計算数理工学論文集 Vol. 5 (2005 年 6 月), 論文 No. 05-062414 JASCOME

格子ボルツマン法による水平二流体の界面成長シミュレーション

NUMERICAL SIMULATION OF INTERFACIAL GROWTH OF HORIZONTALLY STRATIFIED TWO IMMISCIBLE FLUIDS BY THE LATTICE BOLTZMANN METHOD

吉野 正人[1)], 増田 剛士[2)]

Masato YOSHINO and Tsuyoshi MASUDA

1) 信州大学工学部機械システム工学科 (〒 380-8553 長野市若里 4-17-1, E-mail: masato@shinshu-u.ac.jp)
2) 信州大学大学院工学系研究科 (〒 380-8553 長野市若里 4-17-1)

Interfacial growth of horizontally stratified two immiscible fluids with a small density difference is simulated using the lattice Boltzmann method (LBM) for two-phase flows. In the Kelvin–Helmholtz instability, time variations of the interface are numerically investigated in several cases. After a velocity difference is initially applied to the fluids at rest, the interface either grows or decays according to the non-dimensional parameter related to the gravitational force and the surface tension. As the magnitude of the velocity difference is increased, the interface becomes unstable and finally leads to a peculiar shape, which is generally called "a cat's eye" in fluid dynamics.

Key Words: Lattice Boltzmann Method (LBM), Two-Phase Flows, Interfacial Growth, Kelvin–Helmholtz Instability

1. はじめに

流体力学や伝熱工学の分野において，流れの不安定問題は古くから重要な問題である．その中でも特に，二相流体の界面不安定問題は，理論的，実験的および数値計算の各アプローチによってこれまでに数多くの研究が行われてきた．例えば，ケルビン・ヘルムホルツ不安定問題では，Thorpe[(1)] が，等密度の液・液二相流体における界面の不安定問題の実験を行い，得られた成長率を線形安定性理論と比較した．また，数値計算の分野では，海老原ら[(2)] が，成長速度の波数による影響について計算結果と理論との比較を行っている．これらの研究より，界面が線形的に成長する領域では詳細な検討が行われているが，非線形領域における研究はまだ数多く見られない．

ところで，これまでの混相流解析の代表的な数値計算法としては，VOF (Volume of Fluid) 法[(3)] や Level Set 法[(4)] などがあげられる．このような手法では，界面の形状を識別するための関数を導入する必要があり，また，界面の移動と同時に格子も移動しなければならないため，例えば気液二相流における気泡の合体や分裂を表現するのが難しい面も考えられる．これに対し，1995 年頃から開発され始めた二相系格子ボルツマン法 (Lattice Boltzmann Method, 以下 LBM と呼ぶ) では，界面形状の時間変化を陽に追跡する必要がなく，また，質量保存性に優れているため，気液，液液二相流の新しい数値計算法として最近注目されている．

そこで，本研究では，流れの不安定性問題の一例としてケルビン・ヘルムホルツ不安定を取り上げ，二相系 LBM による水平二流体の界面成長過程の数値計算を行った．なお，二相系 LBM にはこれまでにいくつかのモデルが提案されているが，特に本問題では，二流体の密度比がそれほど大きくないケースを考えるため（具体的には，密度比が 2～3 程度を対象とする），Swift–Osborn–Yeomans モデル[(5)] を基に稲室らが改良を加えたモデル[(6)] を用いた．次節で計算のアルゴリズムについて説明を行うが，詳しい解説については文献 (6) を参照されたい．

2. 数値計算法

使用する物理量はすべて，代表長さ L，粒子の代表速さ c，代表時間 $t_0 = L/U$（U：流れの代表速さ），および基準密度 ρ_0 を用いて無次元化したものである[(6)]．本計算に使用した二相系 LBM では，二つの速度分布関数を導入する[(7)]．つまり，分布関数 f_i を用いて界面を識別する order parameter ϕ を計算し，得られた ϕ から流体の密度 ρ を計算する．一方，分布関数 g_i を用いて流速および圧力を計算する．以下の説明では 2 次元 9 速度モデルに対して行うが，3 次元 15 速度モデルの場合にも同様である．

さて，時刻 t で格子点 $\boldsymbol{x}$ 上の速度 $\boldsymbol{c}_i$，すなわち $\boldsymbol{c}_1 = \boldsymbol{0}$, $\boldsymbol{c}_i = [\cos(\pi(i-2)/2), \sin(\pi(i-2)/2)]$ $(i = 2,3,4,5)$，お

よび $\boldsymbol{c}_i = \sqrt{2}[\cos(\pi(i-11/2)/2), \sin(\pi(i-11/2)/2)]$ $(i = 6,7,8,9)$ をもつ粒子の分布関数 f_i および g_i の時間発展を次式で計算する．

$$
\begin{aligned}
f_i(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{c}_i\Delta x, t+\Delta t) &= f_i(\boldsymbol{x},t) \\
&\quad - \frac{1}{\tau_f}[f_i(\boldsymbol{x},t) - f_i^{\mathrm{eq}}(\boldsymbol{x},t)], \qquad (1)\\
g_i(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{c}_i\Delta x, t+\Delta t) &= g_i(\boldsymbol{x},t) \\
&\quad - \frac{1}{\tau_g}[g_i(\boldsymbol{x},t) - g_i^{\mathrm{eq}}(\boldsymbol{x},t)] \\
&\quad - 3E_i c_{iy}(\rho-\rho_2)g\Delta x, \qquad (2)
\end{aligned}
$$

ここで，重力は y 方向のみに働くものとする．上式において，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），g は重力加速度，ρ は流体の密度である．また，E_i は定数であり，それらの値は後述する．各格子点上における界面を識別する order parameter ϕ，流体の密度 ρ，流速 $\boldsymbol{u}$，および圧力 p は，それぞれ f_i および g_i を用いて次式で定義される．

$$
\begin{aligned}
\phi &= \sum_{i=1}^{9} f_i, \qquad (3)\\
\rho &= \frac{\phi-\phi_{\min}}{\phi_{\max}-\phi_{\min}}(\rho_2-\rho_1)+\rho_1, \qquad (4)\\
\boldsymbol{u} &= \frac{1}{\rho}\sum_{i=1}^{9} g_i \boldsymbol{c}_i, \qquad (5)\\
p &= \frac{1}{3}\left(\sum_{i=1}^{9} g_i - \rho\right), \qquad (6)
\end{aligned}
$$

ここに，$\phi_{\max}$ および $\phi_{\min}$ はそれぞれ order parameter ϕ の最大値および最小値であり，ρ_1 および ρ_2 はそれぞれ低密度相および高密度相の流体密度である．式中の局所平衡分布関数は，次式で定義される．

$$
\begin{aligned}
f_i^{\mathrm{eq}} &= H_i\phi + F_i\left(p_0 - \kappa_f\phi\frac{\partial^2\phi}{\partial x_\alpha^2}\right) \\
&\quad + 3E_i\phi u_\alpha c_{i\alpha} + E_i\kappa_f G_{\alpha\beta}^{\phi} c_{i\alpha}c_{i\beta}, \qquad (7)\\
g_i^{\mathrm{eq}} &= H_i\rho + E_i\left[3p + \rho\left(3u_\alpha c_{i\alpha} - \frac{3}{2}u_\alpha u_\alpha + \frac{9}{2}u_\alpha u_\beta c_{i\alpha}c_{i\beta}\right)\right] \\
&\quad + 2F_i\omega_g u_\alpha\frac{\partial\rho}{\partial x_\alpha} + E_i G_{\alpha\beta}^{\rho} c_{i\alpha}c_{i\beta}, \qquad (8)
\end{aligned}
$$

ここで，

$$
\left.
\begin{aligned}
&E_1 = 4/9,\ E_2 = E_3 = E_4 = E_5 = 1/9,\\
&E_6 = E_7 = E_8 = E_9 = 1/36,\\
&H_1 = 1, \quad H_i = 0 \ \ (i = 2,3,\cdots,9),\\
&F_1 = -5/3, \quad F_i = 3E_i \ \ (i = 2,3,\cdots,9),
\end{aligned}
\right\} \qquad (9)
$$

また，

$$
\begin{aligned}
G_{\alpha\beta}^{\phi} &= \frac{9}{2}\frac{\partial\phi}{\partial x_\alpha}\frac{\partial\phi}{\partial x_\beta} - \frac{9}{4}\frac{\partial\phi}{\partial x_\gamma}\frac{\partial\phi}{\partial x_\gamma}\delta_{\alpha\beta}, \qquad (10)\\
G_{\alpha\beta}^{\rho} &= \frac{9}{2}\left[\kappa_g\frac{\partial\rho}{\partial x_\alpha}\frac{\partial\rho}{\partial x_\beta} + \omega_g\left(u_\beta\frac{\partial\rho}{\partial x_\alpha} + u_\alpha\frac{\partial\rho}{\partial x_\beta}\right)\right] \\
&\quad - \frac{9}{4}\left(\kappa_g\frac{\partial\rho}{\partial x_\gamma}\frac{\partial\rho}{\partial x_\gamma} + 2\omega_g u_\gamma\frac{\partial\rho}{\partial x_\gamma}\right)\delta_{\alpha\beta}, \qquad (11)
\end{aligned}
$$

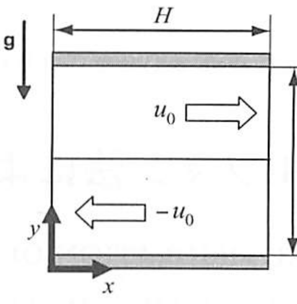


Fig. 1 Computational domain.

ここで，$\omega_g = \frac{1}{3}(\tau_g - \frac{1}{2})\Delta x$ はガリレイ不変性を保証するためのパラメータ [8] であり，デカルト座標系 $\alpha, \beta, \gamma = x, y$ は総和規約に従う．$\delta_{\alpha\beta}$ はクロネッカーのデルタ，κ_f および κ_g はそれぞれ，界面の厚さおよび界面張力を決めるパラメータである．また，p_0 は次式で与えられる．

$$
p_0 = \phi T\frac{1}{1-b\phi} - a\phi^2, \qquad (12)
$$

ここに，a, b, T は $\phi_{\max}$ および $\phi_{\min}$ を決める定数である．なお，式中に現れる変数 $\lambda\,(=\phi, \rho)$ の一階微分および勾配の発散は，それぞれ次式で近似した．

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial\lambda}{\partial x_\alpha} &\approx \frac{1}{6\Delta x}\sum_{i=1}^{9} c_{i\alpha}\lambda(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{c}_i\Delta x), \qquad (13)\\
\frac{\partial^2\lambda}{\partial x_\alpha^2} &\approx \frac{1}{3(\Delta x)^2}\sum_{i=2}^{9}\left[\lambda(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{c}_i\Delta x) - 8\lambda(\boldsymbol{x})\right]. \qquad (14)
\end{aligned}
$$

また，流体の動粘性係数 ν および界面張力 σ は，それぞれ次式で与えられる [8]．

$$
\begin{aligned}
\nu &= \frac{1}{3}\left(\tau_g - \frac{1}{2}\right)\Delta x, \qquad (15)\\
\sigma &= \kappa_g\int_{-\infty}^{\infty}\left(\frac{\partial\rho}{\partial\xi}\right)^2 d\xi, \qquad (16)
\end{aligned}
$$

ここに，ξ は界面に垂直な座標である．

3. 計算対象および計算条件

Fig. 1 に示すように，一辺が $H = 128\Delta x$ の二次元正方形領域内に水平層状の静止二相流体を考える．密度 ρ_1，粘性係数 μ_1 の流体 I を y 方向の上半分に，密度 ρ_2，粘性係数 μ_2 の流体 II $(\rho_1 < \rho_2)$ を下半分に置き，$t \geq 0$ において，各流体にそれぞれ x 方向の流速 $\pm u_0$ を与えたときの流れ場の計算を行った．領域の左右には周期境界条件を用い，上下のすべりなし壁には bounce-back 境界条件を用いた．なお，流体 I と II の密度比は $\rho_2/\rho_1 = 2$ $(\rho_2 = 2,\ \rho_1 = 1)$，粘性係数の比は $\mu_2/\mu_1 = 2$ とした．式 (12) におけるパラメータの値は，$a = 1$，$b = 6.7$，$T = 3.5 \times 10^{-2}$ とした．よって，order parameter ϕ の最大値および最小値はそれぞれ，$\phi_{\max} = 9.714 \times 10^{-2}$ および $\phi_{\min} = 1.134 \times 10^{-2}$ になる．その他のパラメータの値は，$\tau_f = 1$，$\tau_g = 0.8377$，$\kappa_f = 0.5(\Delta x)^2$，$\kappa_g = 1.0 \times 10^{-6}(\Delta x)^2$ $g\Delta x = 3.914 \times 10^{-6}$ とした．以下では，次式で定義する無次元パラメータ J [1] を導入する．

$$
J = \frac{2}{(\Delta U)^2}\frac{\rho_1+\rho_2}{\rho_1\rho_2}\left[g\sigma(\rho_2-\rho_1)\right]^{\frac{1}{2}}, \qquad (17)
$$

ここで，$\Delta U = 2u_0$ は二流体に与えられた速度差である．

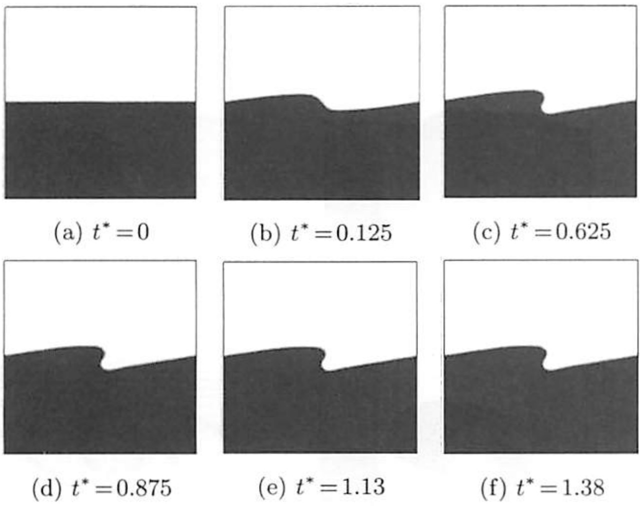


Fig. 2 Time evolution of interfacial growth of two immiscible fluids for $J = 1.35$. The white and black areas represent the densities of the fluids I (lighter) and II (heavier), respectively. $t^* = t\Delta U/H$ is the dimensionless time.

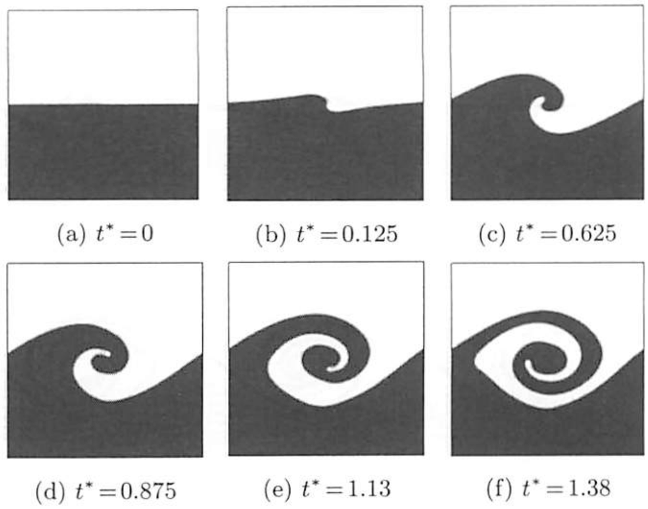


Fig. 3 Time evolution of interfacial growth of two immiscible fluids for $J = 8.57 \times 10^{-3}$. The white and black areas represent the densities of the fluids I (lighter) and II (heavier), respectively. $t^* = t\Delta U/H$ is the dimensionless time.

4. 結果および考察

本研究では，異なる速度差 ΔU を与えることにより，種々の無次元パラメータ J $(8.57 \times 10^{-3} \leq J \leq 3.05)$ に対する界面の時間変化を計算した．結果の一例として，(i) $J = 1.35$ $[\Delta U = 1.59 \times 10^{-3}]$ および (ii) $J = 8.57 \times 10^{-3}$ $[\Delta U = 2 \times 10^{-2}]$ の 2 ケースにおける密度分布の時間変化をそれぞれ Fig. 2 および Fig. 3 に示す．両図において，$t^* = t\Delta U/H$ は無次元時間を表している．まず，$J = 1.35$ (Fig. 2) では，速度差を与え始めた後，界面が徐々に変化しながら先端が伸びていくが，$t^* = 0.625$ [(c)] 以降は界面形状にほとんど変化は見られず，最終的にはその状態のまま落ち着く結果となった．一方，$J = 8.57 \times 10^{-3}$ (Fig. 3) では，界面が最初はわずかに変形するだけであるが [(b)]，時刻が進むにつれて境界の峰や谷が内側に巻き込みながら渦が発生し［(c)，(d)］，やがては猫目 (cat's eye) と呼ばれる形［(e), (f)］にまで変形した．また，Fig. 3 の各時刻における速度ベクトルおよび等密度線図を Fig. 4 に示す．この図から，界面が変形し始める時点から大きな循環流が発生し，徐々に成長していく様子がよくわかる．なお，$t^* > 1.38$ では，(f) とほぼ同様な状態が続き，流れ場は準定常状態となる結果が得られた．

次に，上記のケース (i) および (ii) に対して，領域の中心 $(x/H, y/H) = (0.5, 0.5)$ における y 方向の流速 u_y の時間変化を Fig. 5 に示す．$J = 1.35$ の時には，過渡状態後 $t^* = 1$ 付近でほぼ一定値に収束しているが，$J = 8.57 \times 10^{-3}$ の場合では，ほぼ周期的に変動する非定常な結果が得られた．その他のケースに対しても同様の解析を行い，局所流速の時間変動を調べたところ，与えた速度差 ΔU の大きさがある値を超えると，過渡状態が終わった後に流速が時間的に変動し，流れ場が不安定となると考えられる．実際に，相対速度変化率を調べることにより，(iii) $J = 1.17$ $[\Delta U = 1.71 \times 10^{-3}]$ のケースでは，局所の流速が一定値に収束したが，(iv) $J = 6.71 \times 10^{-1}$ $[\Delta U = 2.26 \times 10^{-3}]$ のケースでは，時間変動する結果が得られた．したがって，不安定を引き起こす臨界速度差 ΔU_{c} は，$1.71 \times 10^{-3} < \Delta U_{\mathrm{c}} < 2.26 \times 10^{-3}$ の範囲にあると考えられる．ところで，Kelvin[9] の理論的研究によると，最初に不安定が起こる臨界速度差 ΔU_{c}^* は，次式で与えられる．

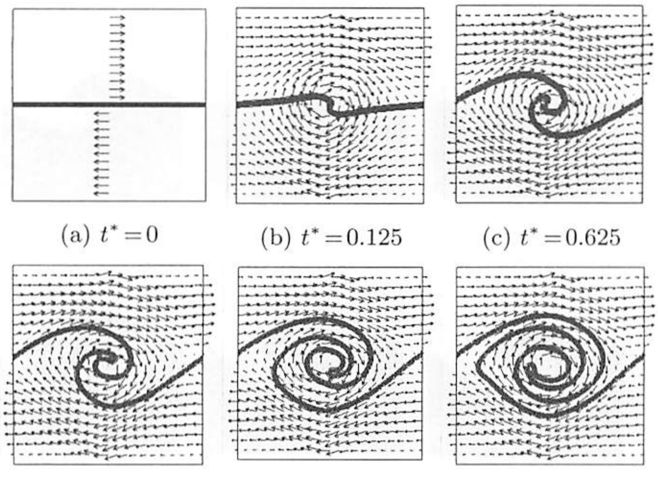
$$\Delta U_{\mathrm{c}}^* = \left\{ 2\frac{\rho_1 + \rho_2}{\rho_1 \rho_2} \left[g\sigma \left(\rho_2 - \rho_1 \right) \right]^{\frac{1}{2}} \right\}^{\frac{1}{2}}. \tag{18}$$

よって，各パラメータの値を代入して求めると，この場合の理論値は 1.85×10^{-3} となり，本研究で得られた結果ならびに上記の考察は妥当であると言える．

最後に，同様の問題を 3 次元 15 速度モデルを用いて計算を行った．計算領域は，一辺が $H = 80\Delta x$ の立方体とし，上下の壁 (これを鉛直 z 方向とする) にはすべりなし境界条件，領域の側面には周期境界条件を用いた．使用したパラメータの値は，二次元問題の場合と同じである．計算結果の一例として，$J = 1.08 \times 10^{-1}$ $[\Delta U = 5.63 \times 10^{-3}]$ のときの界面形状を Fig. 6（左側）に示す．ここでも同様に，臨界値より大きな速度差を与えると，時間とともに界面が不安定になり，最終的には界面形状が猫目になるまで成長する結果が得られた．また，奥行き方向（y 方向）の中央 $y/H = 0.5$ の断面（x–z 平面）における速度ベクトルならびに等密度線図を Fig. 6（右側）に示す．この結果を同じ物理条件下での二次元計算による結果と比較したところ，速度ベクトル，密度分布のいずれに関しても両者の間にほとんど差異はみられなかった．したがって，本計算で用いたパラメータの範囲内では，三次元性については特に考慮しなくてもよいと考えられる．

5. おわりに

二相系 LBM を用いて，ケルビン・ヘルムホルツ不安定問題の数値シミュレーションを行い，二流体に速度差を与えた後の界面の成長過程を調べた．また，流れの不安定性を引き



(a) $t^*=0$ (b) $t^*=0.125$ (c) $t^*=0.625$

(d) $t^*=0.875$ (e) $t^*=1.13$ (f) $t^*=1.38$

Fig. 4 Velocity vectors and density contours of two immiscible fluids for $J = 8.57 \times 10^{-3}$. $t^* = t\Delta U/H$ is the dimensionless time.

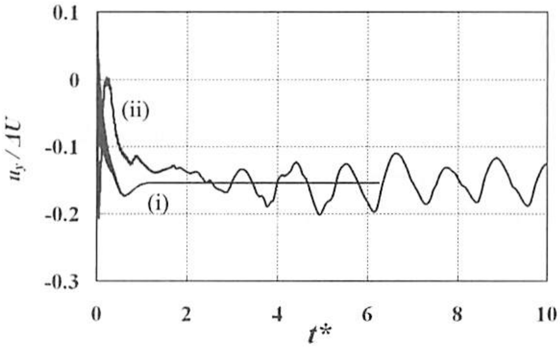


Fig. 5 Time variations of velocity in the y-direction at $(x/H, y/H) = (0.5, 0.5)$; (i) $J = 1.35$, (ii) $J = 8.57 \times 10^{-3}$ $(t^* = t\Delta U/H)$.

起こす臨界速度差について，本計算結果は理論値と良く対応することがわかった．なお，本研究では，流れの不安定性に与える波数の影響は考慮に入れなかった．これについては今後の課題である．

謝辞

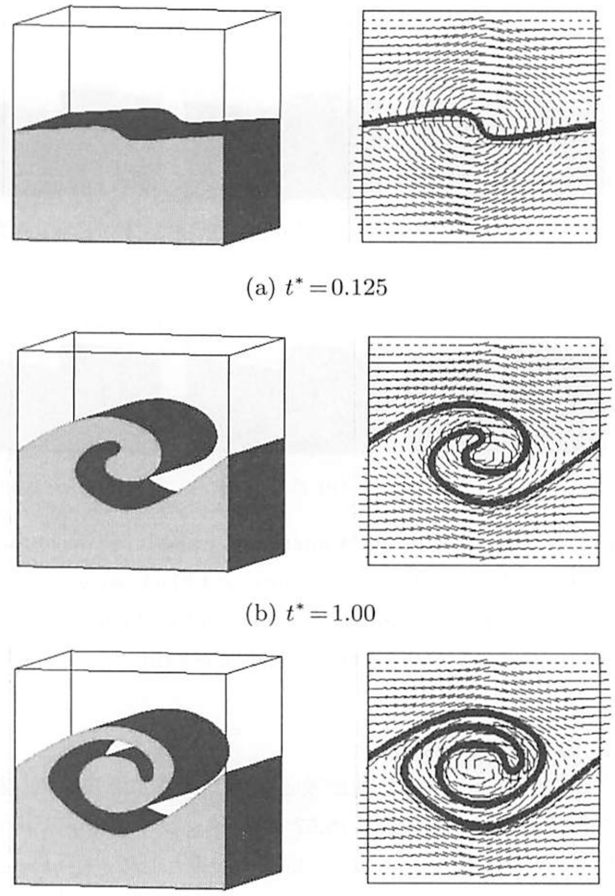
本研究の一部は，平成 16 年度文部科学省科学研究費補助金（若手研究 (B) No.16760122）によっている．ここに記して謝意を表します．

参考文献

(1) S. A. Thorpe : Experiments on Instability of Stratified Shear Flows: Immiscible Fluids, *J. Fluid Mech.*, **39**(1969), pp. 25–48.

(2) K. Ebihara and T. Watanabe : Lattice Boltzmann Simulation of the Interfacial Growth of the Horizontal Stratified Two-Phase Flow, *Int. J. Mod. Phys.*, **17**(2003), pp. 113–117.

(3) C. W. Hirt and B. D. Nichols : Volume of Fluid (VOF) Method for the Dynamics of Free Boundaries, *J. Comput. Phys.*, **39**(1981), pp. 201–225.



(a) $t^*=0.125$

(b) $t^*=1.00$

(c) $t^*=2.50$

Fig. 6 Interfacial growth of two immiscible fluids (left) and velocity vectors and density contours on $y/H = 0.5$ (right) for $J = 1.08 \times 10^{-1}$ in the three-dimensional problem $(t^* = t\Delta U/H)$.

(4) M. Sussman, P. Smereka and S. Osher : A Level Set Approach for Computing Solutions to Incompressible Two-Phase Flow, *J. Comput. Phys.*, **114**(1994), pp. 146–159.

(5) M. R. Swift, W. R. Osborn and J. M. Yeomans : Lattice Boltzmann Simulation of Non-Ideal Fluids, *Phys. Rev. Lett.*, **75**(1995), pp. 830–833.

(6) 稲室隆二：格子ボルツマン法 —新しい流体シミュレーション法—，物性研究，**77**(2001) pp. 197–232.

(7) X. He, S. Chen and R. Zhang : A Lattice Boltzmann Scheme for Incompressible Multiphase Flow and Its Application in Simulation of Rayleigh–Taylor Instability, *J. Comput. Phys.*, **152**(1999), pp. 642–663.

(8) T. Inamuro, N. Konishi and F. Ogino : 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.

(9) W. Kelvin : Hydrokinetic Solutions and Observations, *Phil. Mag.*, **42**(1871), pp. 362–377; Also *Math. Phys. Papers*, **IV**(1910), pp. 69–85.