

界面拡散モデルに対する格子ボルツマン法への TRT 衝突則の適用

THE PHASE-FIELD-BASED TWO RELAXATION TIME LATTICE BOLTZMANN METHOD

瀬田 剛¹⁾

Takeshi SETA

1) 富山大学大学院理工学研究部 (工学) (〒 930-8555 富山市五福 3190, E-mail: seta@eng.u-toyama.ac.jp)

We verify the accuracy of the interface capturing method in order to calculate the motion of a droplet on a hydrophobic surface by the immersed boundary-lattice Boltzmann method (IB-LBM). To exactly derive the Cahn-Hilliard equation, we use the proper source term proposed by Liang and the two-relaxation-time (TRT) collision operator. The series of the numerical tests, including Zalesak's disk rotation, a single vortex, and a deformation of a sphere demonstrate that the computational effectiveness of the TRT collision operator is superior to that of the multi relaxation time (MRT) collision operator. The present IB-LBM with the TRT collision operator appropriately calculates the contact angle of a droplet on the hydrophilic or hydrophobic plate in two and three dimensions.

Key Words: Computational Fluid Dynamics, Lattice Boltzmann Method, Two Relaxation Time Collision Operator, Phase Field Method, Immersed Boundary Method

1. はじめに

生活用品や医療用部材の防汚処理から電子基盤の高詳細化, 細胞培養基材に至るまで, 超撥水技術には大きな市場規模が期待されている. これまで, フェーズフィールド法 (Phase Field Method, PFM) に基づく格子ボルツマン法 (Lattice Boltzmann Method, LBM)⁽¹⁾ を用いた濡れ性に関する数値解析が精力的に行われており, バウンスバック境界条件によって設定された固体表面の凹凸形状による撥水効果への影響等が検証されている^(2, 3). LBM に基づくフェーズフィールド法では, Navier-Stokes 方程式に対する分布関数 f_α と, Cahn-Hilliard 方程式に対する分布関数 g_α の, それぞれに対する運動方程式を解くことで二相流解析が可能となる. Cahn-Hilliard 方程式を, LBM の運動方程式から導出すると, オーダーパラメータの時間微分に関する誤差項が生じ, この誤差項を除去する様々な手法が提案された^(4, 5, 6). 近年, 任意形状の境界壁を設定出来る埋め込み境界法 (Immersed Boundary Method, IBM) と LBM とを組み合わせた Immersed Boundary Lattice Boltzmann Method (IB-LBM)⁽⁷⁾ により, 接触角を設定出来る手法が提案されており, IB-LBM によるサブマイクロスケール凹凸面を考慮した超撥水現象解析が期待出来る⁽⁸⁾. IB-LBM によって設定された壁面に対する接触角を正しく解析するためには, 二相界面を正確に捕捉する必要がある. 本

研究では, 計算効率に優れた Two Relaxation Time (TRT) 衝突則⁽⁹⁾ による Cahn-Hilliard 方程式の計算精度への影響を検証し, IB-LBM による濡れ性解析への本手法の適用性を評価することを本研究の目的とする.

2. 計算手法

LBM では, Cahn-Hilliard 方程式,

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \phi = \theta_M \nabla^2 \mu_\phi, \quad (1)$$

が, 分布関数 g_α に対する運動方程式,

$$g_\alpha(\mathbf{x} + \mathbf{c}_\alpha \delta t, t + \delta t) = \tilde{g}_\alpha(\mathbf{x}, t), \quad (2a)$$

$$\tilde{g}_\alpha(\mathbf{x}, t) = g_\alpha(\mathbf{x}, t) - \frac{g_\alpha(\mathbf{x}, t) - g_\alpha^{(\text{eq})}(\mathbf{x}, t)}{\tau_c}, \quad (2b)$$

により解析される. 式 (2a), (2b) は, それぞれ, 並進過程と衝突過程を表す. ここで, \mathbf{u} は流速, θ_M は易動度, μ_ϕ は化学ポテンシャル, α は離散速度 \mathbf{c} の方向を示すインデックス, τ_c は緩和時間, $g_\alpha^{(\text{eq})}$ は平衡分布関数, \tilde{g}_α は衝突後の分布関数である. オーダーパラメータ ϕ は,

$$\phi = \sum_{\alpha} g_\alpha, \quad (3)$$

で定義される. 化学ポテンシャル μ_ϕ は,

$$\mu_\phi = 4a\phi(\phi^2 - \phi^{\#2}) - \kappa \nabla^2 \phi, \quad (4)$$

である．ここで， a はバルクの自由エネルギーの大きさに対する係数， κ は界面の勾配エネルギーの大きさに対する係数である． $\pm\phi^\#$ は二相に対するオーダーパラメータの値を示し， ϕ は $-\phi^\#$ から $+\phi^\#$ までの範囲の値をとる．界面厚さ W と表面張力 σ は，

$$\sigma = \frac{4\sqrt{2\kappa a}}{3}\phi^\#3, \quad W = \frac{\sqrt{2\kappa/a}}{\phi^\#}, \quad (5)$$

で与えられる．Liang によって提案された D2Q9 モデルに対する平衡分布関数は，

$$g_\alpha^{(\text{eq})} = \begin{cases} \phi + (\omega_0 - 1)\eta\mu_\phi, & \alpha = 0, \\ \omega_\alpha(\eta\mu_\phi + \phi\frac{3c_\alpha \cdot \mathbf{u}}{c^2}), & \alpha = 1 - 8, \end{cases} \quad (6)$$

である (6)．ここで ω_α は重み係数であり， $\omega_0 = 4/9$ ， $\omega_{1-4} = 1/9$ ， $\omega_{5-8} = 1/36$ である． c は離散速度の大き， η は易動度 θ_M を調整するパラメータである．式 (2a)，(2b) にマルチスケール展開を適用すると，

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \phi = \theta_M \nabla^2 \mu_\phi + \delta_t \left(\tau_c - \frac{1}{2} \right) \frac{\partial \nabla \cdot (\phi \mathbf{u})}{\partial t}, \quad (7)$$

のように，誤差項が生じる．易動度 θ_M は，

$$\theta_M = \frac{\eta c^2 \delta_t}{3} (\tau_c - 0.5), \quad (8)$$

である．

Fakhari は，式 (2b) に対し，次式の Multi Relaxation Time (MRT) 衝突則を適用すれば，界面の振動を抑えられることを示した (5)．

$$\tilde{g}_\alpha(\mathbf{x}, t) = g_\alpha(\mathbf{x}, t) - \Lambda_{\alpha\beta} (g_\beta(\mathbf{x}, t) - g_\beta^{(\text{eq})}(\mathbf{x}, t)). \quad (9)$$

ここで，行列 $\Lambda = M^{-1}SM$ であり，

$$M = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ -4 & -1 & -1 & -1 & -1 & 2 & 2 & 2 & 2 \\ 4 & -2 & -2 & -2 & -2 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & -1 & 0 & 1 & -1 & -1 & 1 \\ 0 & -2 & 0 & 2 & 0 & 1 & -1 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & -2 & 0 & 2 & 1 & 1 & -1 & -1 \\ 0 & 1 & -1 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 1 & -1 \end{pmatrix}, \quad (10)$$

$$S = \text{diag}(s_0, s_1, s_2, s_3, s_4, s_5, s_6, s_7, s_8), \quad (11)$$

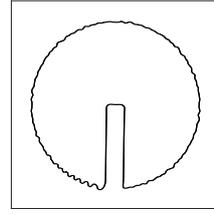
である．なお，Fakhari は，以下の平衡分布関数，

$$g_\alpha^{(\text{eq})} = \begin{cases} \phi + 3(\omega_0 - 1)\eta\mu_\phi, & \alpha = 0, \\ 3\omega_\alpha(\eta\mu_\phi + \phi\frac{c_\alpha \cdot \mathbf{u}}{c^2}), & \alpha = 1 - 8, \end{cases} \quad (12)$$

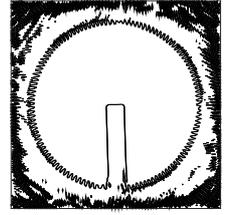
を用いており，式 (7) の誤差項の除去はしていない．

Liang は，次式に示されるように，MRT 衝突則と補正項 q_α を，式 (2b) に適用することで，式 (7) の誤差項を除去し，式 (1) を適切に解析出来ることを示した (6)．

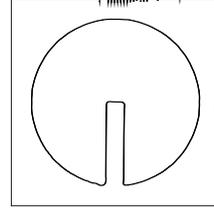
$$\tilde{g}_\alpha(\mathbf{x}, t) = g_\alpha(\mathbf{x}, t) - \Lambda_{\alpha\beta} (g_\beta(\mathbf{x}, t) - g_\beta^{(\text{eq})}(\mathbf{x}, t)) + \delta_t \Theta_{\alpha\beta} q_\beta(\mathbf{x}, t). \quad (13)$$



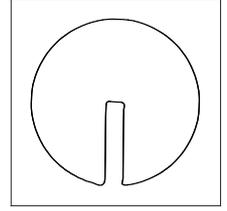
(a) Fakhari's model (5)



(b) Liang's SRT model (6)



(c) Liang's MRT model (6)



(d) Present TRT model

Fig. 1 Results of Zalesak's disk test after one period at $Pe = 400$ and $U_0 = 0.04$.

ここで，行列 $\Theta = M^{-1}(I - S/2)M$ ， I は単位行列である． q_α は次式で定義され，時間に関する微分は後退差分近似によって求められる．

$$q_\alpha = \frac{3\omega_\alpha c_\alpha \cdot \partial_t \phi \mathbf{u}}{c^2}. \quad (14)$$

本研究では，Liang のモデルに対し，計算効率に優れた TRT 衝突則を適用する．

$$\tilde{g}_\alpha(\mathbf{x}, t) = g_\alpha(\mathbf{x}, t) - \frac{g_\alpha^+(\mathbf{x}, t) - g_\alpha^{+(\text{eq})}(\mathbf{x}, t)}{\tau_c^+} - \frac{g_\alpha^-(\mathbf{x}, t) - g_\alpha^{-(\text{eq})}(\mathbf{x}, t)}{\tau_c^-} + \delta_t \left(1 - \frac{1}{2\tau_c^-} \right) q_\alpha(\mathbf{x}, t). \quad (15)$$

TRT 衝突則において，分布関数 g_α は，次式により，偶関数部分と奇関数部分とに分離される．

$$g_\alpha^\pm = \frac{g_\alpha \pm g_{\bar{\alpha}}}{2}, \quad g_0^+ = g_0, \quad g_0^- = 0. \quad (16)$$

ここで， $g_{\bar{\alpha}}$ は離散速度 c_α に対し逆向きに離散速度 $c_{\bar{\alpha}}$ に対応した分布関数である．TRT 衝突則で用いられる 2 種類の緩和時間 τ_c^\pm に対し，Ginzburg は，マジックパラメータ λ を定義した (9)．本研究では，計算結果を検証した結果， $\lambda = 0.1$ に決定した．

$$\lambda = \left(\tau_c^+ - \frac{1}{2} \right) \left(\tau_c^- - \frac{1}{2} \right). \quad (17)$$

3. 計算結果

3.1. Zalesak の二次元剛体回転問題

格子点数が 200×200 の計算領域の中心に設定した半径 80，スロット幅 16 の円盤を回転させる二次元剛体回転問題を解く (10)．対流速度は次式で与えられる．

$$u = -\frac{U_0 \pi}{d}(y - 0.5d), \quad v = \frac{U_0 \pi}{d}(x - 0.5d). \quad (18)$$

ここで， $d = 200$ ， $U_0 = 0.04$ とし，周期は $T = 2d/U_0 = 10,000$ となる． $\tau_c^- = 0.75$ ， $\phi^\# = 1$ ， $W = 2$ ， $\sigma = 0.04$ ， Pe

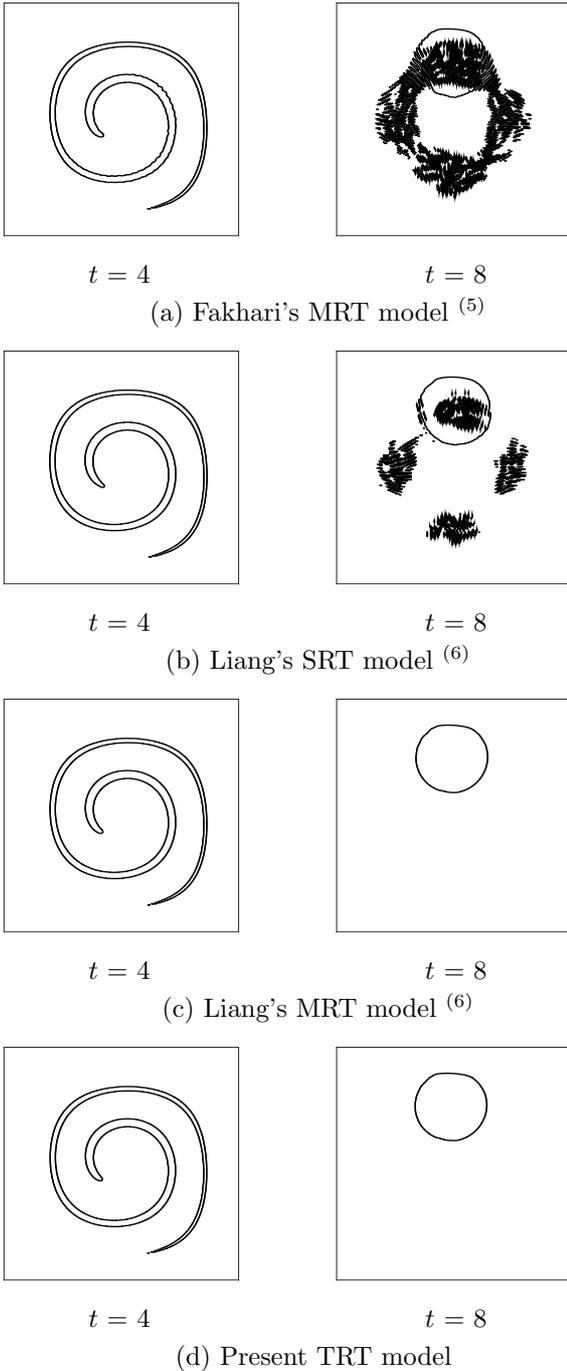


Fig. 2 Results of the single-vortex test at $Pe = 500$ and $U_0 = 0.08$.

クレ数 $Pe = U_0 W / (4\theta_M a \phi^{\#2}) = 400$ とする。円盤が一回転した後の ϕ の分布を Fig. 1 に示す。Fig. 1(a) に示されるように、Fakhari のモデルでは、式 (7) の誤差項を除去していないため、界面に振動が発生する。式 (7) の誤差項を除去する Liang のモデルに対し、SRT 衝突則を用いた場合の計算結果を、Fig. 1(b) に示す。Fig. 1(b) より、誤差項を除去しただけでは、適切に界面を捕捉出来ないことが分かる。式 (7) の誤差項を除去し、更に MRT 衝突則または TRT 衝突則を用いることで、界面を正確に計算出来ることが、Fig. 1(c), 1(d) から分かる。Fig. 1(c), 1(d) の比較から、アルゴリズムが単純な TRT 衝突則を用いても、MRT 衝突則と同等の精度が

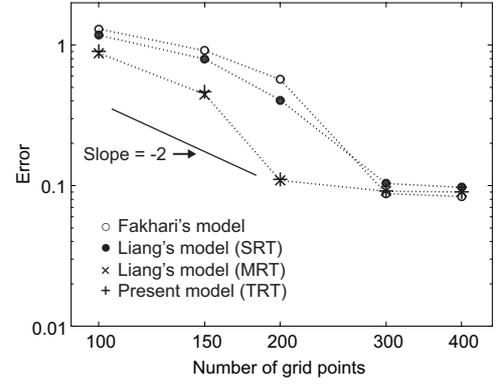


Fig. 3 Relative error versus the number of grid points.

得られることが明らかである。円盤が一回転するまでに要した CPU time は、MRT 衝突則で 139[s], TRT 衝突則で 68[s] であり、TRT 衝突則の方が、計算効率が高かった。

3.2. 液滴変形の二次元計算

前節の Zalesak の問題と異なり、界面形状が伸縮・変形する場合の本手法の計算精度を検証する。格子点数が 200×200 の計算領域の (100, 150) の位置に中心が設定された半径 40 の液滴に対し、次式の対流速度を与える。

$$u = U_0 \sin^2 \frac{\pi x}{d} \cos \frac{2\pi y}{d} \cos \frac{\pi t}{T}, \quad (19)$$

$$v = -U_0 \sin \frac{2\pi x}{d} \sin^2 \frac{\pi y}{d} \cos \frac{\pi t}{T}. \quad (20)$$

ここで、 $d = 200$, $U_0 = 0.08$ とし、時間 t を d/U_0 で無次元化し、周期を $T = 8$ とする。Fig. 2 に半周期後と一周期後の ϕ の分布を示す。Fig. 2(a) に示されるように、誤差項を除去していない Fakhari のモデルでは、 $t = 4$, $t = 8$ のどちらでも、界面に振動が発生している。Fig. 2(b) から、誤差項を除去しただけでは、Fig. 1(b) の結果と同様に、数値的安定性に問題があることが分かる。Fig. 2(c), 2(d) において、MRT 衝突則または TRT 衝突則を適用し、式 (7) の誤差項を除去することで、界面が適切に計算されている。 ϕ の初期形状 $\phi(\mathbf{x}, 0)$ に対する一周期後の形状 $\phi(\mathbf{x}, T)$ の相対誤差 $E(\mathbf{x})$ を次式のように定義し、各手法の計算精度を比較する。

$$E(\mathbf{x}) = \frac{\sum_{\mathbf{x}} |\phi(\mathbf{x}, T) - \phi(\mathbf{x}, 0)|}{\sum_{\mathbf{x}} |\phi(\mathbf{x}, 0)|}. \quad (21)$$

格子点数が 200×200 までは、各手法とも空間に対しほぼ二次精度を有していることが、Fig. 3 から分かる。式 (7), (14) に示される ϕ の時間微分を含む誤差項や補正項の影響により、周期 T の間に誤差が発生する。この時間に関する誤差は空間解像度を高くしても除去されないため、低解像度ではほぼ二次精度であるが、高解像度になると収束性が悪くなり、誤差が 0.09 程度で一定になったと考えられる。以上より、TRT 衝突則を用いた場合、全手法の中で最も誤差が小さい MRT 衝突則と同等の計算精度を有しており、TRT 衝突則は最も効率よく界面形状を計算可能であると結論出来る。

3.3. 液滴変形の三次元計算

TRT 衝突則を用いた本手法の三次元計算に対する有効性を検証するため、LeVenque による液滴変形の計算を行



(a) Zheng's SRT model ⁽⁴⁾



(b) Present SRT model



(c) Present TRT model

Fig. 4 Deformation of a sphere at $Pe = 700$ and $U_0 = 0.02$.

う ⁽¹¹⁾. 格子点数 $160 \times 160 \times 160$ の計算領域において、中心を $(56, 56, 56)$ に設定した液滴に対し、せん断速度、

$$u = 2U_0 \sin^2(\pi x) \sin(2\pi y) \sin(2\pi z) \cos \frac{\pi t}{T}, \quad (22)$$

$$v = -U_0 \sin(2\pi x) \sin^2(\pi y) \sin(2\pi z) \cos \frac{\pi t}{T}, \quad (23)$$

$$w = -U_0 \sin(2\pi x) \sin(2\pi y) \sin^2(\pi z) \cos \frac{\pi t}{T}, \quad (24)$$

を与える。

Zheng は D3Q7 モデルに対し、式 (7) の誤差項を除去するため、衝突項を、

$$\begin{aligned} \tilde{g}_\alpha(\mathbf{x}, t) &= g_\alpha(\mathbf{x}, t) - \frac{g_\alpha(\mathbf{x}, t) - g_\alpha^{(\text{eq})}(\mathbf{x}, t)}{\tau_c} \\ &+ (1 - q)[g_\alpha(\mathbf{x} + \mathbf{c}_\alpha \delta t, t) - g_\alpha(\mathbf{x}, t)], \end{aligned} \quad (25)$$

のように修正し、更に、平衡分布関数を緩和時間 τ_c の関数とした ⁽⁴⁾.

$$g_\alpha^{(\text{eq})} = \begin{cases} \phi - 3\eta\mu_\phi, & \alpha = 0, \\ \frac{1}{2}(\eta\mu_\phi + \phi \frac{\mathbf{c}_\alpha \cdot \mathbf{u}}{c^2}), & \alpha = 1 - 6. \end{cases} \quad (26)$$

ここで、 $q = 1/(\tau_c + 0.5)$ である。易動度は次式で定義される。

$$\theta_M = q\eta c^2 \delta t (\tau_c q - 0.5). \quad (27)$$

本手法と Zheng のモデルとを比較するため、D3Q7 モデルに、補正項を付加した式 (15) を適用し、以下の平衡分布関

数を用いる。

$$g_\alpha^{(\text{eq})} = \begin{cases} \phi - 3\eta\mu_\phi, & \alpha = 0, \\ \frac{1}{2}(\eta\mu_\phi + \phi \frac{\mathbf{c}_\alpha \cdot \mathbf{u}}{c^2}), & \alpha = 1 - 6. \end{cases} \quad (28)$$

補正項は、

$$q_\alpha = \frac{\mathbf{c}_\alpha \cdot \partial_t \phi \mathbf{u}}{2c^2}, \quad (29)$$

易動度は、

$$\theta_M = \eta c^2 \delta t (\tau_c - 0.5), \quad (30)$$

となる。Fig. 4 に、ペクレ数 $Pe = 700$ 、代表速さ $U_0 = 0.02$ 、 $\tau_c^- = 0.75$ 、 $W = 2$ 、 $\sigma = 0.04$ とした場合の計算結果を示す。式 (26) に示されるように、平衡分布関数を緩和時間 τ_c の関数とする Zheng の手法では、LeVenque の液滴変形問題を解くことが出来ないことが、Fig. 4(a) から分かる。ペクレ数 Pe や、代表速さ U_0 等を変更しても、Zheng の手法では、LeVenque の液滴変形問題は解けなかった。Fig. 4(b) に示されるように、式 (15) の補正項を用いる本手法では、Fig. 4(a) で観察された界面の発散は抑えられている。Fig. 4(b) において、SRT 衝突則では、一周期後の界面に僅かな誤差が発生しているが、TRT 衝突則を適用することにより、適切に界面を捕捉出来ることが Fig. 4(c) から分かる。

3.4. IB-LBM への適用

最後に、Shao によって提案された濡れ性を考慮する IB-LBM ⁽⁸⁾ への本手法の適用性を評価する。界面拡散モデルに対する支配方程式は、

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla \cdot (n\mathbf{u}) = 0, \quad (31)$$

$$\frac{\partial n\mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (n\mathbf{u}\mathbf{u}) = -\nabla P + \mu \nabla^2 \mathbf{u} + \mathbf{G}, \quad (32)$$

で与えられる。ここで、 n は二相の平均密度、圧力は $\nabla P = \phi \nabla \mu_\phi + \nabla p_0$ 、 $p_0 = nc^2/3$ である。式 (31), (32) は、分布関数 f_α に対する方程式、

$$\begin{aligned} & f_\alpha(\mathbf{x} + \mathbf{c}_\alpha \delta t, t + \delta t) - f_\alpha(\mathbf{x}, t) \\ &= -\frac{f_\alpha(\mathbf{x}, t) - f_\alpha^{(\text{eq})}(\mathbf{x}, t)}{\tau_v} + \delta t F_\alpha(\mathbf{x}, t), \end{aligned} \quad (33)$$

によって解析される。平衡分布関数は、

$$f_0^{(\text{eq})} = n\omega_0 \left(1 - \frac{3}{2c^2} \mathbf{u} \cdot \mathbf{u}\right) - \omega' \phi \mu_\phi, \quad (34)$$

$$\begin{aligned} f_\alpha^{(\text{eq})} &= n\omega_\alpha \left(1 + \frac{3}{c^2} \mathbf{c}_\alpha \cdot \mathbf{u} + \frac{9}{2c^4} (\mathbf{c}_\alpha \cdot \mathbf{u})^2 - \frac{3}{2c^2} \mathbf{u} \cdot \mathbf{u}\right) \\ &+ 3\omega_\alpha \phi \mu_\phi, \end{aligned} \quad (35)$$

で与えられる。ここで、重み係数 ω_α は、D2Q9 モデルに対し、 $\omega_0 = 4/9$ 、 $\omega_{1-4} = 1/9$ 、 $\omega_{5-8} = 1/36$ 、 $\omega' = 5/3$ 、D3Q19 モデルに対し、 $\omega_0 = 1/3$ 、 $\omega_{1-6} = 1/18$ 、 $\omega_{7-18} = 1/36$ 、 $\omega' = 2$ である。

平均密度 n と流速 \mathbf{u} は、

$$n = \sum_\alpha f_\alpha, \quad n\mathbf{u} = \sum_\alpha \mathbf{c}_\alpha f_\alpha + \frac{\delta t}{2} (\mu_\phi \nabla \phi + \mathbf{G}), \quad (36)$$

で定義される. Navier-Stokes 方程式の外力を適切に導出可能な Guo の外力項を, 式 (33) の F_α に適用する⁽¹²⁾.

$$F_\alpha = n\omega_\alpha \left(1 - \frac{1}{2\tau_v}\right) \left[(\mathbf{c}_\alpha - \mathbf{u}) + \frac{3\mathbf{c}_\alpha \cdot \mathbf{u}}{c^2} \mathbf{c}_\alpha \right] (\mu_\phi \nabla \phi + \mathbf{G}). \quad (37)$$

ノンスリップ境界条件を高精度に設定でき, 固体壁内への流体の漏れを防ぐ Implicit Correction Method により, 外力 \mathbf{G} を計算する⁽¹³⁾. Implicit Correction Method では, 式 (36) を次式のように表す.

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}^* + \delta \mathbf{u}. \quad (38)$$

ここで,

$$\mathbf{u}^* = \frac{1}{n} \left(\sum_\alpha f_\alpha \mathbf{c}_\alpha + \frac{\delta_t}{2} \mu_\phi \nabla \phi \right), \quad \delta \mathbf{u} = \frac{\delta_t}{2n} \mathbf{G}, \quad (39)$$

である. IBM では, 固液界面はラグランジュ点の集合で近似される. この境界上の点 \mathbf{x}_b に適切な外力 \mathbf{G} を発生させることで, 流体は構造体の影響を受け, 流体内に任意形状の固体壁が設定される. 固体表面上のラグランジュ点 \mathbf{x}_b 上の外力 $\mathbf{G}(\mathbf{x}_b)$ は, 次式により, オイラー座標 \mathbf{x}_f 上に補間される.

$$\mathbf{G}(\mathbf{x}_f, t) = \sum_b^N \mathbf{G}(\mathbf{x}_b, t) D(\mathbf{x}_f - \mathbf{x}_b) \Delta s. \quad (40)$$

ここで, N は境界を構成する点の総数, Δs は各ラグランジュ点に対する面積 (体積) を表す. また, 固体表面上の流速 $\mathbf{u}(\mathbf{x}_b)$ は, 次式により内挿される.

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}_b, t) = \sum_f \mathbf{u}(\mathbf{x}_f) D(\mathbf{x}_f - \mathbf{x}_b) \delta_x^2. \quad (41)$$

ここで, \sum_f は格子点 \mathbf{x}_f に関する総和を表す.

$D(\mathbf{x})$ は, 二次元計算に対しては,

$$D(\mathbf{x}_f - \mathbf{x}_b) = \delta(x_f - x_b) \delta(y_f - y_b), \quad (42)$$

三次元計算に対しては,

$$D(\mathbf{x}_f - \mathbf{x}_b) = \delta(x_f - x_b) \delta(y_f - y_b) \delta(z_f - z_b), \quad (43)$$

であり, $\delta(r)$ は,

$$\delta(r) = \begin{cases} \frac{1}{4\delta_x} \left(1 + \cos\left(\frac{\pi|r|}{2\delta_x}\right)\right), & |r| \leq 2\delta_x, \\ 0, & |r| > 2\delta_x, \end{cases} \quad (44)$$

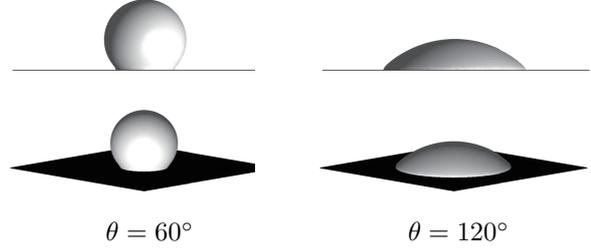
で与えられる. ノンスリップ境界条件を満足するため, 式 (41) の境界上の流速 $\mathbf{u}(\mathbf{x}_b)$ は, 設定値 $\mathbf{u}^d(\mathbf{x}_b)$ と等しくなければならない. 式 (38), (39), (40), (41) から, $\delta \mathbf{u}$ に対する連立方程式が得られる.

$$\mathbf{u}^d(\mathbf{x}_b) = \sum_f \mathbf{u}^*(\mathbf{x}_f) D(\mathbf{x}_f - \mathbf{x}_b) \delta_x^2 + \sum_f \sum_{b'} \delta \mathbf{u}(\mathbf{x}_{b'}) D(\mathbf{x}_f - \mathbf{x}_{b'}) \Delta s D(\mathbf{x}_f - \mathbf{x}_b) \delta_x^2. \quad (45)$$

式 (45) を解くことによりラグランジュ点上の $\delta \mathbf{u}$ が得られ, 式 (39) より, \mathbf{G} が求まる.



(a) Numerical results in two dimensions



(b) Numerical results in three dimensions

Fig. 5 A droplet placed on a hydrophobic or a hydrophilic surface.

界面拡散モデルにおいて, 接触角を設定するため, Briant によって定式化されたウェッティングポテンシャル Ω と接触角 θ との関係式,

$$\cos \theta = \frac{(1 + \Omega)^{3/2} - (1 - \Omega)^{3/2}}{2}, \quad (46)$$

を用いる⁽¹⁴⁾. ここで,

$$\Omega = -\frac{\partial \phi_s}{\partial n} \cdot \frac{\sqrt{\kappa}}{\sqrt{2a\phi_s^2}}, \quad (47)$$

である. 接触角を設定するためには, 式 (46), (47) に対応した $\frac{\partial \phi_s}{\partial n}$ を, 固体表面上に設定する必要がある. Shao は, Cahn-Hilliard 方程式 (1) と化学ポテンシャルの定義式 (4) に基づき, ϕ に対するノイマン条件の設定を可能にした. 式 (3) から計算されたオーダーパラメータを $\phi^*(\mathbf{x}_f)$ とする. 式 (41) を用い, $\phi^*(\mathbf{x}_f)$ から固体表面上の $\phi^*(\mathbf{x}_b)$ を求め, 次式により, 化学ポテンシャルに対する固体表面上のフラックスを求める.

$$\delta \mu_\phi(\mathbf{x}_b, t) = 2\kappa \left(\frac{\partial \phi_s(\mathbf{x}_b, t)}{\partial n} - \frac{\partial \phi^*(\mathbf{x}_b, t)}{\partial n} \right). \quad (48)$$

なお, 境界の表と裏の両面を考慮するため, 式 (48) においてフラックスが二倍される. 式 (40) を用い, オイラー座標上の値 $\delta \mu_\phi(\mathbf{x}_f, t)$ を求め, 次式により化学ポテンシャル μ_ϕ を修正することで, 接触角 θ が設定される.

$$\mu_\phi(\mathbf{x}_f, t) = \mu_\phi^*(\mathbf{x}_f, t) + \delta \mu_\phi(\mathbf{x}_f, t). \quad (49)$$

同様の手法で, μ_ϕ に対するノイマン条件を設定出来る. 式 (4) によって計算された μ_ϕ^* に対し,

$$\delta \phi(\mathbf{x}_b, t) = -2\theta_M \left(\frac{\partial \mu_{\phi_s}(\mathbf{x}_b, t)}{\partial n} - \frac{\partial \mu_\phi^*(\mathbf{x}_b, t)}{\partial n} \right), \quad (50)$$

により, オーダーパラメータに対する固体表面上のフラックスを求める. 式 (44) の補間関数により, オイラー座標上の値 $\delta \phi(\mathbf{x}_f, t)$ を求めた後,

$$\phi(\mathbf{x}_f, t) = \phi^*(\mathbf{x}_f, t) + \delta \phi(\mathbf{x}_f, t), \quad (51)$$

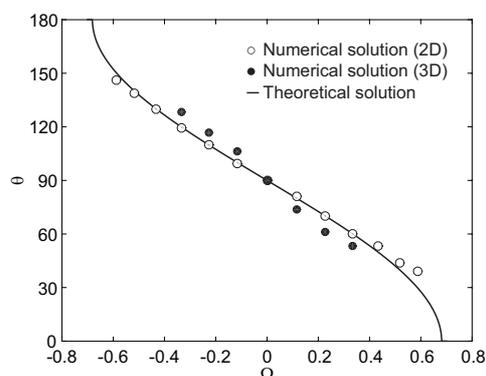


Fig. 6 Wetting angle θ plotted as a function of non-dimensional wetting potential Ω .

によって、オーダーパラメータを修正する。固体壁において質量フラックスが0であるため、 $\frac{\partial \mu_{\phi s}}{\partial n} = 0$ とする。

Fig. 5に、本手法を適用したIB-LBMによって計算された親水性平板上と撥水性平板上の液滴の界面形状を示す。Fig. 5(a)には、 100×100 の格子点を用いたD2Q9モデルによる計算結果を、Fig. 5(b)には、 $100 \times 100 \times 100$ の格子点を用いたD3Q19モデルによる計算結果を示す。接触角が 60° 、 120° になるように設定された平板に対し、ノイマン条件が適切に設定されていることがFig. 5から分かる。Fig. 5の計算結果と、式(46)の理論式とを比較する。IB-LBMによって計算された接触角 θ は、平板からの液滴の高さと液滴の幅から求めた。Fig. 6において、二次元計算では、理論値と数値解とが良い一致を示しているが、三次元計算では、過大に接触角が評価され、親水性平板ではより接触角が小さくなり、撥水性平板ではより接触角が大きくなっている。 g_α に対する離散速度数や、式(7)の誤差項の影響等、今後より詳細に原因を検証する必要がある。

4. おわりに

Cahn-Hilliard方程式を解析するLBMの運動方程式に、誤差項を除去する補正項とTRT衝突則とを適用することにより、界面振動を効果的に除去出来ることが実証された。IB-LBMに本手法を適用したところ、二次元問題に対し、適切に接触角が計算されたが、三次元モデルでは、誤差が大きくなり、また、接触角 $\theta > 120^\circ$ 、 $\theta < 60^\circ$ に対して安定に計算することが出来なかった。IB-LBMにより凹凸のある固体壁上の液滴挙動を計算し、超撥水現象に対する実験結果と計算結果とを比較するためには、三次元LBモデルの計算精度と数値的安定性を向上させる必要がある。なお、本研究はJSPS科研費(JP16K06070)の助成を受けたものである。

参考文献

- (1) Chen, S., Doolen, G. D. : Lattice Boltzmann method for fluid flows, *Annu. Rev. Fluid Mech.*, **30**(1998), pp. 329–364.
- (2) 吉野正人, 小林勇貴, 田中義人 : 濡れ性を考慮した多数の球状物体間を浸透する液相の挙動解析, *混相流*, **26**(2013), pp. 499–507.
- (3) Takada, N., Matsumoto, J., Matsumoto, S. : A diffuse-interface tracking method for the numerical simulation of motions of a two-phase fluid on a solid surface, *J. Comput. Multiphase Flows*, **6**(2014), pp. 283–298.
- (4) Zheng, H. W., Shu, C., Chew Y. T., Sun, J. H. : Three-dimensional lattice Boltzmann interface capturing method for incompressible flows, *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, **56**(2008), pp. 1653–1671.
- (5) Fakhari, A., Rahimian, M. H. : Phase-field modeling by the method of lattice Boltzmann equations, *Phys. Rev. E*, **81**(2010), pp. 036707.
- (6) Liang, H., Shi, B. C., Guo, Z. L., Chai, Z. H. : Phase-field-based multiple-relaxation-time lattice Boltzmann model for incompressible multiphase flows, *Phys. Rev. E*, **30**(2014), pp. 053320.
- (7) Seta T., Rojas, R., Hayashi, K., Tomiyama, A. : Implicit-correction-based immersed boundary–lattice Boltzmann method with two relaxation times, *Phys. Rev. E*, **89**(2014), pp. 023307.
- (8) Shao, J. Y., Shu, C., Chew, Y. T. : Development of an immersed boundary-phase field-lattice Boltzmann method for Neumann boundary condition to study contact line dynamics, *J. Comput. Phys.*, **234**(2013), pp. 8–32.
- (9) Ginzburg, I., d’Humières, D., Kuzmin, A. : Optimal stability of advection-diffusion lattice Boltzmann models with two relaxation times for positive/negative equilibrium, *J. Stat. Phys.*, **139**(2010), pp. 1090–1143.
- (10) Zalesak, S. T. : Fully multidimensional flux-corrected transport algorithms for fluids, *J. Comput. Phys.*, **31**(1979), pp. 335–362.
- (11) LeVenque, R., High-resolution conservative algorithms for advection in incompressible flow, *SIAM J. Numer. Anal.*, **33**(1996), pp. 627–665.
- (12) Guo, Z., Zheng, C., Shi, B. : Discrete lattice effects on the forcing term in the lattice Boltzmann method, *Phys. Rev. E*, **65**(2002), pp. 046308.
- (13) Wu, J., Shu, C. : Implicit velocity correction-based immersed boundary-lattice Boltzmann method and its applications, *J. Comput. Phys.*, **228**(2009), pp. 1963–1979.
- (14) Briant, A. J., Yeomans, J. M. : Lattice Boltzmann simulations of contact line motion. II. Binary fluids, *Phys. Rev. E*, **69**(2004), pp. 031603.