二相系格子ボルツマン法によるせん断流中の液滴の変形・分裂シミュレーション

Lattice Boltzmann Simulations of Drop Deformation and Breakup in Shear Flows

稲室 隆二, 京大工, 〒 606-8501 京都市左京区吉田本町, E-mail: inamuro@cheme.kyoto-u.ac.jp 冨田 隆治, 京大院, 〒 606-8501 京都市左京区吉田本町, E-mail: ryuji@cheme.kyoto-u.ac.jp 荻野 文丸, 京大工, 〒 606-8501 京都市左京区吉田本町, E-mail: ogino@cheme.kyoto-u.ac.jp Takaji Inamuro Kyoto University, Yoshida-honmachi, Sakyo-ku, Kyoto 606-8501, Japan Ryuji Tomita Kyoto University, Yoshida-honmachi, Sakyo-ku, Kyoto 606-8501, Japan Fumimaru Ogino Kyoto University, Yoshida-honmachi, Sakyo-ku, Kyoto 606-8501, Japan

The lattice Boltzmann method for multicomponent immiscible fluids is applied to the simulations of drop deformation and breakup in shear flows for various capillary numbers and at three different Reynolds numbers. The effect of the Reynolds number on the drop behavior is investigated. From the results of simulations, it is found that the drop is easier to deform and to be ruptured as the Reynolds number increases.

1. 緒言

せん断流中の液滴の変形および分裂に関する研究は、混合器の 設計、ポリマーのブレンド、乳液の操作、レオロジーや生物細 胞の変形など、多くの理工学的分野において基本的問題であり、 非常に重要な研究課題である⁽¹⁾。そのため、これまで多くの 実験的、理論的および数値解析的研究がなされており、それら の研究から、せん断流中の液滴の変形および分裂に関する現象 は、せん断応力と界面張力の比であるキャピラリー数ならびに 連続相と液滴の粘度比の2つの無次元数でまとめられるとされ ている⁽²⁾⁽³⁾。しかしながら、多くの既存の研究においては非 常に低いレイノルズ数の場合についてのみ研究されており、液 滴の変形および分裂に与えるレイノルズ数の影響については、 これまであまり研究されていない。

数値解析的研究においては、いくつかの数値解析法がせん断 流中の液滴の変形および分裂の問題に適用されている⁽⁴⁾⁽⁵⁾ が、複雑に変形しながら分裂や合一する界面の取り扱いや界面 張力の正確なモデル化などの問題点が残されている。近年、こ れらの問題点を解決する新しい数値解析法の一つとして、二相 系格子ボルツマン法(LBM)⁽⁶⁾⁻⁽⁹⁾が提案され注目を集め ている。なかでも、稲室ら⁽¹⁰⁾は等密度の二相系格子ボルツマ ン法を提案し、せん断流中の液滴の変形および分裂の問題に適 用した。その結果、提案した手法を用いて液滴の分裂挙動をシ ミュレーションできることを定性的に確認している。

そこで本研究では、稲室らが提案した等密度の二相系格子ボ ルツマン法を用いて、せん断流中の液滴の変形および分裂の問 題に適用し、液滴の変形および分裂に与えるレイノルズ数の影 響について調べることを目的とした。液滴の変形度の時間変化、 液滴の定常な形および液滴の分裂を計算し、液滴の変形度につ いては既存の実験、理論および数値解析的研究の結果と比較し た。

2. 計算方法

以下の物理量はすべて、代表長さ H、粒子の代表速さ c、時間 スケール $t_0 = H/U$ (U:流れの代表速さ)および代表密度 ρ_0 を用いて無次元化したものである⁽¹¹⁾。LBM とは、流体を有 限個の速度をもつ多数の仮想粒子の集合体(格子気体モデル) で近似し、各粒子の衝突と並進とを粒子の速度分布関数を用い て逐次計算することにより、巨視的流れ場を求める数値計算法 である。以下では、3次元15速度モデル⁽¹²⁾を用いる。3次 元15速度モデルの粒子速度*c*iは以下のように与えられる。

$c_1,$	$c_2,$	$\boldsymbol{c}_3,$	$c_4,$	$c_5,$	c_{6}, c_{6}	c_7, a	c_{8}, c_{8}	c_{9}, c_{9}	10,	c_{11}, c_{12}	c_2, c_1	$_{3}, c_{1}$	$_4, c_1$	5]=	=
0	1	0	0 ·	-1	0	0	1 -	-1	1	1 - 1	1 -	-1 -	-1]		
0	0	1	0	0 -	$^{-1}$	0	1	1 -	-1	1 - 1	$^{-1}$	1 -	-1	•	(1)
0	0	0	1	0	0 -	$^{-1}$	1	1	1 -	-1 -1	-1 -	-1	1		

全領域を立方体格子に分割し、各格子点において分布関数の発展方程式を計算する。分布関数には、 $f_i \geq g_i$ の2つの分布関数を用いて計算する。Swift ら⁽⁸⁾のモデルの分布関数 f_i を用いて界面を識別する index function $\phi^{(9)}$ を計算し、分布関数 g_i を用いて流体の流速および圧力を計算する。時間 t で格子点x上の粒子速度 c_i をもつ粒子の分布関数 $f_i(x,t)$ および $g_i(x,t)$ の時間発展方程式を次式で計算する。

$$f_i(\boldsymbol{x} + \boldsymbol{c}_i \Delta \boldsymbol{x}, t + \Delta t) - f_i(\boldsymbol{x}, t) = -\frac{1}{\tau_f} \left[f_i(\boldsymbol{x}, t) - f_i^{\text{eq}}(\boldsymbol{x}, t) \right], \quad (2)$$

$$g_i(\boldsymbol{x} + \boldsymbol{c}_i \Delta \boldsymbol{x}, t + \Delta t) - g_i(\boldsymbol{x}, t) = -\frac{1}{\tau_g} \left[g_i(\boldsymbol{x}, t) - g_i^{\text{eq}}(\boldsymbol{x}, t) \right], \quad (3)$$

ここに、 f_i^{eq} および g_i^{eq} は局所平衡分布関数、 τ_f および τ_g は 無次元緩和時間、 Δx は格子間隔、 Δt は時間刻み(仮想粒子が 隣の格子点まで移動する時間)である。

界面を識別する index function ϕ ならびに巨視的変数である 流体の圧力 p および流速 u は、それぞれ f_i および g_i を用いて 次式で定義される。

$$\phi = \sum_{i=1}^{15} f_i, \qquad p = \frac{1}{3} \sum_{i=1}^{15} g_i, \qquad \boldsymbol{u} = \sum_{i=1}^{15} g_i \boldsymbol{c}_i. \tag{4}$$

また、局所平衡分布関数は次式で与えられる。

$$f_i^{\text{eq}} = H_i \phi + F_i \left[p_0 - \kappa_f \phi \nabla^2 \phi - \frac{\kappa_f}{6} \left| \nabla \phi \right|^2 \right]$$

$$+E_{i}\phi\left[3c_{i\alpha}u_{\alpha}-\frac{3}{2}u_{\alpha}u_{\alpha}+\frac{9}{2}c_{i\alpha}c_{i\beta}u_{\alpha}u_{\beta}\right]$$
$$+E_{i}\kappa_{f}G_{\alpha\beta}c_{i\alpha}c_{i\beta}, \qquad (5)$$
$$g_{i}^{\text{eq}}=E_{i}\left[3p+3c_{i\alpha}u_{\alpha}-\frac{3}{2}u_{\alpha}u_{\alpha}+\frac{9}{2}c_{i\alpha}c_{i\beta}u_{\alpha}u_{\beta}\right]$$
$$+E_{i}\kappa_{g}G_{\alpha\beta}c_{i\alpha}c_{i\beta}, \qquad (6)$$

ここで、

$$E_{1} = 2/9, E_{2} = E_{3} = E_{4} = \dots = E_{7} = 1/9,$$

$$E_{8} = E_{9} = E_{10} = \dots = E_{15} = 1/72,$$

$$H_{1} = 1, H_{2} = H_{3} = H_{4} = \dots = H_{15} = 0,$$

$$F_{1} = -7/3, F_{i} = 3E_{i} (i = 2, 3, 4, \dots, 15),$$
 (7)

また、

$$G_{\alpha\beta} = \frac{9}{2} \frac{\partial \phi}{\partial x_{\alpha}} \frac{\partial \phi}{\partial x_{\beta}} - \frac{3}{2} \frac{\partial \phi}{\partial x_{\gamma}} \frac{\partial \phi}{\partial x_{\gamma}} \delta_{\alpha\beta}, \qquad (8)$$

ここで、デカルト座標系 $\alpha, \beta, \gamma = x, y, z$ は総和規約に従う。 $\delta_{\alpha\beta}$ はクロネッカーのデルタ、 κ_f は界面の厚さを決めるパラ メーター、 κ_g は界面張力を決めるパラメーターである。また、 (5) 式中の p_0 は次式で与えられる。

$$p_0 = \phi T \frac{1}{1 - b\phi} - a\phi^2, \tag{9}$$

p0 は二相を分離するための関数((9) 式はファン・デル・ワー ルス流体の状態方程式に相当)であり、T, a, bは ϕ の最小およ び最大値を決める任意の定数である。なお、 f_i は、流速uを f_i から求めたとすると、Swift らの二相系 $LBM^{(8)}$ と全く同じで ある。Swift らの二相系 LBM では、非平衡系の熱力学に基づ いた圧力テンソルを用いることにより、系の自由エネルギーが 最小となるように、界面の形状は自律的に変形して決まる。ま た、各相の質量保存性に優れており、長時間計算を続けても界 面がぼやけたり体積が変化したりしない。しかし、Swift らの 二相系 LBM では、臨界点近傍の状態を扱っていることから相 変化の速さが大きく、たとえば、大小の多数のドメイン(一方 の相の領域)が存在する場合、ドメイン同士の合一がなくても 小さなドメインが消滅して大きなドメインが成長する。そのた め、臨界点から離れた一般の液液二相を取り扱う場合には不具 合が生じる。そこで、新たな速度分布関数 g_iを導入し、速度場 および圧力場を gi から求めることにした。この方法では、二 相間の相変化の速さ (τ_f の関数になる)を小さくすることがで き、上記の問題を解決することができる。また、界面張力の適 用範囲も広げることができる。

なお、(5),(6) および(8) 式の中にある1 階微分および2 階 微分は、それぞれ次式で近似する。

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

$$\nabla^2 \psi \approx \frac{1}{5\Delta x} \left[\sum_{i=1}^{15} \psi(\boldsymbol{x} + \boldsymbol{c}_i \Delta x) - 14\psi(\boldsymbol{x}) \right].$$
(11)

(1)~(9) 式に漸近展開論である S 展開⁽¹³⁾を適用すると、非 圧縮 Navier-Stokes 方程式および連続の式を満足する巨視的変 数 (u および p)を $O[(\Delta x)^2]$ の誤差で計算できることがわか る⁽¹¹⁾。また、粘性係数は次式で与えられる。

$$\mu = \frac{1}{3} \left(\tau_g - \frac{1}{2} \right) \Delta x. \tag{12}$$



Fig. 1 Computational domain.



Fig. 2 Drop deformation in a shear flow. L: a major axis; B: a minor axis.

従って、 τ_g を変化させることにより、二相の粘性係数を変化させることができる。また、界面張力 σ は次式で与えられる。

$$\sigma = \kappa_g \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{\partial \phi}{\partial \xi}\right)^2 \delta\xi, \qquad (13)$$

ここで、 ξ は界面に垂直な座標である $^{(14)}$ 。

3. 計算結果および考察

Fig. 1 に示すように、距離 *H* の平行平板間の中心に半径 *R* (*R*/*H* = 0.125)の球形の液滴を配置し、液滴が十分平衡状態 に達した後、上下の壁を反対方向に速さ u_w でステップ状に動か し(動かし始めた時刻をt = 0とする)、その後の液滴の変形お よび分裂状態を追跡した。上下の壁には滑りなし境界条件⁽¹⁵⁾ を、側面には周期境界条件を用いた。また、液滴と連続相の密度 は等しいとした。計算領域は $128 \times 64 \times 128$ の立方体格子に分 割した。この問題の無次元数は、レイノルズ数 Re = $\rho \Gamma R^2/\mu_c$ 、 キャピラリー数 Ca = $\mu_c \Gamma R/\sigma$ および粘度比 $\eta = \mu_d/\mu_c$ であ る。ここで、 $\Gamma = 2u_w/H$ はせん断強さ、 μ_c は連続相の粘性 係数、 μ_d は液滴の粘性係数である。計算条件は、a = 9/49、 b = 2/21、T = 0.55 (このとき、 $\phi_{max} = 4.895$ 、 $\phi_{min} = 2.211$ となる)とし、 $\kappa_f = 0.01(\Delta x)^2$ 、 $\tau_f = 0.7$ 、 $R = 16\Delta x$ とした。 その他のパラメーター u_w 、 τ_g 、 κ_g の値は、Re = 0.20, 1.0, 10, 10



Fig. 3 Time variations of drop deformation D ($t^* = t\Gamma$). (a) Re=0.20, Ca=0.10, - - Ca=0.20, - - - Ca=0.30, — Ca=0.40; (b) Re=1.0, - - Ca=0.10, — Ca=0.20; (c) Re=10, - - Ca=0.10, — Ca=0.15.

 $0.05 \le Ca \le 0.45$ になるように変化させた。また、粘度比は $\eta = 1$ とした。なお、液滴の変形度 Dを、D = (L-B)/(L+B)で定義した。ここで、Lおよび B は、Fig. 2 に示すように、そ れぞれ液滴の長軸および短軸の長さである。液滴が大きく変形 すればするほど、Dの値は大きくなる。

まず、Fig. 3 に液滴の変形度 D の時間変化を示す。図中の 横軸は無次元時間 $t^* = t\Gamma$ である。Fig. 3 (a) は Re = 0.20 の



Fig. 4 Stable shapes of the deformed drop at Re = 0.20. (a) Ca=0.10, $t^*=2.73$; (b) Ca=0.20, $t^*=4.69$; (c) Ca=0.30, $t^*=7.05$; (d) Ca=0.40, $t^*=22.7$. The contour surface represents the index function $\phi = (\phi_{\max} + \phi_{\min})/2$.



Fig. 5 Velocity vectors and contour lines of the index function ϕ on the x-z plane cutting the center of the drop at Re=0.20 and Ca=0.20.

場合であるが、Fig. 3 (a) から、壁を動かすと液滴は Ca にか かわらずすぐに変形し始める。その後、液滴はキャピラリー数 Ca が大きい場合ほど大きく変形し、また、液滴の変形度が一 定になるまでにかかる時間も Ca が大きいほど長くなる。一方、 Fig. 3 (b) から Re = 1.0 の場合は、Re = 0.20 の場合と比較し て、壁を動かした後、液滴はややゆっくりと変形する。この傾 向は Fig. 3 (c) の Re = 10 の場合はさらに顕著になり、液滴は 非常にゆっくりと変形する。これは、レイノルズ数が高い場合 ほど粘性係数が小さいため、せん断場がゆっくりと発達するか らである。しかし、Re = 1.0 や 10 の場合でも、Ca が大きい



Fig. 6 Drop breakup at Re = 0.20 and Ca = 0.45 ($t^* = t\Gamma$). The contour surface represents the index function $\phi = (\phi_{\max} + \phi_{\min})/2$.

場合ほど液滴が大きく変形する傾向は $\operatorname{Re} = 0.20$ の場合と同様 である。

次に、Fig. 4 に Re = 0.20 においてキャピラリー数を Ca = 0.10, 0.20, 0.30, 0.40 と変化させた場合に液滴の変形が定常に達した後の計算結果を示す。液滴は楕円体になることがわかる。この状態でせん断応力と界面張力が釣り合っていることがわかる。また、Fig. 5 に Re = 0.20, Ca = 0.20 の場合の、液滴の中心を通る x - z断面における速度場および index function ϕ の等高線を示す。Fig. 5 から、液滴内部に循環流が生じ、液滴周りの速度場が少し乱れていることがわかる。しかし、液滴から離れたところではせん断場が保たれていることがわかる。

次に、Fig. 4 の場合と同じ Re = 0.20 において、Ca = 0.45 と少しキャピラリー数を大きくした場合の計算結果を Fig. 6 に 示す。この場合、液滴は楕円体に変形した後、せん断応力に比 べて界面張力が弱いために液滴は楕円体を保つことができず、 さらにダンベル型に変形し、最後には 2 つの液滴に分裂するこ とがわかる。このような液滴の分裂形態は fracture と呼ばれて いる⁽¹⁾。

Fig. 7 Drop breakup at Re=1.0 and Ca=0.30 ($t^* = t\Gamma$). The contour surface represents the index function $\phi = (\phi_{\text{max}} + \phi_{\text{min}})/2$.

次に、Fig. 7 に Re = 1.0, Ca = 0.30、Fig. 8 に Re = 10, Ca = 0.20 の、Fig. 6 の場合と比べてレイノルズ数を増加さ せ、キャピラリー数を減少させた場合の計算結果を示す。この 場合、Fig. 6 の場合と同様に、液滴は楕円形に変形した後、ダ ンベル型に変形し、最後に 2 つの大きな液滴に分裂し、Fig. 8 の場合はさらに中央部分に 1 つの小さな液滴を形成する。いず れの場合も液滴の分裂形態は fracture である。しかしながら、 同じキャピラリー数であっても、Fig. 4 (b) および (c) に示すよ うに Re = 0.20 の場合は液滴は楕円体を保っている。よって、 液滴の変形および分裂の現象には、キャピラリー数だけではな く、レイノルズ数の影響が存在することがわかる。

最後に、以上の計算結果をもとにキャピラリー数と液滴の変形 度 D との関係を求めた結果を Fig. に示す。なお、Fig. には既存 の実験 ^{(16) (17)}、数値計算 ⁽⁵⁾ および理論解析 ⁽¹⁸⁾ の結果を合 わせて示している。なお、既存の結果のレイノルズ数は非常に小 さく (Re < 10⁻³)、特に理論解析の結果は Re = 0 に対するも のである。Fig. より、Re = 0.20 における Ca = 0.10, 0.20, 0.30 の場合の計算結果は、既存の結果とレイノルズ数が異なるにも かかわらず、液滴の変形度について既存の結果との違いは見ら



Fig. 8 Drop breakup at Re=10 and Ca=0.20 $(t^*=t\Gamma)$. The contour surface represents the index function $\phi = (\phi_{\text{max}} + \phi_{\text{min}})/2$.

れない。一方、Ca = 0.40の場合の結果は、既存の結果より変形 度 D が少し大きくなる。さらに、Ca = 0.45の場合では、本計 算結果は Fig. 6 で示したように液滴は分裂するが、低レイノル ズ数における既存の結果においては分裂せずに楕円体形状を保 つ。これらの差異はレイノルズ数の違いによるものであると考 えられる。実際に、さらにレイノルズ数を大きくした Re = 1.0や 10 の場合の計算結果は、同様の傾向を示している。すなわ ち、本計算結果よりレイノルズ数が大きくなるにしたがって、 液滴は変形および分裂しやすくなることがわかる。

4. 結言

等密度二相系格子ボルツマン法を用いて、せん断流中の液滴の 変形および分裂のシミュレーションを行い、液滴の変形および 分裂に与えるレイノルズ数の影響について調べた。液滴と連続 相の粘度比は $\eta = 1$ の条件について計算を行い、レイノルズ数 は Re = 0.20, 1.0 および 10 の場合について、キャピラリー数を $0.10 \leq \text{Ca} \leq 0.45$ の範囲で変化させ、以下の結果が得られた。

1. 本計算結果は Re = 0.20 で Ca = 0.10, 0.20 および 0.30 の場合、低レイノルズ数における既存の結果 (Re < 10^{-3}) とレイノルズ数が異なるにもかかわらず、液滴の変形度 D



Fig. 4 The relation between the capillary number Ca and drop deformation D ($\eta = 1.0$). Re=0.20, Re=1.0, Re=10.0, present results; --- Cox⁽³⁾; Rumcheidt et al⁽⁴⁾; De Bruijn⁽⁵⁾; Li et al.⁽⁶⁾

に既存の結果との違いは見られない。

- Re = 0.20, Ca = 0.40の場合、液滴の変形度 D は低レイノ ルズ数における既存の結果よりわずかに大きな値となる。
- 3. Re = 0.20, Ca = 0.45 の場合、低レイノルズ数における既 存の結果においては液滴は分裂しないが、本計算結果にお いては液滴は分裂した。
- レイノルズ数が増加するにしたがって、上記の傾向は顕著 になり、液滴は変形および分裂しやすくなる。

参考文献

- Stone, H. A., "Dynamics of drop deformation and breakup in viscous fluids," Annu. Rev. Fluid Mech., 26 (1994), pp. 65-102.
- (2) Torza, S., Cox, R. G., and Mason, S. G., "Practice motions in sheared suspensions. . Transient and steady deformation and burst of liquid drops," J. Coll. Int. Sci., 38 (1972), pp. 395-411.
- (3) Grace, H. P., "Dispersion phenomena in high viscosity immiscible fluid systems and application of static mixers as dispersion devices in such systems," Chem. Eng. Commun., 14 (1982), pp. 225-277.
- (4) Sheth, K. S., and Pozrikidis, C., "Effects of inertia on the deformation of liquid drops in simple shear flow," Computers Fluids, 24 2 (1995), pp. 101-119.
- (5) Li, J., Renardy, Y. Y., and Renardy, M., "Numerical simulation of breakup of a viscous drop in simple shear flow through a volume-of-fluid method," Phys. Fluids, 12 (2000), pp. 269-282.
- (6) Gunstensen, A. K., Rothman, D. H., Zaleski, S., and Zanetti, G., "Lattice Boltzmann model of immiscible fluids," Phys. Rev. A, 43 (1991), pp. 4320-4327.

- (7) Shan, X., and Chen, H., "Lattice Boltzmann model for simulating flows with multiple phases and components," Phys. Rev. E, 47 (1993), pp. 1815-1819.
- (8) Swift, M. R., Osborn, W. R., and Yeomans, J. M., "Lattice Boltzmann simulation of nonideal fluids," Phys. Rev. Lett., **75** (1995), pp. 830-833.
- (9) He, X., Chen, S., and Zhang, R., "A discrete Boltzmann equation model for non-ideal gases," J. Comput. Phys., **152** (1999), pp. 642-663.
- (10) Inamuro, T., Miyahara, T., and Ogino, F., "Lattice Boltzmann simulations of drop deformation and breakup in simple shear flow," Computational Fluid Dynamics 2000, ed. N. Satofuka (Springer-Verlag) (2001), pp. 499-504.
- (11) Inamuro, T., Yoshino, M., and Ogino, F., "Accuracy of the lattice Boltzmann method for small Knudsen number with finite Reynolds number," Phys. Fluids, 9 (1997), pp. 3535-3542.
- (12) Qian, Y. H., d'Humières, D., and Lallemand, P., "Lattice BGK models for Navier-Stokes equation," Europhys. Lett., 17 (1992), pp. 479-484.

- (13) Sone, Y., "Asymptotic theory of flow of rarefied gas over a smooth boundary ," Rarefied Gas Dynamics, (ed. D. Dini), 2 Editrice Tecnico Scientifica, Pisa, (1971), pp. 737-749.
- (14) 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.
- (15) Inamuro, T., Yoshino, M., and Ogino, F., "A non-slip boundary condition for lattice Boltzmann simulations," Phys. Fluids, 7 (1995), pp. 2928-2930. ; Erratum: 8 (1996), pp. 1124.
- (16) Rumscheidt, F. D., and Mason, S. G., "Practice motions in sheared suspensions. Deformation and burst of fluid drops in shear and hyperbolic flow," J. Colloid Sci., **16** (1961), pp. 238-261.
- (17) Bruijn, R. A. de, "Deformation and breakup of drops in simple shear flows," Ph. D. thesis, Technical University at Eindhoven, (1989).
- (18) Cox, R. G., "The deformation of a drop in a general time-dependent fluid flow," J. Fluid Mech., 37 (1969), pp. 601-624.