

粘弾性を伴う二相系格子ボルツマン法

A LATTICE BOLTZMANN METHOD FOR TWO-PHASE FLUID FLOWS WITH VISCOELASTICITY

吉野 正人¹⁾, 鳥海 泰幸²⁾

Masato YOSHINO and Yasuyuki TORIUMI

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, E-mail: t07a124@shinshu-u.ac.jp)

A lattice Boltzmann method (LBM) for two-phase fluid flows with viscoelasticity is proposed. The viscoelastic force is introduced by the Maxwell model which has a spring and a damper connected with each other in series. The deformation of a droplet in shear flows of a viscoelastic fluid is simulated using the proposed method with the two-dimensional nine-velocity model. In the investigations, the effects of viscoelasticity on the deformation and orientation of the droplet are evaluated. Also, the present results are compared with available numerical and experimental studies and in qualitative agreement with each other.

Key Words : Lattice Boltzmann Method (LBM), Two-Phase Flow, Viscoelasticity, Maxwell Model, Shear Flow

1. はじめに

粘弾性というのは、フックの法則に従う弾性変形とニュートンの粘性法則に従う粘性の両方の性質が同時に発現するという性質である。粘弾性をもつ物質というのは幅広く存在し、たいいてい物質は粘性または弾性どちらか一方の影響が強く現れ、粘性流体と弾性体とを区別することができる。以下では、ゲルやゼラチンのような粘性と弾性の両方の性質が同程度に現れるものを粘弾性体と考える⁽¹⁾。

この粘弾性を伴う混相流問題は、工学や医学の分野で見られる重要な問題である。例えば工学分野では、粘弾性固体のバイブライン輸送や高分子材料の製造過程などで見られ、特に前者では流路の詰まりや輸送効率の観点から、また後者では加工精度の観点から流動様式の詳細を知ることが重要になる⁽²⁾。一方、医学分野では、赤血球や血小板などを含む血流が代表的な例として挙げられ、動脈瘤や血栓などの疾患に対する予防ならびに適切な治療を行うためには、血液の流動現象の解明が必要とされている⁽³⁾。しかしながら、通常このような流れ場というのは流路が狭く複雑であったり、流体の物性が場所によって異なるケースが多いため、実験的研究は困難である。それゆえ、数値計算のアプローチによる微視的な観点からの粘弾性混相流解析が必要不可欠となる。

ところで、粘性流体の新しい数値計算法として1990年頃から開発されてきた格子ボルツマン法⁽⁴⁾(Lattice Boltzmann

Method, 以下LBMと呼ぶ)は、アルゴリズムが簡単で、並列計算にも向いているという利点があるため、特に複雑な流路内の流れ解析に適用され成功を収めている。また、最近では単相流のみならず気液、液液などの二相系LBM⁽⁵⁾や非ニュートン流体のためのLBM⁽⁶⁾なども開発されてきている。したがって、前述のような工学および医学分野への応用を考えると、粘弾性を考慮した二相系LBMを開発することは重要な課題の一つとしてあげられる。

本研究では、Ispolatov & Grant⁽⁷⁾によって提案された弾性項の導入法のアイデアを高密度比の二相系LBM⁽⁵⁾に組込むことにより、粘弾性を伴う二相系LBMを提案した。また、本手法を用いて、せん断流れ場中の液滴の変形問題の計算を行い、提案された手法の妥当性について考察した。

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)、基準 order parameter ϕ_0 、および基準密度 ρ_0 を用いて無次元化したものである⁽⁵⁾。気液、液液などの二相流を扱えるLBMはこれまでにいくつかのモデルが提案されているが、本研究では稲室らが提案した高密度比の二相系LBMを用いた。詳細については、文献(5)を参照していただきたい。

2.1. 粘弾性項の導入

バネとダンパの直列接合で構成された Maxwell モデルにおける応力テンソル $\Pi_{\alpha\beta}^{el}$ は、次式のように表される (7)。

$$\tau_{el} \frac{\partial \Pi_{\alpha\beta}^{el}}{\partial t} = -\Pi_{\alpha\beta}^{el} + \eta \left(\frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\beta} + \frac{\partial u_\beta}{\partial x_\alpha} \right), \quad (1)$$

ここで、 u_α は流体の速度、 τ_{el} は弾性変形における緩和時間、 η は粘性係数である。また、 $\alpha, \beta = x, y$ はデカルト座標を表し、総和規約に従うものとする。 $t = -\infty$ で力は有限であることに留意して、この 1 階線形微分方程式を定数変化法によって解くと、格子点 \mathbf{x} における時刻 t での応力テンソルは、次式で与えられる (8)。

$$\Pi_{\alpha}^{el}(\mathbf{x}, t) = \frac{\eta}{\tau_{el}} \int_{-\infty}^t \exp\left(-\frac{t-t'}{\tau_{el}}\right) \dot{\gamma}(\mathbf{x}, t') dt', \quad (2)$$

ここで、

$$\dot{\gamma} = \frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\beta} + \frac{\partial u_\beta}{\partial x_\alpha}, \quad (3)$$

はひずみ速度テンソルである。式 (2) の勾配をとることにより、粘弾性力 $F_{\alpha}^{el}(\mathbf{x}, t)$ は次式で与えられる。

$$F_{\alpha}^{el}(\mathbf{x}, t) = \frac{\eta}{\tau_{el}} \int_{-\infty}^t \exp\left(-\frac{t-t'}{\tau_{el}}\right) \nabla^2 u_\alpha(\mathbf{x}, t') dt', \quad (4)$$

ここで、 $\nabla^2 = \partial^2 / \partial x_\alpha^2$ はラプラシアンを表す。いま、時間刻みを Δt (ただし Δt は微小) として、式 (4) を時間に関して離散化すると、近似式の一つとして次式が得られる。

$$F_{\alpha}^{el}(\mathbf{x}, t + \Delta t) = \left(1 - \frac{\Delta t}{\tau_{el}}\right) F_{\alpha}^{el}(\mathbf{x}, t) + \frac{\eta \Delta t}{\tau_{el}} \nabla^2 u_\alpha(\mathbf{x}, t). \quad (5)$$

上式の右辺第一項は粘弾性力の影響を表し、第二項はひずみにより生じる粘弾性力を表している。本計算では、粘弾性を示す相に対して、式 (5) で表される力を二相系 LBM の外力項として導入した。

2.2. 粘弾性を伴う二相系 LBM

以下では、粘弾性を考慮する A 相と考慮しない B 相からなる二相系を考える。格子気体モデルには、2 次元 9 速度モデルを用いた。この速度モデルの粒子速度 \mathbf{c}_i は、 $\mathbf{c}_1 = \mathbf{0}$ 、 $\mathbf{c}_i = [\cos(\pi(i-2)/2), \sin(\pi(i-2)/2)]$ ($i = 2, 3, 4, 5$)、および $\mathbf{c}_i = \sqrt{2}[\cos(\pi(i-11)/2), \sin(\pi(i-11)/2)]$ ($i = 6, 7, 8, 9$) で与えられる。計算には、2 つの速度分布関数 f_i および g_i を用いる。すなわち、 f_i を用いて界面を識別する order parameter を計算し、 g_i を用いて圧力勾配のない二相流体の流速の予測値を計算する。2 次元 9 速度モデルを用いた粘弾性を伴う二相系 LBM において、 f_i および g_i の時間発展式はそれぞれ次式のようになる。

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta x, t + \Delta t) = f_i(\mathbf{x}, t) - \frac{1}{\tau_f} [f_i(\mathbf{x}, t) - f_i^{eq}(\mathbf{x}, t)], \quad (6)$$

$$g_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta x, t + \Delta t) = g_i(\mathbf{x}, t) - \frac{1}{\tau_g} [g_i(\mathbf{x}, t) - g_i^{eq}(\mathbf{x}, t)] + 3E_i c_{i\alpha} \frac{1}{\rho} \left[\frac{\partial}{\partial x_\beta} \mu \left(\frac{\partial u_\beta}{\partial x_\alpha} + \frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\beta} \right) \right] \Delta x + 3E_i c_{i\alpha} \Delta x \frac{1}{\rho} \left(\frac{\rho - \rho_B}{\rho_A - \rho_B} \right) \times \left[\left(1 - \frac{\Delta t}{\tau_{el}}\right) F_{\alpha}^{el}(\mathbf{x}, t - \Delta t) + \frac{\eta \Delta t}{\tau_{el}} \nabla^2 u_\alpha(\mathbf{x}, t - \Delta t) \right], \quad (7)$$

ここで、 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、その他の物理量 ρ, μ, u_α ならびに定数 E_i は、以下で定義する。なお、時間刻み Δt は仮想粒子がちょうど隣の格子点まで移動する時間と等しくなるように選ばれ、 $\Delta t = \text{Sh} \Delta x$ の関係がある。ここで、 $\text{Sh} (= U/c)$ はストローハル数である。また、添え字 A および B はそれぞれ、各相における物理量を表すものとする。

二相を識別する order parameter ϕ および二相流体の速度の予測値 u_α^* は、分布関数を用いて次のように定義される。

$$\phi = \sum_{i=1}^9 f_i, \quad (8)$$

$$u_\alpha^* = \sum_{i=1}^9 c_{i\alpha} g_i. \quad (9)$$

式 (6) および式 (7) の局所平衡分布関数 f_i^{eq}, g_i^{eq} は、それぞれ次式で与えられる。

$$f_i^{eq} = H_i \phi + F_i (p_0 - \kappa_f \phi \nabla^2 \phi) + E_i \phi \left(3u_\alpha c_{i\alpha} - \frac{3}{2} u_\alpha u_\alpha + \frac{9}{2} u_\alpha u_\beta c_{i\alpha} c_{i\beta} \right) + E_i \kappa_f G_{\alpha\beta}(\phi) c_{i\alpha} c_{i\beta}, \quad (10)$$

$$g_i^{eq} = E_i \left[1 + 3u_\alpha c_{i\alpha} - \frac{3}{2} u_\alpha u_\alpha + \frac{9}{2} u_\alpha u_\beta c_{i\alpha} c_{i\beta} \right] + \frac{3}{2} \left(\tau_g - \frac{1}{2} \right) \Delta x \left(\frac{\partial u_\beta}{\partial x_\alpha} + \frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\beta} \right) c_{i\alpha} c_{i\beta} + E_i \frac{\kappa_g}{\rho} G_{\alpha\beta}(\rho) c_{i\alpha} c_{i\beta} - \frac{1}{2} F_i \frac{\kappa_g}{\rho} \left(\frac{\partial \rho}{\partial x_\alpha} \right)^2, \quad (11)$$

ここで、 $E_1 = 4/9, E_2 = E_3 = E_4 = E_5 = 1/9, E_6 = E_7 = E_8 = E_9 = 1/36, H_1 = 1, H_2 = H_3 = H_4 = \dots = H_9 = 0, F_1 = -5/3, F_i = 3E_i$ ($i = 2, 3, 4, \dots, 9$)、および

$$G_{\alpha\beta}(\phi) = \frac{9}{2} \frac{\partial \phi}{\partial x_\alpha} \frac{\partial \phi}{\partial x_\beta} - \frac{9}{4} \frac{\partial \phi}{\partial x_\gamma} \frac{\partial \phi}{\partial x_\gamma} \delta_{\alpha\beta}, \quad (12)$$

ここで、 $\delta_{\alpha\beta}$ 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の強さを決める定数パラメータである。式 (10) における p_0 は、次式で与えられる。

$$p_0 = \phi T \frac{1}{1 - b\phi} - a\phi^2, \quad (13)$$

ここで、 a, b, T は、order parameter ϕ の最大および最小値を決定するパラメータである。式 (7) および (10)~(12) における微分は、テーラー級数展開を用いて導かれる以下の中心差分近似を使用した。

$$\frac{\partial \psi}{\partial x_\alpha} \approx \frac{1}{6\Delta x} \sum_{i=2}^9 c_{i\alpha} \psi(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta x), \quad (14)$$

$$\nabla^2 \psi \approx \frac{1}{3\Delta x} \left[\sum_{i=2}^9 \psi(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta x) - 8\psi(\mathbf{x}) \right]. \quad (15)$$

界面の密度 ρ は、 ϕ の閾値 ϕ_A^* および ϕ_B^* を用いて次のように計算した。

$$\rho = \begin{cases} \rho_B & \phi < \phi_B^*, \\ \frac{\Delta \rho}{2} \left[\sin\left(\frac{\phi - \phi^*}{\Delta \phi^*} \pi\right) + 1 \right] + \rho_B & \phi_B^* \leq \phi \leq \phi_A^*, \\ \rho_A & \phi > \phi_A^*, \end{cases} \quad (16)$$

ここで、 ρ_A および ρ_B は、それぞれ A 相および B 相の密度であり、 $\Delta\rho = \rho_A - \rho_B$ 、 $\Delta\phi^* = \phi_A^* - \phi_B^*$ 、 $\bar{\phi}^* = (\phi_A^* + \phi_B^*)/2$ である。さらに、界面の粘性係数 μ は次式で与えられる。

$$\mu = \frac{\rho - \rho_B}{\rho_A - \rho_B}(\mu_A - \mu_B) + \mu_B, \quad (17)$$

また、界面張力 σ は次式で与えられる。

$$\sigma = \kappa_g \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{\partial \rho}{\partial \xi} \right)^2 d\xi, \quad (18)$$

ここで、 ξ は界面に垂直な座標である。

連続の式を満たす流速の修正は、文献 (5) と同様に、圧力 p に関するポアソン方程式を LBM を用いて解いた。つまり、

$$\text{Sh} \frac{\mathbf{u} - \mathbf{u}^*}{\Delta t} = -\frac{\nabla p}{\rho}, \quad (19)$$

$$\nabla \cdot \left(\frac{\nabla p}{\rho} \right) = \text{Sh} \frac{\nabla \cdot \mathbf{u}^*}{\Delta t}, \quad (20)$$

を解くために、速度分布関数 h_i についての次の発展方程式を計算した。

$$h_i^{n+1}(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta x) = h_i^n(\mathbf{x}) - \frac{1}{\tau_h} [h_i^n(\mathbf{x}) - E_i p^n(\mathbf{x})] - \frac{1}{3} E_i \frac{\partial u_{\alpha}^*}{\partial x_{\alpha}} \Delta x, \quad (21)$$

ここで、 $\tau_h = 1/\rho + 1/2$ であり、 n は繰り返し計算の回数である。なお、 p は次式で定義される。

$$p = \sum_{i=1}^9 h_i. \quad (22)$$

本計算では、式 (21) の時間発展式を全領域で $|p^{n+1} - p^n|/\rho < 10^{-6}$ が満たされるまで繰り返して p を求めた。

3. 数値計算例

3.1. せん断流れ場中における液滴の変形問題

本手法を用いてせん断流れ場中における液滴の変形の計算を行った。粘弾性流体 (A 相) が満たされた間隔 L_y の平行平板間の中央に、半径 R_0 の円形状の液滴 (B 相) を配置し、液滴が十分に平衡状態に達した後、急に上下壁を互いに水平方向反対向きに速さ $u_w = 5 \times 10^{-3}$ で動かし (動かし始めた時刻を $t = 0$ とする)、その後の液滴の変形を追跡した。上下の壁にはすべりなし境界条件を、側面には周期境界条件を用いた。計算領域は、 $L_x \times L_y = 128\Delta x \times 64\Delta x$ とした。この問題の無次元数は、レイノルズ数 $\text{Re} = \rho_A \Gamma R_0^2 / \bar{\mu}_A$ 、キャピラリー数 $\text{Ca} = \bar{\mu}_A \Gamma R_0 / \sigma$ 、およびパラメータ $P = N / \text{Ca}^2$ である。ここで、 $\Gamma = 2u_w / L_y$ はせん断強さ、 $\bar{\mu}_A$ は A 相の有効粘性係数であり、 $\bar{\mu}_A = \mu_A + \eta$ で与えた⁽⁹⁾。また、 $N = \tau_{el} \eta \Gamma^2 R_0 / \sigma$ は弾性力と界面張力の比を表す無次元量である。なお、 P は、同様の問題で Greco⁽¹⁰⁾ が最初に導入した粘弾性の効果を表すパラメータである。計算条件は、 $a = 1$ 、 $b = 6.7$ 、 $T = 3.5 \times 10^{-2}$ (このとき $\phi_{\max} = 9.714 \times 10^{-2}$ 、 $\phi_{\min} = 1.134 \times 10^{-2}$ となる)、 $\phi_A^* = 9.20 \times 10^{-2}$ 、 $\phi_B^* = 1.50 \times 10^{-2}$ 、 $\tau_f = 1$ 、 $\tau_g = 1$ 、 $R_0 = 12\Delta x$ 、 $\rho_A = 5$ 、 $\rho_B = 1$ 、 $\mu_B = 1 \times 10^{-10}\Delta x$ 、 $\kappa_f = 0.5(\Delta x)^2$ 、 $\kappa_g = 1 \times 10^{-4}(\Delta x)^2$ とした。 $\bar{\mu}_A$ を以下で示す値

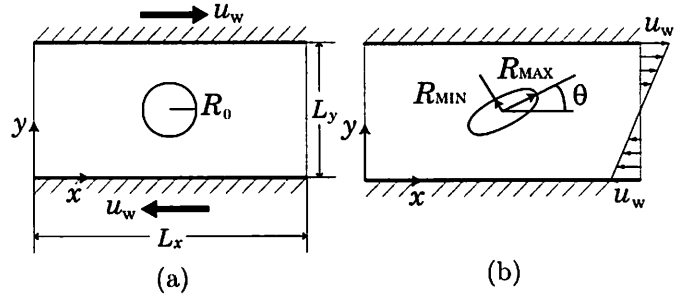


Fig. 1 Deformation of a droplet in shear flows: (a) geometry and coordinates; (b) definition of R_{MAX} , R_{MIN} and θ .

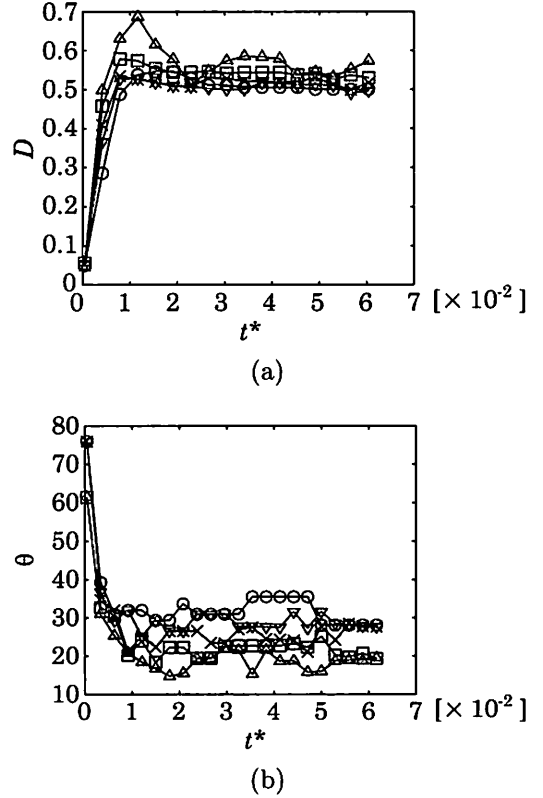


Fig. 2 Time variations of droplet characteristics: (a) deformation parameter D ; (b) orientation angle θ . \circ , $\bar{\mu}_A = 0.1\Delta x$; ∇ , $\bar{\mu}_A = 0.15\Delta x$; \times , $\bar{\mu}_A = 0.2\Delta x$; \square , $\bar{\mu}_A = 0.3\Delta x$; \triangle , $\bar{\mu}_A = 0.5\Delta x$ ($t^* = tu_w / L_y$).

に変化させたときの液滴の変形度 D および傾き角 θ を調べた。ここで、 $D = (R_{\text{MAX}} - R_{\text{MIN}}) / (R_{\text{MAX}} + R_{\text{MIN}})$ である (Fig. 1 参照)。

3.2. 結果と考察

最初に、A 相の粘性係数を $\bar{\mu}_A = 0.1\Delta x, 0.15\Delta x, 0.2\Delta x, 0.3\Delta x, 0.5\Delta x$ (実際には $\mu_A = 0.1\Delta x$ で一定として、 η のみを変化させた) として計算を行った。無次元数はそれぞれ $0.225 \leq \text{Re} \leq 1.125$ 、 $0.938 \leq \text{Ca} \leq 4.69$ 、 $0 \leq P \leq 4.17 \times 10^{-5}$ の範囲となる。このときの D および θ の時間変化を Fig. 2 に示す。横軸は、無次元時間 $t^* (= tu_w / L_y)$ を表す。変形度 [Fig. 2(a)] については、いずれのケースにおいて

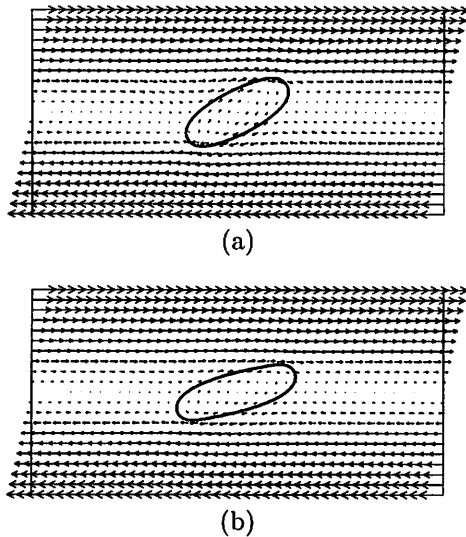


Fig. 3 Velocity field and deformation of a droplet of viscosity coefficient of viscoelasticity: (a) $\bar{\mu}_A = 0.15\Delta x$, $Re = 0.750$ and $Ca = 1.41$; (b) $\bar{\mu}_A = 0.5\Delta x$, $Re = 0.225$ and $Ca = 4.69$.

も壁を動かした直後に増加し、粘性係数が最も大きいケースでオーバーシュートするが、それ以外のケースではほぼ単調に一定値に近づいている。また、その定常状態における値は、どのケースもほとんど同じ値(~ 0.55)となっている。一方、傾き角 [Fig. 2(b)] については、各ケースによってばらつきが見られ、定常状態での平衡値は $20^\circ \sim 30^\circ$ の範囲となっている。この傾向は、別の二相系モデルを用いた LBM による Onishi らの結果⁽⁹⁾ と定性的に一致していると言える。次に、粘性係数が $\bar{\mu}_A = 0.15\Delta x$ および $0.5\Delta x$ の時の定常状態における速度ベクトルならびに等密度線図を Fig. 3 に示す。粘性係数 $\bar{\mu}_A$ を変化させても流れ場に大きな差異は見られないが、 $\bar{\mu}_A$ の値が大きい液滴 [Fig. 3(b)] の方が流れ方向により傾き、変形度がやや大きくなっている様子が確認できる。

次に、 $\mu_A/\eta = 2$ で一定にしたまま Ca を変化させ計算を行った。無次元数はそれぞれ $0.750 \leq Re \leq 10.5$, $0.100 \leq Ca \leq 1.41$, $3.70 \times 10^{-5} \leq P \leq 5.20 \times 10^{-4}$ の範囲となる。 D と Ca の関係を Fig. 4 に示す。図より、低キャピラリ数域 ($Ca < 0.8$) においては両者に線形関係があり、それよりキャピラリ数が高くなると直線からずれることがわかる。この傾向は、Guido ら⁽¹¹⁾ の実験的研究による結果と対応することがわかる。しかしながら、直線の勾配などについて定量的には一致していない。この原因の一つとして、本シミュレーションが二次元計算であることが挙げられるが、詳細な検討については今後の課題である。

4. おわりに

既存の気液二相系 LBM に Maxwell モデルに基づく粘弾性を導入することにより、粘弾性を伴う二相系 LBM の提案を行った。また、本手法を用いて、粘弾性を考慮したせん断流れ場中における液滴の変形問題の計算を行い、定常状態における液滴の変形度および傾き角を調べた。今後は、本手法

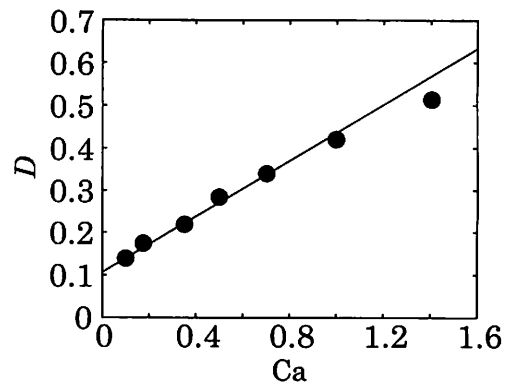


Fig. 4 Relation between deformation parameter D and capillary number Ca .

を三次元モデルに拡張し、各無次元数の影響について定量的に調べる必要があると考えられる。

謝 辞

本研究は、平成 18 年度文部科学省 科学研究費補助金 (若手研究 (B) No. 18760121) により行われたものである。ここに銘記して謝意を表します。

参考文献

- (1) 岡小天, レオロジー入門, (1970), 工業調査会.
- (2) V.T. Kharin: Rheology of Viscoelastic Thixotropic Fluids such as Oil and Polymer Solutions and Melts, *Fluid Dynamics*, **19** (1984), pp. 355-360.
- (3) M. Hirabayashi, M. Ohta, D.A. Rüfenacht and B. Chopard: A Lattice Boltzmann Study of Blood Flow in Stented Aneurism, *Future Gene. Comput. Syst.*, **20** (2004), pp. 925-934.
- (4) S. Chen and G.D. Doolen: Lattice Boltzmann Method for Fluid Flows, *Annu. Rev. Fluid Mech.*, **30** (1998), pp. 329-364.
- (5) T. Inamuro, T. Ogata, S. Tajima and N. Konishi: A Lattice Boltzmann Method for Incompressible Two-Phase Flows with Large Density Differences, *J. Comput. Phys.*, **198** (2004), pp. 628-644.
- (6) S.P. Sullivan, L.F. Gladden and M.L. Johns: Simulation of Power-Law Fluid Flow through Porous Media Using Lattice Boltzmann Techniques, *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, **133** (2006), pp. 91-98.
- (7) I. Ispolatov and M. Grant: Lattice Boltzmann Method for Viscoelastic Fluids, *Phys. Rev. E*, **65** (2002), 056704.
- (8) 中村喜代次: 非ニュートン流体力学, (1997), コロナ社.
- (9) J. Onishi, Y. Chen and H. Ohashi: Dynamic Simulation of Multi-Component Viscoelastic Fluids Using the Lattice Boltzmann Method, *Physica A*, **362** (2006), pp. 84-92.
- (10) F. Greco: Drop Deformation for Non-Newtonian Fluids in Slow Flows, *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, **107** (2002), pp. 111-131.
- (11) S. Guido, M. Simeone and F. Greco: Deformation of a Newtonian Drop in a Viscoelastic Matrix under Steady Shear Flow Experimental Validation of Slow Flow Theory, *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, **114** (2003), pp. 65-82.