

## 二相流に対する熱流動格子ボルツマンモデルの提案\*

瀬田 剛<sup>\*1</sup>, 高橋 亮 一<sup>\*2</sup>  
奥井 健 一<sup>\*1</sup>, 竹越 栄 俊<sup>\*1</sup>

## Thermal Lattice Boltzmann Model for Simulating Two-Phase Flows

Takeshi SETA<sup>\*3</sup>, Ryoichi TAKAHASHI,  
Kenichi OKUI and Eisyun TAKEGOSHI<sup>\*3</sup> Faculty of Engineering, Toyama University, 3190 Gofuku, Toyama-shi, Toyama, 930-8555 Japan

In this paper, we propose a new lattice Boltzmann model for two-phase flows pertinent to thermal nonideal fluids. The LBM introduces a fictitious forcing term and recovers thermohydrodynamic equations for nonideal fluid through the Chapman-Enskog expansion procedure. Numerical measurements of thermal conductivity and of surface tension agree well with theoretical predictions. Simulation of phase transition with heat transfer is carried out. It shows that the phases spontaneously separate into domains occupied by the coexisting phases, and demonstrates that the model is applicable to two-phase flows with thermal effects. Using finite difference Lattice Boltzmann method ensures numerical stability of the scheme.

**Key Words:** Computational Fluid Dynamics, Multi-phase Flow, Numerical Analysis, Finite Difference Method, Lattice Boltzmann Method, Thermohydrodynamics, van der Waals-Cahn-Hilliard Free Energy

## 1. 緒 言

格子ガス・オートマトン法 (Lattice Gas Automata, LGA) <sup>(1-3)</sup> や格子ボルツマン法 (Lattice Boltzmann Method, LBM) <sup>(4,5)</sup> などの格子ガス法は、複雑な形をした境界条件や二相界面を容易に扱える新しい数値解法として注目されている。LBM では、仮想的な粒子に対する分布関数が、格子上を局所的に時間発展することにより、系全体の巨視的な挙動が再現される。Chapman-Enskog 展開を用いると、LBM の発展方程式の線形な対流過程から、Navier-Stokes 方程式の非線形な対流過程が導出される<sup>(4)</sup>。LBM では、最小限の速度数しか用いられないため単純な代数計算のみによって粒子速度分布関数はマクロ変数に変換される。

LGA の問題点である統計的ノイズが除去され、Navier-Stokes 方程式の偽の不変量が消去された<sup>(5)</sup>ことから、さまざまな保存式系の解析に適用可能な LB モデルが次々に提案された。Alexander ら<sup>(6)</sup>は、格子間距離より速い粒子を付加した六角格子モデル (図 1

(a) を用いることにより、理想気体に対するエネルギー保存式を解析できる LB モデルを提案した。また、二相流における気泡や界面の挙動を比較的簡単に再現できることから、二相流のシミュレーションに対する格子ボルツマンモデルが多数、提案された<sup>(7-11)</sup>。

しかし、これらの二相流 LB モデルでは、解析条件が等温場に限定され、二相流に対するエネルギー保存式を考慮できない<sup>(9)</sup>。実際の相変化では、熱の放出や吸収、凝縮や沸騰における潜熱の発生などがあるため、熱を考慮できるように二相流 LB モデルを改良する必要がある。著者らは、Alexander らにより提案された理想気体に対する熱流動 LBM<sup>(6)</sup>に仮想的な外力項を付加することにより、二相流に対するエネルギー保存式を解析できる二次元および三次元の LBM を提案

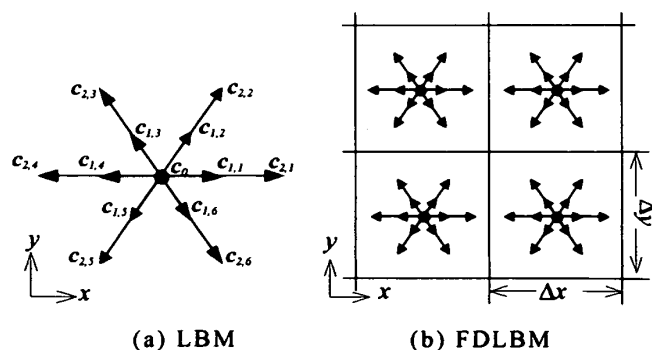


Fig. 1 Schematic of hexagonal LB models.

\* 原稿受付 2001年11月15日。

<sup>\*1</sup> 正員, 富山大学工学部 (〒930-8555 富山市五福3190)。<sup>\*2</sup> 正員, 東京工業大学工学部 (〒152-0033 東京都目黒区大岡山2-12-1)。

E-mail: seta@eng.toyama-u.ac.jp

した<sup>(12,13)</sup>. この熱流動二相流 LBM の外力項に改良を加え, クエット流れ, ラプラスの法則, 相分離に対するシミュレーションを行い, モデルの熱流動特性と二相流のシミュレーションへの適用性とを定量的かつ定性的に検証する. ただし, 二相の密度比が 10 以下である臨界点近傍における二相流の挙動を解析対象とする.

2. 熱流動二相流格子 Boltzmann モデル

van der Waals-Cahn-Hilliard による自由エネルギー理論に基づく二相流に対する連続の式,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_\alpha}{\partial x_\alpha} = 0, \dots \dots \dots (1)$$

運動量保存式,

$$\frac{\partial \rho u_\alpha}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_\alpha u_\beta}{\partial x_\beta} = -\frac{\partial P_{\alpha\beta}}{\partial x_\beta} + \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left[ \lambda \frac{\partial u_\gamma}{\partial x_\gamma} \right] + \frac{\partial}{\partial x_\beta} \left[ \mu \left[ \frac{\partial u_\beta}{\partial x_\alpha} + \frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\beta} \right] \right], \dots \dots \dots (2)$$

エネルギー保存式,

$$\frac{\partial \rho e}{\partial t} + \frac{\partial \rho e u_\alpha}{\partial x_\alpha} = -P_{\beta\alpha} \frac{\partial u_\beta}{\partial x_\alpha} + \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left[ \kappa_T \frac{\partial T}{\partial x_\alpha} \right] + \mu \left[ \frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\beta} + \frac{\partial u_\beta}{\partial x_\alpha} \right] \frac{\partial u_\beta}{\partial x_\alpha} + \lambda \left[ \frac{\partial u_\gamma}{\partial x_\gamma} \right]^2, \dots \dots \dots (3)$$

を解析できる LB モデルを提案する. ここで,  $\rho$  は密度,  $u_\alpha$  は局所速度,  $e$  は内部エネルギー,  $T$  は温度,  $P_{\alpha\beta}$  は非理想気体に対する圧力テンソル,  $\mu$  はせん断粘性係数,  $\lambda$  は第二粘性係数,  $\kappa_T$  は熱伝導率である. 添え字  $\alpha, \beta, \gamma$  は直交座標成分を表し, アインシュタインの規約に従う. 圧力テンソル  $P_{\alpha\beta}$  は,

$$P_{\alpha\beta} = \left[ p - \kappa_s \rho \nabla^2 \rho - \frac{\kappa_s}{2} |\nabla \rho|^2 \right] \delta_{\alpha\beta} + \kappa_s \left( \frac{\partial \rho}{\partial x_\alpha} \right) \left( \frac{\partial \rho}{\partial x_\beta} \right), \dots \dots \dots (4)$$

のように導出される<sup>(7)</sup>. ここで,  $\kappa_s$  は表面張力の強さを調整する表面張力パラメータ,  $\delta_{\alpha\beta}$  はクロネッカーのデルタ, 圧力  $p$  は,

$$p = \frac{\rho T}{1-b\rho} - a\rho^2, \dots \dots \dots (5)$$

であり, van der Waals の状態方程式に従う温度  $T$  と密度  $\rho$  の関数である. 式(1)-(5)の定式化により相分離現象や表面張力をモデル化できることが示されている<sup>(7)</sup>. 温度変化を考慮するため, Alexander らによって提案された一つの静止粒子,

$$c_0 = (0,0), \dots \dots \dots (6)$$

と, 粒子速度の大きさが 1 と 2 の二種類の運動粒子,  $c_{\sigma,i} = \sigma(\cos(\pi(i-1)/3), \sin(\pi(i-1)/3)), \dots \dots \dots (7)$  ( $i=1, \dots, 6, \sigma=1, 2$ ),

が存在する 13 速度六角格子 (図 1 (a)) を用いる.

LBM を, 高 Reynolds 数流れや熱流動現象の解析に用いると, 数値的に不安定になることがある<sup>(14)</sup>. そのため, LBM は適切な条件下でのみ, 安定にシミュレーション可能である. Cao らは図 1 (b)に示すように, 粒子速度に対する格子形状と離散化空間に対する格子形状とを分離する FDLBM (Finite Difference Lattice Boltzmann Method) を提案し, 数値的不安定性の問題に対する解決法を示した<sup>(15)</sup>. FDLBM では, 空間刻みと離散粒子速度を独立に扱えるようにすることで, 格子の大きさ, つまり, 離散粒子速度の大きさとは無関係に, 空間刻み  $\Delta x, \Delta y$  を設定できる. 筆者らは, von Neumann の安定性解析法を用い, 7 速度 6 角格子 FDLBM に対する数値的安定性を, 波数, Courant 数, 緩和時間と関連させ定量的に評価し<sup>(16)</sup>, 半陰解法による風上差分近似を用いれば, Courant 数が 1 の場合に対しても, 自発的相分離を安定に計算出来ることを確認した. FDLBM では, 風上差分近似を用い, CFL 条件を満たすように, 時間刻みと空間刻みを適切に設定すれば, 二相流現象を安定に計算できることから, FDLBM を採用する.

FDLBM では, 離散格子上の分布関数  $f_{\sigma,i}$  に対し, 離散化粒子速度ベクトル  $c_{\sigma,i}$  に関する Boltzmann 方程式,

$$\frac{\partial f_{\sigma,i}(x,t)}{\partial t} + c_{\sigma,i} \nabla \cdot f_{\sigma,i}(x,t) = \Omega_{\sigma,i}, \dots \dots \dots (8)$$

を解くことにより流体の挙動が再現される. 一般に LBM では BGK 近似衝突項が適用される. この BGK 近似衝突項に, 擬似的な外力項  $F_{\sigma,i}$  を加えた衝突オペレータ,

$$\Omega_{\sigma,i} = -\frac{f_{\sigma,i}(x,t) - f_{\sigma,i}^{(0)}(x,t)}{\varepsilon \tau} + F_{\sigma,i}, \quad (i=1, \dots, 6), \dots \dots \dots (9)$$

を Boltzmann 方程式(8)に適用することにより, LBM によるメソ・スコピックな二相流のモデル化が可能となる<sup>(8)</sup>. ここで,  $\tau$  は緩和時間,  $f_{\sigma,i}^{(0)}$  は局所平衡分布関数,  $\varepsilon$  はクヌッセン数に比例する十分小さなパラメータである. 外力項により, 二相流に対する圧力テンソル  $P_{\alpha\beta}$  がマクロ・スコピックなレベルで適切に導出される.

無次元化される前の Boltzmann 方程式,

$$\frac{\partial \hat{f}_{\sigma,i}}{\partial \hat{t}} + \hat{c}_{\sigma,i} \hat{\nabla} \cdot \hat{f}_{\sigma,i} = -\frac{\hat{f}_{\sigma,i} - \hat{f}_{\sigma,i}^{eq}}{\hat{\tau}}, \dots \dots \dots (10)$$

に対し,  $L$  を代表長さ,  $c_r$  を代表速度,  $\rho_r$  を代表密度,  $t_c = L/c_r$  を代表時間とし,  $c_{\sigma,i} = \hat{c}_{\sigma,i}/c_r$ ,  $\nabla = L\hat{\nabla}$ ,  $t = \hat{t}t_c$ ,  $\tau = \hat{\tau}t_c$ ,  $f_{\sigma,i} = \hat{f}_{\sigma,i}/\rho_r$  の無次元量を代入すると,

$$\frac{\partial f_{\sigma,i}}{\partial t} + c_{\sigma,i} \nabla \cdot f_{\sigma,i} = -\frac{f_{\sigma,i} - f_{\sigma,i}^{eq}}{\varepsilon \tau}, \dots \dots \dots (11)$$

が得られる.  $\varepsilon = t_c/L$  の関係から,  $\varepsilon$  は代表長さに対する平均自由行程の割合, つまりクヌッセン数に相当することが示され, 式(8), (9)が無次元化された Boltzmann 方程式であることが分かる.

密度  $\rho$ , 運動量  $\rho u_\alpha$ , 内部エネルギー  $\rho e$  は平衡分布関数  $f_{\sigma,i}^{(0)}$  によって,

$$\sum_{\sigma,i} f_{\sigma,i}^{(0)} = \rho, \dots \dots \dots (12)$$

$$\sum_{\sigma,i} f_{\sigma,i}^{(0)} c_{\sigma,i} = \rho u_\alpha, \dots \dots \dots (13)$$

$$\frac{1}{2} \sum_{\sigma,i} f_{\sigma,i}^{(0)} |c_{\sigma,i} - u|^2 = \rho e, \dots \dots \dots (14)$$

のように定義される. ここで, 温度  $T$  と内部エネルギー  $e$  との関係は,  $T = e$  で与えられる. 平衡分布関数は, 局所速度を  $|u_\alpha| \ll 1$  と仮定し,  $u_\alpha$  まわりに展開した丸めた Maxwell-Boltzmann 分布で与えられる. つまり, 平衡分布関数は, 静止粒子に対し,

$$f_0^{(0)} = \rho (A_0 + D_0 u^2), \dots \dots \dots (15)$$

運動粒子に対し,

$$f_{\sigma,i}^{(0)} = \rho \left( A_\sigma + B_\sigma c_{\sigma,i} \cdot u + C_\sigma (c_{\sigma,i} \cdot u)^2 + D_\sigma u^2 + E_\sigma (c_{\sigma,i} \cdot u)^3 + F_\sigma (c_{\sigma,i} \cdot u) u^2 \right), \dots \dots (16)$$

である. 平衡分布関数(15), (16)の係数は, 理想気体に対する熱流動 LBM<sup>(6)</sup>に従い,

$$\begin{aligned} A_0 &= 1 - \frac{5}{2}e + 2e^2, & D_0 &= -\frac{5}{4} + 2e, & A_1 &= \frac{4}{9}(e - e^2), \\ A_2 &= \frac{1}{36}(4e^2 - e), & B_1 &= \frac{4}{9}(1 - e), & B_2 &= \frac{1}{36}(4e - 1), \\ C_1 &= \frac{4}{9}(2 - 3e), & C_2 &= -\frac{1}{72}(1 - 6e), & D_1 &= -\frac{2}{9}(1 - e), \\ D_2 &= \frac{1}{72}(1 - 4e), & E_1 &= -\frac{4}{27}, & E_2 &= \frac{1}{108}, \\ F_1 &= 0, & F_2 &= 0, \end{aligned} \quad (17)$$

とする.

一般に, LBM では, 式(8)に, Chapman-Enskog 展開<sup>(9)</sup>を適用することにより, マクロ・スコピックな保存式系が導出される. Chapman-Enskog 展開では, マルチ・スケール変数によって時間の偏差を早い時間スケール  $t_0$  と遅い時間スケール  $t_1$  に分け, 分布関数  $f_{\sigma,i}$  を平衡分布関数  $f_{\sigma,i}^{(0)}$  周りに展開することで,

Boltzmann 方程式(8)から,  $\varepsilon$  の 1 次のオーダーの動力学方程式,

$$\frac{\partial f_{\sigma,i}^{(0)}}{\partial t_0} + (c_{\sigma,i})_\alpha \frac{\partial f_{\sigma,i}^{(0)}}{\partial x_\alpha} = -\frac{f_{\sigma,i}^{(0)}}{\tau} + F_{\sigma,i}, \dots \dots \dots (18)$$

と,  $\varepsilon$  の 2 次のオーダーの動力学方程式,

$$\frac{\partial f_{\sigma,i}^{(1)}}{\partial t_0} + \frac{\partial f_{\sigma,i}^{(0)}}{\partial t_1} + (c_{\sigma,i})_\alpha \frac{\partial f_{\sigma,i}^{(1)}}{\partial x_\alpha} = 0, \dots \dots \dots (19)$$

が得られる. Chapman-Enskog 展開による, 式(18), (19)からの巨視的な保存式の導出過程から, 外力項  $F_{\sigma,i}$  に対する拘束条件を導出できる.  $i$  と  $\sigma$  について式(18)の総和を,

$$\frac{\partial \sum_{\sigma,i} f_{\sigma,i}^{(0)}}{\partial t_0} + \frac{\partial \sum_{\sigma,i} f_{\sigma,i}^{(0)} (e_{\sigma,i})_\alpha}{\partial x_\alpha} = -\frac{\sum_{\sigma,i} f_{\sigma,i}^{(0)}}{\tau} + \sum_{\sigma,i} F_{\sigma,i}, \dots \dots (20)$$

のように取れば, 1 次のオーダーの質量保存式,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t_0} + \frac{\partial \rho u_\alpha}{\partial x_\alpha} = 0, \dots \dots \dots (21)$$

が導出されるべきであり,  $i$  と  $\sigma$  に関し, 式(19)の総和を取ることにより,

$$\frac{\partial \sum_{\sigma,i} f_{\sigma,i}^{(1)}}{\partial t_0} + \frac{\partial \sum_{\sigma,i} f_{\sigma,i}^{(0)}}{\partial t_1} + \frac{\partial \sum_{\sigma,i} f_{\sigma,i}^{(1)} (c_{\sigma,i})_\alpha}{\partial x_\alpha} = 0, \dots \dots \dots (22)$$

から, 2 次のオーダーの質量保存式

$$\frac{\partial \rho}{\partial t_1} = 0, \dots \dots \dots (23)$$

が導出されなくてはならない.

また, 式(18)に  $c_{\sigma,i}$  を掛け  $i$  と  $\sigma$  について総和を取ることにより,

$$\begin{aligned} \frac{\partial \sum_{\sigma,i} f_{\sigma,i}^{(0)} (c_{\sigma,i})_\alpha}{\partial t_0} + \frac{\partial \sum_{\sigma,i} f_{\sigma,i}^{(0)} (c_{\sigma,i})_\alpha (c_{\sigma,i})_\beta}{\partial x_\beta} \\ = -\frac{\sum_{\sigma,i} f_{\sigma,i}^{(0)} (c_{\sigma,i})_\alpha}{\tau} + \sum_{\sigma,i} F_{\sigma,i} (c_{\sigma,i})_\alpha, \end{aligned} \dots \dots (24)$$

から, 1 次のオーダーの運動量保存式,

$$\frac{\partial \rho u_\alpha}{\partial t_0} + \frac{\partial \rho u_\alpha u_\beta}{\partial x_\beta} = -\frac{\mathcal{P}_{\alpha\beta}}{\alpha_\beta}, \dots \dots \dots (25)$$

が, 式(19)に  $c_{\sigma,i}$  を掛け, 同様に総和を取ること,

$$\begin{aligned} \frac{\partial \sum_{\sigma,i} f_{\sigma,i}^{(1)} (c_{\sigma,i})_\alpha}{\partial t_0} + \frac{\partial \sum_{\sigma,i} f_{\sigma,i}^{(0)} (c_{\sigma,i})_\alpha}{\partial t_1} \\ + \frac{\partial \sum_{\sigma,i} f_{\sigma,i}^{(1)} (c_{\sigma,i})_\alpha (c_{\sigma,i})_\beta}{\partial x_\beta} = 0, \end{aligned} \dots \dots \dots (26)$$

から, 2 次のオーダーの運動量保存式,

$$\frac{\partial \rho u_\alpha}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left[ \lambda \frac{\partial u_\gamma}{\partial x_\gamma} \right] + \frac{\partial}{\partial x_\beta} \left[ \mu \left[ \frac{\partial u_\beta}{\partial x_\alpha} + \frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\beta} \right] \right], \dots (27)$$

が得られなければならない。

また、エネルギー保存式は、式(18)、(19)に  $|c_{\sigma,i}|^2 (c_{\sigma,i})_\alpha$  を掛け  $i$  と  $\sigma$  について総和を取ることで導出されるべきである。つまり、式(18)から1次のオーダーのエネルギー保存式、

$$\frac{\partial \rho e}{\partial t} + \frac{\partial \rho e u_\alpha}{\partial x_\alpha} = -P_{\beta\alpha} \frac{\partial u_\beta}{\partial x_\alpha}, \dots (28)$$

が、式(19)から2次のオーダーのエネルギー保存式、

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho e}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left[ \kappa_T \frac{\partial T}{\partial x_\alpha} \right] \\ + \mu \left[ \frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\beta} + \frac{\partial u_\beta}{\partial x_\alpha} \right] \frac{\partial u_\beta}{\partial x_\alpha} + \lambda \left[ \frac{\partial u_\gamma}{\partial x_\gamma} \right]^2, \dots (29) \end{aligned}$$

が、導出されるべきである。

式(9)に外力項  $F_{\sigma,i}$  が付加されない、理想気体に対する熱流動 LBM<sup>(6)</sup> から導出される運動量保存式は、

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho u_\alpha}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_\alpha u_\beta}{\partial x_\beta} = - \frac{\partial \rho T}{\partial x_\beta} \\ + \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left[ \lambda \frac{\partial u_\gamma}{\partial x_\gamma} \right] + \frac{\partial}{\partial x_\beta} \left[ \mu \left[ \frac{\partial u_\beta}{\partial x_\alpha} + \frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\beta} \right] \right], \dots (30) \end{aligned}$$

であり、エネルギー保存式は、

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho e}{\partial t} + \frac{\partial \rho e u_\alpha}{\partial x_\alpha} = -\rho T \frac{\partial u_\beta}{\partial x_\alpha} + \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left[ \kappa_T \frac{\partial T}{\partial x_\alpha} \right] \\ + \mu \left[ \frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\beta} + \frac{\partial u_\beta}{\partial x_\alpha} \right] \frac{\partial u_\beta}{\partial x_\alpha} + \lambda \left[ \frac{\partial u_\gamma}{\partial x_\gamma} \right]^2, \dots (31) \end{aligned}$$

である。式(2)と式(30)、式(3)と式(31)をそれぞれ比較することにより、非理想気体に対する保存式と理想気体に対する保存式とのずれを補正するための条件式、

$$\sum_{\sigma,i} F_{\sigma,i} \begin{pmatrix} 1 \\ (c_{\sigma,i})_\alpha \\ |c_{\sigma,i}|^2/2 \\ |c_{\sigma,i}|^2 (c_{\sigma,i})_\alpha \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_1 \\ (a_2)_\alpha \\ a_3 \\ (a_4)_\alpha \end{pmatrix}, \dots (32)$$

$$\begin{pmatrix} a_1 \\ (a_2)_\alpha \\ a_3 \\ (a_4)_\alpha \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \partial_\alpha \rho T - \partial_\beta P_{\alpha\beta} \\ \partial_\alpha \rho T u_\alpha - \partial_\alpha P_{\beta\alpha} u_\beta \\ 4T(\partial_\beta \rho \delta_{\alpha\beta} - \partial_\beta P_{\alpha\beta}) \end{pmatrix}, \dots (33)$$

が導かれる。式(33)の係数  $a_1 \sim a_4$  は、理想気体と非理想気体との保存式のずれに対応する。式(33)の1行目は質量保存式(1)に対する条件を表す。理想気体と非理想気体の質量保存式は等しいため、 $a_1 = 0$  となる。

式(33)の2行目は、運動量保存式(2)の圧力テンソルが導出されるための条件である。つまり、二相流に対する圧力テンソルの式(4)と理想気体の状態方程式  $p = \rho T$  との差が  $a_2$  に相当する。式(33)の3行目と4行目の条件は、それぞれ、 $\varepsilon$  の1次のオーダーのエネルギー保存式(28)と理想気体に対するエネルギー保存式(31)とのずれ、2次のオーダーのエネルギー保存式(29)と理想気体に対するエネルギー保存式(31)とのずれを補正するために用いられる。

式(32)、(33)を満たす外力項として、奇数次には、0になるテンソルの性質を用いた、1次と2次の両方のテンソルを有する外力項、

$$F_{\sigma,i} = (G_\sigma)_\alpha (c_{\sigma,i})_\alpha + H_\sigma |c_{\sigma,i}|^2, \dots (34)$$

が、考えられる。式(34)では、係数  $G_\sigma$ 、 $H_\sigma$  は、巨視的な保存式系(1)-(5)の導出における外力項の影響を調節する。式(34)を式(32)、(33)に代入することにより、係数  $G_\sigma$ 、 $H_\sigma$  は、

$$(G_1)_\alpha = \frac{4(a_2)_\alpha - (a_4)_\alpha}{9}, \dots (35)$$

$$(G_2)_\alpha = \frac{(a_4)_\alpha - (a_2)_\alpha}{36}, \dots (36)$$

$$H_1 = \frac{2a_1 - a_3}{9}, \dots (37)$$

$$H_2 = \frac{2a_3 - a_1}{72}, \dots (38)$$

のように導出される。Chapman-Enskog 展開において、動力学方程式(18)、(19)から運動量保存式(27)、エネルギー保存式(29)を導出することにより、粘性係数や、熱伝導率などの輸送係数が決定される。本 LBM の第二粘性係数  $\lambda$  とせん断粘性係数  $\mu$  は、

$$\lambda = -\rho e \tau, \quad \mu = \rho e \tau, \dots (39)$$

熱伝導率  $\kappa_T$  は、

$$\kappa_T = 2\rho e \tau, \dots (40)$$

である。

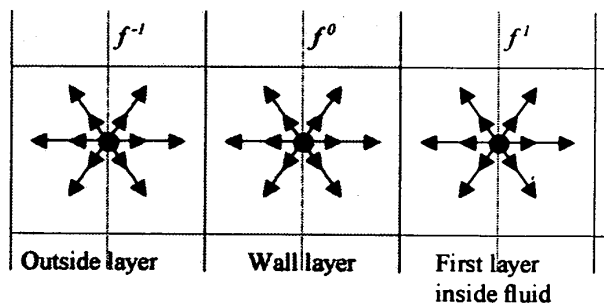
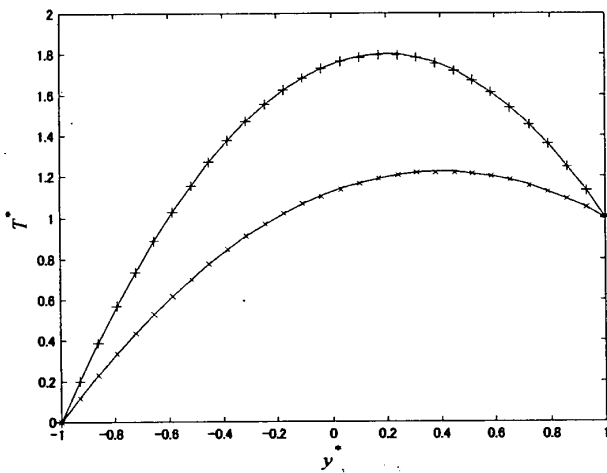


Fig.2 Extrapolation scheme.

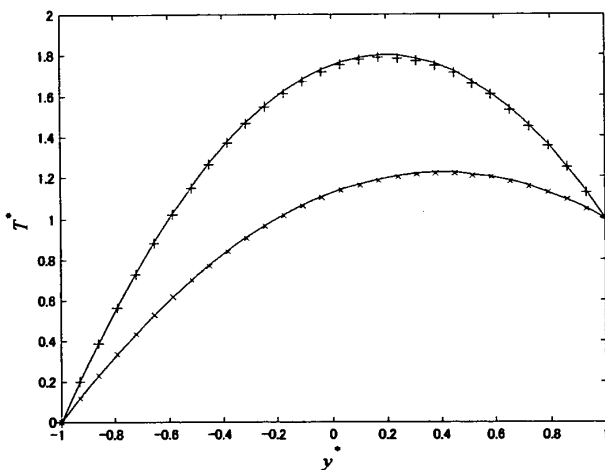
3. LBM の離散化

本モデルでは、発展方程式(8)を離散化することで、シミュレーションが行われる。Cao らは滑らかな解を持つ問題を解くために、式(8)に 2 次の中心差分近似を用いた<sup>(15)</sup>。しかし、急な密度勾配を扱う衝撃波や二相流の界面の問題に対し 2 次の中心差分を用いた場合、数値振動などの問題が発生する。これに対し、式(8)に 1 次の風上差分近似を用い、二相流を安定に数値振動なくシミュレーションできることが示されている<sup>(9)</sup>。本モデルでは、単相に対するクエット流れのシミュレーションには対流項の離散化に 2 次の中心差分近似、

$$\frac{\partial f_{\sigma,i}}{\partial x_\alpha} = \frac{f_{\sigma,i}(x_\alpha + \Delta x_\alpha) - f_{\sigma,i}(x_\alpha - \Delta x_\alpha)}{2\Delta x_\alpha}, \dots \dots \dots (41)$$



(a) The initial density,  $\rho$  equals to 1.400.



(b) The initial density,  $\rho$  equals to 5.767.

Fig.3 Simulation of Couette flow.

を用いる。ラプラスの法則の検証や自発的相分離のシミュレーションでは、界面における急な密度勾配を扱うため、対流項の離散化に 1 次の風上差分近似、

(i)  $(c_{\sigma,i})_\alpha \geq 0$ :

$$\frac{\partial f_{\sigma,i}}{\partial x_\alpha} = \frac{f_{\sigma,i}(x_\alpha) - f_{\sigma,i}(x_\alpha - \Delta x_\alpha)}{\Delta x_\alpha}, \dots \dots \dots (42)$$

(ii)  $(c_{\sigma,i})_\alpha < 0$ :

$$\frac{\partial f_{\sigma,i}}{\partial x_\alpha} = \frac{f_{\sigma,i}(x_\alpha + \Delta x_\alpha) - f_{\sigma,i}(x_\alpha)}{\Delta x_\alpha}, \dots \dots \dots (43)$$

を用いる。また、時間項は 2 次精度の Runge-Kutta (修正 Euler) 法で計算する。Runge-Kutta 法では、分布関数は、

$$f_{\sigma,i}^{(n+1/2)} = f_{\sigma,i}^{(n)} + \frac{1}{2} \Delta t (-c_{\sigma,i} \cdot \nabla f_{\sigma,i}^{(n)} + \Omega_{\sigma,i}^{(n)}), \dots \dots \dots (44)$$

および

$$f_{\sigma,i}^{(n+1)} = f_{\sigma,i}^{(n)} + \Delta t (-c_{\sigma,i} \cdot \nabla f_{\sigma,i}^{(n+1/2)} + \Omega_{\sigma,i}^{(n+1/2)}), \dots \dots \dots (45)$$

によって時間発展する。なお、全てのシミュレーションに対し、外力項は、2 次精度の中心差分近似によって離散化される。

4. 数値実験

数値実験として、クエット流れ、ラプラスの法則、自発的相分離についてシミュレーションを行う。式(1)-(3)から予測される解と、式(8), (9), (34)-(38)から得られる計算結果とが一致することにより、式(34)-(38)の外力項から、式(1)-(3)が、適切に導出されることが分かる。以下の全てのシミュレーションにおいて、van der Waals パラメータ  $a = 0.32143$ ,  $b = 0.095238$  を用い、 $T = 0.90$  においてマクスウェル・コンストラクションが成立する  $\rho = 5.767$  を液相の密度とし、 $\rho = 1.400$  を気相の密度として用いる。

4.1 クエット流れ

熱流動特性を検証するため、液相および気相の両相に対するクエット流れのシミュレーションを行う。クエット流れにおける平板間の無次元化された温度の解析解は、

$$T^* = \frac{T - T_0}{T_1 - T_0} = \frac{1}{2}(1 + y^*) + \frac{Br}{8}(1 - y^{*2}), \dots \dots \dots (46)$$

である。 $y^*$  は規格化された平板間の中心からの距離、 $Br$  はプラントル数とエックハート数の積であるプリンクマン数であり、 $T_1, T_0$  は上壁、下壁の温度である。

一般に、LBM の境界条件には、LGA で開発されたバウンス・バック・スキームが直接適用される。バウンス・バック・スキームでは、壁に到達した粒子が入射方向に跳ね返ることでノン・スリップ境界条件が再現されることになる。これにより、質量と運動量が保

存され、ポーラス・メディアなどの複雑な境界条件を簡単に設定できる。しかし、バウンス・バック・スキームは、境界条件に対し 1 次の精度しか有していない<sup>(17)</sup>。非圧縮性 Navier-Stokes 方程式に対し 2 次の解析精度を有する LBM に対しては、2 次精度の外挿法<sup>(17)</sup>を用いる方が有効である。外挿法では、図 2 の

ように、境界の外に格子点を一つ多めにとり、以下の境界条件、

$$f_{\sigma,i}^{-1} = 2f_{\sigma,i}^0 - f_{\sigma,i}^1, \dots \dots \dots (47)$$

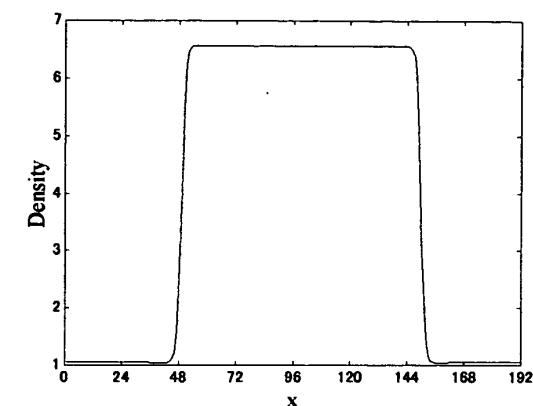
を時間ステップごとに適用する。ここで、 $f_{\sigma,i}^{-1}$ は境界の外の分布関数、 $f_{\sigma,i}^0$ は境界上の分布関数、 $f_{\sigma,i}^1$ は境界に隣接するグリッド上の分布関数である。クエット流れのシミュレーションにおいて式(47)の外挿法を適用する。なお、ラプラスの法則の検証と自発的相分離のシミュレーションに対しては、周期的境界条件が適用される。

ブリンクマン数を  $Br = 5$ ,  $Br = 10$  とした計算結果をそれぞれ (×), (+) で示し、気相に対する計算結果を図 3 (a) に、液相に対する結果を図 3 (b) に示す。計算格子は  $4 \times 32$ 、表面張力係数は  $\kappa_s = 0.001$ 、時間刻みは  $\Delta t = 0.01$ 、各方向の空間刻みは  $\Delta x = \Delta y = 0.5$ 、緩和時間は  $\tau = 0.16$  を用いる。両相に対し、解析解と数値解とがよく一致しており、本 LBM により熱伝導特性が二次精度まで適切に再現されることが分かる。

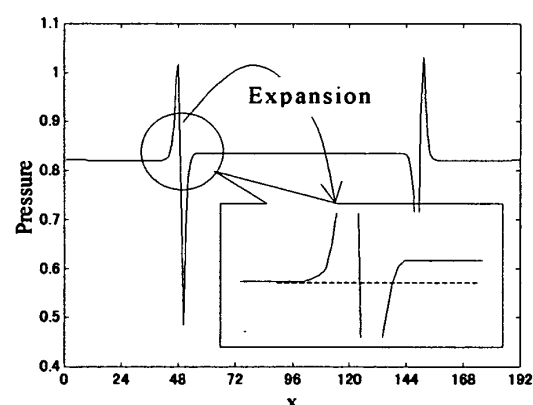
**4.2 ラプラスの法則** 次に、二相界面における表面張力の検証にラプラスの法則に関する数値実験を行う。二相界面から離れたところでは、各相は理想気体に対する Navier-Stokes 方程式に従うが、界面付近では界面自身の挙動が重要となり、表面張力が正確にモデル化されなくてはならない。表面張力  $\sigma_s$  の力学的定義いわゆるラプラスの法則は、

$$\Delta p = \frac{\sigma_s}{R}, \dots \dots \dots (48)$$

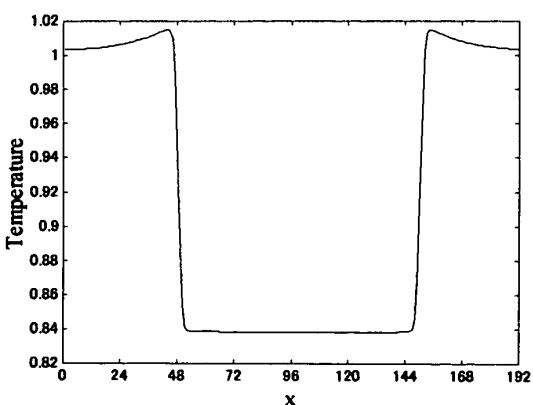
となる。ここで、 $\sigma_s$  は表面張力、 $R$  は曲率半径、 $\Delta p$  は液滴の内圧と外圧の差である。式(48)は、圧力差  $\Delta p$  が液滴の曲率 (半径の逆数)  $1/R$  に比例することを示している。図 4 (a) で示されるように、蒸気で満たされた領域の中心に半径  $R$  の液滴を 1 つ置く。ここで、計算領域の一边が液滴の直径の 2 倍になるように設定する。表面張力係数は  $\kappa_s = 0.02$ 、時間刻みは  $\Delta t = 0.1$ 、空間刻みは  $\Delta x = \Delta y = 0.5$ 、緩和時間は  $\tau = 0.16$  を用いる。計算格子を  $192 \times 192$  とし、平衡状態になった場合の圧力分布と温度分布を、それぞれ、図 4 (b), (c) に示す。図 4 (b) の拡大図から、表面張力の効果により液滴の圧力が蒸気より高くなり、圧力差が生じることが分かる。図 4 (b) では、二相界面において、圧力の急激な変化が見られるが、これは、図 4(a) に示される厚い界面上で、密度が気相から液相に連続に変化するため、van der Waals の状態方程式で示される不安定領域が、界面上に再現されたためと考えられる。この非物理的な圧力分布は、今後解決すべ



(a) Density distribution



(b) Pressure distribution



(c) Temperature distribution

Fig.4 A single-component droplet in vapor.

き課題である。なお、図 4(b)に示された圧力分布は、巨視的な基礎方程式から導かれる実質的な圧力<sup>(18)</sup>,

$$p' = p - \kappa_s \rho \nabla^2 \rho + \frac{\kappa_s}{2} |\nabla \rho|^2 \dots \dots \dots (49)$$

を用いて計算された。また、図 4 (c)から、液相の温度が、気相より低くなっており、密度分布 (図 4 (a)) に連動し、温度が計算されたことが分かる。様々な半径の液滴に対する数値実験から計測された圧力差 $\Delta p$ と液滴の曲率半径  $1/R$  との関係を図 5 に示す。二相界面力学において重要な表面張力現象が本 LBM によって再現されることが分かる。

**4.3 自発的相分離** 二相流のシミュレーションとして、van der Waals 流体の熱力学的不安定性に起因する自発的相分離のシミュレーションを行う。マクスウェル・コンストラクションが成立する不安定領域に初期条件を設定すると、相が自発的に気相と液相に分離する<sup>(16)</sup>。この現象を自発的相分離と呼ぶ。周期的境界条件を用い、初期密度を $\rho = 3.33335$ とし、5%のランダムなゆらぎを与える。計算格子は  $128 \times 128$ 、表面張力係数は $\kappa_s = 0.02$ 、時間刻みは $\Delta t = 0.1$ 、空間刻みは $\Delta x = \Delta y = 0.5$ 、緩和時間は $\tau = 0.16$ 、初期温度は $T = 0.90$ を用いる。高密度および高温領域は白、低密度および低温領域は黒で、時間ステップごとの密度分布と温度分布をそれぞれ図 6 と図 7 に示す。時間の発展とともに相の分離が進み、表面張力の効果により液滴同士が引き合うことが分かる。図 6 と図 7 の比較から、気相の温度が液相に比較して相対的に高く、相変化と連動しながら温度分布が計算されることが分かる。本 LBM では、界面に関する実験式やラプラスの式などを明示的に解く必要がなく、温度変化を計算しつつ、複雑な界面挙動を自律的にシミュレーションできることが分かる。

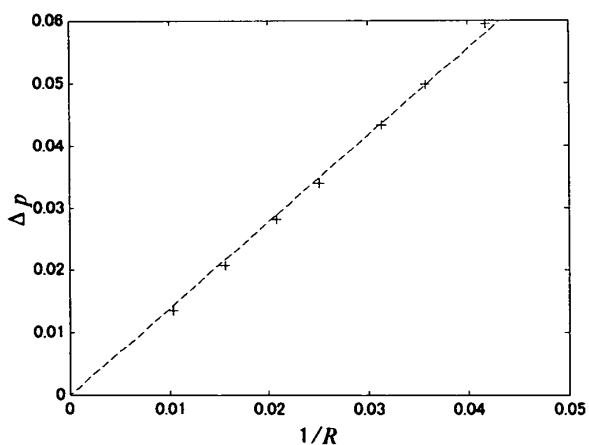
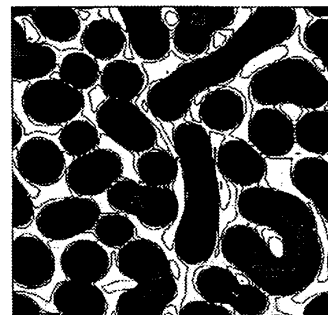
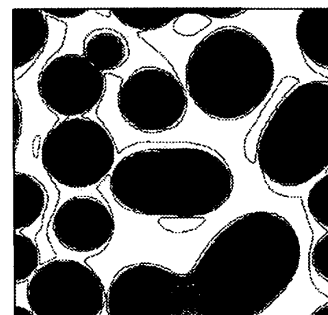


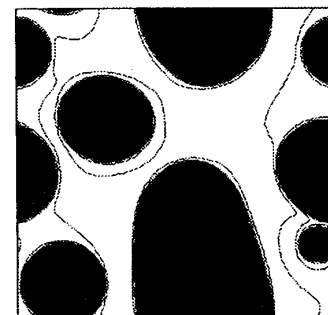
Fig.5  $\Delta p$  plotted vs  $1/R$  as a test of Laplace's law.



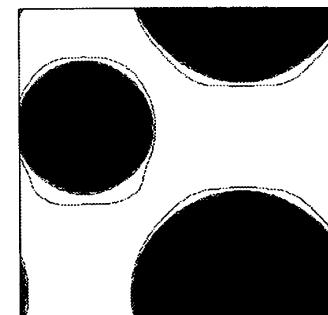
(a)  $t = 100$



(b)  $t = 400$



(c)  $t = 1,600$



(d)  $t = 12,800$

Fig.6 The density distribution of simulation of phase transition.

## 5. 結 言

外力項を改良し、van der Waals-Cahn-Hilliard 自由エネルギー理論から導出される圧力テンソルを解析できる熱流動二相流格子ボルツマンモデルを提案した。Chapman-Enskog 展開による、二相流に対する巨視的な保存式の導出過程から、外力項に対する拘束条件を導出した。1次と2次の両方のテンソルを有し、係数によって外力の影響を調節できる外力項を提案した。この係数は、導出した拘束条件を満足するように決定された。境界条件に外挿法を用いたクエット流れのシミュレーションにより、気相、液相の両相に対し、熱伝導特性が適切に再現されることが示された。様々な半径の液滴から計測された液滴の内圧と外圧の差は、液滴の曲率半径に対し、ラプラスの法則を満たすことが示された。これにより、二相界面力学において重要な表面張力現象が本 LBM によって再現されることが示された。複雑な界面挙動のある自発的相分離現象に対する、温度変化を自律的にシミュレーションできた。自発的相分離の数値実験より、本 LBM の二相流のシミュレーションへの適用性が実証された。

今後、エトベス数やモルトン数等の無次元数を調節し、実験結果と比較するためや、流れの3次元成分による影響を考慮できる実用的な二相流のシミュレーションを実現するためには、3次元モデルの提案が必要である。立方格子を用い、離散速度数を33速度に増加させれば、3次元モデルに対し、拘束条件(32)、(33)を満足できる、外力項が導かれることが分かっている。ただし、3次元モデルでは、 $x$ 、 $y$ 、 $z$ の3方向のテンソルを考慮しなくてはならないため、2次元モデルと比較し、外力項の影響が大きくなり、数値的に不安定になりやすい問題点がある。

van der Waals の状態方程式は、準安定な状態として過熱液および過飽和蒸気の範囲を再現でき、少なくとも定性的には、実在の気体や液体の性質をよく表している。しかし、厳密には、van der Waals の状態方程式(5)の  $a$  および  $b$  は、定数ではなく、温度および圧力の関数であるため、定量的な熱計算を実行するためには、実験結果から作成される実用状態方程式を用いなくてはならない<sup>(19)</sup>。本モデルは、二相流の定性的な挙動の再現を目的とし、二相の密度比が10以下の臨界点近傍の状態を対象としている。稲室らは、等温場2成分格子ボルツマンモデルにインデックス・ファンクションとプロジェクション法を導入することにより、密度比1000までの計算を安定に行えることを報告している<sup>(20)</sup>。本モデルを、高密度比の二相流

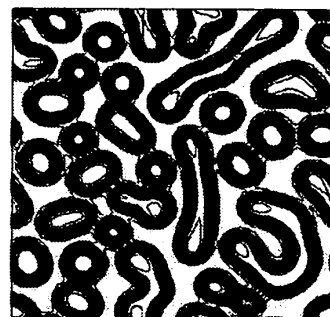
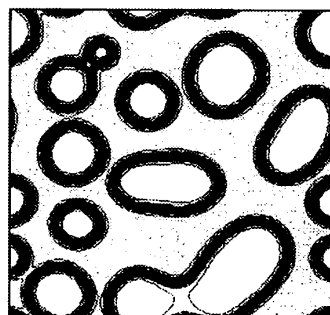
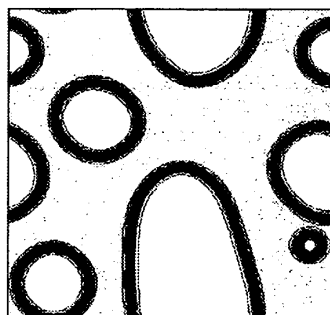
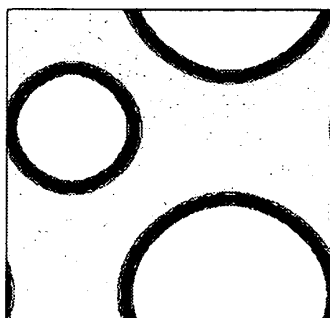
(a)  $t = 100$ (b)  $t = 400$ (c)  $t = 1,600$ (d)  $t = 12,800$ 

Fig.7 The temperature distribution of simulation of phase transition.



のシミュレーションに適用するためには、界面内における不安定流動の問題を解決する必要がある。

熱流動 LBM には、プラントル数が常に、0.5 になる問題点がある。この点は、プラントル数が 13.3 ( $T = 0^\circ\text{C}$ ) から 0.98 ( $T = 300^\circ\text{C}$ ) まで、大きく変化する水などに本モデルを適用する場合、障害となる。Y. Chen らは、2 つの緩和時間を用いることにより、プラントル数を調整できる熱流動格子ボルツマンモデルを提案している<sup>(21)</sup>。一方、本外力項に対する条件式を適切に設定することによっても、プラントル数を任意の値に変更できる。また、分布関数と外力項を適切に設定すれば、LBM に潜熱を導入することも理論的に可能である。

本論文執筆について貴重なご意見を賜った東京大学大橋弘忠教授、東京大学秋山守名誉教授に深謝する。本研究は、財団法人エネルギー総合工学研究所による「次世代シミュレーション手法の安全性解析モデルへの適用性評価」の一環として行われたことを記し、謝意を表する。

## 文 献

- (1) Frisch, U., Hasslacher, B., and Pomeau, Y., Lattice-Gas Automata for the Navier-Stokes Equation, *Phys. Rev. Lett.*, **56** (1986), 1505-1508.
- (2) 松隈, 小林, 阿部, 9 速度格子ガスオートマトン法による液滴微粒化の数値シミュレーション, *機論*, B, **66**-642 (2000), 315-322.
- (3) Niimura, H., Lattice-Gas Model with Wetness Control for Various Deformable Microstructures, *Computer Physics Communications*, **129** (2000), 145-157.
- (4) McNamara, G. R. and Zanetti, G., Use of the Boltzmann Equation to Simulate Lattice-Gas Automata, *Phys. Rev. Lett.*, **61** (1988), 2332-2335.
- (5) Chen, H., Chen, S., and Matthaeus, W. H., Recovery of the Navier-Stokes Equations Using a Lattice-Gas Boltzmann Method, *Phys. Rev.*, A, **45** (1992), 5339-5342.
- (6) Alexander, F. J., Chen, S., and Sterling, J. D., Lattice Boltzmann Thermohydrodynamics, *Phys. Rev.*, E, **47** (1993), 2249-2252.
- (7) Swift, M. R., Osborn, W. R., and Yeomans, J. M., Lattice Boltzmann Simulation of Nonideal Fluids, *Phys. Rev. Lett.*, **75** (1995), 830-833.
- (8) Qian, Y. H. and Chen, S., Finite Size Effect in Lattice BGK Models, *J. Mod. Phys.*, C, **8** (1997), 763-772.
- (9) 瀬田, 河野, Martinez, D., Chen, S., 二相流に対する格子ボルツマン・スキームの提案, *機論*, B, **65**-634 (1999), 1995-1963.
- (10) Seta, T., Kono, K., Martinez, D., and Chen, S., Lattice Boltzmann Scheme for Simulating Two-Phase Flows, *JSME International Journal*, **43** (2000), 305-313.
- (11) Takada, N., Misawa, M., Tomiyama, A., and Fujiwara, S., Numerical Simulation of Two- and Three-Dimensional Two-Phase Fluid Motion by Lattice Boltzmann Method, *Computer Physics Communications*, **129** (2000), 233-246.
- (12) 瀬田, 高橋, 格子ボルツマン法による二相流のシミュレーション, 日本機械学会東北支部米沢地方講演会講演論文集, (1999), 179-180.
- (13) 瀬田, 高橋, 熱流動二相格子ボルツマンモデル, 日本流体力学会年会 2000 講演論文集, (2000), 179-180.
- (14) Sterling, J. D. and Chen, S., Stability Analysis of Lattice Boltzmann Methods, *J. Comput. Phys.*, **123** (1996), 196-206.
- (15) Cao, N., Chen, S., Jin, S., and Martinez, D., Physical Symmetry and Lattice Symmetry in the Lattice Boltzmann Method, *Phys. Rev.*, E, **55** (1997), 21-24.
- (16) 瀬田, 高橋, FDLBM への半陰解法の適用と数値的安定性解析, *機論*, B, **67**-659 (2001), 1662-1671.
- (17) Chen, S., Martinez, D., and Mei, R., On Boundary Conditions in Lattice Boltzmann Methods, *Phys. Fluids*, **8** (1996), 2527-2536.
- (18) Inamuro, T., Konishi, N., and Ogino, F., A Galilean Invariant Model of the Lattice Boltzmann Method for Multiphase Fluid Flows Using Free-Energy Approach, *Computer Physics Communications*, **129** (2000), 32-45.
- (19) 谷下, 工業熱力学, 裳華房 (1960), 168-175.
- (20) 稲室, 小西, 田島, 荻野, 二相系格子ボルツマン法による気液二相流シミュレーション, 日本混相流学会年会講演会 2001 講演論文集, (2001), 287-288.
- (21) Chen, Y., Ohashi, H., and Akiyama, M., Two-Parameter Thermal Lattice BGK Model with a Controllable Prandtl Number, *J. Sci. Comput.*, **12** (1997), 169-185.