

格子ボルツマン法による水・油二相流れの数値シミュレーション

Numerical Modeling of Multi-Phase (Water–Oil) Flow by Lattice Boltzmann Method

荒木 健¹・越村俊一²

Takeru ARAKI and Shunichi KOSHIMURA

In the past years, the Lattice Boltzmann Method (LBM) has been developed and applied to simulate single phase flow with a free surface. In this paper, the free-surface tracking algorithms are newly implemented in a multi-phase LBM model to expand a capability of LBM to simulate a complex behavior of fluid flow. The model was verified by standard dam-break (single-phase) and oil-slick (two-phase) experiments and were found to be in good agreement with the results.

1. はじめに

格子ボルツマン法 (Lattice Boltzmann Method, 以下 LBM) とは分子動力学に基づく数値流体解析手法 (CFD) であり (McNamara・Zanetti, 1988; Qianら, 1992; Chen・Doolen, 1998), 流体を模擬した微視的仮想粒子の運動から巨視的な流体の流れを求める手法である。格子ボルツマン方程式を支配方程式とし, 粒子の各速度成分の頻度 (粒子分布関数 f) を変数として完全に陽的なスキームで表現されるが, その解は Navier-Stokes 式と一致する事が数学的に保証されている (渡辺, 2006a, 2006b)。並列計算に向いているため Multi-core CPU や GPU などを用いた計算の高速化が可能であり, Navier-Stokes 式の直接解法より圧倒的に計算効率の高い手法として期待されている。また単相流のみならず様々な種類の流れを統一的に取り扱うことが可能であり, 特に混相流においては粒子の運動から計算される流体密度の識別により界面形状が自律的に求まるため, 界面の生成・消滅などの複雑流動を容易に扱えるという特徴がある (二相系 LBM)。

著者らは主に単相流について LBM に基づく新たな津波数値解析手法の開発を行ってきた (大家ら, 2008; 荒木・越村, 2009) が, 津波の陸上遡上に伴う油の流出・移流や, 地滑り津波などといった防災上重要なマルチフェイジックス現象を取り扱うためには二相流のモデル化が必要となる。しかし既往の二相流モデルにおいて自由表面の境界条件は確立されておらず, 実現象への応用には自由表面探索アルゴリズムの構築が課題であった。

そこで本研究では, 二相系 LBM における自由表面探索アルゴリズムを構築し, 上記の複雑現象に対応する新たな数値解析手法の基礎となる計算手法を開発することを

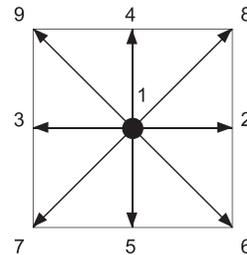


図-1 LBMの2次元9速度格子モデル

目的とする。まず「密度差の比較的小さい」二流体を対象とした Grunau ら (1993) の二相モデルに, 単相流において確立された Köner ら (2005) の自由表面探索手法を組み合わせ, 新たに自由表面を有する二相流れを解析するモデルを提案する。そして鉛直二次元の流れ場において, ダムブレイク流れによる水・水の混合および水・油の混合を再現した水槽実験との比較を通してモデルの妥当性を検討する。

2. 格子ボルツマン法

(1) 格子形状

本研究では格子形状に図-1の2次元9速度モデルを用いる。粒子の運動はこの格子に沿った有限な方向に制限され, 粒子の速度 $e_i (i = 1, 2, \dots, 9)$ は, それぞれ $0 (i = 1), e (i = 2, 3, 4, 5), \sqrt{2} e (i = 6, 7, 8, 9)$ となる。ここで, $e = \Delta x / \Delta t$ (格子間隔 Δx 及び時間刻み幅 Δt) である。

(2) 格子ボルツマン方程式

Grunau ら (1993) の二相流モデルでは, 互いに混ざり合わない異なる流体の粒子を別個に扱う (赤青粒子モデル)。それぞれの色の粒子に対して, 時刻 t , 位置 x で i 方向の速度を持つ粒子の分布関数 $f_i^k(x, t)$ の時間発展を, 並進と衝突の二つの過程を表す格子ボルツマン方程式 (BGK 方程式) により解く。ここで, 添字 k は k 成分 (r: red または b: blue) の粒子に関する式であることを表す。

1 正会員 修(工) 日本工営株式会社
2 正会員 博(工) 東北大学大学院准教授 工学研究科

$$f_i^k(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \Delta t, t + \Delta t) = \left(1 - \frac{1}{\tau^k}\right) f_i^k(\mathbf{x}, t) + \frac{1}{\tau^k} f_i^k(eq) \dots (1)$$

ここで τ^k は単一時間緩和係数であり、 τ^k により仮想的な水粒子の局所的な運動が平衡状態に達する速さ（粘性）が決まる。流体の動粘性係数 ν と式 (2) のような関係が成り立っており、この値を変化させることにより動粘性係数の異なる流体を取り扱う。

$$\tau^k = \frac{1}{2} + 3\nu^k \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \dots (2)$$

(3) 局所平衡分布関数

局所平衡分布関数 $f_i^k(eq)$ は局所平衡状態における粒子分布関数であり、各流体の密度 $\rho_k = \sum_i f_i^k$ および流速 $\mathbf{u} = \sum_{i,k} \mathbf{e}_i f_i^k / \rho$ により求められる。

$$f_i^k(eq) = \begin{cases} \rho_k \left(\frac{\lambda_k}{5+\lambda_k} - \frac{2}{3} \mathbf{u}^2 \right) \\ \rho_k \left(\frac{1}{5+\lambda_k} - \frac{1}{6} \mathbf{u}^2 + \frac{1}{3} (\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u}) + \frac{1}{2} (\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u})^2 \right) \\ \frac{\lambda_k}{5+\lambda_k} - \frac{1}{6} \mathbf{u}^2 + \frac{1}{3} (\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u}) + \frac{1}{2} (\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u})^2 \end{cases} \dots (3)$$

$$i = \begin{cases} 1 \\ 2, \dots, 5 \\ 6, \dots, 9 \end{cases}$$

ここで、 λ_k をパラメータとし二流体の密度比を変化させることができる。本モデルでは二流体の密度比を $\frac{\rho_r}{\rho_b} = \frac{5+\lambda_r}{5+\lambda_b}$ とし、局所平衡分布関数を上式のような形に決定した。

3. 自由表面探索アルゴリズム

(1) セルの分類

二流体の界面形状については、粒子の運動から計算される流体密度の識別により自動的に求めることができるが、自由表面については特別な操作が必要となる。VOF法 (Hirt・Nichols, 1981) の類推から、各セル内の流体の充填率 ε に応じて、その属性を空隙 (G) セル ($\varepsilon = 0$)、界面 (IF) セル ($0 < \varepsilon < 1$)、流体 (F) セル ($\varepsilon = 1$) に分類する。界面セルは自由表面の位置を表し、そのセルの位置により自由表面を探索できる。本研究ではさらに、二流体の界面でありかつ気体との界面（自由表面）となるセルを取り扱うため、各セルに含まれる粒子の色についても分類し、空隙セルも含めて合計7種類に分類する。(図-2)。一成分の流体のみを含んでいる領域を赤 (r) または青 (b) 領域とし、二流体を含んでいる領域を紫 (p) 領域とする。そのセルでは異なる二流体の含有比に応じてその中間の物性 (ρ, λ, τ) を持つセルとして扱う。

(2) 自由表面の境界条件

界面セルは空隙セルと隣接するため、境界条件式 (Könerら (2005)) を用いて流入する粒子分布関数を補完する必要がある。

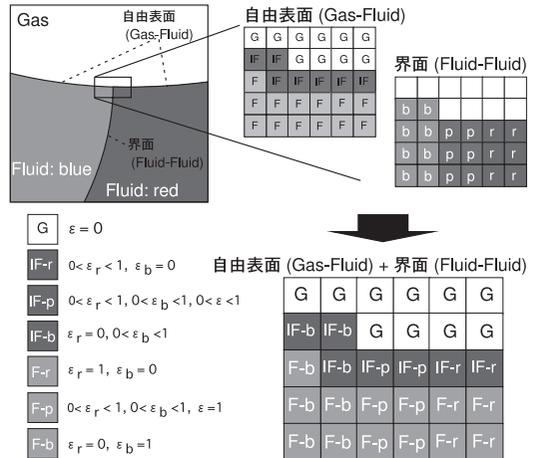


図-2 セル分類のジオメトリ (Köner et al. (2005)を拡張)

$$f_i(\mathbf{x}, t + \Delta t) = f_i^{eq}(\rho_A, \mathbf{u}) + f_i^{eq}(\rho_B, \mathbf{u}) - f_i(\mathbf{x}, t) \dots (4)$$

ここで、添字 \tilde{i} は i と逆方向であることを意味し、 $\mathbf{e}_{\tilde{i}} = -\mathbf{e}_i$ である。界面において液体（流体セル）と空気（空隙セル）の流速は等しくそれぞれが及ぼす力も等しいと考え、 \mathbf{u} は界面セルでの流体の速度、また空気の密度 ρ_A には流体の基準密度を用いる。界面での力の釣り合いを保つため、次式で求められる界面の傾き \mathbf{n} を考慮し、 $\mathbf{n} \cdot \mathbf{e}_{\tilde{i}} > 0$ が成り立つ場合、粒子分布関数を補完する。

$$\mathbf{n} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \varepsilon(\mathbf{x}_{l-1,m}) - \varepsilon(\mathbf{x}_{l+1,m}) \\ \varepsilon(\mathbf{x}_{l,m-1}) - \varepsilon(\mathbf{x}_{l,m+1}) \end{pmatrix} \dots (5)$$

ここで、 $\mathbf{x}_{l,m}$ はセルの座標を表している。なお、紫領域では赤および青粒子を含んでいるため、式 (4) で求めた値に含有比を乗じ、各粒子へ分配する。

$$f_i^k(\mathbf{x}, t + \Delta t) = f_i^k(\mathbf{x}, t + \Delta t) \times \frac{\rho_k}{\rho} \dots (6)$$

(3) 質量の計算

充填率 ε は、各セル内の質量 m と密度 ρ の比で表す。界面セルにおける質量の変化量は、次式のように隣り合うセル同士の粒子分布関数のやりとりから求める。

$$\Delta m_i(\mathbf{x}, t) = \begin{cases} 0 \\ f_i(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i, t) - f_i(\mathbf{x}, t) \\ (f_i(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i, t) - f_i(\mathbf{x}, t)) \frac{\varepsilon(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i, t) + \varepsilon(\mathbf{x}, t)}{2} \dots (7) \end{cases}$$

$$\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \in \begin{cases} G \\ F \\ IF \end{cases}$$

周囲の各セルとの質量の変化量を全方向に渡って足し合わせることで、次ステップでの質量が求まる。

$$m(\mathbf{x}, t + \Delta t) = m(\mathbf{x}, t) + \sum_{i=1}^9 \Delta m_i(\mathbf{x}, t) \dots (8)$$

(4) 界面セルの判定と変換

各セルの質量および密度の値から求めた流体の充填率 ϵ により, 界面セルが「流体で満たされた ($1 < \epsilon$)」か「空になった ($\epsilon < 0$)」かを判断し, セルの状態を変換する. ここで, 界面セルが流体で満たされた ($1 < \epsilon$), または空になった ($\epsilon < 0$) ということは, 界面が隣接するセルへ移動したということを意味する. そのため, 界面セルの変換に伴い, 周囲の隣接する流体セルまたは空隙セルが新たに界面セルに変換される (図-3). その際に元の界面セルにおいて生じる余分な質量 (多く流入しすぎた分 ($1 < \epsilon$) または, 流出しすぎた分 ($\epsilon < 0$)) は質量保存するように周囲の隣接セルへ分配する. このようにして1ステップ毎に界面セルを追跡することで自由表面の位置を決定する.

4. 二相流れの数値解析

(1) 水・油の混合

縦20cm×横20cm×奥行10cmの塩化ビニル製実験水槽を作成し, ゲート急開により発生する二相流れ場の再現実験を行った. 水槽をゲートにより二分し, 左側に着色した水を, 右側にキャノラ油を高さ4cmまで貯め, 手でゲートを急開した. LBMによる再現計算には表-2のパラメータを用い, 壁面境界条件は Slip 条件とした. 赤および青流体 (キャノラ油および水) の物性値は, $\rho_b/\rho_r = 1/0.9$ ($\lambda_b = 4.0$ および $\lambda_r = 3.1$), $\nu_b/\nu_r = 1/30$ ($\tau_b = 0.509$ および $\tau_r = 0.77$) とした.

図-4および図-5に実験結果と数値計算結果の比較を示す. 図-4は高速ビデオカメラで撮影した実験画像と数値計算結果の比較であり, 図-5は水槽内の各地点における水および油の各層の厚さの時間変化である. 実験値は画像から目視にて界面を抽出し求めた. なお, 数値計算結果は油を薄い灰色, 着色した水を濃い灰色で示している. ゲート急開後, 水が油層の下へ入り反対に油が水の上を広がる様子を再現されており, 界面形状についても概ね一致していることが確認できる. 水・油の界面や水・油・空気の間界についても安定して計算できており, 本モデルの自由表面探索アルゴリズムが妥当であるといえる. ただし, 実験同様油先端の方が水先端よりも早く側壁面に達するが, 数値計算では実験に比べ油先端の移動速度が遅くなっている. 図-5からも, A点においては誤差が比較的大きくなっていることがわかる. 特にA点の $t=0.8s$ から $1.2s$ 付近で誤差が大きいが, これは界面の移動速度が遅いためであると考えられる. その点を除くと

表-1 水・油の混合: 計算パラメータ

grid resolution	Δx (m)	Δt (s)	τ_b, τ_r
50 × 200	0.001	2×10^{-4}	0.509, 0.770

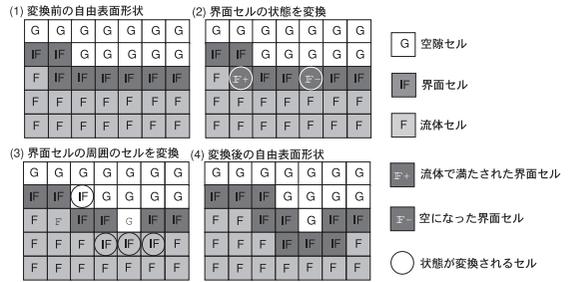


図-3 セル状態の変換 (Thürey (2003)を参考に作成)

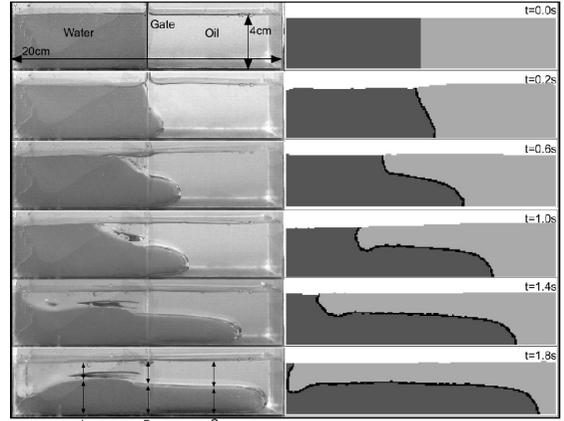


図-4 水・油の混合の界面形の時間変化 (左: 実験画像, 右: LBM)

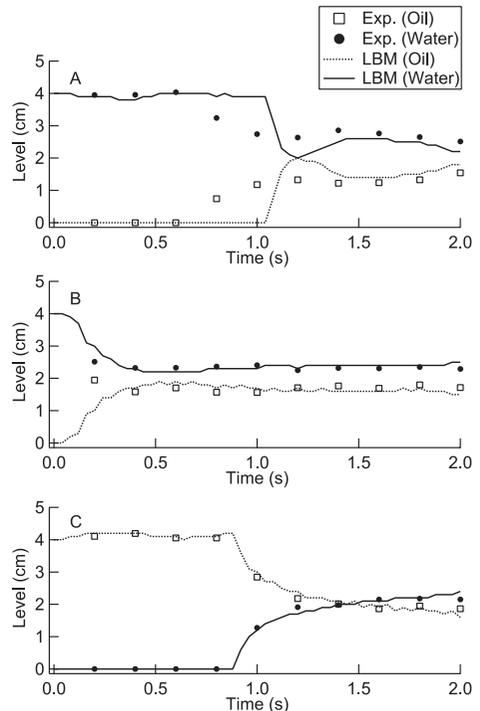


図-5 水および油の層厚の時間変化 (A: 左壁面から5cm, B: 中央, C: 右壁面から5cm)

A点の油の先端通過後やB点およびC点においては実験値と良く一致していることが確認できる。

(2) Violent flowにおける水・水の混合

次に、津波先端部のような激しい流れ場においてモデルの適用性を検証するため、ダムブレイク流れの再現計算を行なう。Janosiら(2004)の実験に倣い、計算領域を図-6のように設定し、水路の上流側には透明な水を、下流側には着色した水を溜め、ゲートを急開した。上流側の初期水深 d_0 は15cmとし、下流側水深 d は5mmから70mmまで変化させた。再現計算では上流および下流の水をそれぞれ同じ物性を持つ別の流体として扱い、計算パラメータは表-2の値を用いた。なおゲート急開の速度は1.0m/sと仮定した。

図-7および図-8に実験結果と数値計算結果の比較を示す。図-7は下流側水深 d を変化させた各ケースの比較である。透明な水は水圧が高い底面付近から流れ込み、着色水を押しのけ潜り込むように進む。数値計算結果は、実験と同様に透明な水が着色水を押しのけている。また下流側水深が高くなる程、水を押出す量が少なくなり同時刻での界面の移動距離は短くなるなど、実験と同様の挙動を示していることがわかる。細かな界面形状や碎波形状の再現性には課題が残るが、界面挙動を良く再現できていることが確認できる。図-8は $d=15\text{mm}$ の場合の界面形の時間変化の比較である。実験と同様に、前方だけでなく後方(上流側)へも碎波が起こりマッシュルーム型の界面形を呈する。前方への碎波は数値計算では先端が先鋭化する前に崩れており、細かな碎波形状までは一致していないが、碎波位置については概ね一致している。また、後方への碎波により激しい混合が生じているため正確な界面の抽出は難しいが、界面について概ね移動距離が一致していると判断できる。ただし図-8に見られる段波後方での混合拡散現象については、本モデルの適用範囲外であり完全な再現は難しい。以上から、細かな界面形状や碎波形状の再現性には課題が残るものの、本手法が激しい流れ場においても実用上十分適用可能であることがわかる。

表2 水・水の混合：計算パラメータ

grid resolution	Δx (m)	Δt (s)	τ_b, τ_r
200 × 1040	0.001	5×10^{-5}	0.518

(3) 津波侵入による油の移流を想定したテストケース

さらに本モデルの適用事例として、津波の陸上遡上に伴い広がる油を想定した数値計算を行ない、油の密度の違いによる挙動変化について検討する。臨海地域に貯蔵される種々の石油製品を想定し、油の比重は0.6から0.9まで変化させた。

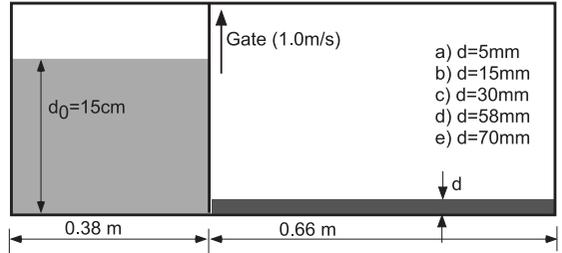


図-6 再現計算の諸元 (Janosiら, 2004)

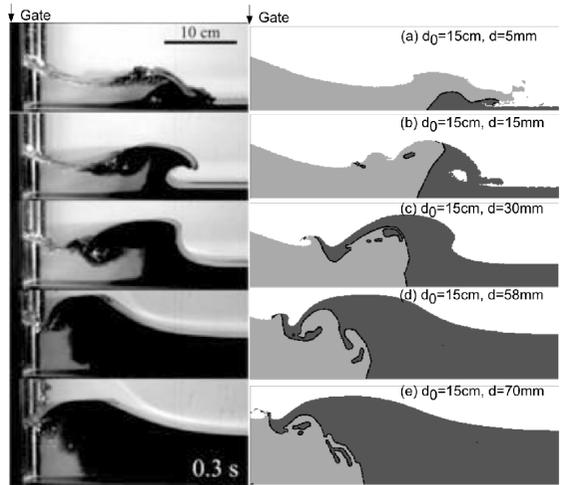


図-7 $t=0.3\text{s}$ でのスナップショット (左: Janosiら(2004)の実験, 右: LBM)

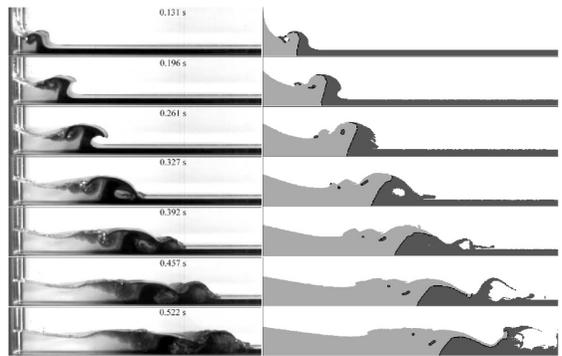


図-8 水の混合の界面形の時間変化 (左: Janosiら(2004)の実験, 右: LBM). 上流側水深 $d_0=15\text{cm}$, 下流側水深 $d=15\text{mm}$.

図-9には二流体の密度比が (a) 1:0.9および (b) 1:0.6の2ケースの比較を示す。ケース (b) では密度が大きいケース (a) に比べ油塊の移動速度が大きくなり、油塊が長い距離を移動する。本計算ケースでは水が油を巻き込んで進むような挙動は見られなかったが、数値計算が鉛直二次元の流れ場であることや、粗い解像度であることが原因であると考えられる。津波侵入による油の移流現象への適用へ向けて、今後は水理実験などから得られ

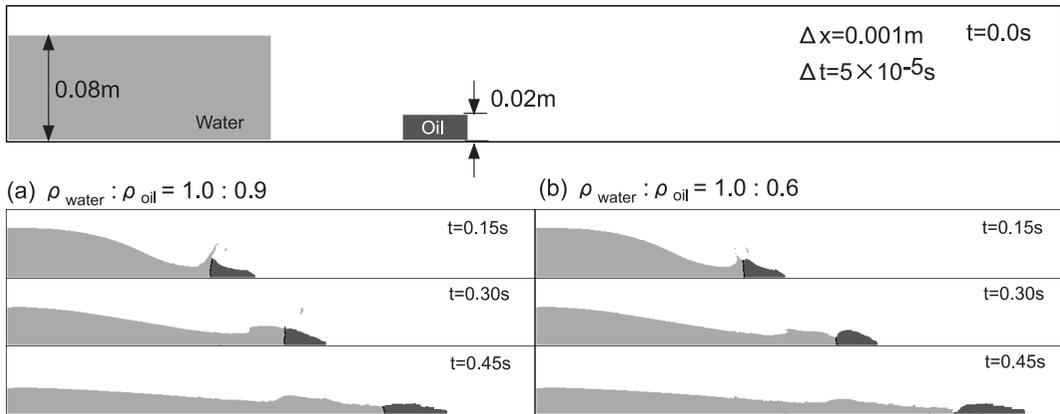


図-9 津波侵入による油の移流を想定したテストケース ((a) 密度比1 : 0.9, (b) 密度比1 : 0.6)

る結果との比較検証が必要である。

5. 結論

本研究で得られた結論を以下に列挙する。

二相流を対象としたLBMの自由表面探索アルゴリズムを構築し、水および油の混合現象の実験結果を用いて検証した。水・油・空気の界面を安定して計算することができ、自由表面および水・油の界面形状を良好に再現することができた。また水槽内の各地点における水・油の層厚の時間変化についても実験結果とほぼ一致し、本モデルによって自由表面を有する密度の異なる二相流れを精度よく計算可能であることが示された。

砕波を含む激しい流れ場における二相系LBMの再現性について、着色した水によるダムブレイク流れの実験と比較して検証した。水の激しい混合による複雑な界面形状や砕波の再現性には課題が残るものの、砕波位置や二流体の界面位置などは概ね一致しており、本モデルが複雑な流れ場に対しても有効であることが示された。

さらに、本モデルの適用事例として津波による油の流出や移流現象について、種々の石油製品を想定した油の巻き込み・移流現象を再現した。今後は水理実験などから得られる結果との比較検証が必要である。

また、本研究で開発した自由表面を含む二相系LBMでは、二流体の密度比が1:0.6程度まで計算できることを確認した。本モデルを基礎とし、物性の異なる様々な二流体の衝突現象を再現するモデルへと拡張していくことが今後の課題である。

謝辞：本研究の一部は科学研究費補助金（挑戦的萌芽、代表：越村俊一、課題番号：21651078）、および独立行

政法人原子力安全基盤機構（JNES）の補助を受けて実施された。ここに記して謝意を表する。

参考文献

- 荒木 健・越村俊一（2009）：格子ボルツマン法による自由表面流れの解析，海岸工学論文集，第56巻，pp. 56-60。
 大家隆行・越村俊一・荒木 健（2008）：格子ボルツマン法に基づく津波遡上シミュレーション手法の開発，海岸工学論文集，第55巻，pp. 221-225。
 渡辺 正（2006a）：格子ボルツマン法（1），ボルツマン方程式から格子ボルツマン方程式へ，応用数理，Vol. 16, No. 1, pp. 31-35。
 渡辺 正（2006b）：格子ボルツマン法（2），ボルツマン方程式からナビエーストックス方程式へ，応用数理，Vol. 16, No. 2, pp. 64-69。
 Chen, S. and G. D. Doolen (1998) : Lattice Boltzmann Method for fluid flows, Annual Review of Fluid Mechanics, 1998 Vol.30, pp. 329-364。
 Grunau, D., S., Chen and K., Eggert (1993) : A Lattice Boltzmann Model for Multi-phase Fluid Flows, Physics Fluids A 5 (10), 2557。
 Hirt, C. W. and B. D. Nichols (1981) : Volume of Fluid (VOF) Method for the Dynamics of Free Boundaries, Journal of Computational Physics, Vol. 39, pp. 201-225。
 Janosi, I. M., D. Jan, K. G. Szabo and T. Tel (2004) : Turbulent drag reduction in dam-break flows, Experiments in Fluids, Vol. 37, pp. 219-229。
 Körner, C., M. Thies, T. Hofmann, N. Thürey and U. Rüdte (2005) : Lattice Boltzmann Model for Free Surface Flow for Modeling Foaming, Journal of Statistical Physics, Vol. 121, (1-2), pp.179-196。
 McNamara, G. R. and G. Zanetti (1988) : Use of the Boltzmann Equation to Simulate Lattice-Gas Automata, Physical Review Letters, 61, pp. 2332-2335。
 Qian, Y. H., D. d'Humieres and P. Lallemand (1992) : Lattice BGK Models for Navier-Stokes Equation, Europhysics Letters, 17 (6), pp. 479-484。
 Thürey, N. (2003) : A single-phase free-surface lattice boltzmann method, University of Erlangen-Nuremberg, Master thesis, 60p.