2相に分離する。重力場において温度差や外力を加えない限り相分離は保たれる(Fig.3)。



Fig.3 Phase separation

## 3. 2流体モデルの精度比較

2流体モデルにおいて構成粒子が同じ場合1流体モデルと同じ結果が得られる必要がある為に精度比較及び検証を行った。検証例として非熱流体モデルによる外力の作用しないキャビティ流れ、及び熱流体モデルによるベナール対流の解析を行った。

### 3.1 2流体キャビティ流れ

Shuling Hou らによる 2D9V 非熱流体モデル<sup>(2)</sup>(Fig.4)を用いて外力の作用しないキャビティ流れの計算を行った。

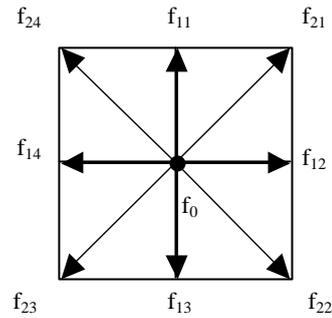


Fig.4 2D9V

粒子の速度指標は以下のように定義した。

$$\begin{aligned} \vec{e}_0 &= (0, 0) \\ \vec{e}_{1i} &= \left( \cos\left(\frac{i\mathbf{P}}{2}\right), \sin\left(\frac{i\mathbf{P}}{2}\right) \right) \\ \vec{e}_{2i} &= \sqrt{2} \left( \cos\left(\frac{i\mathbf{P} + \mathbf{P}}{4}\right), \sin\left(\frac{i\mathbf{P} - \mathbf{P}}{4}\right) \right) \\ (i &= 1, 2, 3, 4) \end{aligned}$$

各粒子のボルツマン方程式は式(1)及び(2)、局所物理量との関連式には式(3),(4)、衝突後の各粒子の平衡分布は式(6),(7)を用いて求めた。また、粒子の平衡分布は式(9),(10),(11)を用いて算出する。

$$f_0^{eq}(\vec{r}, t) = \frac{4}{9} \left[ 1 - \frac{3}{2} \bar{u}^2(\vec{r}, t) \right] \dots (9)$$

$$f_{1i}^{eq}(\vec{r}, t) = \frac{1}{9} \left[ 1 + 3(\vec{e}_{1i} \cdot \bar{u}(\vec{r}, t)) + \frac{9}{2} (\vec{e}_{1i} \cdot \bar{u}(\vec{r}, t))^2 - \frac{3}{2} \bar{u}^2(\vec{r}, t) \right] \dots (10)$$

$$f_{2i}^{eq}(\vec{r}, t) = \frac{1}{36} \left[ 1 + 3(\vec{e}_{2i} \cdot \bar{u}(\vec{r}, t)) + \frac{9}{2} (\vec{e}_{2i} \cdot \bar{u}(\vec{r}, t))^2 - \frac{3}{2} \bar{u}^2(\vec{r}, t) \right] \dots (11)$$

格子点数 129x129、Re=100 のキャビティ流れの計算を行った結果、有効数字桁内で1流体と一致する事が確認出来た。定常状態における流線(Fig.5)をGhiaらによる差分法によるデータ<sup>(3)</sup>の比較より渦中心の位置がほぼ一致している事が確認出来た。

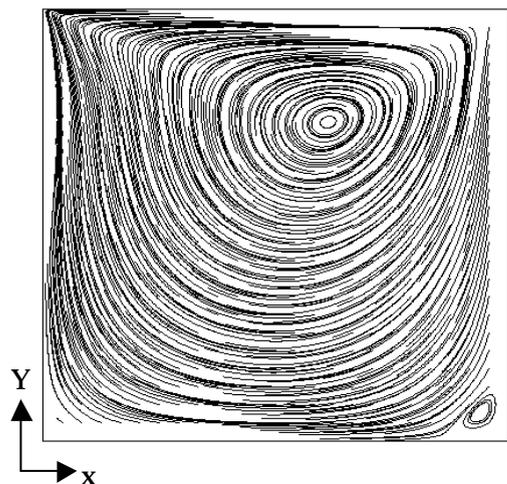


Fig.5 StreamLine of Cavity flow

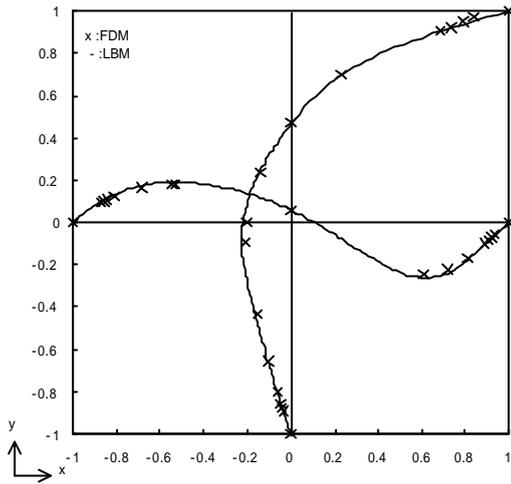


Fig.6 Velocity at center of cavity

Fig.6はキャピティ中心に於ける流速をGhiaによる差分法のデータと比較したもので差分法との良い一致が見られる。

1流体モデルと同じ結果が得られた事から2流体モデルは外力の作用しない非熱流体において有用であると結論付けられる。

### 3.2 ベナール対流

鳶原、高田らによる2D21V熱流体モデル<sup>(4)</sup>(Fig.7)により格子点数100x20、Ra=4000のベナール対流の計算を行い1流体との比較を行った。

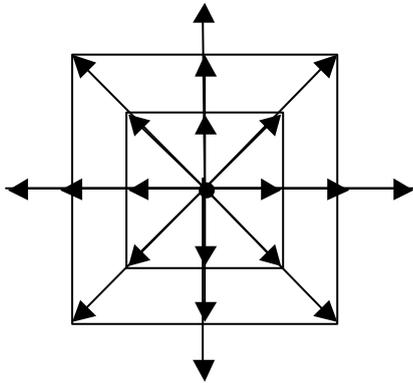


Fig.7 2D21V

粒子の速度指標は以下のように置いた。

$$\begin{aligned} \vec{e}_0 &= (0, 0) \\ \vec{e}_{1i} &= \left( \cos\left(\frac{i\mathbf{p}}{2}\right), \sin\left(\frac{i\mathbf{p}}{2}\right) \right) \\ \vec{e}_{2i} &= \sqrt{2} \left( \cos\left(\frac{i\mathbf{p}}{2} + \frac{\mathbf{p}}{4}\right), \sin\left(\frac{i\mathbf{p}}{2} - \frac{\mathbf{p}}{4}\right) \right) \\ \vec{e}_{3i} &= 3 \left( \cos\left(\frac{i\mathbf{p}}{2}\right), \sin\left(\frac{i\mathbf{p}}{2}\right) \right) \\ \vec{e}_{4i} &= 2 \left( \cos\left(\frac{i\mathbf{p}}{2}\right), \sin\left(\frac{i\mathbf{p}}{2}\right) \right) \\ \vec{e}_{5i} &= 2\sqrt{2} \left( \cos\left(\frac{i\mathbf{p}}{2} + \frac{\mathbf{p}}{4}\right), \sin\left(\frac{i\mathbf{p}}{2} - \frac{\mathbf{p}}{4}\right) \right) \\ (i &= 1, 2, 3, 4) \end{aligned}$$

各粒子のボルツマン方程式は式(1),(2)、局所物理量との関連式には式(3),(4),(5)、衝突後の各粒子の平衡分布は式

(7),(8)、外力には重力及び浮力の影響を考慮し、2.2で提案した方法により外力を導入した。また、平衡分布は式(12)を用いて求める。

$$f_{si}^{eq}(\vec{r}, t) = F_{si} \mathbf{r}(\vec{r}, t) \left[ \begin{array}{l} 1 + \frac{(\vec{e}_{si} \cdot \vec{u}(\vec{r}, t))}{T(\vec{r}, t)} + \frac{(\vec{e}_{si} \cdot \vec{u}(\vec{r}, t))^2}{2T^2(\vec{r}, t)} \\ - \frac{\vec{u}^2(\vec{r}, t)}{2T(\vec{r}, t)} + \frac{(\vec{e}_{si} \cdot \vec{u}(\vec{r}, t))^3}{6T^3(\vec{r}, t)} \\ - \frac{(\vec{e}_{si} \cdot \vec{u}(\vec{r}, t))(\vec{u}(\vec{r}, t) \cdot \vec{u}(\vec{r}, t))}{2T^2(\vec{r}, t)} \end{array} \right] \dots(12)$$

ここで $F_{si}$ は粒子の速さ毎に温度に応じて決定されるパラメータである。格子点数100x20、Ra=4800のベナール対流の計算を行った結果、各格子点上における1流体との平均誤差は

$$\Delta \mathbf{r} = 0.0469824$$

$$\Delta \vec{u}_x = 0.04059976$$

$$\Delta \vec{u}_y = 0.03985548$$

$$\Delta T = 0.01203132$$

となりほぼ1流体と同じ結果が得られる事が確認出来た。

Fig.8は定常状態における流速を示しており、ベナール渦が等間隔に出来ている事が確認出来る。

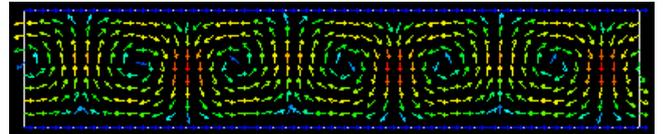


Fig.8 Velocity vector of Benard convection

Fig.9は定常状態における密度分布である。冷却壁により冷却され密度が重くなった粒子が下降する部分及び加熱壁により加熱され軽くなった粒子が上昇し冷却壁に接する部分で密度が高くなっている事が分かる。

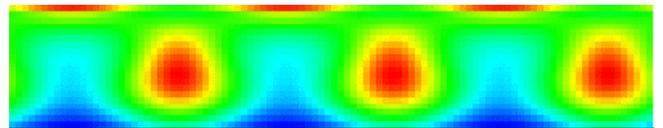


Fig.9 Density profile of Benard convection

定常状態における温度分布は対流の影響を受け波を打った形となっている(Fig.10)。

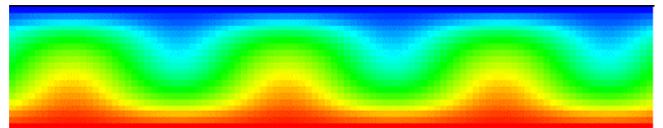


Fig.10 Temperature profile of Benard convection

外力の作用する熱流体モデルにおいても1流体とほぼ一致する事が確認出来た。

キャピティ流れと比較して誤差が増大した理由として各粒子毎に外力の計算を行う際に生じた計算誤差が考えられる。外力が作用しない場合の1流体との誤差は

$$\Delta \mathbf{r} = 2.9535734 \times 10^{-12}$$

$$\Delta \vec{u}_x = 1.79190375 \times 10^{-16}$$

$$\Delta \vec{u}_y = 7.89958356 \times 10^{-16}$$

$$\Delta T = 5.4867076 \times 10^{-15}$$

であり外力計算時の誤差が支配的である事が分かる。この事から外力の計算時の誤差対策の検討が必要である。

#### 4. 密度の異なる粒子による熱流動

本研究で提案した外力を導入した2流体モデルを用いて密度差のある粒子の計算を行い境界相の解析を行った。

##### 4.1 計算条件

格子ボルツマンモデルには薦原、高田らによって提案された2D21V熱流体モデル<sup>(4)</sup>を用いた。

格子点数 100x20、上壁は固定冷却壁、下壁は固定発熱壁、左右には周期境界を適用した(Fig.11)。

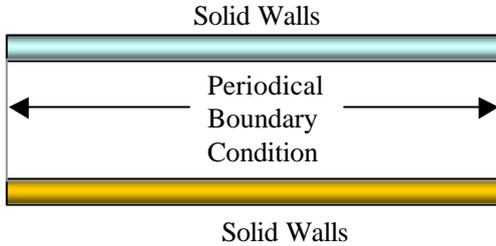


Fig.11 Boundary Condition

粒子の密度比を 10,初期条件として2種類の粒子を 1:1 で分布させ、上下壁の温度差  $T=0.4$ 、重力加速度  $g=-0.04$  として計算を行った。

##### 4.2 境界相

2流体が完全に混ざり合っている状態から重力と温度差によって境界相が形成され変化していく時の流速、密度分布、及び温度分布を示す。

##### 4.2.1 相分離

粒子の密度差の設定により密度の軽い粒子程上壁に集まり、密度の大きい粒子程下壁側に集まる(Fig.12)。

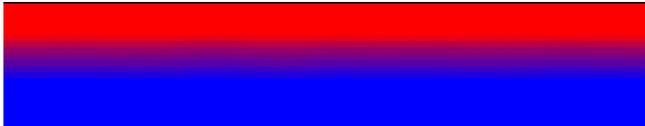


Fig.12 Phase separation

この時、重力の影響により弱い下降流が生じる(Fig.13)。

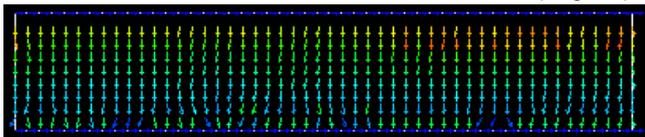


Fig.13 Velocity vector

重力の影響により下壁へ向かって密度分布が大きくなるが下の発熱壁によって粒子が加熱され密度が小さくなっている事が確認出来る(Fig.14)。

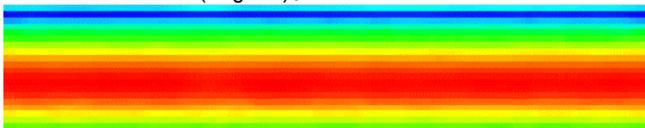


Fig.14 Density profile

この段階では温度に特に目立った変化は見られず温度が1様に拡散している事が分かる(Fig.15)。

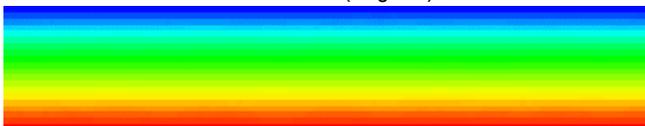


Fig.15 Temperature profile

##### 4.2.2 境界相の変化

密度の小さい粒子が上壁で冷却され軽い粒子の局所密度が増大するため逆転相のような形で密度の重い粒子の相に沈み込む(Fig.16)。

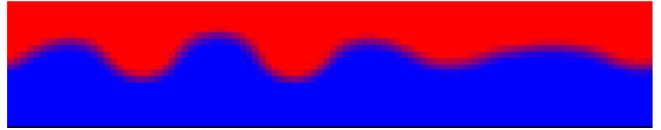


Fig.16 Phase separation

密度の軽い粒子の相の沈み込み及び密度の大きい粒子の相の上昇によって非一様な弱い対流が生じている(Fig.17)。

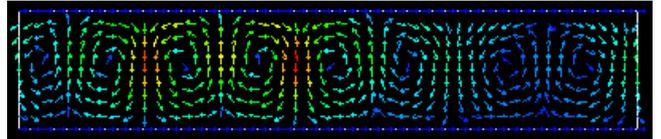


Fig.17 Velocity vector

境界相の変化が大きい個所と密度が大きい個所が一致している事が分かる(Fig.18)。

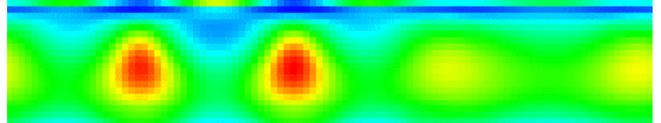


Fig.18 Density profile

この時の温度分布は対流の影響により温度の拡散が一様ではなくなる(Fig.19)。

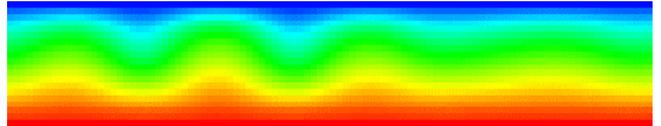


Fig.19 Temperature profile

##### 4.2.3 レイリーテイラー不安定性

逆転相における沈み込みが更に大きくなりこの状態の境界相を形成する(Fig.20)。

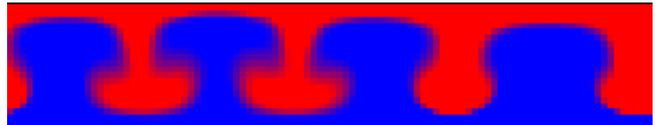


Fig.21 Phase separation

対流に速度差が生じていたが速度差が緩和され流れ場全体に渡って対流が生じている事が分かる(Fig.22)。

1流体によるベナール対流の流速(Fig.8)と比較してベナール渦の間隔が狭くなっていることが確認出来る。

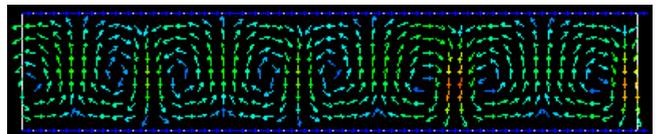


Fig.22 Velocity vector

密度の大きい粒子の影響により密度分布が1流体の密度分布(Fig.9)と比較して下壁側の密度が大きくなっている事が確認出来る(Fig.22)。

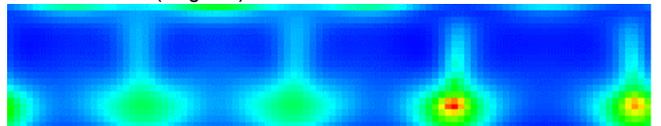


Fig.22 Density profile

温度分布は境界相による影響が強く見られる (Fig.23)。

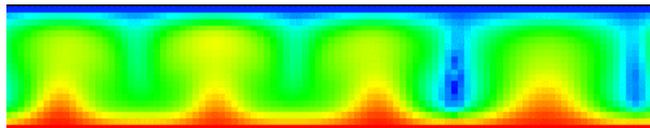


Fig.23 Temperature profile

#### 4.3 考察

熱流体モデルに密度差のある粒子を設定した場合、加熱等による密度差が生じるために2相の影響が分かり難い計算例であったが比較的明確な境界相が確認出来た。また、本研究で提案したモデルにより2流体の相互作用を解析出来ることが確認できた。

#### 5. 結論及び今後の課題

微視的な粒子の相互作用に2流体の相互作用を記述出来る事が確認出来たが、外力の計算誤差については検討が必要である。

しかしながら、既存の格子ボルツマンモデルを拡張することにより複数の種類の粒子により構成される流体の解析が行える為より複雑な流体の解析が可能である。

#### 参考文献

- (1) David R. Noble, John G. Georgiadis and Richard O. Buckius, "Comparison of Accuracy and Performance for Lattice Boltzmann and Finite Difference Simulations of Steady Viscous Flow", International Journal for Numerical Methods In Fluids, Vol.23 (1996), pp1-18
- (2) Shuling Hou, Qisu Zou, Shiyi Chen, Gray Doolen, Allen C.Cogley, "Simulation of Cavity Flow by the Lattice Boltzmann Method", Journal of Computational Physics, vol.118(1995), pp329-347
- (3) U.Ghia, K.N.Ghia, and C.T.Shin, "High-Re Solutions for Incompressible Flow Using the Navier-Stokes Equations and a Multigrid Method", Journal of Computational Physics, Vol48(1982), pp387-411
- (4) 蔦原 道久, 高田 尚樹, 片岡 武, "格子気体法・格子ボルツマン法", コロナ社 (1999)