



格子ボルツマン法による水平層状  
二相流の界面成長及び変形の数値解析

2005年3月

海老原 健一

日本原子力研究所  
Japan Atomic Energy Research Institute

本レポートは、日本原子力研究所が不定期に公刊している研究報告書です。

入手の問合せは、日本原子力研究所研究情報部研究情報課（〒319-1195 茨城県那珂郡東海村）あて、お申し越しください。なお、このほかに財団法人原子力弘済会資料センター（〒319-1195 茨城県那珂郡東海村日本原子力研究所内）で複写による実費領布をおこなっております。

This report is issued irregularly.

Inquiries about availability of the reports should be addressed to Research Information Division, Department of Intellectual Resources, Japan Atomic Energy Research Institute, Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki-ken 〒319-1195, Japan.

---

©Japan Atomic Energy Research Institute, 2005

編集兼発行 日本原子力研究所

## 格子ボルツマン法による水平層状二相流の界面成長及び変形の数値解析

日本原子力研究所計算科学技術推進センター

海老原 健一

(2005 年 1 月 24 日受理)

二相流は、原子力施設における炉心や熱交換器において見られる重要な現象の 1 つであり、そのような二相流現象を、数値的解析によって理解し、さらに予測するための技術は、原子炉や熱交換器の最適な設計及び安全な運転のために必要とされている。

現在、二相流の数値解析には、二流体モデルを用いた手法が広く用いられている。この手法では、流体を連続体とする巨視的な流体力学方程式を、二相界面や壁面での境界条件、流入流出境界条件のもとで、数値的に解くことによって二相流現象の解析を行なう。この時、二相界面や壁面における境界条件は、実験結果に従って得られるモデル(相関式や相関図)によって与えられるため、二流体モデルを用いた手法による二相流数値解析の精度は、実験やモデル化の精度に依存することとなる。

近年、計算機能力の著しい発達と、新たな数値解析手法の開発により、二相流の界面運動を伴う二相流の数値シミュレーションが可能となってきた。そのような状況において、1990 年代に、流体を空間格子上における粒子集合や粒子分布関数によって表現する格子ガス法及び格子ボルツマン法が提案され、それらの手法が二相流数値シミュレーションへ適用されるようになった。これらの手法の二相流体計算モデルの特徴は、粒子間相互作用の効果により二相界面の自発的な生成を計算できるため、界面位置や形状を追跡することなく二相流の数値シミュレーションが可能となることである。そのことから、格子ガス法や格子ボルツマン法は、実験に依存しない二相流数値解析の可能性、また二流体モデルに用いられる相関図や相関式の代替を与える可能性を持つと考えられる。

本論文では、まず、液滴落下や気泡上昇の現象に、格子ガス法及び格子ボルツマン法の二相流体モデルを適用し、その妥当性や有用性の検証を行なう。次いで、それらの結果に基づき、格子ボルツマン法の二相流体モデルであり、Rayleigh-Taylor 不安定性による複雑界面形状変化のシミュレーションへ適用されている He、Chen、Zhang のモデル(HCZ モデル)によって、基本的かつ重要であり、また実際の状況においてもしばしば見られる二相流動様式である水平層状二相流の数値シミュレーションを行なった。その結果、HCZ モデルによる界面の成長は、Kelvin-Helmholtz 不安定性理論に従い、理論的考察によって導かれた Taitel と Dukler の流動様式線図(T-D 線図)

の界面成長に関する曲線を再現できることが分かった。また、流路幅が狭い狭隘流路では、流れの三次元性の影響が顕著となることにより、T-D 線図で与えられる値より大きなみかけ流速が必要になることが明らかとなった。さらに、より複雑な界面現象を現す界面からの液滴発生の数値シミュレーションを行ない、液滴発生が起こる流動状態を示す Ishii と Grolmes の実験相関式が、実験結果の分布範囲において、再現可能であることが分かった。

これらの結果から、格子ボルツマン法 HCZ モデルによって複雑界面形状変化を伴う水平層状二相流の数値シミュレーションが可能であり、また理論的流動様式線図及び実験相関式の再現が可能であることが明らかとなった。また、本研究を通じ、このモデルのより実際的な二相流現象への適用を考慮した場合、実際的な密度比の再現や熱効果の導入など未だ解決すべき問題が存在することも分かった。

Numerical Analysis of Interfacial Growth and Deformation in Horizontal Stratified Two-phase Flow  
by Lattice Boltzmann Method

Ken-ichi EBIHARA

Center for Promotion of Computational Science and Engineering  
(Tokai Site)

Japan Atomic Energy Research Institute  
Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki-ken

(Received January 24, 2005)

Two-phase flow is one of the important phenomena in nuclear reactors and heat exchangers at nuclear plants. It is desired for the optimum design and safe operation of such equipment to understand and predict the two-phase flow phenomenon by numerical analysis.

In the present, the two-fluid model is widely used for the numerical analysis of two-phase flow. The numerical analysis method using the two-fluid model solves macroscopic hydrodynamic equations, in which fluid is regarded as continuum, with the boundary conditions at the wall, the inlet and outlet, and the interface between two phases. Since the interfacial and the wall boundary conditions utilized by this method are given as the model, such as the flow regime map and correlation, which is usually constructed on the basis of experimental results, the accuracy of the two-phase flow analysis using the two-fluid model depends on that of the utilized model or the experiment result for modeling.

Tremendous progress of the computer performance and the development of new computational methods make the numerical simulation of two-phase flow with the interfacial motion possible in recent years. In such circumstances, the lattice-gas method and the lattice Boltzmann method, which represent fluid by many particles or the particle distribution function on the spatial lattice, was proposed in 1990s and these methods are applied to the numerical simulation of two-phase flow. The main feature of the two-phase fluid model of those methods is the capability of the simulation of two-phase flow without the procedure for tracking the interfacial position and shape owing to the inter-particle potential generating the interface. Therefore it is expected that the lattice-gas method and the lattice Boltzmann method possess the predictability of the experiment by the numerical analysis of two-phase flow as well as the possibility of giving the substitute of the flow regime map and the correlation used by the two-fluid model.

In this paper, first, the validity and the usefulness of the lattice-gas model and the lattice Boltzmann method for the numerical analysis of two-phase flow are examined by applying the two-phase fluid model of these methods to the phenomena of the falling droplet and the rising bubble. Next, on the basis of the examination of its numerical results, the horizontal stratified two-phase flow, which is the fundamental and important flow and often observed in a practical situation, is simulated by use of the HCZ model that is the two-phase fluid model of the lattice Boltzmann method proposed by He, Chen, and Zhang. The HCZ model can simulate Rayleigh-Taylor instability which shows complex interfacial phenomena. It is verified that the simulated interfacial growth is subject to the Kelvin-Helmholtz instability theory and can reproduce the curve concerning the interfacial growth of the theoretical flow regime map proposed by Taitel and Dukler (T-D map). Furthermore, it is found that the interfacial growth in the channel with the narrow width needs more superficial flow velocity than that given by the T-D map. In the simulation of the droplet generation in the horizontal stratified two-phase flow, it is verified that the HCZ model can also reproduce the experimental correlation proposed by Ishii and Grolmes within the range of the distribution of experimental data.

According to the results of this report, it is found that the HCZ model of the lattice Boltzmann method can simulate complex interfacial phenomena in the horizontal stratified two-phase flow and reproduce the theoretical flow regime map and the experimental correlation. Considering the application of this model to more practical two-phase flow, it is also seen that this model has some problems which have to be solved, such as practical density difference, thermal influence and so on.

Keywords: Lattice Boltzmann Method, Horizontal Stratified Two-phase Flow, Interfacial Growth, Flow Regime Map of Taitel and Dukler, Droplet Generation, Experimental Correlation of Ishii and Grolmes, Computational Fluid Dynamics

## 目 次

1. 緒言 . . . . .	1
2. 二相流体格子法 . . . . .	3
2.1 格子ガス法 . . . . .	3
2.2 二相流体格子ガス法 . . . . .	4
2.3 格子ボルツマン法 . . . . .	6
2.4 二相流体格子ボルツマン法 . . . . .	8
2.5 格子ガス気液モデル及び格子ボルツマン法 HCZ モデル . . . . .	9
3. 格子ガス法の二相流シミュレーションへの適用 . . . . .	11
3.1 二相流体格子ガス法による二相流計算例 . . . . .	11
3.2 気液モデルによる液滴落下シミュレーション . . . . .	11
3.3 液滴落下シミュレーションに対する考察 . . . . .	14
3.4 気液モデルの二相流シミュレーションへの適用に関する考察 . . . . .	24
4. 格子ボルツマン法の二相流シミュレーションへの適用 . . . . .	25
4.1 二相流体格子ボルツマン法による気泡及び液滴挙動の計算例 . . . . .	25
4.2 HCZ モデルの界面特性 . . . . .	25
4.3 HCZ モデルによる気泡上昇及び液滴落下シミュレーション . . . . .	29
4.4 HCZ モデルの水平層状二相流シミュレーションへの適用に関する考察 . . . . .	35
5. HCZ モデルの二相界面における Kelvin-Helmholtz 不安定性の検証 . . . . .	36
5.1 Kelvin-Helmholtz 不安定性 . . . . .	36
5.2 二次元シミュレーションによる検証 . . . . .	37
5.3 三次元シミュレーションによる検証 . . . . .	40
6. HCZ モデルによる水平層状二相流の界面成長シミュレーション . . . . .	41
6.1 Taitel-Dukler 流動様式線図 . . . . .	41
6.2 水平層状二相流の界面成長シミュレーション . . . . .	42
6.3 Taitel-Dukler 流動様式線図との比較 . . . . .	47
7. HCZ モデルによる水平層状二相流における液滴発生シミュレーション . . . . .	50
7.1 Ishii-Grolmes 実験相関式 . . . . .	50
7.2 水平層状二相流における液滴発生シミュレーション . . . . .	51
7.3 Ishii-Grolmes 実験相関式との比較 . . . . .	63
8. 結言 . . . . .	85
謝辞 . . . . .	86
参考文献 . . . . .	87
付録 . . . . .	92

## Contents

1.	Introduction . . . . .	1
2.	Two-phase Fluid Lattice Method . . . . .	3
2.1	Lattice-gas Method . . . . .	3
2.2	Two-phase Fluid Lattice-gas Method . . . . .	4
2.3	Lattice Boltzmann Method . . . . .	6
2.4	Two-phase Fluid Lattice Boltzmann Method . . . . .	8
2.5	Liquid-gas Model of the Lattice-gas Method and the HCZ Model of the Lattice Boltzmann Method . . . . .	9
3.	Application of the Lattice-gas Method to the Two-phase Flow Simulation . . . . .	11
3.1	Examples of the Two-phase Flow Simulation by the Two-phase Fluid Lattice-gas Method . . . . .	11
3.2	Simulation of the Falling Droplet by the Liquid-gas Model . . . . .	11
3.3	Discussion of the Falling Droplet Simulation . . . . .	14
3.4	Discussion of Applicability of the Liquid-gas Model to the Two-phase Flow Simulation . . . . .	24
4.	Applicataion of the Lattice Boltzmann Method to the Two-phase Flow Simulation . . . . .	25
4.1	Examples of the Simulation of the Bubble and Droplet Behavior by the Lattice Boltzmann Method . . . . .	25
4.2	Interfacial Characteristics of the HCZ Model . . . . .	25
4.3	Rising Bubble and Falling Droplet Simulation by the HCZ Model . . . . .	29
4.4	Discussion of Applicability of the HCZ Model to the Horizontal Stratified Two-phase Flow Simulation . . . . .	35
5.	Verification of the Kelvin-Helmholtz Instability of the Interface of the HCZ Model . . . . .	36
5.1	Kelvin-Helmholtz Instability . . . . .	36
5.2	Verification by the 2 Dimensional Simulation . . . . .	37
5.3	Verification by the 3 Dimensional Simulation . . . . .	40
6.	Simulation of the Interfacial Growth in the Horizontal Stratified Two-phase Flow by the HCZ Model . . . . .	41
6.1	Flow Regime Map of Taitel and Dukler . . . . .	41
6.2	Simulation of the Interfacial Growth in the Horizontal Stratified Two-phase Flow . . . . .	42
6.3	Comparison with the Flow Regime Map of Taitel and Dukler . . . . .	47
7.	Simulation of the Droplet Generation in the Horizontal Stratified Two-phase Flow by the HCZ Model . . . . .	50
7.1	Experimental Correlation by Ishii and Grolmes . . . . .	50

7.2 Simulation of the Droplet Generation in the Horizontal Stratified Two-phase Flow	51
7.3 Comparison with the Experimental Correlation by Ishii and Grolmes	63
8. Summary and Conclusion	85
Acknowledgements	86
References	87
Appendices	92

This is a blank page.

## 1. 緒言

現在最も利用されている軽水炉では、炉心の燃料集合体から発生した熱を、冷却材である水を直接または間接的に蒸気に変化させることによって除去し、その蒸気をタービンに送り電力を得ている。さらに蒸気は復水器において水に戻り、再び炉心の熱の除去に用いられる<sup>(1)</sup>。軽水炉におけるこのタービン-復水系において、水と蒸気が混合した流動、つまり気液二相の流動現象が見られる。このことから、さまざまな条件下における気液二相流の状態を理解し、予測する技術は、軽水炉の最適な設計や安全な運転のために重要な要素の1つである。

気液二相流の流動状態は、各相の流体の物性や温度、流量、流れ方向、流路形状などの条件によって異なり、その違いは二相界面の幾何学的形態の違いとして現われる<sup>(2)</sup>。二相界面の形態は、流動機構や伝熱過程の特性に大きな影響を与えるため、気液二相流の研究では、界面の多様な幾何学的形態を幾つかの流動様式に分類し、各々の流動様式とその発生条件の関係を明らかにすることが必要であり、それらは、解析モデルや実験結果の考察に基づいて構築された流動様式線図や相関式として整理されている<sup>(3, 4)</sup>。解析モデルは、物理的な基本原理に基づいて作られており、流体や流動の条件を、物理的に妥当な範囲において変化させることができ、その範囲におけるすべての流動条件と流動様式との関係を示すことが可能である。しかし、それは、実際の流動を理想化し簡略化しているため、現実の状態を忠実に表現しているとは言いがたい。また実験では、ある流動条件を設定し、それに対応する実際の流動様式を再現することが可能であり、その条件と流動様式との関係を、測定精度の範囲において詳細に明らかにすることが可能である。しかし、あらゆる条件に対する実験を行なうことは不可能であることから、実験がなされていない条件の場合については、既存の実験結果からの類推に頼らざるを得ない。現在は、このような解析モデルや実験結果に基づき、幾つかの典型的な条件における気液二相流の流動様式線図や相関式が得られており、それらは流動様式の予測に用いられる。

一方、流体に対する方程式のモデル化によって得られる基礎式を計算機によって数値的に解くことにより、二相流の流動状態を予測する研究が行なわれている<sup>(5)</sup>。数値解析に用いられるモデルには、均質流モデル、スリップ流モデル、ドリフトフラックスモデル、二流体モデルなどがあり、それらは、対象とする流動、必要な精度、利用可能な計算機資源などによって使い分けられる。しかし、均質流モデル以外のモデルには、両相の速度比や界面における物理量の輸送に関する条件が、実験によって得られた相関式によって与えられるため、これらの計算モデルによって得られる数値解析結果は、実験相関式の精度に大きく依存することになる。つまり、計算機による二相流の数値解析の研究では、二相界面に関する十分な計算モデルや境界条件が得られていないのが現状であり、この分野では、実験によらない相関式や、相関式を必要としない数値計算手法の開発が進められている。

このような状況において、1980年代の終わりから1990年代にかけて、流体を数値計算することができる新たな計算手法として、格子ガス法<sup>(6)</sup>、格子ボルツマン法<sup>(7)</sup>が相次いで提案された。これらの手法は、計算格子上での粒子または粒子分布関数の状態の時間発展を計算し、それにより

流動を表現する手法であることから、総称的に格子法とも呼ばれている。格子法は、流体を連續体とする方程式を数値的に解き、流速や圧力などの物理量を直接得る従来の巨視的な手法と、分子動力学に代表される連続的な空間における粒子の運動によって流体を表す微視的な手法との間に位置し、両者の利点を併せ持つ計算手法である。つまり、流体の粒子的表現であることから、異なる種類の粒子の導入や粒子間相互作用の導入により容易に二相流の計算手法へ拡張が可能であり、また粒子分布を計算格子上において計算するため、分子動力学ほどの計算資源を必要としない。さらに、二相流の計算手法に拡張された格子法では、二相への自発的な分離を再現できることから、計算過程における二相界面の追跡などの特殊な処理を必要としない。従って、実験相関式を導入することなく、また界面の位置や形状を考慮することなく、二相流の計算が可能である。また、格子法によって計算された界面現象から、界面に関する相関式を作成し、これまでの実験相関式を代替する可能性も考えられる。しかし、格子法の二相流体モデルへの拡張が、直観的考察によるものや理論的考察によるものであるため、自発的に現われる二相界面が現実の界面の性質を有しているのか、また計算によって得られる二相流動は、実際の二相流現象を再現しているのか等の検証されるべき問題点がある。

以上のことから、本論文では、格子ガス法及び格子ボルツマン法を二相流体モデルに拡張した計算手法を用い、それらによって二相流のシミュレーションを試みる。さらに、シミュレーションにおける二相流の状態と界面形状との関係が、解析モデルや実験によって得られている結果を再現しているかを検証し、それぞれの手法の二相流シミュレーションへの適用について検討する。また、二相流のさまざまな流動様式の中で比較的簡単であるが、現実の状況でもしばしば現われる重要な流動様式である水平層状二相流のシミュレーションに、格子ボルツマン法の二相流体モデルを適用し、その界面現象を観察する。さらに、水平層状二相流の界面形状と流動状態との関係を表す流動様式線図や相関式の再現を試みる。本論文の構成は、以下に示す通りである。次章では、本研究で用いた格子ガス法の気液モデル、格子ボルツマン法 HCZ モデル (He, Chen, Zhang によって提案されたモデル) について記述する。第三章では、格子ガス気液モデルの界面特性を調べ、さらにそのモデルを单一液滴の落下現象のシミュレーションへ適用し、モデルの妥当性や有用性を検討する。第四章では、格子ボルツマン法 HCZ モデルの界面特性を調べた後、そのモデルを单一気泡の上昇現象及び单一液滴の落下現象のシミュレーションへ適用し、モデルの妥当性及び有用性を検討する。さらに、水平層状二相流への適用可能性を検討する。第五章では、水平層状二層流における Kelvin-Helmholtz 不安定性を調べることにより、格子ボルツマン法 HCZ モデルによる界面成長の定量的妥当性を検証する。第六章では、格子ボルツマン法 HCZ モデルを矩形断面流路内の水平層状二相流へ適用し、その結果の界面成長と流動状態の関係を、Taitel と Dukler の流動様式線図と比較する。さらに流路幅の界面成長への影響について議論する。第七章では、界面形状が複雑に変化する水平層状二相流における液滴発生現象へ、HCZ モデルを適用し、界面形状変化を観察すると共に実験相関式の再現を試みる。第八章で本論文をまとめると共に結論を述べる。

## 2. 二相流体格子法

本章では、まず、格子ガス法及び格子ボルツマン法の概要について記述する。さらに、これらの格子法に対する既存の二相流体モデルを比較し、本論文において用いた格子法の一成分二相流体モデルについて記述する。

### 2.1 格子ガス法

格子ガス法は、格子ガスセルオートマトン法とも呼ばれ、空間を離散化した格子上を離散化された速度で運動する粒子集団の状態によって、連続体である流体の運動をシミュレーションする計算手法である。当初、Hardy, Pazzis, Pomeau によって正方格子を用いた格子ガス法<sup>(8)</sup>が二次元の流体解析に用いられたが、正方格子の空間対称性が十分でないため、非粘性流体をシミュレーションするに留まっていた。その後、Frisch, Hasslacher, Pomeau は、三角形格子を用いた格子ガス法(FHP モデル)<sup>(9)</sup>が、非圧縮性の粘性流体をシミュレーションできることを示した。現在では、この FHP モデルが格子ガス法の標準モデルとなっている。

格子ガス法では、粒子の有無の状態をブーリアン数(1 または 0)によって表現し、その状態の時間変化を粒子の伝播(propagation)と衝突(collision)によって表現する(図 2.1)。粒子の伝播は、各格子点から図 2.2 に示す速度ベクトルに沿って隣接する格子点への粒子の移動であり、衝突は、各格子点での粒子数(質量)及び運動量を保存し、粒子の向きを変える操作である。衝突の規則(衝突則)によって FHP モデルには、いくつかの種類が存在し、その代表的なモデルが、FHP-I、FHP-II、FHP-III である<sup>(10, 11)</sup>。これらのモデルと衝突則との関係を図 2.3 に示す。この中で FHP-III モデルは、二体衝突、三体衝突、停止粒子を含む衝突、衝突によって向きを変えない粒子を含む衝突、これらの粒子の有無を反転させた衝突を含む一般的なモデルである<sup>(10, 11)</sup>。このような粒子の運動を表した方程式に対して、分子カオス仮定のもとで統計平均操作を行ない、Chapmann-Enskog 展開及び低 Mach 数展開を施すことにより、非圧縮性の粘性流体に対する巨視的な方程式(非圧縮性 Navier-Stokes 方程式)を得ることができる<sup>(6, 10, 12)</sup>。このことは、格子ガス法が非圧縮粘性流体をシミュレーションする計算手法であることを示している。(付録 A に非圧縮性 Navier-Stokes 方程式の導出について記す。)

三次元格子ガス法の場合、二次元の場合と同様、粘性流体を表すためには十分な空間対称性を持つ格子が必要となる。しかし、三次元空間において最も対称性が高い立方格子でさえ、必要な空間対称性を得ることができない<sup>(13)</sup>。この困難を解決するため、d'Humieres 等は、三次元空間の面心立方格子(Face-Centered Cubic 格子:FCC 格子)を四次元空間に拡張した面心超立方格子(Face-Centered HyperCubic 格子:FCHC 格子)を使うことにより、巨視的極限で、三次元の非圧縮性 Navier-Stokes 方程式を導出できることを示した<sup>(14)</sup>。さらに、FCHC 格子での粒子の運動を三次元空間に射影することにより、格子ガス法によって三次元の粘性流体を表現することができることが示された<sup>(15)</sup>。付録 B に、空間対称性と Navier-Stokes 方程式の導出との関係及び FCHC

格子の詳細について記述する。

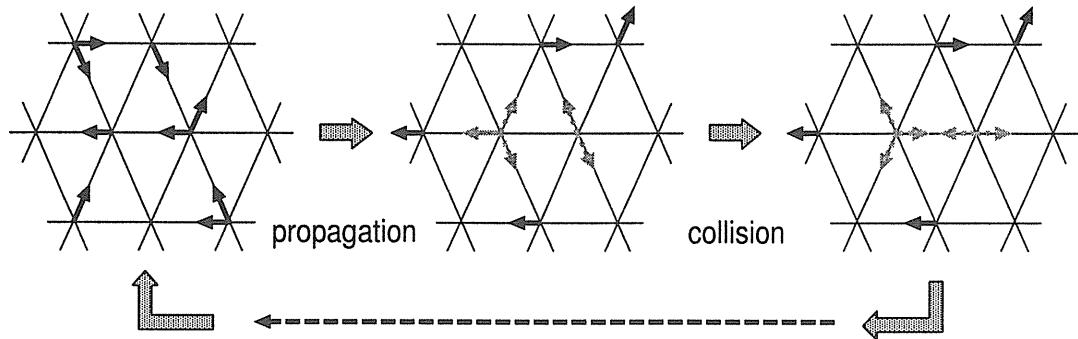


Fig. 2.1 Evolution of particles in the lattice-gas method: The arrow on the lattice represents the particle and the direction of the gray arrows changes after the collision operation.

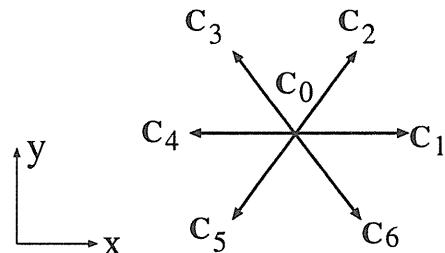


Fig. 2.2 Microscopic particle velocity: The particle with zero speed is shown by  $C_0$ .

## 2.2 二相流体格子ガス法

前節の単相流体の格子ガス法に対して、粒子の伝播・衝突以外に、粒子間の相互作用を導入することにより、格子法を二相流体モデル(6, 12)へ拡張することができる<sup>1</sup>。この拡張には、大きく分けて二つの方法がある。一つは、異なる二種類の粒子を導入し、互いの粒子間に相互作用を導入する方法であり、もう一つは、同種の粒子間に相互作用を導入する手法である。前者は、二成分の二相流体格子ガスモデルであり、混じり合わない二種類の流体の凝集・分離をシミュレーションすることができることから非浸透格子ガスモデルと呼ばれている。後者は一成分の二相流体格子ガスモデルであり、水と水蒸気のように、同一成分で密度の異なる二相への相分離をシミュ

<sup>1</sup> 三相以上のモデルへの拡張は、基本的に二相流体モデルへの拡張と同様に成される。

N	x	y	Pattern	I	II	III	N	x	y	Pattern	I	II	III		
0	0	0		1	No	No	7	0	0		1	/	No	No	
1	0	0		1	/	No	No	6	0	0		1	No	No	No
1	2	0		6	No	No	No	6	2	0		6	/	No	No
2	0	0		3	O	O	O	5	0	0		3	/	No	O
2	2	0		6	/	O	O	5	2	0		6	No	No	O
2	2	0		6	No	O	O	5	2	0		6	No	No	O
2	3	2		6	No	No	No	5	3	2		6	/	No	No
3	0	0		3	/	O	O	4	0	0		3	No	No	O
3	0	0		2	O	O	O	4	0	0		2	/	O	O
3	2	0		6	No	No	No	4	2	0		6	No	No	O
3	2	0		6	No	No	No	4	2	0		6	No	No	O
3	3	2		6	/	No	No	4	3	2		6	No	No	No
3	4	0		6	No	No	No	4	4	0		6	/	No	No

Fig. 2.3 The collision rule of FHP models: The number of particle and the two components of momentum are shown as N, x, and y, respectively. The particle configuration before the collision is shown as "Pattern" and each FHP model is shown as I, II, and III. The number in the "Pattern" column means the number of configurations which can be identified with each other by the rotational symmetry of the lattice. No collision operation is represented as "No" and no particle configuration is represented by the diagonal line. The circle means that the collision operation can be applied. The arrow with two heads means that the particle configurations exchange each other with a certain probability.

レーションできることから格子ガス気液モデルと呼ばれている。これらの二相流体格子ガス法では、自発的な相分離過程、さらに二相界面挙動をシミュレーションすることが可能である。

非浸透格子ガスモデルは、Rothman と Keller によって最初に提案され<sup>(16)</sup>、モデル開発時に、赤と青によって粒子の種類を区別していたため、赤青モデルとも呼ばれている。二種類の粒子間には、粒子の種類(色)に対する流束(フラックス)と場(フィールド)の概念を用いた相互作用を導入している。流束は、各格子点における各々の種類の粒子に対する運動量の差によって、場は、各格子点の隣接格子点における各々の種類に対する粒子数の差の総和によって定義され、この流束と場の内積から計算される仕事量を最小にするように、各格子点において粒子を並べ替え、これを相互作用としている。このモデルは、スピノーダル分解による相分離現象をシミュレーションすることができる。

格子ガス気液モデルは、Appert と Zaleski によって最初に提案され<sup>(17)</sup>、ある距離離れた格子点上の同種の粒子間に相互作用(長距離相互作用:図 2.4)を導入している。この長距離相互作用では、図 2.4 で示すように、相互作用を施す 2 つ格子点における粒子の質量と運動量を保存し、粒子の向きを内側に向ける操作を行なう。このモデルは、巨視的極限において、van der Waals の気液理論<sup>(18)</sup>と類似した状態方程式をもち、それは、

$$p = ad - brf(d), \quad (2.1)$$

の形で書くことができる。ここで  $p$  は圧力、 $d$  は換算密度(粒子密度を 1 つの格子点の最大粒子数で割った値:  $0.0 < d < 1.0$ )、 $r$  は長距離相互作用距離、 $f(d)$  は換算密度の多項式を表す。また、 $a$ 、 $b$  は定数であり格子形状や長距離相互作用の種類に依存する。この式は、 $r$  の値によって  $\frac{\partial p}{\partial d} > 0$  または  $\frac{\partial p}{\partial d} < 0$  となり、前者の場合、密度の増加に伴い圧力も増加するので安定であるが、後者の場合、密度の増加によって圧力が減少するので不安定となる。この不安定領域において高密度相と低密度相への相分離が起こる。このように長距離相互作用の距離は温度に対応した働きをしている。さらに、このモデルは、導入する長距離相互作用の種類の違いによって区別することができ、最も簡単な場合は、図 2.4 の(a)のみの相互作用を導入している最小相互作用モデル(minimal interaction model)である<sup>(19, 20)</sup>。このモデルに対して、図のすべての相互作用を含んだモデルを最大相互作用モデル(maximal interaction model)としている<sup>(21)</sup>。二次元の場合は、この両モデルについての開発が報告されている<sup>(22, 23)</sup>が、三次元の場合には、最小相互作用モデルの開発が報告<sup>(19, 20)</sup>されているのみである。

### 2.3 格子ボルツマン法

格子ボルツマン法は、当初、格子ガス法に内在する非物理的な保存量、統計的雑音、非ガレリオ不变性などを取り除くため、格子ガス法を統計平均することによって得られた<sup>(24, 25)</sup>。そのため、格子ボルツマン法の基礎方程式は、格子上の粒子(ブーリアン数)ではなく、粒子分布関数(実数)の状態に対する時間発展として表現される。また、この手法も、格子ガス法と同様の理由により、非圧縮性 Navier-Stokes 方程式に従う流体を表している。

さらに、格子ガス法から引き継いだ衝突項の複雑さを回避するため、衝突項を、1 つの緩和時間による粒子分布関数の局所平衡粒子分布関数への緩和(BGK 近似<sup>(26)</sup>)とした格子ボルツマン

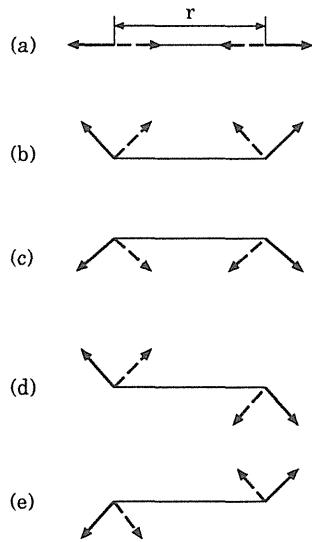


Fig. 2.4 Long range interaction : The direction of the solid arrow changes to the direction of the dashed arrow after the interaction. The distance of the long range interaction is  $r$ .

法が提案された(27, 28)。このBGK近似を採用した格子ボルツマン法では、その基礎方程式の巨視的極限が非圧縮性 Navier-Stokes 方程式となるように、Maxwell-Boltzmann 分布と仮定した局所平衡分布関数の離散形を決定する(29)。そのため、格子の空間対称性への依存性は局所平衡分布関数に吸収され、格子の対称性に対して格子ガス法ほどの厳しい制限がなく、二次元及び三次元の格子ボルツマン方程式を同様の手続きによって得ることができる。既存のモデルとして、二次元 7 速度格子(六角格子)、二次元 9 速度格子(対角線上の速度方向を持つ正方格子)、三次元 15 速度格子(面及び頂点への速度方向を持つ立方格子)、三次元 19 速度格子(面及び辺への速度方向を持つ立方格子)、三次元 27 速度格子(面、辺、頂点への速度方向を持つ立方格子)が存在する<sup>2</sup>(24, 29, 30)。現在では、主に、このBGK近似の衝突項を持つ格子ボルツマン法が流動解析に用いられている(7, 31)。

この格子ガス法からの格子ボルツマン法の導出とは別に、従来のボルツマン方程式を離散化することによって、同等の格子ボルツマン方程式を導出する方法も提案されている(30, 32)。この方法では、粒子間力や外力を含んだボルツマン方程式からでも機械的に格子ボルツマン方程式が導出できるため、二相流体格子ボルツマン法の基礎方程式を導出する場合にも有用である(33, 34)。

---

<sup>2</sup> Q 速度格子とは、1つの格子点から Q 方向へ分布関数が伝播することを意味する。格子点上に留まる場合も含む。

## 2.4 二相流体格子ボルツマン法

格子ボルツマン法についても、格子ガス法と同様に、二相流体格子ボルツマン法への拡張が可能であり、その拡張方法の違いによって幾つかの異なるモデルが存在する。また、それぞれの拡張方法は、一成分モデル、二成分モデル、または両方のモデルを得るために用いることができる。以下には、代表的な拡張方法によって得られる二相流体格子ボルツマン法のモデルについて記述する。

Gunstensen 等による方法<sup>(35)</sup>は、格子ガス法の非浸透格子ガスモデルを自然に発展させ、二成分の非浸透流体に対する格子ボルツマン法を得るものである。さらに、このモデルは、Grunau 等<sup>(36)</sup>によって密度と粘性が可変となるよう改良された。

Shan と Chen による方法<sup>(37, 38, 39)</sup>は、格子間ポテンシャルを導入し、その効果による粒子の運動量の変化を運動量流束テンソルの変化として、単相の格子ボルツマン方程式に加えることにより、一成分二相流体格子ボルツマン法を構築している。また、この方法では、二種類の粒子を導入し、粒子間ポテンシャルの形を変えることにより、二成分二相流体格子ボルツマン法を得ることもできる。この方法は、多粒子系の微視的粒子間相互作用のモデル化であり、格子ガス気液モデルの発展と見ることもできる。また、この方法の局所平衡分布関数は、Maxwell-Boltzmann 分布の離散形となっている。

Swift 等による方法<sup>(40, 41)</sup>は、van der Waals によって提案された、密度が非均質な等温度場に対する自由エネルギーを導入し、これから導かれる圧力を圧力テンソルへ組み込むことによって一成分二相流体に対する格子ボルツマン方程式を得ている。この方法では、非理想流体に対する非局所的な熱力学的性質を反映させるため、Maxwell-Boltzmann 分布の平衡分布関数に非局所的な項を加える必要がある。この方法でも、二種類の粒子を導入することによって二成分二相流体モデルを得ることができる。

Qain と Chen の方法<sup>(42)</sup>は、単相の格子ボルツマン方程式に仮想的な外力項（擬似ポテンシャル）を加え、二相流体格子ボルツマン方程式を得ている。さらに Seta 等<sup>(43)</sup>は、擬似ポテンシャルの形を変え、Swift 等の方法と同一の圧力テンソルを得ている。つまり、擬似ポテンシャルによる方法では、Swift 等の方法において平衡分布関数の Maxwell-Boltzmann 分布からずれを仮想的な外力項と見なしている。さらに、仮想的な外力項の形状を適切に選ぶことにより、擬似ポテンシャルの方法によって、Shan と Chen の方法で得られる二流体格子ボルツマン方程式を得ることもできる<sup>(31)</sup>。

He, Chen, Zhang の方法<sup>(33, 44)</sup>は、密な流体を表している Enskog 方程式<sup>(46)</sup>に含まれる粒子間力と同等な粒子の排体積効果と粒子間引力効果を外力項としてボルツマン方程式に加え、その式を離散化し一成分二相流体格子ボルツマン方程式を導出している。さらに、彼等は、一成分二相の界面付近の急激な密度勾配に起因する計算上の数値不安定性を抑えるため、新たな分布関数を導入し、計 2 つの格子ボルツマン方程式を用い、一成分二相流の解析を行なっている<sup>(44)</sup>。

## 2.5 格子ガス気液モデル及び格子ボルツマン法 HCZ モデル

以上のように、格子ガス法及び格子ボルツマン法に対し、幾つかの二相流体格子法が提案されている。これらの中から、本研究で用いた格子ガス気液モデル及び格子ボルツマン HCZ モデルの詳細について記述する。

格子ガス法については、2.1 節で示した最も一般的な FHP-III 衝突則を採用し、2.2 節で記述した一成分二相流体を表現できる格子ガス気液モデルの二次元最大相互作用モデル、二次元最小相互作用モデルを用いた。それぞれのモデルの状態方程式は、

$$\begin{aligned} p &= 3d - 2rd^2(1-d)^2 \left[ 1 + \frac{1}{2}(1-d)^4 + d(1-d)^3 + \frac{3}{2}d^2(1-d)^2 + d^3(1-d) + \frac{1}{2} + d^4 \right] \\ &\quad (2D \text{ maximal interaction model}) \quad (2.2) \\ p &= 3d - 3rd^2(1-d)^2 \\ &\quad (2D \text{ minimal interaction model}) \end{aligned}$$

と書ける(19, 21)。この式において、 $d, r, p$  は、それぞれ、2.2 節で示した換算密度、長距離相互作用距離及び圧力である。それぞれの  $r = 9$  の場合の状態方程式を図 2.5 に示す。さらに、図には、シミュレーションによって測定した換算密度に対する圧力を示してある。圧力の測定は、格子ガス気液モデルの場合に用いられる文献(47)の方法を用いて行なった。この図において、どちらのモデルの場合も  $\frac{\partial p}{\partial d} < 0$  の不安定領域では状態方程式から離れ、圧力がほぼ一定の線上に並び、Maxwell 構造(18)を形成している。また、不安定領域以外において測定結果が状態方程式からはずれる部分は準安定領域であり、核生成の機構により相分離が起こる領域である。これら不安定領域及び準安定領域以外は安定領域であり、測定結果が状態方程式とほぼ一致している。

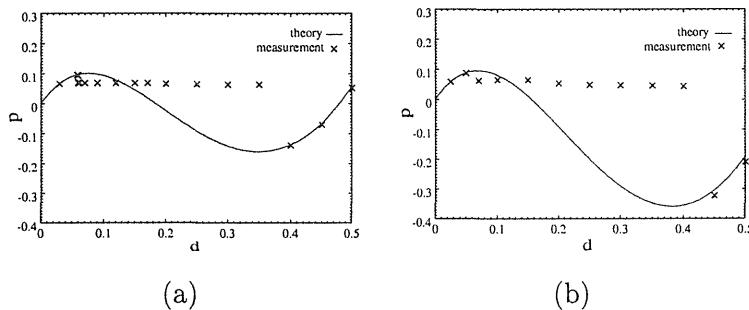


Fig. 2.5 Equation of state for (a)2D maximal interaction model, (b)2D minimal interaction model: The measurement values are also shown.

格子ボルツマン法については、幾つかの一成分二相流体のモデルが提案されている。これらのいずれのモデルも、巨視的極限において、界面張力を含む非理想流体の挙動を表す運動方程式を与えることから、巨視的にはほぼ同等と考えられる。しかし、微視的な粒子間相互作用の付加の方法に対して相違がある。その中で、He, Chen, Zhang の方法に基づくモデル(33, 44)は、粒子間引力を付加した密な流体を表現する Enskog 方程式を離散化することによって格子ボルツマン方程式を導出しており、その物理的基礎が明確であり、また、二つの分布関数を用い、二相界面付近の急激な密度勾配に起因する数値不安定性を軽減させ、複雑界面現象が生じる Rayleigh-Taylor

不安定性の数値的に安定なシミュレーションをしている(44, 45)。これらのことから、He 等のモデルは本研究の目的に合致したモデルと考えられる。このことから、一成分二相流体格子ボルツマン法として、He, Chen, Zhang が提案した HCZ モデルを採用した。HCZ モデルの基礎方程式の導出については、付録 C に記述する。

### 3. 格子ガス法の二相流シミュレーションへの適用

本章では、まず、二相流体格子ガス法の二相流シミュレーションへの適用例を紹介する。次に、液滴落下現象のシミュレーションを通じて、格子ガス気液モデルの二相流シミュレーションへの適用についての妥当性及び有用性を検討する。尚、本章は主に文献(21, 22)に基づき記述する。

#### 3.1 二相流体格子ガス法による二相流計算例

二相流体格子ガス法の二相流及び界面挙動への応用は、多くの研究者によって報告されている。非浸透格子ガスモデルによるものには、液滴の変形と衝突<sup>(48, 49)</sup>、界面の分裂や液滴の落下<sup>(50)</sup>、対向流界面の乱れ<sup>(51)</sup>、攪拌槽による混合<sup>(52)</sup>、分離混合時の界面積変化<sup>(53)</sup>、成分流体の凝集、分離<sup>(54)</sup>、液滴の微粒化<sup>(55)</sup>等であり、これらすべて二次元モデルによるものである。また、三次元シミュレーションによる例として、文献<sup>(56)</sup>に微粒化、文献<sup>(57)</sup>に凝集、分離が報告されている。格子ガス気液モデルによるものは、重力場中の波の振動<sup>(58, 59)</sup>、狭隘流路への浸透<sup>(60)</sup>等がある。これらから、格子ガス気液モデルについては応用例があまり見られない。従って、本論文では、格子ガス気液モデルの典型的なモデルである最大相互作用モデルと最小相互作用モデルを用いて、重力を想定した外力場中での液滴落下のシミュレーションを行なった。その結果において、液滴形状や流速分布を観察し、さらに液滴形状及び終端速度とそれらに関する無次元数の関係を Grace の実験相関図<sup>(61)</sup>と比較し、このモデルの二相流シミュレーションへの適用妥当性や有用性を検討した。

#### 3.2 気液モデルによる液滴落下シミュレーション

##### 3.2.1 重力モデル

まず、液滴に作用する重力を想定した外力について検討する。格子ガス気液モデルに対する重力を想定した外力については、文献<sup>(58, 59, 60)</sup>に報告されている。これらの文献では、ある確率で格子点を選択し、選択された格子点上のある方向の粒子の向きをある方向へ変えることによって与えている。よって、この外力は、格子点を選択する確率以外に、向きを変えられる粒子が存在する確率と、向きを変える方向に粒子が存在しない確率にも依存することになる。例えば、計算格子全体に粒子が定常的に一様に分布している場合<sup>1</sup>、格子点の一つの方向に粒子が存在する確率は、換算密度  $d$  に等しいことから、外力の大きさは  $d(1 - d)$  に比例する。また、本論文で用いている FHP-III 衝突側の場合、1 つの格子点に存在できる粒子の数が 7 であり、換算密度  $d$  と密度  $\rho$  には  $\rho = 7d$  の関係がある。よって、外力は  $\rho(1 - \rho/7)$  に比例することとなる。一方、外力が重力であることを想定した場合、外力項は密度に比例する必要がある。そこで、本論文では、計

<sup>1</sup> ある格子点のある方向において、粒子は常に存在しているのではなく、その格子点のその方向をある時間観測した時、粒子はある割合（確率）で現われる。その確率がどの格子のどの方向でも等しい場合を定常的に一様と称している。

算格子全体をそれぞれが同数の格子点を含む複数の正方形のセルに分割し、各セル内の全格子点の平均換算密度  $d_{cell}$  を計算し、各セル内において格子を選択する割合を、定数  $\alpha$  と  $1/(1 - d_{cell})$  の積で与えることとした。これにより、外力の大きさは  $d$  に近い値に比例することになる。実際、このことの確認のため、 $x \times y = 360 \times 720$  の計算格子に一様に分布させた粒子に対して、定数  $\alpha = 0.0002$  で外力を与えるシミュレーションを行なった。外力は、計算格子を  $9 \times 9$  の格子点を含む正方形のセルに分割し、それぞれのセルにおいて  $\alpha/(1 - d_{cell})$  の割合で格子点を選択し、選ばれた格子点において図 2.2 に示す  $c_2, c_3$  方向の粒子をそれぞれ  $c_6, c_5$  に向けることによって与えた。つまり  $-y$  方向に外力を与えたことになる。また、比較のため、文献(58, 59, 60) で報告されている外力の与え方の場合についても同様なシミュレーションを行なった。その結果を換算密度に対する計算格子全体の運動量(外力を与えることにより全体の運動量が変化する。)の関係として図 3.1 に示す。この図から、文献(58, 59, 60) の方法は、全運動量が  $d(1 - d)$  に比例しているが、ここで導入した方法では、 $d$  に比例していることが分かる。この結果から、本論文で示した外力の付加方法は、これまでの方法より適切に重力を模擬していると考えられるので、以下における液滴落下シミュレーションでは、ここで導入した方法で与える外力を重力として用いる。

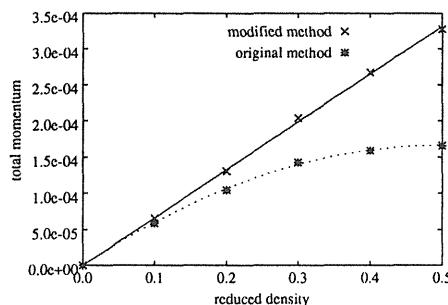


Fig. 3.1 Comparison of the external force between the original and modified methods

### 3.2.2 シミュレーション結果

第 2 章で示した格子ガス気液モデルの最大相互作用モデルと最小相互作用モデルに対して、前述の重力モデルを適用し、液滴落下シミュレーションを行なった。シミュレーション条件は、計算格子を  $x \times y = 360 \times 720$ 、長距離相互作用距離を  $r = 9$ 、換算密度を  $d = 0.07$  とした。上下方向の境界は「跳ね返り壁」境界(6, 12)、左右方向は周期境界とした。「跳ね返り壁」境界の格子点では、粒子の向きを反転させる操作を行なう。初期状態は、計算格子の上方の境界付近に生成した円形の高密度相(本論文において、これを液滴と呼んでいる。)が平衡に達した状態とした。この初期状態に達した液滴に対して、前節で導入した外力を  $\alpha = 0.0002$  で与え、その変形の様子を観察した。最大相互作用モデル及び最小相互作用モデルによるシミュレーション結果の粒子密度分布及び流速分布を、それぞれ図 3.2 及び図 3.3 に示す。これらの図では  $18 \times 18$  の領域で粗視化した結果を示している。図 3.2 における密度分布では、液滴は上下に扁平した橢円形に変形し、下方へ移動している様子が見られる。また流速分布では、液滴の後に渦が見られる。この結果は、重力によって落下する現実の液滴の変形及び流速分布と類似していることがわかる。しかし、図 3.3 における密度分布では、液滴が外力方向へ延び、左右に潰れた形状となっている。また、流速分布では、液滴の左右に渦が見られる。

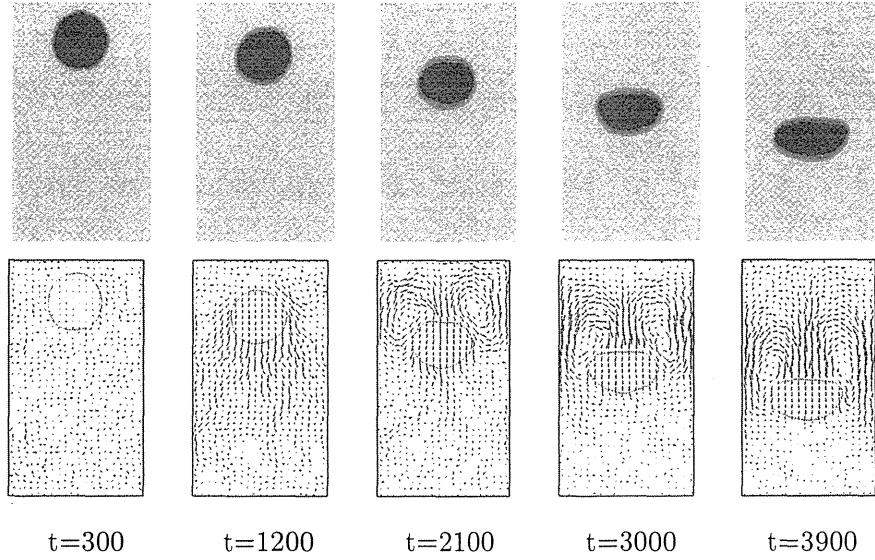


Fig. 3.2 Density and flow velocity distribution of the falling droplet simulation by the 2D maximal interaction model with the modified external force: The upward direction is the  $y$ -direction and the rightward direction is the  $x$ -direction. The droplet moves in  $-y$  direction.

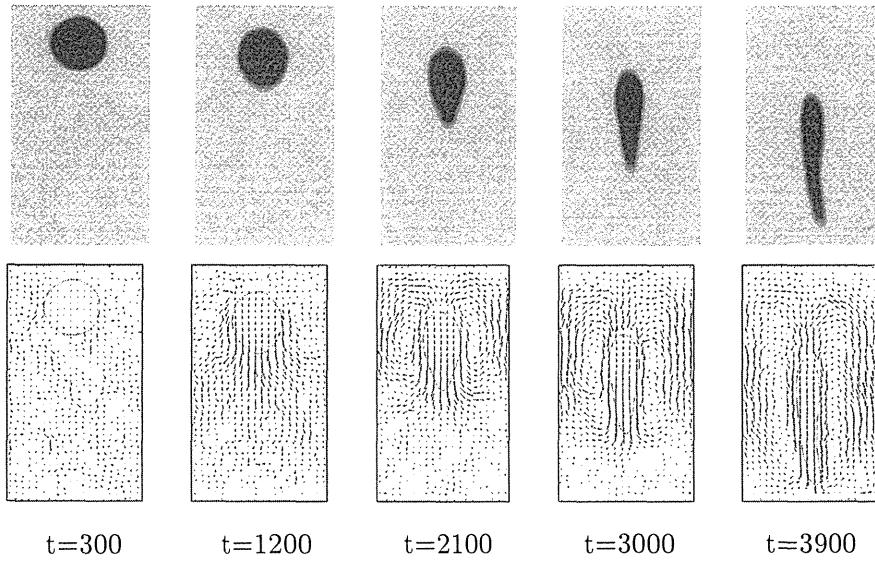


Fig. 3.3 Density and flow velocity distribution of the falling droplet simulation by the 2D minimal interaction model with the modified external force: The upward direction is the  $y$ -direction and the rightward direction is the  $x$ -direction. The droplet moves in  $-y$  direction.

### 3.3 液滴落下シミュレーションに対する考察

#### 3.3.1 最大及び最小相互作用モデルにおける液滴形状の相違について

前節の液滴落下シミュレーションにおいて、最大相互作用モデルの場合と最小相互作用モデルの場合において、液滴形状に相違が見られた。最大相互作用モデルの場合は、外力方向に液滴が扁平したのに対し、最小相互作用モデルの場合は、外力方向に延びていた。これは、モデルに含まれる相互作用の種類が異なることによると考えられる。現実の液滴は、液滴界面付近の圧力は等方的であり、液滴の移動方向にある外部の流体から受ける抗力と重力によって、重力(外力)方向に扁平する。このことから、最小相互作用モデルにおける液滴周囲の圧力分布が、最大相互作用モデルのそれと異なっていると考えられる。そして、この相違は、長距離相互作用の違いによって引き起こされていると考えられる。格子ガス気液モデルでは、圧力は、格子点の各方向に沿った運動量移動量の和によって表される(19, 47, 62)。そこで、両モデルにおいて圧力の等方性を調べるために、格子の各方向の運動量移動量を測定した。

この測定では、 $d = 0.15$ 、 $r = 9$ と設定し、 $x \times y = 360 \times 720$ の計算格子に、 $x$ 方向中央に位置する $y$ 方向に沿った帯状高密度相を生成し、それが平衡となった状態で、 $\alpha = 0.0002$ の外力を $-y$ 方向に作用させることによって行なった。計算格子の境界は、 $x$ 方向、 $y$ 方向を周期的とした場合と、 $x$ 方向を「跳ね返り壁」境界、 $y$ 方向を周期的とした場合の二通りを用いた。この測定の計算において、計算格子を $18 \times 18$ の領域に分割し、各領域において、300ステップ毎に格子の各方向の運動量移動量、換算密度、流速の300ステップでの平均値を測定した。格子の方向は、図2.2において、 $c_1c_4$ に沿った方向を方向1、 $c_2c_5$ に沿った方向を方向2、 $c_3c_6$ に沿った方向を方向3とした。両モデルの場合についての結果を図3.4に示す。この図では、外力によって発生した流速の大きさによって、この測定結果を分類し示している。この図において $v = a$  ( $a = 0.05, 0.1, 0.15, 0.2$ )に分類されたグラフには、 $v = a \pm 0.025$ の範囲の流速を持つ測定値を含んでいるため測定値の分布に幅が見られる。図には、流速に依存する換算密度

$$d_i(\mathbf{v}) = d + \frac{7}{3}d\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{v} + d\frac{49}{18}\frac{1-2d}{1-d} \left[ (\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{v})^2 - \frac{3}{7}v^2 \right], \quad (3.1)$$

を、各モデルの状態方程式に代入して得られた理論曲線を示した。また、運動量移動量については、測定値の3倍の値を表示している。この図から、最大相互作用モデルでは、各格子方向の運動量移動量がどの流速の場合もほぼ同じであるが、最小相互作用モデルでは、方向1の運動量移動量の傾向が方向2及び方向3の運動量移動量の傾向と異なっていることが分かる。流速が大きくなった場合、この格子の方向による違いが、換算密度の大きいところで顕著になっている。この結果から、最小相互作用モデルによる液滴落下シミュレーションでは、換算密度が大きい液滴内部において、方向1の運動量移動量が方向2及び方向3の運動量移動量より小さくなることにより、圧力の非等方性が生じ、液滴は、運動量移動量が大きい方向2及び方向3に沿った方向へ延び、運動量移動量が小さい方向1に沿った方向に潰れていると考えられる。

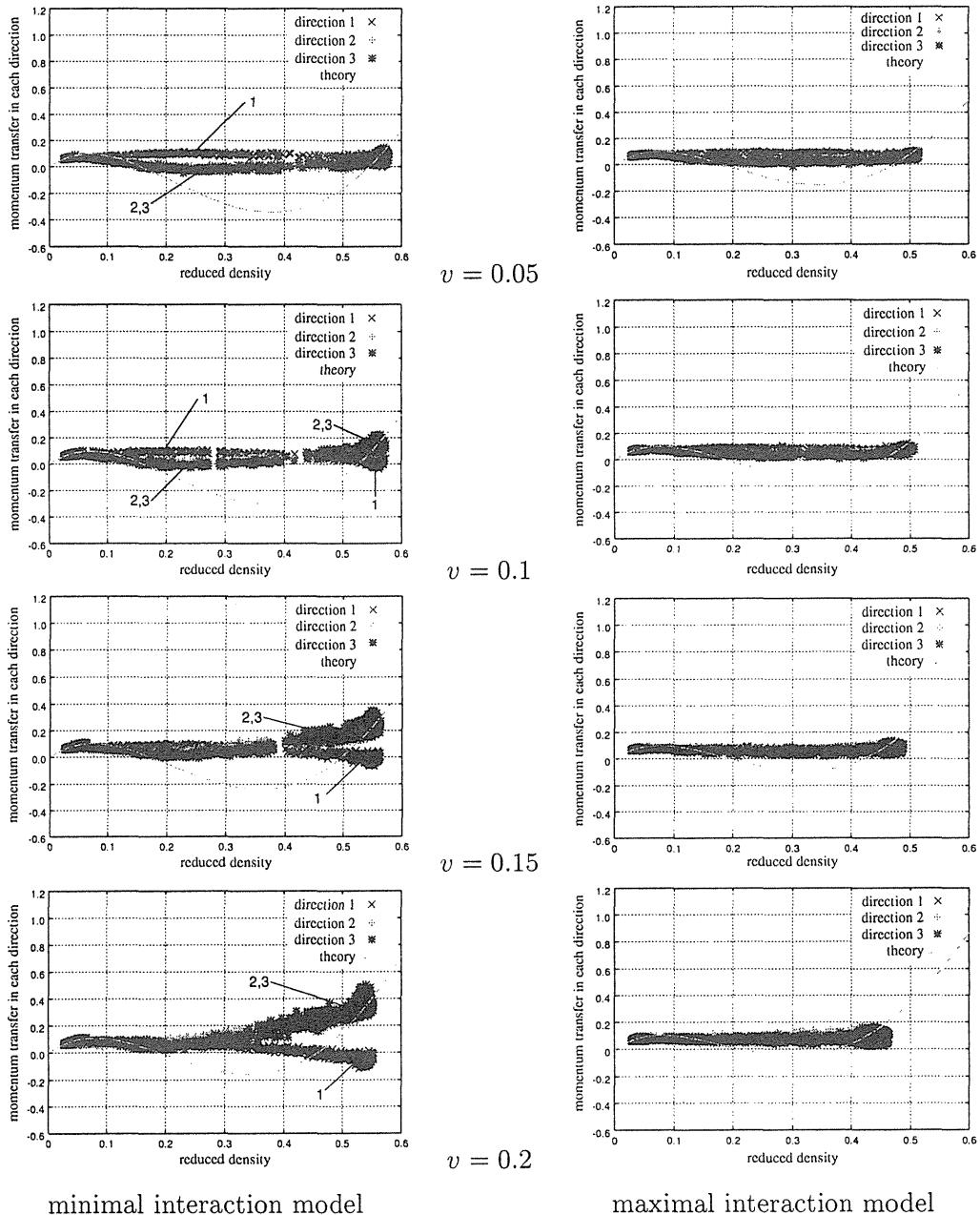


Fig. 3.4 Comparison of momentum transfer isotropy between the minimal interaction model and the maximal interaction model

### 3.3.2 最大相互作用モデルのシミュレーション結果と実験相関図との比較

最大相互作用モデルによる液滴落下シミュレーションにおいて、液滴は、実際に観測される液滴形状と類似した変形を示した。よって、まず最大相互作用モデルの界面の特性を調べ、その結果を用いて、前節のシミュレーションで得られた液滴形状及び落下終端速度に関する無次元数を測定する。さらにその無次元数の関係を Grace の実験相関式<sup>(61)</sup>と比較し、最大相互作用モデルによる液滴落下シミュレーションの定量的妥当性を検討する。

#### 最大相互作用モデルの界面特性

界面特性を見るために、まず界面位置の決定について考える。文献<sup>(63)</sup>によると、一般の気液界面の位置  $R_s$  は、

$$\int_{-\infty}^{R_s} [\rho_L - \rho(z)] dz = \int_{R_s}^{\infty} [\rho(z) - \rho_V] dz, \quad (3.2)$$

を満足するとしている。ここで、 $z$  は、密度  $\rho_L$  の液相から密度  $\rho_V$  の気相へ向かう界面に垂直な方向を表し、 $\rho(z)$  は界面付近の密度分布を表す。このような界面位置は Gibbs が最初に提案しており、Gibbs の dividing surface<sup>(64)</sup> と呼ばれている。そして、この Gibbs の dividing surface となる界面位置を与える界面付近の密度分布の 1 つが、

$$\rho(z) = \rho_V + \frac{1}{2}(\rho_L - \rho_V)[1 + \tanh \zeta(z - R_s)], \quad (3.3)$$

と表すことができるとしている。ここで  $\zeta$  は任意定数である。言いかえると、界面付近でこのような密度分布となる場合、その界面位置は、Gibbs の dividing surface で与えられる位置となる。

文献<sup>(19)</sup>において、格子ガス気液モデルにおける界面付近の換算密度分布が、

$$d(z) = d_V + \frac{1}{2}(d_L - d_V)[1 + \tanh \frac{\xi}{r}(z - R_s)], \quad (3.4)$$

と表すことができることが報告されている。ここで、 $d_L$ 、 $d_V$  は、それぞれ高密度相及び低密度相の換算密度であり、 $\xi$  は任意定数である。この式は、式(3.3)と同様の関数形であることが分かる。このことから、格子ガス気液モデルの界面位置は、Gibbs の dividing surface として与えられることとなる。さらに、このような密度分布は、 $\alpha$  を任意定数として、

$$\frac{1}{2\alpha} \int_{R_s-\alpha}^{R_s+\alpha} d(z) dz = \frac{1}{2}(d_L + d_V), \quad (3.5)$$

となる性質を持つ。つまり界面位置  $R_s$  は、 $d_L$  と  $d_V$  によって決まることとなる。この性質から、 $d_L$  と  $d_V$  が分かっている場合、ある小さな円内の密度が、両相の密度の平均より大きい場合は、その円の中心は高密度相の内部であり、逆の場合には、低密度相内にあることになる。つまり、すべての格子点において、この操作を行なうことにより、格子点をどちらかの相へ分類することができ、その二相の境界として界面を得ることができる。また、格子ガス気液モデルへの適用を考慮して、小円の代わりに、半径が  $r$  となる円に内接する六角形を用いる。この格子点を高密度相又は低密度相へ分類する方法を、ここでは局所領域クラスタリング法と呼ぶこととする<sup>(22)</sup>。

この局所領域クラスタリング法を用いるためには、 $d_L$  と  $d_V$  の値が必要である。両相密度は、長距離相互作用の大きさのみによって決まる。そこで、図 3.5(a) に示すように、 $600 \times 600$  の計算格子

の左右に設定した垂直な壁の一方に沿って高密度相を生成させるシミュレーションを行ない、各相の換算密度を測定した。上下は周期境界としている。初期換算密度を  $d = 0.17$  とし、 $r = 9, 11, 13, 15$  のそれぞれの場合について行なった。測定は、両相が平衡状態に達したのち、それぞれの相において換算密度が一定となる領域で平均した値を各相の換算密度とした。さらに、異なる初期粒子状態に対して 5 回の同様な測定を行ない、その統計平均の値を結果として用いた。図 3.6 には  $d_L$ 、 $d_V$  及び  $\frac{1}{2}(d_L + d_V)$  の値を  $r$  の関数として示す。この図から、 $r$  の増加と共に、 $d_L$  は単調に増加し、 $d_V$  は単調減少することがわかる。

次に、局所領域クラスタリング法の妥当性を見るため、計算格子の中心付近に、外力が作用していない静止液滴を生成し、その界面の検出を行ない、界面付近の密度分布と検出された界面位置の関係を調べる。静止液滴は、 $600 \times 600$  の計算格子に  $d = 0.07$  となるように粒子を分布させ、 $r = 9, 11, 13, 15$  の場合について生成した。図 3.5(b) に平衡状態に達した後の粒子分布の例を示す。この図から分かるように、液滴は完全な円になっていないため、局所領域クラスタリング法で界面位置として検出された格子点に対して数学的な円を当てはめ、その円の円周を界面とした。当てはめた円の中心に対する同心円上において平均した換算密度を、中心からの距離の関数として図 3.7 に示す。また当てはめた円の半径の位置を垂直な実線で示してある。さらに、式 (3.4) において、 $\xi = -6/r$  とした場合の曲線も示してある。この図から、界面付近の密度分布は、ほぼ Gibbs によって提案された密度分布となっていることが分かる。また界面も妥当な位置となっている。よって、局所領域クラスタリング法は、格子ガス気液モデルの界面を Gibbs の dividing surface として仮定される界面として検出していることが分かる。

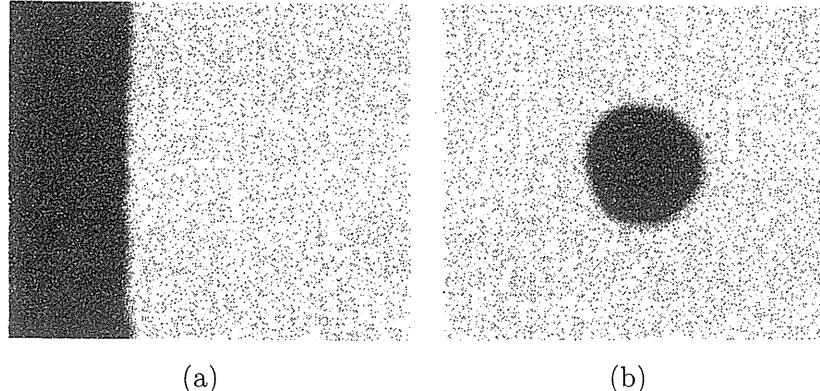


Fig. 3.5 The sample of the particle distribution with (a)the straight interface and (b)the curved interface. The dark dot means the high-density node and the light dot the low-density node.

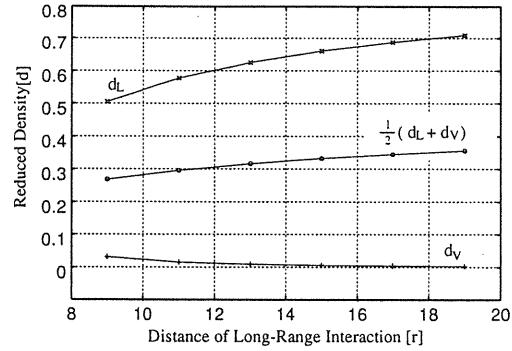


Fig. 3.6 The reduced density of the dense phase and the rare phase plotted against the distance of the long-range interaction. The values of  $\frac{1}{2}(d_L + d_V)$  are also shown. The simulation for  $r=9, 11, 13$ , and  $15$  was carried out in the  $600 \times 600$  lattice system with the initial reduced density  $d = 0.17$ .

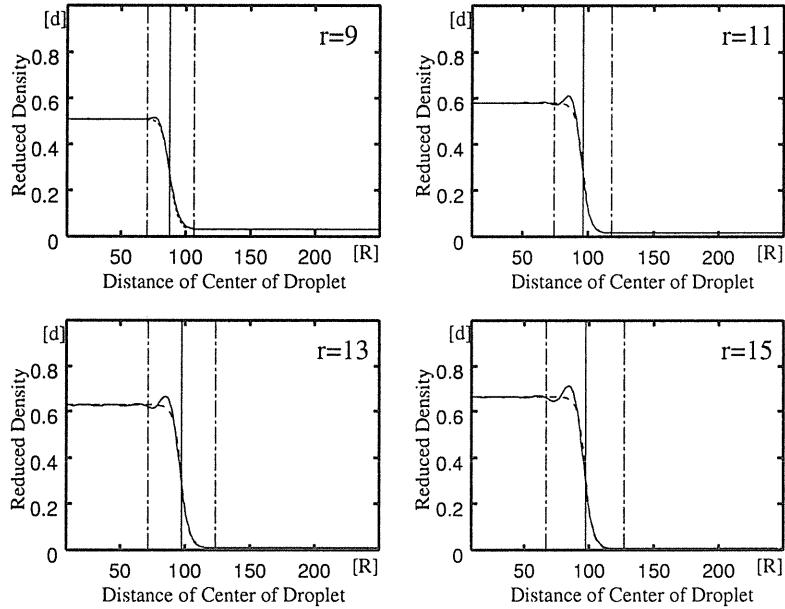


Fig. 3.7 The density distribution against the distance from the center of the droplet for  $r=9, 11, 13$ , and  $15$  in the  $600 \times 600$  lattice system with the average reduced density  $d = 0.07$ . The solid vertical line means the position of the calculated interface,  $R_s$ , and the dashed lines mean the positions,  $R_s - 2r$  and  $R_s + 2r$ . Equation (3.4) with  $\xi = -r/6$  is also shown by the dashed line.

次に、局所領域クラスタリング法によって検出された界面において、Laplace 則

$$p_{in} - p_{out} = \frac{\sigma}{R_s}, \quad (3.6)$$

を適用し、界面張力を算出する。ここで、 $p_{in}$ 、 $p_{out}$  はそれぞれ液滴の内部圧力と外部圧力を、 $\sigma$  は界面張力を表す。この関係から界面張力を得るために、内部領域と外部領域を定義する必要がある。図 3.7 に見られるように、 $R_s - 2r$  と  $R_s + 2r$  の位置を示す垂直な直線の間において、換算密度が変化しており、他の範囲では換算密度は一定である。このことから、 $R_s - 2r$  の内側を液滴内部、 $R_s + 2r$  の外側を液滴外部とし、残りの部分を界面厚さと考えることができる。さらに、文献(65)の方法を気液モデルへ拡張した方法によって、各格子点での平均自由行程を測定し、その値を図 3.7 と同様に、液滴中心の距離の関数として図 3.8 に示す。この図における  $R_s - 2r$  と

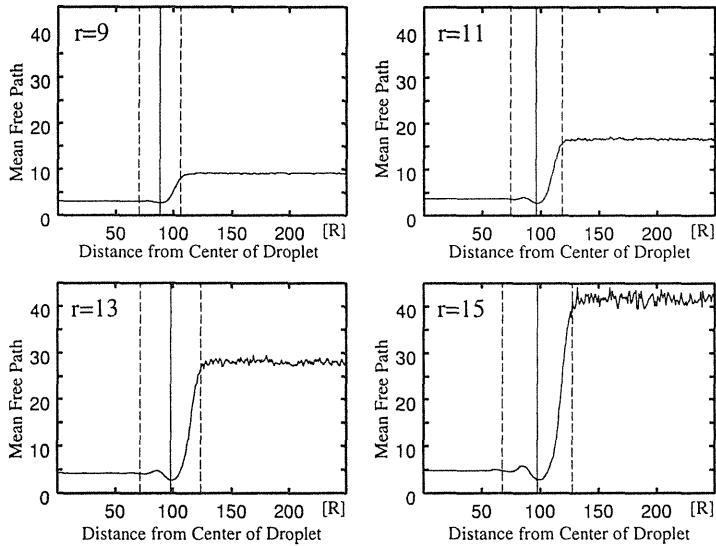


Fig. 3.8 The distribution of the mean free path against the distance from the center of the droplet for  $r=9, 11, 13$ , and  $15$  in the  $600 \times 600$  lattice system with the average reduced density  $d = 0.07$ . The solid vertical line means the position of the calculated interface,  $R_s$ , and the dashed lines mean the positions,  $R_s - 2r$  and  $R_s + 2r$ .

$R_s + 2r$  の位置を示す直線からも、上記の液滴内部領域と外部領域の定義が妥当であることが分かる。よって、 $p_{in}$  と  $p_{out}$  をそれぞれの領域で計算し、さらに局所領域クラスタリング法によって得られた界面格子点に当てはめた円の半径を  $R_s$  とし、Laplace 則の関係を見る。この関係を得るために、幾つかの異なる大きさの計算格子において、換算密度  $d = 0.07$  または  $d = 0.17$  を初期条件として与えて液滴を生成し、それぞれに対して圧力差と曲率 ( $R_s$  の逆数) を測定した。格子ガス気液モデルの圧力の測定については、文献(19, 47, 62)の手法が広く用いられていることから、本論文においてもその手法を用いた。その結果を図 3.9 に示す。この図から、圧力差と曲率は比例関係にあることが見られる。よって測定値に当てはめた直線の傾きが界面張力  $\sigma$  を与えることになる。さらに、この界面張力が妥当なものであるか確認するため、図 3.5(a) に示すような直線界面を成

す高密度相を生成し、その界面において、

$$\sigma = \int_{-\infty}^{\infty} [p_n - p_t(z)] dz, \quad (3.7)$$

の関係(63)から得られる界面張力を計算した。ここで、 $p_n$ 、 $p_t(z)$ は、それぞれ界面に対する法線方向の圧力と接線方向の圧力である。また、 $z$ は高密度相から低密度相へ向かう界面に垂直な軸の座標を表わしている。このように直線界面から得られた界面張力と Laplace 則から得られた界面張力の比較を表 3.1 に示す。この表から、両者の間には、多少の差があるがほぼ等しい値となっている<sup>2</sup>。よって、格子ガス気液モデルの界面位置、界面厚さに関する定義は妥当であると考えることができる。

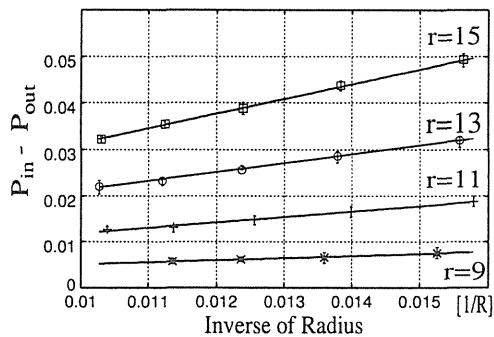


Fig. 3.9 Laplace's law for  $r=9, 11, 13, 15$ :The gradient of the fitted line gives the interfacial tension.

Table 3.1 Comparison between the interfacial tensions calculated on the straight interface and obtained using the Laplace's formula

$r$	9	11	13	15
Curved interface	0.46( $\pm 0.025$ )	1.18( $\pm 0.057$ )	1.91( $\pm 0.045$ )	3.15( $\pm 0.047$ )
Straight interface	0.59( $\pm 0.046$ )	1.29( $\pm 0.069$ )	2.16( $\pm 0.106$ )	3.01( $\pm 0.052$ )

<sup>2</sup> この両者の界面張力における多少の差については、格子ガス気液モデルの表面張力の非等方性が関係している。付録 D にその詳細を示す。

## 無次元数の計算と Grace の実験相関図との比較

液滴形状とそれに関する無次元数の関係を Grace の相関図(61)と比較し、その定量的な妥当性を調べる。Grace の相関図は、実験によって得られた相関図であり、重力中の上昇気泡や落下液滴の形状及び終端速度に関する無次元数の相関を表している。相関図に現われる無次元数は、流体の物性に関する Morton 数  $M$ 、液滴の形状に関する Eötvös 数  $Eo$ 、及び落下液滴の終端速度に関する Reynolds 数  $Re$  であり、それぞれ、

$$M = g \nu^4 \Delta\rho \rho_V^2 / \sigma^3, \quad Eo = g \Delta\rho d_e^2 / \sigma, \quad Re = d_e U / \nu, \quad (3.8)$$

で定義される。ここで、 $d_e$  は体積等価直径、 $U$  は終端速度、 $\nu$  は低密度相の動粘性係数、 $g$  は重力加速度、 $\Delta\rho$  は高密度相と低密度相の密度差、 $\rho_V$  は低密度相の密度、 $\sigma$  は界面張力を表している。

界面張力  $\sigma$  については、Laplace 則によって得られた値を用いる。また両相の密度差は図 3.6 に示す値を用いる。重力加速度  $g$  については、3.2.1 節で示したように、重力を想定した外力が換算密度  $d$  に比例しており、FHP-III の衝突側において、 $d$  は密度  $\rho$  と  $\rho = 7d$  の関係があることから、図 3.1 における測定値の最小二乗直線の傾きの 1/7 を本論文の重力モデルの重力加速度とする。

動粘性係数  $\nu$  については、文献(62)に示されている方法を用いて解析的に導出することが可能であり、以下の関数で表すことができる。

$$\begin{aligned} \nu &= \nu_0 \left(1 - \frac{1}{3}\kappa_3\right) \left(1 - r\kappa_3\right) + \frac{1}{12}r\kappa_3 \left(1 - \frac{1}{2}r\kappa_3\right) + \frac{1}{8}r^2\kappa_2 \\ &\quad + \frac{1}{24}r(\kappa_7 - \kappa_6) + \nu_0 \left[ \frac{1}{3}r\kappa_7 + r\kappa_6 - \frac{1}{3}(\kappa_6 + \kappa_7)\kappa_3 + \frac{1}{3}r^2\kappa_7\kappa_6 \right] \\ &\quad - \frac{1}{8} \left[ r\kappa_6 - \frac{1}{3}r^2(\kappa_6 + \kappa_7)\kappa_3 + \frac{1}{3}r^2\kappa_7\kappa_6 \right], \\ \nu_0 &= \frac{1}{4} \left( \frac{1}{\kappa_2(7-8\kappa_2)} - \frac{1}{2} \right) \\ \kappa_2 &= d(1-d), \quad \kappa_3 = d(1-d)(1-2d), \quad \kappa_6 = d(1-d)^5, \quad \kappa_7 = d(1-d)^5(1-4d), \end{aligned} \quad (3.9)$$

ここで導出した動粘性係数の妥当性を検証するために、シミュレーションによって動粘性係数を測定し、両者の比較を行なった。動粘性係数の測定では、周期境界を持つ計算格子の上半分の領域と下半分の領域において、粒子に反対方向の運動量を与え、せん断流の流速場を作り、上下の領域において絶対値が最大となる流速の値を用いて動粘性係数を決定する。この方法は、文献(66)においても用いられている。この測定を  $256 \times 256$  の計算格子において  $r = 3$  とし、換算密度を変化させて行なった。速度分布は、定常となった後 3000 ステップの時間平均によって得た。この結果を図 3.10(a) に示す。この図から、シミュレーションから得られた動粘性係数は、解析で得られたものより大きな値となっているが、ほぼ同じ変化傾向が見られる。このすれば、計算格子が小さいこと、時間平均のステップ数が短いこと、理論値が近似を用いて得られていることによると考えられる。図 3.10(b) には、 $r = 9$  の場合の液滴の中心から液滴外部への軸に沿った動粘性係数の変化を示す。この図の、3.3.2 節で定義した液滴内部領域及び外部領域において平均することにより、各相の動粘性係数を得ることができる。

終端速度  $U$  は、液滴落下シミュレーションにおいて、液滴の水平方向の最長径と垂直方向の最長径との交点の  $y$  座標 ( $y_c$ ) の時間変化が、一定となる範囲の傾きから求めた。また体積等価直径  $d_e$  は、終端速度を求めた範囲において平均した液滴体積(面積) $A$  から、 $d_e = 2\sqrt{A/\pi}$  によって求めた。図 3.11 にそれぞれの時間変化及び当てはめた直線を示す。この図において、時刻 5000 程度からの  $d_e$  の増加は、液滴が底辺の壁境界に近づいたことによると考えられる。

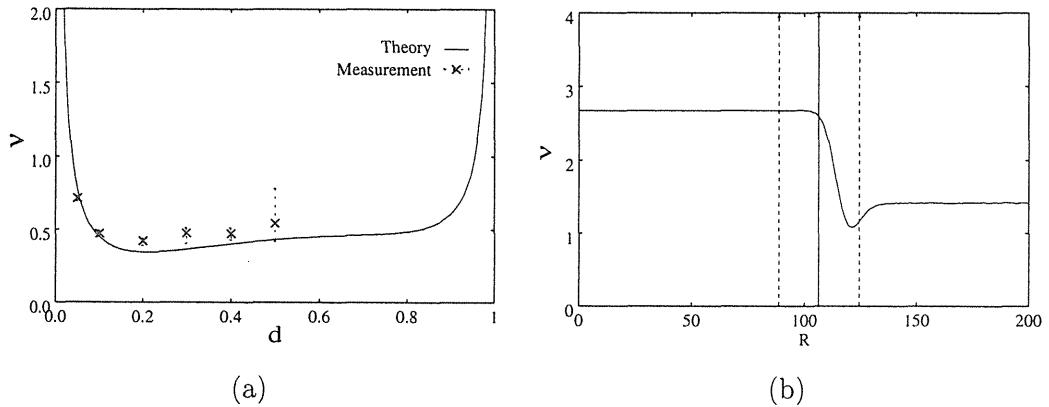


Fig. 3.10 (a)Comparison of kinematic viscosity between theoretical and measurement values for the 2D maximal interaction model with  $r = 3$  (b)Kinematic viscosity distribution in the vicinity of the droplet surface by the 2D maximal interaction model with  $r = 9$ : The solid vertical line means the interface position,  $R_s$  and the dotted lines mean the positions,  $R_s - 2r$  and  $R_s + 2r$ .

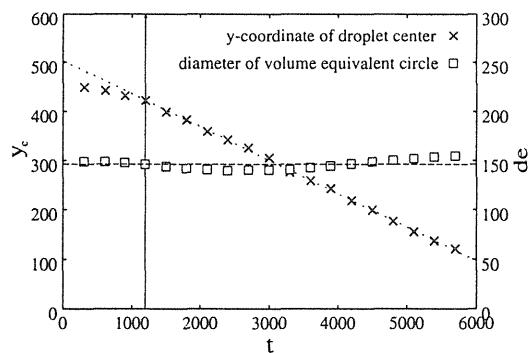


Fig. 3.11 Change of  $y_c$  and  $d_e$ : The terminal velocity is obtained from the gradient of the line fitted to  $y_c$ . The point before the vertical solid line is not used for fitting the line.

以上において求めた値とそれから計算した無次元数を表 3.2 に示す。ここで得られた  $Eo_{sim}$  及び  $M_{sim}$  を Grace の相関図にプロットし、その点と液滴形状との関係及び相関図から得られる  $Re_{grace}$  とシミュレーションで得られた  $Re_{sim}$  との比較を行なった。その結果、図 3.12 において、 $Eo_{sim}$  と  $M_{sim}$  の関係は、相関図における楕円形の領域にあり、シミュレーションで得られた液滴形状とほぼ一致していることが見られた。しかし、 $Eo_{sim}$ 、 $M_{sim}$  及び相関図から得られた  $Re_{grace}$  は、およそ 45 であり、シミュレーションで得られた  $Re_{sim} = 7.1$  より大きな値であることがわかった。この結果に対する理由として 2 つのが考えられる。1 つは、計算格子サイズが小さく、水平方向を周期境界としているため、液滴自身が相互作用して終端速度が小さくなり、それに比例する Reynolds 数が小さな値となつたことが考えられる。また、もう 1 つは、Grace の実験相関式は、三次元の現象を対象としているのに対して、本論文でのシミュレーションは二次元であるため、実際には、無限に長い円柱の落下をシミュレーションしていることになる。そのため、三次元の球形の場合に比べ、液滴に作用する力と液滴の落下方向からの抗力の関係が、三次元の球形の場合と異なつていてことによると考えられる。

Table 3.2 Obtained physical quantities and calculated dimensional values

$g$	$\sigma$	$\rho_{in}$	$\rho_{out}$	$\Delta\rho$	$\nu$	$U$	$d_e$	$Re_{sim}$	$Eo_{sim}$	$M_{sim}$
$9.5 \times 10^{-5}$	0.45	3.6	0.22	3.4	1.4	0.068	146	7.1	$1.5 \times 10$	$6.6 \times 10^{-4}$

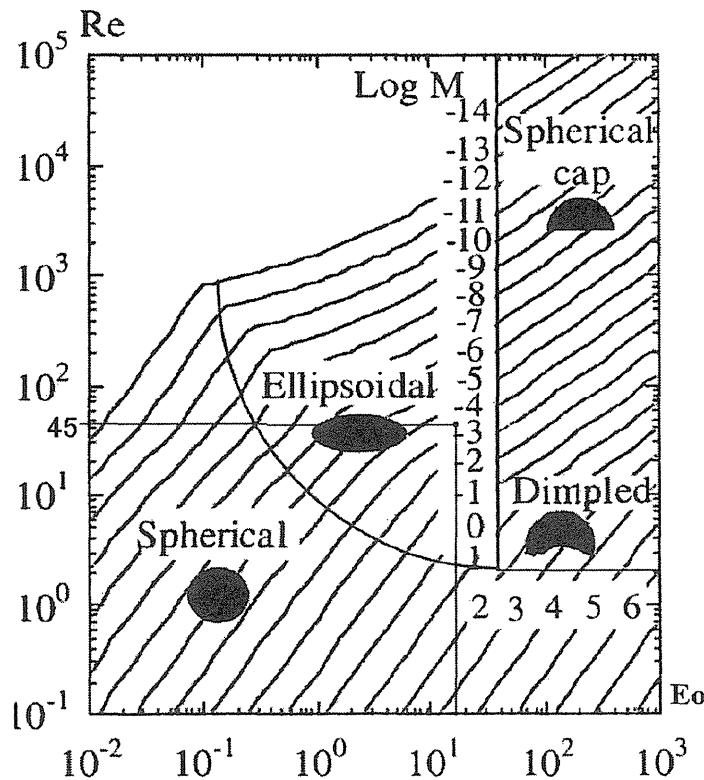


Fig. 3.12 Comparison between the simulation result and Grace's regime map for bubbles and drops: The plotted point of  $M_{sim}$  and  $Eo_{sim}$  is in the ellipsoidal regime but  $Re_{sim}$  is deviated from the  $Re_{grace}$  obtained from this map.

### 3.4 気液モデルの二相流シミュレーションへの適用に関する考察

以上において、格子ガス気液モデルの最小相互作用モデルによる液滴落下シミュレーションでは、圧力の非等方性のため、落下液滴が外力方向に延びる、非物理的現象が見られた。最大相互作用モデルでは、落下液滴の形状や液滴周囲の流速分布は、ほぼ妥当な結果が得られた。定量的評価として、Grace の実験相関式との比較を行ない、液滴形状については、妥当と考えられる結果を得た。しかし、終端速度については、実験相関式の値より小さな値がシミュレーションの結果として得られた。これについては、計算格子サイズが十分でないこと、また二次元シミュレーションの結果を実験相関式と比較していることによると考えられる。また、付録 D に示すように、格子ガス気液モデルは、格子に起因する界面張力の非等方性が存在することも分かった。

この液滴落下シミュレーションに対する計算格子サイズについては、付録 D から最小液滴直径が約  $12r$  であるので、左右がその 10 倍程度、高さが 20 倍程度の計算格子を用いることによって、周期境界の影響を軽減することができると思われる。長距離相互作用距離  $r = 9$  とすると  $1080 \times 2160$  程度である。また、三次元化を考えると  $1080 \times 1080 \times 2160$  となる。これは、本論文のシミュレーションの約 10000 倍となる。本論文の計算コードでは、1 格子当たり 0.3KB の記憶領域を必要とするので 3MB 程度の記憶領域があれば十分である。よって、計算格子サイズの問題は解決が不可能ではない。しかし、三次元化については、既存の三次元格子ガス気液モデルは、最小相互作用モデルのみであることから、圧力の非等方性が顕著に現われない三次元の最大相互作用モデルに対応するモデルの開発が必要になると考えられる。また、界面張力の非等方性についても、それを含まないモデルの開発が必要になると考えられる。

以上のことから、今後、さらに、実際的な複雑界面を示す二相流の流動様式を再現し、流動様式線図や実験相関式などとの定量的な比較が可能な数値シミュレーションを行なうためには、格子ガス気液モデルは多くの解決すべき問題を含んでいる。さらに、格子ガスは、粒子の運動により流体を表現していることから、ある時刻における 1 つの格子点の物理量には統計的な雑音が含まれ、それを除去するために粗視化操作が必要になる。そのため、さらに大きな計算格子サイズが必要となる。また、制御可能なパラメータの種類が多くないのでさまざまな条件での計算が期待できない。これらのことからも、格子ガス気液モデルは実際の二相流動の数値計算には未だ不十分と思われる。

しかし、粒子集団の運動により流体现象をシミュレーションすることができ、それに基づく二相界面の自発的な運動の再現可能性や壁境界の簡易な取り扱いなどの特徴は捨てがたい特徴である。従って、以下では、格子ガス法の統計平均を取ることにより、粒子的手法による流体の表現である特徴を残しつつ、格子ガス法の格子の影響やそれに起因する非物理的特性を取り除いたとされる格子ボルツマン法を採用し、それによる二相流動現象のシミュレーションについて議論する。また、格子ボルツマン法は、粒子そのものではなく、各格子点における粒子分布関数の時間発展により流動をシミュレーションする手法であることから、粗視化をせずに、各格子点において巨視的物理量を得ることができる。そのため、実際的な二相流動シミュレーションを行なう場合にも、格子ガス法が必要とするほどの計算格子を必要としないと考えられる。

## 4. 格子ボルツマン法の二相流シミュレーションへの適用

本章では、まず、二相流体格子ボルツマン法による二相流動挙動、特に液滴や気泡の挙動に関するシミュレーション例を紹介する。その後、本論文で用いる二相流体格子ボルツマン法である HCZ モデルの界面特性を調べ、HCZ モデルによる気泡上昇及び液滴落下シミュレーションを試みる。これらのシミュレーションの結果に基づき、HCZ モデルの複雑界面現象を有する二相流動シミュレーションへの適用可能性や有用性について検討する。

### 4.1 二相流体格子ボルツマン法による気泡及び液滴挙動の計算例

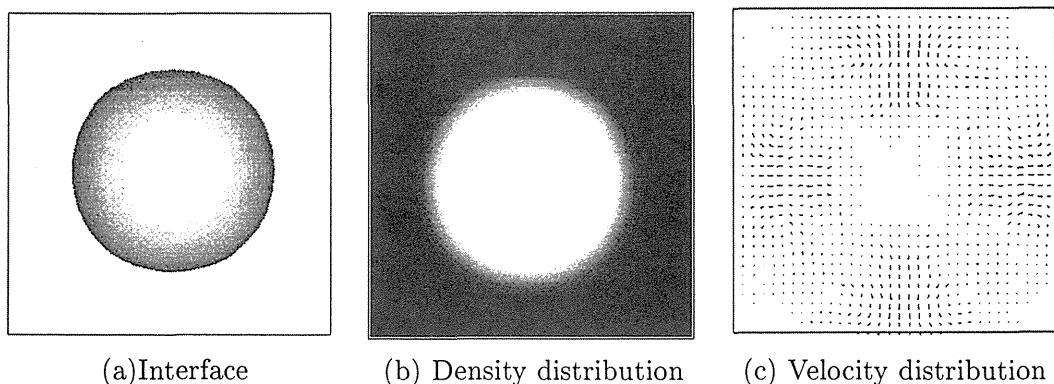
二相流体格子ボルツマン法による界面挙動や二相流シミュレーションについては、多くの報告が見られる。特に、気泡や液滴の界面挙動に関する報告例を挙げる。文献(67, 68, 69)では、せん断流中の液滴や気泡の変形をシミュレーションし、理論や実験の結果と比較している。文献(70, 71)では、単一気泡の上昇をシミュレーションし、気泡形状と無次元数の関係を相関図と比較している。文献(72)では、二つ又は三つの上昇液滴の衝突及びその後の分裂をシミュレーションし、界面積濃度を評価している。文献(73)では、二つの気泡の衝突や、壁による変形をシミュレーションし、VOF(volume of fluid) 法によるシミュレーションの結果と比較している。これらから、二相流体格子ボルツマン法は、気泡や液滴挙動の解析に用いられていることが分かる。しかし、本論文で用いる格子ボルツマン法 HCZ モデルの気泡や液滴挙動への適用の報告例は見られない。従つて、ここでは、HCZ モデルを気泡上昇及び液滴落下のシミュレーションへ適用し、実験相関図との比較を行ない、その結果に基づき、HCZ モデルの二相流シミュレーションへの適用妥当性を検討する。

### 4.2 HCZ モデルの界面特性

付録 C における HCZ モデルの基礎方程式の導出から、このモデルでは、時間刻み幅  $\delta_t$ 、格子間隔  $\delta = \sqrt{3RT}\delta_t$ 、両相の密度  $\rho_h$ 、 $\rho_l$ 、両相の動粘性係数  $\nu_h$ 、 $\nu_l$ 、重力加速度  $\vec{g}$ 、界面張力の強さに関する係数  $\kappa$  を独立に設定し、二相流シミュレーションを行なうことができる。そこで、まず、HCZ モデルの界面特性とこれらのパラメータとの関係を、前章同様、静止液滴及び静止気泡のシミュレーションを用いて調べる。

静止気泡及び静止液滴のシミュレーションでは、時間刻み幅及び格子間隔を、それぞれ、便宜的に  $\delta_t = 1.0$ 、 $\delta = 1.0$  とする。このように設定するには、 $RT = 1/3$  とする必要がある。付録 C で示されているように、 $R$  は気体定数、 $T$  は温度であり、共に、状態方程式の形及び動粘性係数に関係している。以降での HCZ モデルにおけるシミュレーションでは、状態方程式の形を常に同一とし、動粘性係数は、 $R$ 、 $T$  以外に関係する変数である緩和時間  $\lambda$  によって変化させる。また、HCZ モデルによるシミュレーションでは、これらの時間刻み幅と格子間隔が、それぞれ時間と長

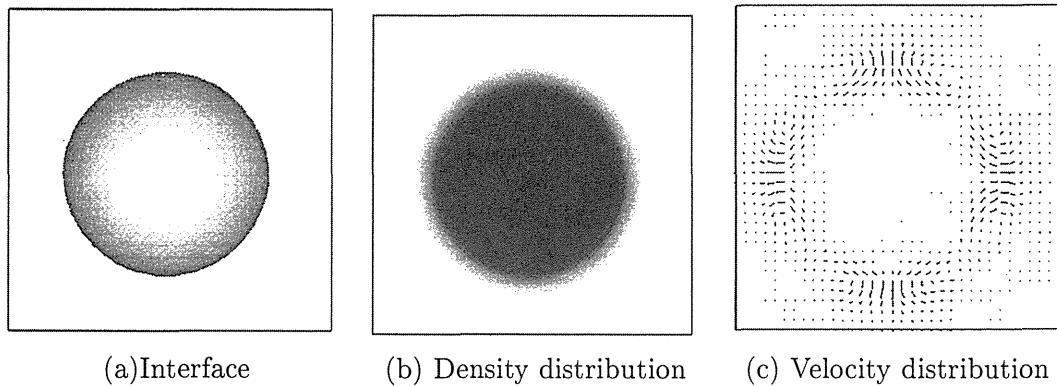
さの単位となる。例えば、速度の単位は  $\delta/\delta_t$  で与えられる。本節のシミュレーションでは、サイズが  $40 \times 40 \times 40$  の計算格子の中央付近に液滴または気泡を生成し、それが平衡状態になった後、各種の測定を行なった。図 4.1 に生成した液滴及び気泡の界面、大円を含む断面上の密度及び流速分布の例を示す。図において、界面は、前章に記述した Gibbs の dividing surface の考え方に基づき、両相の密度の平均値を持つ格子点を滑らかにつないだ曲面として表示している。また、密度分布は、高密度が濃く、低密度が淡くなる濃淡として、流速分布は、流速ベクトルを 2000 倍に拡大して表示している。この図から、液滴及び気泡とともに、その形状はほぼ球形を示し、密度分布は等方的であることが分かる。また流速分布については上下左右方向に流速分布が見られている。この流速ベクトルの大きさは約  $10^{-4}$  のオーダーであり、この液滴や気泡の移動を引き起こす主流

bubble

(a) Interface

(b) Density distribution

(c) Velocity distribution

droplet

(a) Interface

(b) Density distribution

(c) Velocity distribution

Fig. 4.1 Interface, density distribution, and velocity distribution of the static bubble and droplet: The interface is shown by the isosurface of the lattice nodes with density  $\frac{1}{2}(\rho_h + \rho_l)$ . The density and velocity distribution are shown on the plane including the great circle. Dark intensity means high density and light intensity means low density in the gray scale of the density distribution. The magnitude of the velocity vector is magnified 2000 times in the velocity distribution.

の流速が、この値に対して十分大きい場合、結果に大きな影響を与えないと考えられる。さらに、 $\rho_h$ 、 $\rho_l$ 、 $\kappa$ 、動粘性係数と  $\nu = \lambda RT$  によって関係する緩和時間  $\lambda$  を変化させた、静止液滴及び静止気泡の界面に対して数学的な球面を当てはめ、その球面と界面との偏差の分散及び最大値を調べた。その結果を図 4.2 に示す。この図から、いずれの場合においても、その分散は十分小さく、球面と界面との偏差の最大値も 1.0 度であることが分かる。このことから、このモデルの液滴や気泡はほぼ球形であり、前章や付録 D で記述した界面張力の格子依存性が存在しないと考えられる。また、それぞれの液滴及び気泡の中心についての同心球上で平均した密度の分布を図 4.3 に示す。この図から、分布は、前章で記述した Gibbs によって仮定された密度分布（式 (3.3)）の形状をしており、その形状は、密度差、界面張力の強さ、動粘性係数（緩和時間）に影響されないことが分かる。さらに界面厚さは、どの場合でもおよそ 8 格子程度であることが分かる。

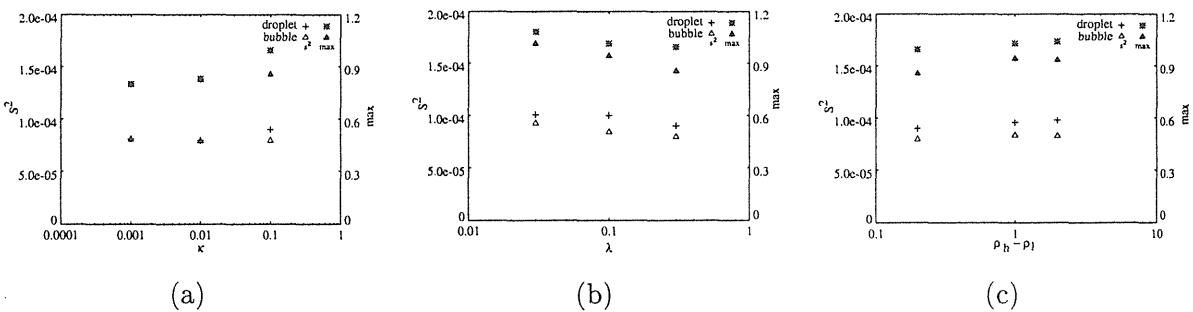


Fig. 4.2 Deviation from the mathematical spherical surface fitted to the interface of the static droplet and bubble: The  $s^2$  is the variance and the max is the maximum deviation.  
(a)  $\lambda = 0.3$  and  $\Delta\rho = 0.2$  (b)  $\kappa = 0.1$  and  $\Delta\rho = 0.1$  (c)  $\kappa = 0.1$  and  $\lambda = 0.3$

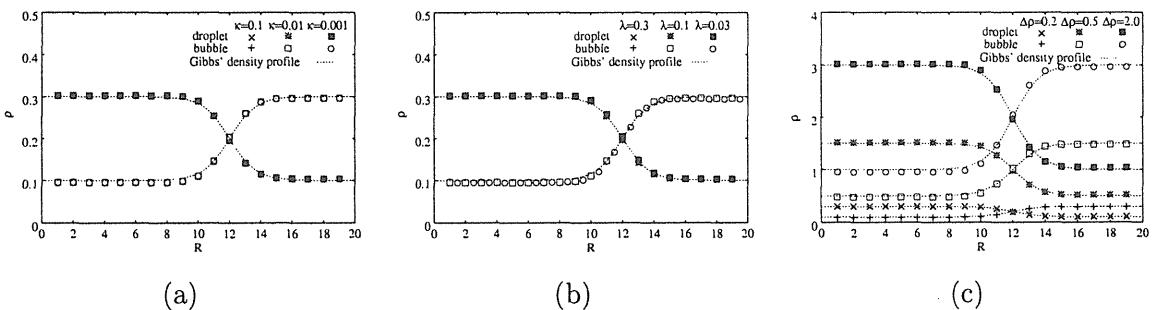


Fig. 4.3 Density profile of the static droplet and bubble against the radius: The density profile which is given in Eq.(3.3) with  $\xi = 0.6$  and  $R_s = 12$  is also shown by the dashed curve. (a)  $\lambda = 0.3$  and  $\Delta\rho = 0.2$  (b)  $\kappa = 0.1$  and  $\Delta\rho = 0.1$  (c)  $\kappa = 0.1$  and  $\lambda = 0.3$

次に界面張力の値について調べる。界面張力の値は、HCZ モデルの基礎方程式から、 $\kappa$  に依存することが分かる（付録 C）。しかし、 $\kappa$  の値と  $\sigma$  の値との関係は明らかでない。また  $\kappa$  以外の変数

が界面張力に影響を与える可能性もある。従って、ここでは、上記と同様の静止液滴及び静止気泡のシミュレーションに対して、Laplace 則の関係を適用し、界面張力を計算する。液滴や気泡の内部領域及び外部領域、界面位置は前章と同様に定義し、圧力差と曲率をそれぞれ測定した。図 4.4 に、気泡及び液滴に対する曲率と圧力差の関係を示す。この図において曲率と圧力差が比例していることから、Laplace 則（三次元の場合  $\Delta p = \frac{2\sigma}{R}$  である）が満たされていることが分かる。この測定値の関係に対して直線を当てはめ、その傾きから  $\sigma$  を計算する。また  $\kappa$ 、 $\lambda$ 、 $\rho$  を変化させ、同様に計算した  $\sigma$  についての結果を図 4.5 に示す。この図から、 $\sigma$  は  $\lambda$  には影響されず、 $\kappa$  と  $\rho_h \rho_l$  に比例することが分かる。つまり  $\sigma \sim \kappa \rho_h \rho_l$  の関係があることが分かる。このことについては、文献(74)でも報告されている。

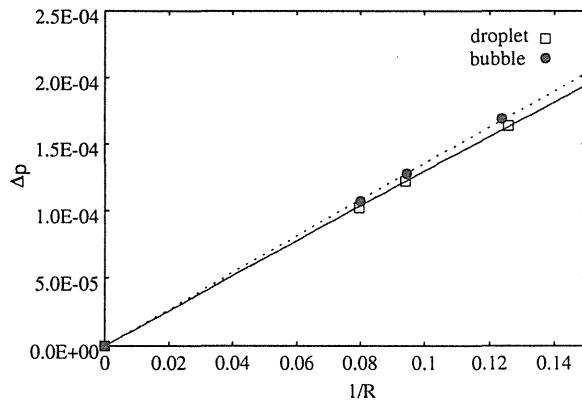


Fig. 4.4 Laplace's law for the droplet and the bubble ( $\kappa = 0.1$ ,  $\lambda = 0.3$ ,  $\rho_h = 0.3$ ,  $\rho_l = 0.1$ ): The fitted line is also shown.

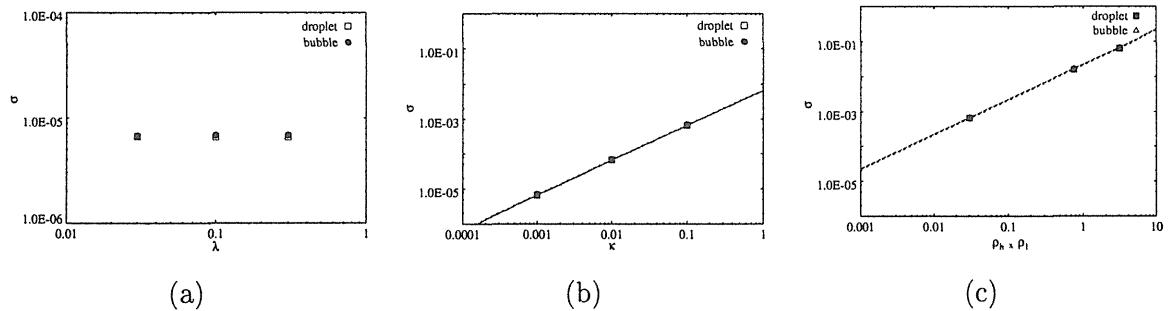


Fig. 4.5 Dependence of the interfacial tension on (a) $\lambda$ , (b) $\kappa$ , and (c) $\rho$ : The fitted line is shown in (b) and (c).

### 4.3 HCZ モデルによる気泡上昇及び液滴落下シミュレーション

ここでは、HCZ モデルによって気泡上昇及び液滴落下のシミュレーションを行ない、前章と同様、液滴及び気泡形状と  $Eo$ 、 $M$  の関係を Grace の実験相関図と比較し、さらにシミュレーションから得られる  $Re$  を相関図から得られる  $Re$  と比較した。また、気泡形状については、実験結果及び VOF(volume of fluid) 法<sup>(75)</sup>によるシミュレーション結果と比較した。

シミュレーションは、 $x, y$  方向を周期境界、 $z$  方向を「跳ね返り壁」境界<sup>(7)</sup>とした  $x \times y \times z = 40 \times 40 \times 128$  の計算格子において行なった。格子ボルツマン法における「跳ね返り壁」境界では、境界上の格子点において粒子分布関数の向きを反転させる。時間刻み幅と格子間隔は、前節同様、 $\delta_t = 1.0$ 、 $\delta = 1.0 (RT = 1/3)$  と設定とした。初期状態は、気泡の場合は計算格子の下方の壁付近に、液滴の場合は計算格子の上方の壁付近に生成した定常状態とした(図 4.6)。その初期状態に対して、 $-z$  方向に重力を作用させシミュレーションを行なった。その他のシミュレーション条件は表 4.1 に示す通りである。緩和時間  $\lambda$  については、Morton 数から動粘性係数  $\nu$  を計算し、

Table 4.1 Simulation conditions of the rising bubble and the falling droplet

Case	$Eo$	$M$	$\rho_l$	$\rho_h$	$g$	$\sigma$
(a)	8.67	7.11	1.0	3.0	$4.59 \times 10^{-4}$	$6.73 \times 10^{-2}$
(b)	4.38	$2.98 \times 10^{-3}$	0.1	0.3	$5.68 \times 10^{-5}$	$6.73 \times 10^{-4}$
(c)	116	1.31	0.1	0.3	$1.50 \times 10^{-3}$	$6.73 \times 10^{-4}$
(d)	115	$4.63 \times 10^{-3}$	0.1	0.3	$1.49 \times 10^{-3}$	$6.73 \times 10^{-4}$

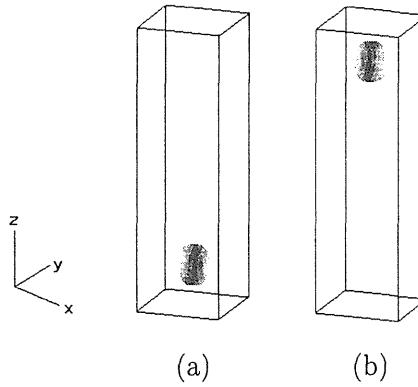


Fig. 4.6 Initial state for the simulation of (a)the rising bubble and (b)the falling droplet:The lattice size is  $40 \times 40 \times 128$ .

$\nu = \lambda RT$  の関係によって得られる値を用いた。また両相において同一の緩和時間つまり動粘性係数を用いた。このシミュレーションにおいて、気泡はその上端が、液滴はその下端が、それぞれ

最小密度となることから、その点を気泡または液滴の位置として、10ステップ毎に測定した。また、 $\rho_m = \frac{1}{2}(\rho_l + \rho_h)$  として、気泡の場合は密度が  $\rho_m$  以下となる格子点を含む領域、液滴の場合は密度が  $\rho_m$  以上となる格子点を含む領域を、それぞれの体積として測定し、この体積から体積等価直径  $d_e$  を計算した。それぞれのシミュレーションにおける液滴及び気泡の界面、密度分布及び流速分布を図 4.7、図 4.8 に示す。この図における界面は図 4.1 と同様に示している。密度分布及び流速分布については、計算格子の垂直な中心軸を含む xz 平面上の値を示している。尚、流速分布については、文献(73) と同様、液滴や気泡の後方の流れの様子を見るために、主流流速を差し引き、液滴や気泡周りの流速を示している。これらの図において、界面が半球状になっている場合 ((c) や (d) の場合) は、液滴や気泡の後方の渦の影響が顕著となり、後方の界面が凹状になっている。そのため、界面形状と密度分布が異なって見える。

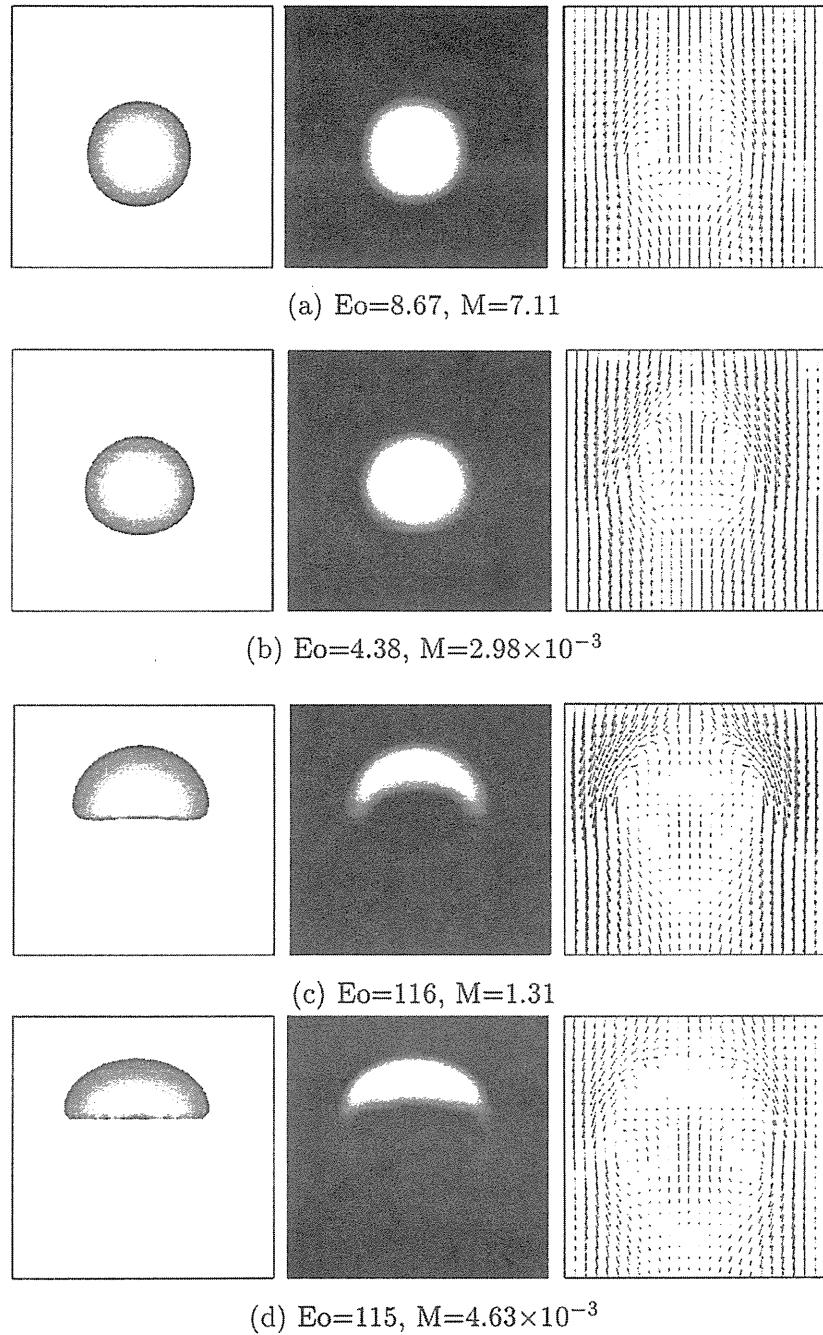


Fig. 4.7 Interface, density distribution, and velocity distribution of the rising bubble: These images are obtained by extracting the region including the bubble. The interface in the left column is shown by the isosurface of the lattice nodes with density  $\frac{1}{2}(\rho_h + \rho_l)$ . The density distribution in the middle column and the velocity distribution in the right column are shown on the xz plane including the vertical center axis of the calculation lattice. Dark intensity means high density and light intensity means low density in the gray scale of the density distribution. The velocity distribution is shown in the moving coordinate system with the rising bubble.

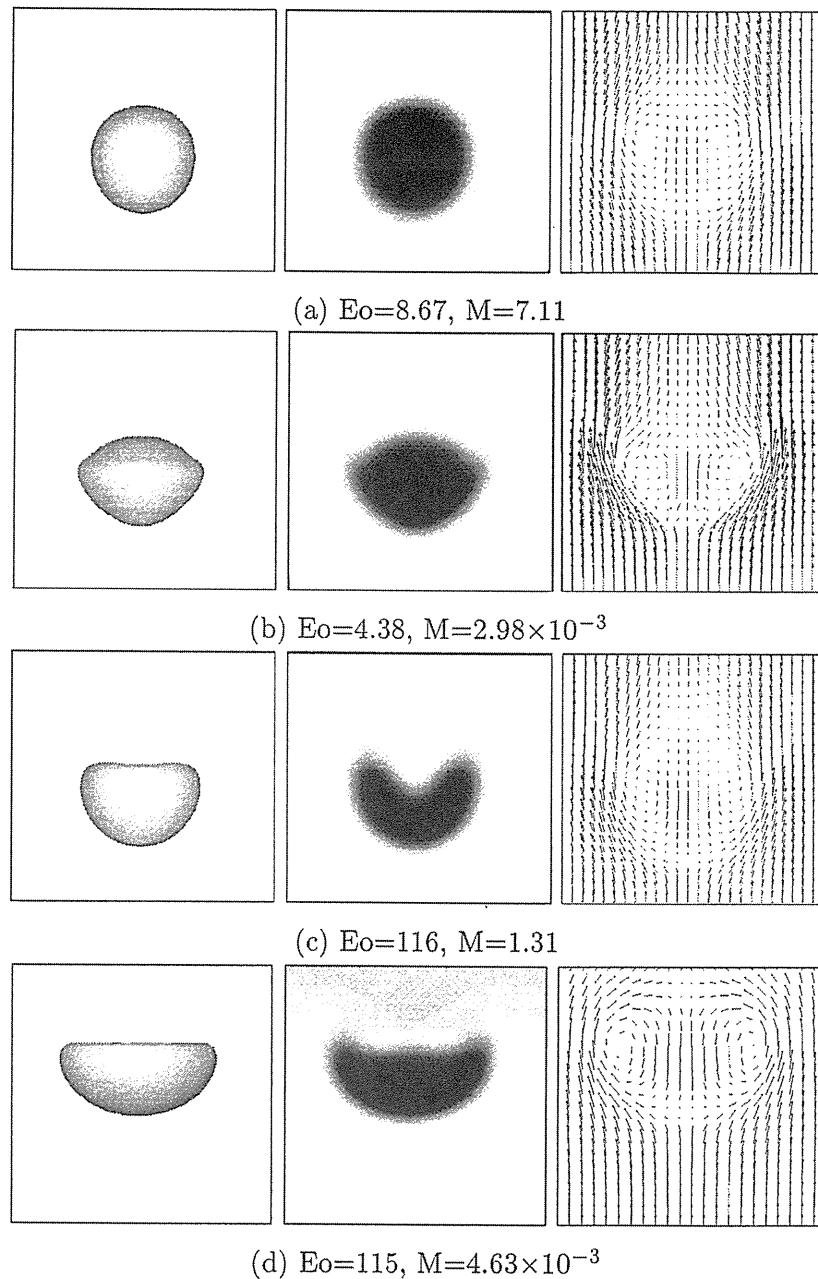


Fig. 4.8 Interface, density distribution, and velocity distribution of the falling droplet: These images are obtained by extracting the region including the droplet. The interface in the left column is shown by the isosurface of the lattice nodes with density  $\frac{1}{2}(\rho_h + \rho_l)$ . The density distribution in the middle column and the velocity distribution in the right column are shown on the xz plane including the vertical center axis of the calculation lattice. Dark intensity means high density and light intensity means low density in the gray scale of the density distribution. The velocity distribution is shown in the moving coordinate system with the falling droplet.

Grace の実験相関図については、前章において記述したが、その図中には気泡形状が示されている。しかし文献<sup>(61)</sup>によると、二相の密度比及び粘性比が極端に大きくなない場合は、落下液滴に対しても適用できることができることが記述されている。本論文のシミュレーションでは、密度比は  $\rho_h/\rho_l = 3.0$ 、粘性比は動粘性係数が同じであるので密度比と同じく  $\mu_h/\mu_l = 3.0$  である。よって、この条件を満たすと考えられることから、液滴の場合についても Grace の相関図を適用する。表 4.1 に示す  $Eo$  と  $M$  の値の Grace の相関図へのプロットと、それぞれの条件に対してシミュレーションで得られた気泡及び液滴形状を図 4.9 に示す。図の気泡及び液滴形状は、測定された体積等価直径が条件として与えた  $Eo$  の値を与える場合の形状を示している。この図から、各々の条件のシミュレーションで得られた気泡及び液滴形状は、Grace の相関図の対応する  $Eo$  と  $M$  が含まれる領域の形状とほぼ同じであることが分かる。また図 4.10 には、 $Eo$  と  $M$  を指定した Grace の相関図から得られる  $Re$  と シミュレーションで得られた気泡や液滴の位置の変化へ當てはめた直線の傾きを終端速度として計算した  $Re$  との比較を示す。この図において両者はほぼ等しいことが見られる。

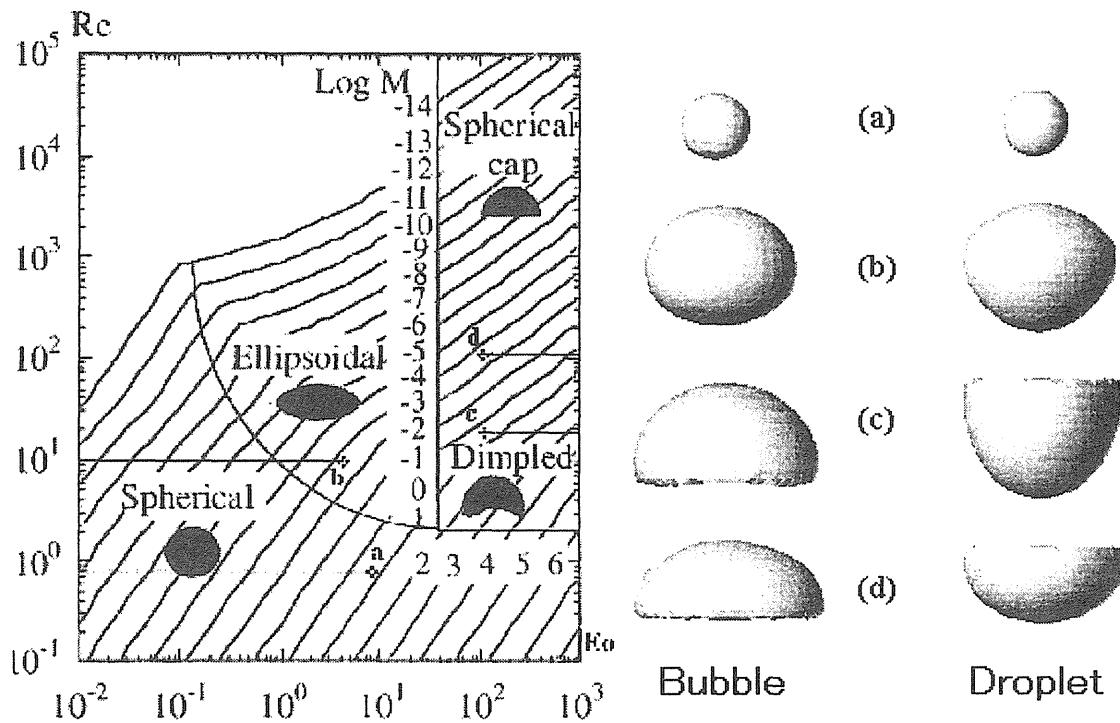


Fig. 4.9 Plotting ( $Eo, M$ ) on the grace's regime map for bubbles and drops and the bubble and drop shape obtained from the simulations

さらに、図 4.9 の気泡形状と実験<sup>(76)</sup> 及び VOF 法で得られた気泡形状<sup>(77)</sup>との比較を図 4.11 に示す。この図から、気泡の下部形状は、概ね両者と一致していることが見られるが、(d) の場合のように気泡が上下に大きく偏平する場合、本論文の結果は、他の二つの結果より偏平が小さいことが見られる。これについては、実験の場合ほど、気泡の大きさに対して十分大きな領域を取れず、水平方向が周期境界であるため、下降流による巻きこみが影響していると思われる。また、

VOF 法によるシミュレーションでは、上下方向を開放境界とし、下方方向の流れを与えて気泡を計算格子内にとどめた状態において、気泡形状を測定していることから、計算格子の上方及び下方での圧力に大きな差が無い。しかし、本論文のシミュレーションでは、本モデルにおいて同様の開放境界条件を与える手法が開発されておらず、上下方向に壁を設けた計算格子において移動する気泡を測定しているため、下方より上方の圧力が小さくなることも 1 つの理由と考えられる。

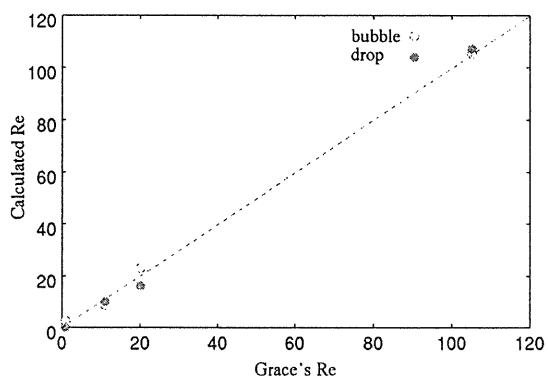


Fig. 4.10 Comparison between the measured Re and the Re of Grace's correlation

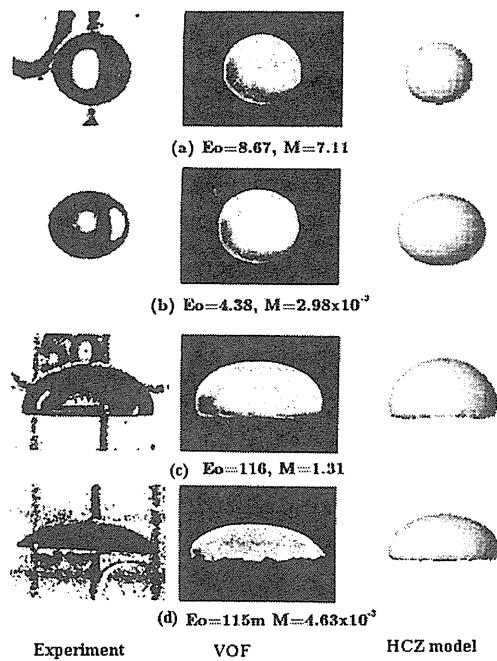


Fig. 4.11 Comparison of the bubble shape among the simulations by the HCZ model, the experimental results, and the simulation results by the VOF method

#### 4.4 HCZ モデルの水平層状二相流シミュレーションへの適用に関する考察

以上において、HCZ モデルの界面特性の調査では、その界面は、格子ガス気液モデルのように、形状が格子に依存せず、つまり非物理的な界面張力の非等方性が存在せず、また界面における密度分布も Gibbs によって提案された密度分布を示していた。また、界面厚さは 8 格子程度であった。さらに、重力中における液滴落下や気泡上昇のような、比較的緩やかな流動中の界面形状変化が大きくなない二相流動シミュレーションでは、実験相関図や他の計算手法の結果とほぼ一致する結果が得られた。これらの結果から格子ボルツマン法 HCZ モデルは、さらに、実際的であり複雑な界面現象を示す二相流動現象のシミュレーションへの適用の可能性を持ち、また、その結果は、相関図や相関式を再現できる能力をもつと思われる。

のことから、以下では、HCZ モデルの水平層状二相流のシミュレーションへの適用について検討する。水平層状二相流は、密度の異なる二種類の流体が重力によって二相に分離し流れている基本的な二相流動の 1 つであるが、実際に原子力施設などにおいて見られる配管内の二相流を理解するために重要な流動でもある。このような、重力により分離した二相の流動に対する二相流体格子ボルツマン法によるシミュレーション例としては以下の報告がある。文献(44, 45, 74)では、二次元及び三次元の Rayleigh-Taylor 不安定性のシミュレーションを行ない、その界面形状を観察しており、文献(78)では、二次元水平層状流におけるせん断流による渦成長、二相混合や界面形状変化に対する界面張力の影響を調べている。文献(79)では、二次元水平層状二相流を二成分二相の格子ボルツマン法で再現し、障害物による流れのブロッキングの影響を調べている。この時、重力を 1 つの成分のみに作用させている。文献(80)では、重力による界面波の運動をシミュレーションしている。

しかし、三次元水平層状二相流を再現し、さらに二相流動状態と流動様式との関係に言及した例は、未だ報告されていない。よって、水平層状二相流のシミュレーションが、格子ボルツマン法によって可能であること、さらに、そのような二相流における流動状態と流動様式の関係が、実験結果や理論考察によって得られている流動様式線図や相関式を再現可能であることを示すことができれば、この計算手法の適用できる二相流動現象の範囲が広がり、その有用性が示されることになると考えられる。また、様々な条件における流動状態と界面形状変化との関係を調べることも可能になると思われる。

## 5. HCZ モデルの二相界面における Kelvin-Helmholtz 不安定性の検証

本章以降において、格子ボルツマン法 HCZ モデルを水平層状二相流シミュレーションへ適用し、さらに、それから遷移して現われる複雑な界面現象を示す流動様式のシミュレーションを行なう。まず、本章では、モデルの二相界面の挙動と流動状態の関係の定量的妥当性を、Kelvin-Helmholtz 不安定性<sup>(3, 81)</sup>を満足することによって検証する。尚、本章は、文献<sup>(82)</sup>に基づき記述する。

### 5.1 Kelvin-Helmholtz 不安定性

水平層状二相流において、低密度相の流速が高密度相の流速より大きく、その差が徐々に増加していく場合、ある流速差以上において、二相界面が不安定化し、界面の波が成長を始める。この現象は、Kelvin-Helmholtz 不安定性理論によって、二次元の場合、解析的に説明されており、水平層状二相流が他の流動様式へ遷移する基本的機構の 1 つである<sup>(3, 4)</sup>。

Kelvin-Helmholtz 不安定性理論では、界面の波が成長を起こす時の両相の流速差が、波の波数、界面張力の大きさ、密度比、重力の関数として表されている。以下において臨界流速差を  $du_c$  で表す。文献<sup>(3)</sup>には、二次元流動に対するこの関係の解析的な導出が詳細に示されているので、ここでは、その関係式のみを示す。

$$du_c^{th} \equiv u_l - u_h = \sqrt{\frac{\rho_h I_h + \rho_l I_l}{\rho_h I_h \rho_l I_l} [k\sigma + (\rho_h - \rho_l) \frac{g}{k}]}. \quad (5.1)$$

ここで、 $u_h$ 、 $u_l$  は、それぞれ高密度相及び低密度相の平均流速、 $\rho_h$ 、 $\rho_l$  は、それぞれ高密度相及び低密度相の密度、 $\sigma$  は界面張力、 $k$  は波数、 $g$  は重力加速度である。また  $I_{[h,l]} = \coth(kh_{[h,l]})$  であり、 $h_h$  は高密度相の高さ、 $h_l$  は低密度相の高さである。また  $h_h + h_l = H$  が流れ全体の高さである。ここで与えられている臨界流速差が理論解析的に導かれたことを、添え字  $th$  で表わしている。

三次元の場合にも、二相流速差によって界面の波の不安定性は引き起こされ、それについては、一般的に Orr-Sommerfeld 方程式<sup>(81)</sup>によって表されている。しかし、この方程式は、ある特殊な場合を除き、解析的な解が存在しない。そこで、本論文では、HCZ モデルの三次元流動における波の不安定性現象の定量的検証を行なうために、近似的であるが、Eular-Darcy 解析<sup>(83)</sup>を用いて得られる、以下の臨界流速差の関係式を用いる。

$$du_c^{th} \equiv u_l - u_h = \sqrt{\frac{(\rho_h + \rho_l)^2}{\rho_h \rho_l} \left[ \frac{k\sigma + (\rho_h - \rho_l)g/k}{\rho_h + \rho_l} \tanh(k(H/2)) - \frac{36\nu^2}{W^4 k^2} \right]}, \quad (5.2)$$

ここで、 $\nu$  は流体の動粘性係数であり、両相で同一の値を用いている。また  $W$  は流路の幅である。この式は、Eular 方程式と Darcy 方程式を組み合わせた式、

$$\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + (\nabla \vec{u}) \vec{u} = -\frac{1}{\rho} \nabla p - \frac{12\nu}{W^2} \vec{u}, \quad (5.3)$$

に対して、二次元の Kelvin-Helmholtz 不安定性の解析を適用することによって得ることができる。この式において、臨界流速差は、二次元の場合と異なり、流路幅と動粘性係数を変数として含んだ関数として与えられている。シミュレーション結果をこの式と比較することにより、三次元化に関する影響を取りこんだ検証が可能となると考えられる。

## 5.2 二次元シミュレーションによる検証

シミュレーションに用いた計算格子及び初期状態を図 5.1 に示す。計算格子の格子間隔及び時間刻み幅は、それぞれ、前章と同様、 $\delta = 1$ 、 $\delta_t = 1$  と設定し、計算格子サイズを  $x \times y \times z = L \times W \times H$  とし、 $W = 1$  とした。高さは、すべての場合で  $H = 40$  とし、 $L$  は、初期状態で生成する波の波長  $2\pi/k$  の約 3 倍となるよう設定した。高さ方向の境界はすべり壁境界<sup>(7)</sup>とし、 $x = 0$ 、 $x = L$  では、それぞれ流入及び流出境界とした。また  $y$  方向は周期境界とした。すべり壁境界では、境界上の格子点の粒子分布関数を鏡面反射の方向へ向きを変える操作を施し、流速が壁面上で 0 とならない状態を模擬することができる。それにより、粒子分布関数が計算格子外へ出ないように、また流れにせん断効果を与えないようにすることができる。Kelvin-Helmholtz 不安定性理論を用いて、式(5.1)、式(5.2)を導出する際に仮定されている条件では、高さ方向の境界の存在を考えていかない。そのため、流速は、せん断効果を受けず、高さ方向において各相それぞれで一定であるとして理論解析を行なっている。ここでは、その流速分布を模擬するために、高さ方向の境界にすべり壁境界を用いた。尚、すべり壁境界を slip wall とも称する。高密度相(液相)及び低密

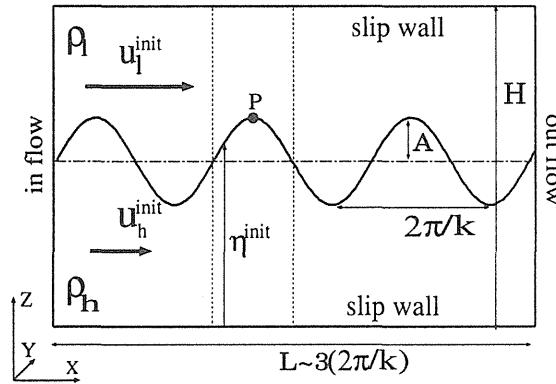


Fig. 5.1 Simulation conditions at the initial state

度相(気相)の密度を、それぞれ  $\rho_h = 0.3$ 、 $\rho_l = 0.1$  とし、重力は  $-z$  方向へ作用させ、その値を  $g = 1.0 \times 10^{-5}$  とした。また動粘性係数は 0.01 とした。これらの変数は、幾つかの試験的なシミュレーションを通じ、経験的に採用した。本章では、HCZ モデルの界面挙動が理論的な関係式を満たすことの確認を目的としており、また、表面張力の影響は小さく、界面成長の理論解析の第一近似では無視されている場合が多いので、ここでも簡単な場合として界面張力を 0 とした。

初期状態では、 $\eta^{init} = A \sin(kx) + H/2$  の正弦波を生成し、液相及び気相の流速  $u_h^{init}$ 、 $u_l^{init}$  を、

それぞれ、

$$u_h^{init} = \sqrt{\frac{\rho_h - \rho_l}{\rho_h + \rho_l} \frac{g}{k} \tanh(kH/2)}, \quad u_l^{init} = u_h^{init} + du^{init} \quad (5.4)$$

と設定した。ここで、界面波の分散関係(59)によって与えらえる波の位相速度を  $u_h^{init}$  として与えている。また、 $du^{init}$  は両相間の流速差を表す。波の振幅を  $A$  で表わし、どの場合も  $A = 5.0$  とした。界面の厚さは、第3章から、8格子程度であり、密度はその範囲で  $\tanh$  の形で変化している。また界面厚さ内での流速については、よく分かっていない。しかし、8格子ほどの範囲において、両相の流速間を線形に内挿しても大きな相違が現われると考えがたい。そこで、界面厚さ内では、密度及び流速については、両相の流速値の間を内挿して与えた。流入境界では、界面の高さを  $\eta_{x=0} = A \sin(kct) + H/2$  で変化させて密度分布を与える、流速分布は初期状態の値を与えた。ここで、流体が粘性を持つことにより、高密度相の界面付近の流速が低密度相の界面付近の流速に引きずられる影響を考慮し、 $c = (\rho_h u_h^{init} + \rho_l u_l^{init}) / (\rho_h + \rho_l)$  として与えた。流出境界では、密度分布を1つ上流の格子点( $x = L - 1$ )での値を与える、流速分布は初期状態の値を与えた。さらに、流入流出境界は開放境界であるので、境界に与えた密度と流速から計算した  $\bar{f}_\alpha^{eq}$ 、 $\bar{g}_\alpha^{eq}$  を、外部から計算格子内に進入する分布関数として用いた。ここで、 $\bar{f}_\alpha^{eq}$ 、 $\bar{g}_\alpha^{eq}$  は、付録Cの式(C.23)の  $f_\alpha$ 、 $g_\alpha$  を平衡分布関数  $f_\alpha^{eq}$ 、 $g_\alpha^{eq}$  で置き換えて得られる関数を表わしている。

以上の条件において、 $k = 0.1, 0.09, 0.07, 0.05, 0.03$ 、それぞれの場合に対して、流速差  $du$  を0.02から0.1へ漸増させてシミュレーションを行ない、図5.1においてPで表される中央の波の頂点の高さ  $\eta^{max}$  を測定した。また、両相の平均流速の差  $du$  と、運動量厚さ  $\delta_m = \frac{1}{4} \int_0^H \{1 - (u_x/u_{lx})^2\} dy$  (78) も同時に、図5.1の垂線の間(波の半波長分の領域)で測定した。運動量厚さは、流速の散逸の割合を表わす指標となっており、二相での流速差が減少すると共に  $\delta_m$  も減少する。図5.2に、 $k = 0.1$ 、 $du^{init} = 0.03$  の場合の測定結果を例として示す。図5.2(a)において、 $du$  は、界面における散逸のため、徐々に変化し小さくなる様子が見られる。そこで、図5.2(b)に示す運動量厚さの変化のピークからピーク(図5.2(b)における二本の垂線の間)では、流速の散逸がほぼないと仮定し、さらに、その範囲で図5.2(a)の流速差及び図5.2(c)に示す波の成長がほぼ一定であると見なした。以下の解析では、この範囲において得られる  $du$  及び  $\eta^{max}$  を用いる。

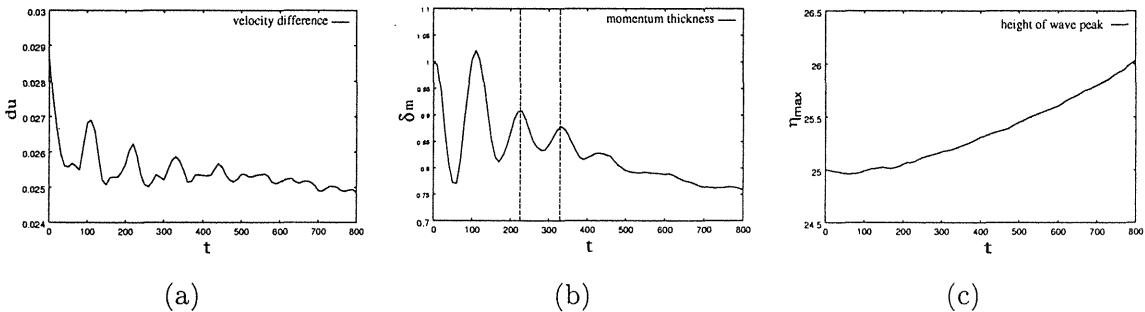


Fig. 5.2 The velocity difference(a), the momentum thickness(b), and the height of the wave peak(c) in the case of  $du^{init} = 0.03$ ,  $k = 0.1$ : The momentum thickness is normalized by its initial value.

Kelvin-Helmholtz 不安定性理論によると、流速差が臨界流速差以上となった場合、波の速度  $c$  は複素数  $c_R + ic_I$  で表されるようになり、虚数部分  $c_I$  が界面の不安定化を引き起こす。この時、 $c_I = \sqrt{a(du)^2 + b}$  と表され、波の振幅は、 $A' = A \exp(kc_I t)$  となる。ここで  $a, b$  は、 $\rho_l, \rho_h, g, h, k$  に依存する定数である。また、 $A'$  は測定値  $\eta^{max}$  と  $A' = \eta^{max} - H/2$  を通じて関係している。このことから、波の成長率  $kc_I$  は、 $\ln[(\eta^{max} - H/2)/(\eta_0^{max} - H/2)]$  で表わされることになる。ここで  $\eta_0^{max}$  は、 $du^{init} = 0$  の場合の測定値であり、重力による波の減衰を除去するために用いている。測定結果からは、 $c_I^2$  に相当する  $\{\ln[(\eta^{max} - H/2)/(\eta_0^{max} - H/2)]/k\}^2$  が計算され、その値と  $(du)^2$  との関係が得られる。図 5.3 に、 $k = 0.1$  に対して得られたこの関係を例として示す。この

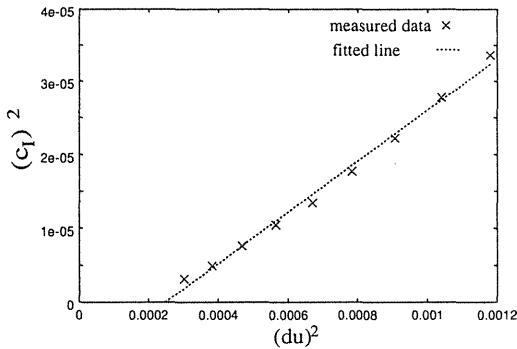


Fig. 5.3 The proportional relation between  $(du)^2$  and  $(c_I)^2$  for  $k=0.1$

関係は、理論的に比例関係である必要がある。よって、シミュレーションで得られた結果も直線であると見なし、直線を当てはめ、その直線を成長率 0 の極限へ外挿した時の  $du$  の値から、臨界流速差  $du_c$  を得ることとした。図には当てはめた直線も示してある。異なる  $k$  に対する同様の解析によって得られた  $du_c$  の値を図 5.4 に示す。この図には、臨界流速差の理論値（式 (5.1) において、 $\sigma = 0, h_h = h_l = H/2$  とした場合の式）

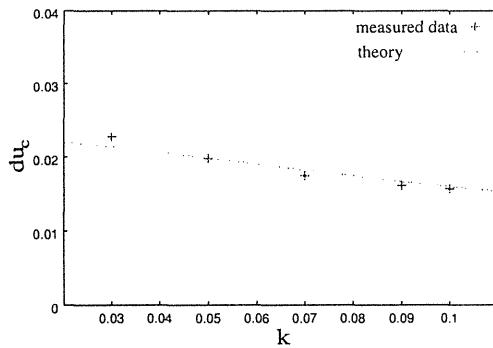


Fig. 5.4 The critical velocity difference against the wave number in 2D simulations

で、 $\sigma = 0, h_h = h_l = H/2$  とした場合の式）

$$du_c^{th} = \sqrt{\frac{\rho_h^2 - \rho_l^2}{\rho_h \rho_l} \frac{g}{k} \tanh(kH/2)}, \quad (5.5)$$

も示してある。この図から、格子ボルツマン法の HCZ モデルの界面は、二次元の場合における Kelvin-Helmholtz の不安定性理論の関係をほぼ満足していることが分かる。

### 5.3 三次元シミュレーションによる検証

次に、三次元に拡張した場合について記述する。二次元の場合と同様に、式 (5.2)において、 $\sigma = 0$ とした式により、臨界流速差の理論式は、

$$du_c^{th} = \sqrt{\frac{(\rho_h + \rho_l)^2}{\rho_h \rho_l} \left[ \frac{(\rho_h - \rho_l) g}{\rho_h + \rho_l} \frac{k}{k} \tanh(kH/2) - \frac{36\nu^2}{W^4 k^2} \right]}, \quad (5.6)$$

となり、この式を比較に用いる。シミュレーション条件は、二次元の場合とほぼ同様であるが、 $y$  方向には文献<sup>(84)</sup>に基づく粘着壁を設定した。粘着壁は、壁面上で流体の流速が 0 になり、流体が移動しない。また、幅方向の境界を粘着壁境界とすることにより、幅方向にせん断効果が現われ、それが三次元効果となり、シミュレーション結果に影響を与えると考えられる。シミュレーションは、 $W = 13$ において  $k = 0.05, 0.07, 0.09, 0.1, 0.15$  の場合を行ない、 $k = 0.1$ において  $W = 11, 13, 15, 19, 29, 39$  の場合を行ない、二次元の場合と同様の解析によって臨界流束差を求めた。得られた結果を理論曲線と共に図 5.5 に示す。この図から、三次元シミュレーションの場合も、Eular-Darcy 解析によって得られる理論値とほぼ一致する臨界流速差を得ていることができる事が分かる。また流路幅の変化についても、理論値をほぼ満足している結果が得られていることが分かる。

以上から、格子ボルツマン法 HCZ モデルの二相界面の成長と流動状態との関係は、定量的に理論解析結果を満足していると考えることができる。

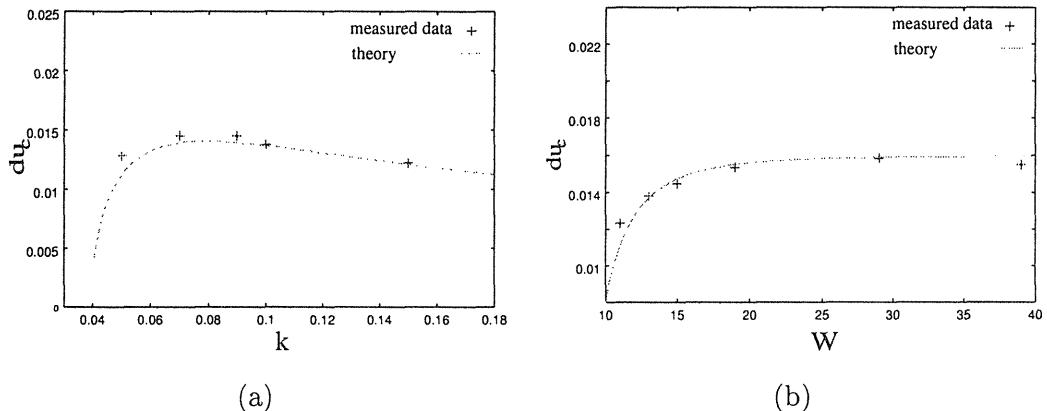


Fig. 5.5 The critical velocity difference against (a) the wave number for  $W = 13$  and (b) the width of the calculation lattice for  $k=0.1$  in 3D simulations

## 6. HCZ モデルによる水平層状二相流の界面成長シミュレーション

前章では、格子ボルツマン法の HCZ モデルの二相界面が、二相流の流動様式遷移を引き起こす基本的な機構の 1 つである Kelvin-Helmholtz 不安定性をほぼ満足していることが確認された。本章では、この結果を考慮し、単純であるが基本的であり、現実の状況でもしばしば現われる矩形断面を持つ水平な流路内における層状二相流に対して、格子ボルツマン法 HCZ モデルを適用し、その界面成長のシミュレーションを試みる。さらにシミュレーションで得られる結果を、二相流の流動状態と流動様式との相関を表した Taitel-Dukler 流動様式線図<sup>(85)</sup>と比較し考察する。尚、本章は、文献<sup>(86,87)</sup>に基づいて記述する。

水平層状二相流については、高さ方向が狭い流路における流路断面形状の波の成長への影響が、文献<sup>(88)</sup>において実験的に調べられており、流路幅が狭い流路での波の不安定性については、文献<sup>(89, 90)</sup>について報告されている。しかし、幅が狭い流路での波の成長と流動様式線図との関係についての報告は見られない。また、流路幅が狭い流路における流動は、多孔質媒体中の流れに類似している<sup>(91)</sup>ことから、流路幅方向の境界の影響を調べることは、き裂や多孔質媒体中などにおける非常に狭い流路での流動の理解に役に立つと考えられる。従って、本章では、さらに、応用計算の一つとして、流路幅の狭い狭隘流路における界面成長のシミュレーションを行ない、流路幅の界面成長への影響も調べた。

### 6.1 Taitel-Dukler 流動様式線図

本節では、まず、Taitel-Dukler 流動様式線図 (T-D 線図)<sup>(85)</sup>について記述する。T-D 線図は、水平流路における気液二相流動に対して、理論的考察に基づいて作られた線図であり、無次元数の関数として与えらえる境界曲線によって分けられた領域によって構成され、それぞれの領域には異なる流動様式が対応している。この線図において、水平層状二相流の波の成長・非成長の境界曲線は、Martinelli パラメータ  $X$  と Froude 数  $F$  の関係で与えられている。文献<sup>(85)</sup>に基づき、高さ  $H$ 、幅  $W$  の矩形断面を持つ流路中での、界面高さ  $\eta$  の水平層状二相流における波の成長・非成長の境界曲線は、

$$F = (1 - \tilde{\eta}) \sqrt{\frac{\tilde{A}_l}{\tilde{u}_l^2 (d\tilde{A}_h/d\tilde{\eta})}} \quad (6.1)$$

と得られる。この式において、 $F$  が右辺の値より大きい場合には波の成長が起り、右辺の値以下の場合には成長が起ららない。つまり、式 (6.1) は、波の成長・非成長についてのしきい値を表わしている。また  $X$  は、

$$X(\tilde{\eta}) = \frac{[(\tilde{u}_l \tilde{D}_l)^{-1} \tilde{u}_l^2 (\tilde{S}_l / \tilde{A}_l + \tilde{S}_i / \tilde{A}_h + \tilde{S}_i / \tilde{A}_l)]}{[(\tilde{u}_h \tilde{D}_h)^{-1} \tilde{u}_h^2 (\tilde{S}_h / \tilde{A}_h)]} \quad (6.2)$$

で与えられ、この式に含まれる変数は、

$$\begin{aligned}
 \tilde{A}_h &= e\tilde{\eta}, \tilde{A}_l = e(1 - \tilde{\eta}), \tilde{A} = e \\
 \tilde{S}_h &= 2(1 - \tilde{\eta}) + e, \tilde{S}_l = 2\tilde{\eta} + e, \tilde{S}_i = e, \\
 \tilde{D}_h &= \frac{4e\tilde{\eta}}{2(1 - \tilde{\eta}) + e}, \tilde{D}_l = \frac{2e(1 - \tilde{\eta})}{\tilde{\eta} + e}, \\
 \tilde{u}_l &= \tilde{A}/\tilde{A}_l, \tilde{u}_h = \tilde{A}/\tilde{A}_h, \\
 e &= W/H
 \end{aligned} \tag{6.3}$$

と書かれる。ここで  $W, H$  は、それぞれ流路断面の幅と高さであり、 $e$  は流路断面のアスペクト比を表わしている。チルダ ( $\tilde{\cdot}$ ) は、代表長さ  $H$ 、代表面積  $H^2$  によって無次元化された変数である。これらの式から  $F$  は  $\tilde{\eta}$  を通じて  $X$  の関数となっていることが分かる。

以下では、格子ボルツマン法 HCZ モデルによる水平層状二相流のシミュレーションにおいて、波の成長、 $X, F$  の測定を行ない、T-D 線図との比較を行なう。

## 6.2 水平層状二相流の界面成長シミュレーション

### 6.2.1 シミュレーション条件

シミュレーションの初期状態として、図 6.1 に示す  $x \times y \times z = L \times W \times H$  の格子に、密度  $\rho_h$  の高密度相と密度  $\rho_l$  の低密度相を、両相界面の高さが  $\eta_0$  となるように設定する。図における  $g$  は、重力加速度を表わす。流動の方向は  $x$  方向とし、その方向の境界条件は、開放境界条件である流入流出境界条件とする。また、 $y, z$  方向では流路壁に相当する粘着壁境界条件を設定する。この粘着壁境界は、境界上の格子点において分布関数の向きを反転させる「跳ね返り壁」境界条件(7)によって設定される。前章では、不安定性理論による理論式との比較を目的としていたので、理論式の導出で仮定されている流速分布に近づけるように、高さ方向をすべり壁境界とした。ここでは、現実的な壁境界を用いた T-D 線図の導出条件に近づけるため、粘着壁境界を高さ及び幅方向に設定した。尚、粘着壁を no-slip wall とも称する。流速は、 $x$  方向の流入境界 ( $x = 0$ ) と流

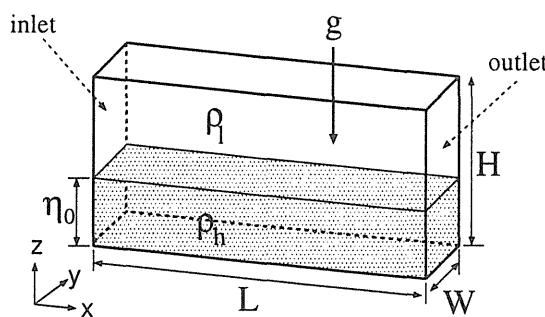


Fig. 6.1 Initial condition of the simulation

出境界 ( $x = L$ ) の間に圧力勾配  $\frac{dp}{dx}$  を与えることによって生じさせる。ここで  $p$  は圧力を表わしている。また、両相間の流速差は、 $\nu_h, \nu_l$  の比を変えることによって与える。さらに、流入境界

では、正弦波が発生するように密度分布を変化させる。以下に、流入境界及び流出境界での境界条件を示す。ここで、*in*、*out*は、それぞれ流入及び流出境界を表す。

$$\begin{aligned}\rho^{in} &= \begin{cases} \rho_h, & \text{for } z < a \sin(kt) + \eta_0 \\ \rho_l, & \text{for } z \geq a \sin(kt) + \eta_0 \end{cases} \\ p^{in} &= p_0, \\ u_x^{in} &= u_x(1, y, z), u_y^{in} = u_z^{in} = 0\end{aligned}\tag{6.4}$$

$$\begin{aligned}\rho^{out} &= \rho(L - 1, y, z), \\ p^{out} &= p_0 - |\frac{dp}{dx}|L, \\ u_x^{out} &= u_x(L - 1, y, z), u_y^{out} = u_z^{out} = 0\end{aligned}$$

この式から分かるように、流入境界では、密度分布、圧力分布、流速のy、z成分の分布を与え、流速のx成分の分布は、境界の格子点から1つ下流の格子点の値を用い、流出境界では、圧力分布、流速のy、z成分の分布を与え、密度分布及び流速のx成分の分布は、境界の格子点から1つ上流の格子点の値を用いている。この境界条件において、*a*は流入境界で生成させる波の振幅、*k*は波数を表す。また、流入流出境界では、上式で与えた巨視的物理量（密度、流速）から $\bar{f}_\alpha^{eq}$ 、 $\bar{g}_\alpha^{eq}$ を計算し、計算格子内へ進入する分布関数とする。ここで、 $\bar{f}_\alpha^{eq}$ 、 $\bar{g}_\alpha^{eq}$ は、付録Cの式(C.23)の $f_\alpha$ 、 $g_\alpha$ を平衡分布関数 $f_\alpha^{eq}$ 、 $g_\alpha^{eq}$ で置き換えて得られる関数を表わしている。

シミュレーションの変数は、*L* = 192、*H* = 60、*W* = 39, 25, 13、各相密度を $\rho_l$  = 0.1、 $\rho_h$  = 0.6、重力加速度の大きさを $g$  =  $1.0 \times 10^{-5}$ 、波の振幅を*a* = 1.0、波の波長を*k* = 0.01、流入境界での圧力を $p_0$  = 0.02と設定した。また、格子間隔及び時間刻み幅は、それぞれ $\delta$  = 1.0、 $\delta_m$  = 1.0とした。表面張力に関する係数 $\kappa$ は、前節のT-D線図が表面張力0の場合に対する結果であることから0とした。また、各相流量の比の違いに対する流動様式線図と比較するため、それぞれの流路幅に対し、初期界面高さ $\eta_0$  = 15, 30, 45, 50を用いた。これから、幅が3通り、界面高さが4通りであるので、12通りの場合を対象としてシミュレーションを行なった。

初期流速分布は、

$$u_x^{init}(x, y, z) = \begin{cases} u_h^m \left\{ 1 - \left( 1 - \frac{y}{W/2} \right)^2 \right\} \left\{ 1 - \left( 1 - \frac{z}{\eta_0} \right)^2 \right\}, & \text{for } z < \eta_0 \\ u_h^m \left\{ 1 - \left( 1 - \frac{y}{W/2} \right)^2 \right\} \left\{ 1 - \left( 1 - \frac{H-z}{H-\eta_0} \right)^2 \right\}, & \text{for } z \geq \eta_0 \end{cases}\tag{6.5}$$

$$u_y^{init}(x, y, z) = u_z^{init}(x, y, z) = 0$$

と設定した。この式では、流路幅方向において、 $y = W/2$ で最大値となる放物線形、高さ方向において、界面位置で最大値 $u_h^m$ となる放物線形を重ね合わせた流速分布を両相で与えている。一般に、高さ及び幅方向が共に粘着壁境界条件の水平層状二相流の流速分布に対する理論解析解は得られていない。しかし、以下で記述するようにT-D線図との比較に用いるための測定は、シミュレーションが定常状態に達した後に行なう。このことから、近似的に式(6.5)を初期流速分布として与えても、それが結果に影響を与えることはないと考えられる。この式において、界面成長のために低密度相の流速を高密度相の流速より大きくする必要があること、低密度相及び高密度

相の流れと共に数値的に安定にシミュレーションできることを指針とした試験的シミュレーションにより、 $u_h^m = 0.05$  とした。また、 $u_h^m$  が、幅方向に関する Poiseuille 流れの理論解析から得られる流速分布の最大値  $\frac{W^2}{8\nu_h\rho_h}|\frac{dp}{dx}|$  になるとし、高密度相の動粘性係数を  $\nu_h = 5.602 \times 10^{-3}$ 、圧力勾配を、それぞれの幅に対して、 $\frac{dp}{dx} = 9.821 \times 10^{-7}$  ( $W = 39$ )、 $\frac{dp}{dx} = 2.541 \times 10^{-6}$  ( $W = 25$ )、 $\frac{dp}{dx} = 1.111 \times 10^{-5}$  ( $W = 13$ ) と設定した。

また低密度相の流速に関しては、それを漸増させて、界面の成長と非成長の境界を見つける必要がある。そこで、その最大流速が  $u_h^m$  より大きな値となることを指針とし、その動粘性係数  $\nu_l$  を変化させ、低密度相の流速を変化させた。(流入流出境界間の圧力差は、上述のように設定されているので、動粘性係数を変化させることにより、流速を変化させることができる。)

### 6.2.2 シミュレーション結果

それぞれの流路幅に対する  $\eta_0 = 15$  の場合のシミュレーション結果の例を図 6.2 に示す。この図では、定常状態に達した後のある時刻における密度分布を示しており、 $y = W/2$  に位置する  $xz$  平面上の分布、及び  $yz$  平面上の分布を示している。また、 $yz$  平面上の分布については、 $xz$  平面上の分布図に示した垂直な直線に位置にある平面の分布を拡大し、垂直な直線の並びと同じ並びで示している。この密度分布において、淡い部分は低密度相、濃い部分は高密度相、界面付近は密度勾配に応じた濃さとなっている。図には、高密度相及び低密度相の Reynolds 数、 $Re_h = u_h^s D_h / \nu_h$ 、

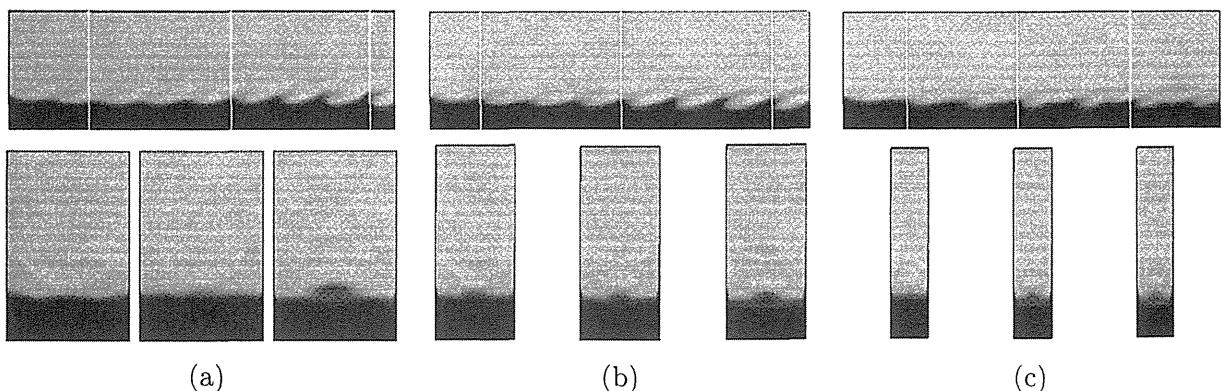


Fig. 6.2 Density distribution of the simulation results ( $\tilde{\eta}_0 = 0.25$ ) (a)  $Re_l = 128.4$ ,  $Re_h = 21.4$ ,  $e = 0.64$ , (b)  $Re_l = 126.5$ ,  $Re_h = 14.1$ ,  $e = 0.40$ , (c)  $Re_l = 87.0$ ,  $Re_h = 11.4$ ,  $e = 0.19$ : In each of the cases, the upper image shows the density distribution on the  $xy$ -plane at  $y=W/2$ . The three lower images show the density distribution on the cross section at the position of the white vertical line of the upper image. The lower images align in the same order with the vertical lines on the upper image. The high density and the low density are shown by dark and light in the gray scale, respectively.

$Re_l = u_l^s D_l / \nu_l$ 、アスペクト比  $e = W/H$ 、及び  $\tilde{\eta}_0 = \eta_0/H$  を示してある。ここで、 $u_h^s$ 、 $u_l^s$  は、各相のみかけ流速を表し、それは、各相の質量流量  $M_h$ 、 $M_l$  を用い、 $u_h^s = M_h / (\rho_h A)$ 、 $u_l^s = M_l / (\rho_l A)$  によって定義される<sup>1</sup>。この図から、各々の場合において、流入境界において発生させた波が、流

<sup>1</sup> みかけ流速は、各相ぞれぞれが、仮に流路全体を占めて流れた場合の流速を表わしている。質量流量は、流体がある断面を単位時間に通過する量を質量で測った値を表わしている。

出境界へ向かい成長している様子が模擬されているのが分かる。また、 $x$  方向に垂直な平面上の密度分布において、どのアスペクト比の場合も、中央付近で波の盛り上がりが見られる。これについては、以下のように考えられる。図 6.2 に示した場合に対して、高さ方向で平均した  $x = L/2$  に

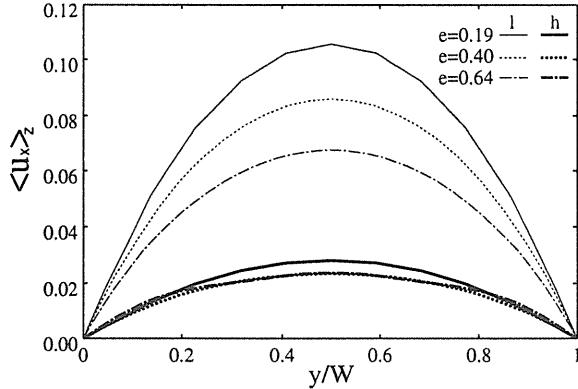


Fig. 6.3 Comparison of the profile of the  $x$ -component flow velocity averaged in the  $z$  direction for each phase: These are the velocity profiles for the cases of (a), (b), and (c) in Fig.6.2. The thick line is for the dense phase and the thin line is for the rare phase.

おける各相の定常流速の  $x$  成分の幅方向に関する分布（図 6.3）によると、どの流路幅の場合も、両相の流速差が、左右の壁において 0 となり、中央へ向かうと大きくなる様子が見られる。このため、Kelvin-Helmholtz の不安定性に起因する波の成長が、中央付近で顕著となっていると考えられる。この図において、高密度相の流速は、初期流速分布の最大値 0.05 より小さくなっているが、これは、各相において高さ方向で平均したことによる。

さらに、シミュレーション結果の流速分布の妥当性を見るために、 $\eta_0 = 15$  の場合において、低密度相の流速分布の形状を測定した。文献(92)によると、矩形断面流路中における水平層状二相流の低密度相の流速を幅方向で平均した分布を、低密度相の高さ（高さ方向の厚み）で規格化した場合、その分布の最大値の位置が、低密度相の Reynolds 数が増加するに従い、上の境界へ移動することが報告されている。そして、この現象は、界面の波の大きさによる界面のせん断応力の増加によるとしている。図 6.4 に、それぞれの流路幅の場合に対して、 $x/L = 0.5$  における低密度相の流路幅方向で平均した流速分布を示す。図では、文献(92)との比較のため、分布の高さ方向を低密度相の高さで規格化し、また流速の大きさをその最大値で規格化した結果を示す。この結果から  $e = 0.64$  では、低密度相の流速の最大値の位置は、その Reynolds 数が増加するに従って増加しており、文献(92)の結果と同様の傾向を示している。しかし、この傾向は、アスペクト比が小さくなることにより小さくなっていることも分かる。これは、流路幅が狭くなり幅方向の壁の影響が顕著となることにより、流速分布が、二次元流動における放物線型から台形型に変形するためと考えられる。このことについては 6.3 節において記述する。

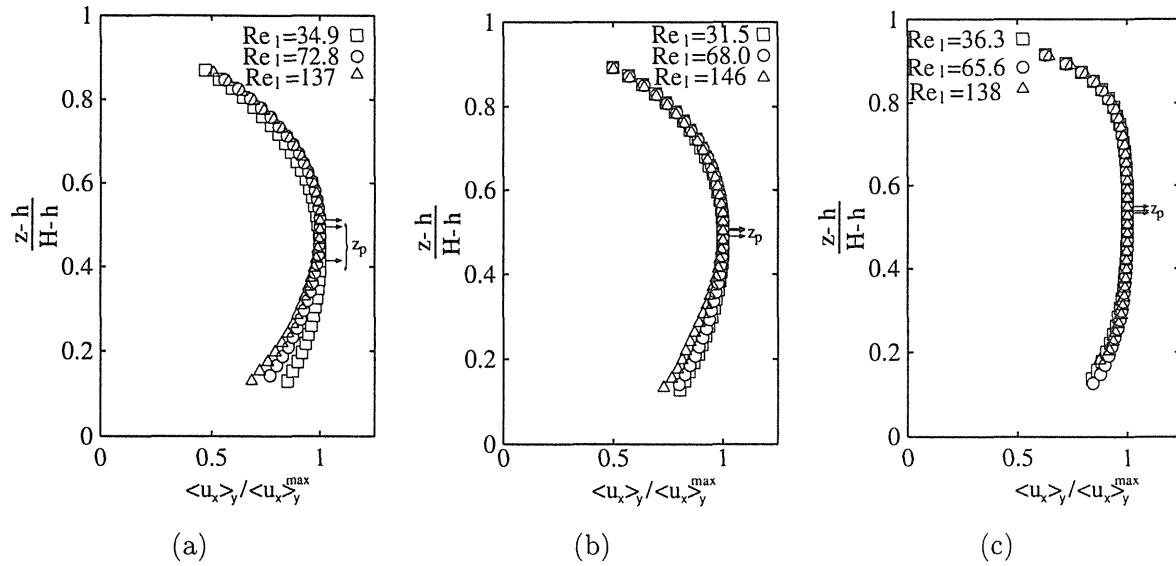


Fig. 6.4 The  $x$ -component flow velocity profile of the rare phase which is obtained by averaging in the  $y$  direction ( $\tilde{\eta}_0 = 0.25$ ): (a)  $Re_l = 34.9, 72.8, 137$ ,  $e = 0.64$  (b)  $Re_l = 31.5, 68.0, 146$ ,  $e = 0.40$  (c)  $Re_l = 36.3, 65.6, 138$ ,  $e = 0.19$ : In these figures, the position of the maximum speed of the rare phase is shown by  $z_p$ .

### 6.2.3 無次元数と界面成長の測定

前節のシミュレーションにおいて、 $x$  方向に垂直な測定断面を、流入流出境界から最も離れており、それらの影響が少ないと考えられる  $x/L = 0.5$  の位置に設定し、その断面上における各相が占める領域の面積、各領域を通る質量流量及び平均密度を測定した。これらの測定値から  $X$  及び  $F$  を以下の式にしたがって算出した。

$$F = \sqrt{\frac{\rho_l}{\rho_h - \rho_l}} \frac{u_l^s}{\sqrt{gH}}, \quad (6.6)$$

$$X = \sqrt{\frac{|(dp/dx)_h^s|}{|(dp/dx)_l^s|}},$$

$$|(dp/dx)_n^s| = \frac{64}{H} \left( \frac{u_n^s H}{\nu_n} \right)^{-1} \frac{\rho_n(u_n^s)^2}{2}. \quad (6.7)$$

ここで、 $n$  は、 $h$ 、 $l$  を表す。この式は  $X$  と  $F$  の定義を与えており、式(6.1)及び(6.2)との関係及び式(6.7)については、文献(85)に詳細に示されている。図 6.5(a) に、10 ステップ毎に測定して得られた  $X$ 、 $F$  の時間変化の例を示す。この図における  $F$  の初期の増加は、低密度相の  $x$  方向の流速を式(6.5)で与えたため、その流速が時間の経過に従って増加していることによる。また  $X$  の変化は、各相の流速が定常状態になる前の変動である。この図から、 $X$ 、 $F$  は、ある時刻から一定値の周りで振動している定常状態となるので、流動様式線図との比較には、この定常状態の範囲で時間平均した値を用いる。

界面の成長・非成長については、 $x/L = 0.5$  の位置の他に  $x/L = 0.0$  の位置に測定断面を設定し、それぞれの測定断面上で界面の位置を測定し、その差から判断する。界面の位置は、測定断面上で密度が  $\rho_m = \frac{1}{2}(\rho_h + \rho_l)$  となる点とし、さらに前節において  $y$  方向中央付近において界面成長が見られていたことから、 $y = W/2$  における界面高さを測定する。この測定を 10 ステップ毎に行なった結果の例を図 6.5(b) に示す。この図において、 $x/L = 0.5$  の測定断面での界面位置の変化において、初期変動が見られるが、図 6.5(a) の場合と同様、ある時刻以降に振動しながら定常状態となっていることがわかる。このことから、界面高さの比較は、この定常状態になっている範囲において、平均値からの分散  $\sigma(x/L)$ 、

$$\begin{aligned}\sigma(x/L) &= \frac{1}{T_2 - T_1} \sum_{t=T_1}^{T_2} (\eta(t, x, y = W/2) - \eta_{ave}(x))^2, \\ \eta_{ave}(x) &= \frac{1}{T_2 - T_1} \sum_{t=T_1}^{T_2} \eta(t, x, y = W/2)\end{aligned}\quad (6.8)$$

を、二つの測定断面で計算し、 $\sigma(x/L = 0.5)/\sigma(x/L = 0.0)$  が 1 より大きい場合に、界面は成長、1 以下の場合は非成長とした。ここで  $T_2 - T_1$  は、測定量が定常状態となっている範囲のステップ数を表す。尚、図 6.5 では確認しにくいが、10 ステップ毎の測定が、図に現われる測定値の振動の周期より十分小さな間隔となっていることは確認されている。

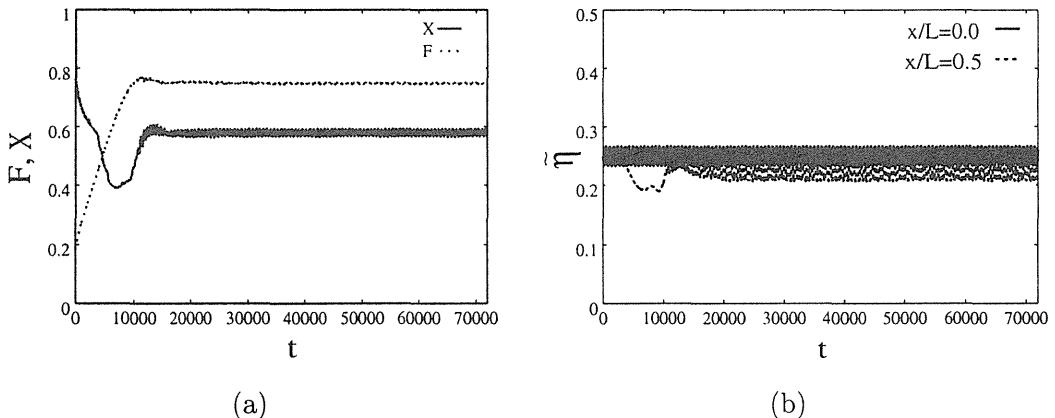


Fig. 6.5 Measurement of (a) $F, X$  at  $x/L = 0.5$  and (b) $\tilde{\eta}$  at  $x/L = 0.0$  and  $x/L = 0.5$  ( $Re_t = 166.1, Re_h = 21.6, e = 0.63, \tilde{\eta}_0 = 0.25$ )

### 6.3 Taitel-Dukler 流動様式線図との比較

シミュレーションでの測定値から算出した  $X, F$  と 6.1 節の流動様式線図との比較を、 $e = 0.64, e = 0.40, e = 0.19$  の場合に対して、それぞれ図 6.6 に示す。これらの図において、界面成長が見られる場合は  $\circ$ 、非成長の場合は  $+$  で表してある。さらに、式(6.1)～式(6.3)によって得られる界面成長・非成長を区別する理論曲線を実線で示している。

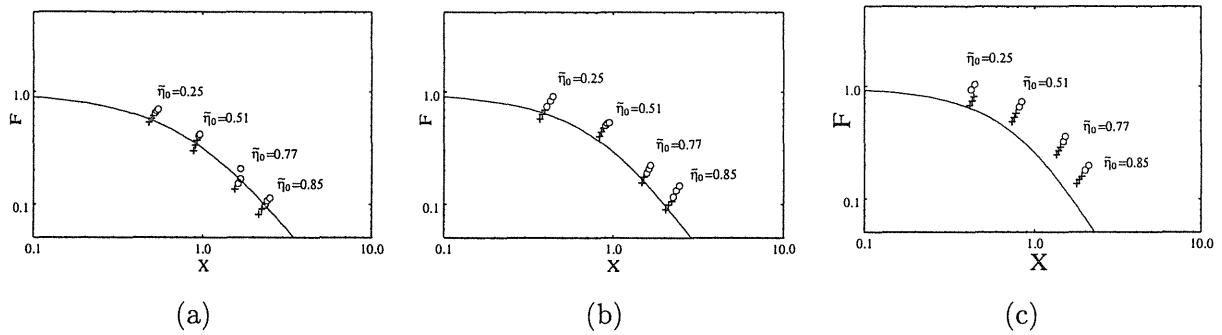


Fig. 6.6 Comparison of the interfacial growth threshold between the flow regime map and the simulation results for (a) $e = 0.64$ , (b) $e = 0.40$ , and (c) $e = 0.19$

図 6.6(a)において、シミュレーションで得られた界面の成長・非成長の境界は、理論曲線とほぼ一致していることが分かる。さらに図 6.6(a)の場合から、アスペクト比を小さくした場合に対する図 6.6(b), (c)では、その境界が徐々に理論曲線から上方に離れていく様子が見られる。これについて以下の理由が考えられる。文献<sup>(91)</sup>では、 $e = 0.5$ 程度以上の場合、流路高さ方向の流速分布は放物線の形状となるが、流路幅が狭くなるほど、幅方向の壁境界の影響によって、その流速分布は台形に近い形状となることが報告されている。本論文のシミュレーションにおいても、流路幅方向で平均した定常流速の  $x$  成分の高さ方向分布の比較（図 6.7）に見られるように、文献<sup>(91)</sup>の報告と同様な結果が得られている。このことから、流路幅が狭い場合に、流路幅が広い場

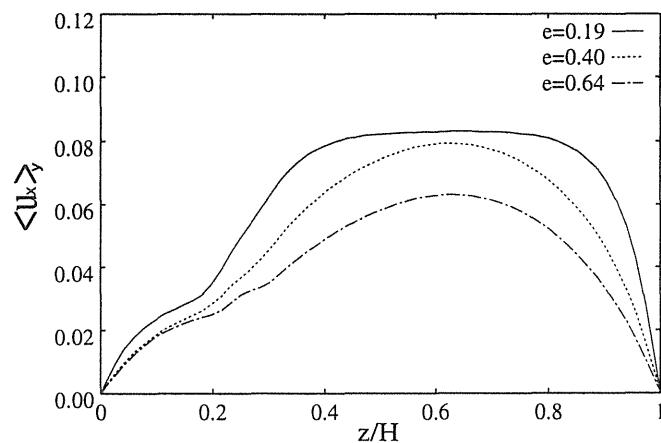


Fig. 6.7 Comparison of the distribution of the x-component flow velocity averaged in the y direction for Fig.6.2(a), (b), and (c)

合と同程度の最大流速を得て、波を成長させるためには、より大きなみかけ流速が必要であると言つてよい。さらに、アスペクト比が小さい場合、流路幅方向の壁境界の影響が大きくなる。

り、流れの三次元性が顕著となるため、二次元水平層状二相流の Kelvin-Helmholtzm 不安定性に基づいて得られた T-D 線図の波の成長・非成長曲線から離れると考えられる。また、本章での計算条件と若干の差異があるものの、前章の図 5.5(b)において、Eular-Darcy 解析によって得られる矩形断面流路における水平層状二相流の波の成長を引き起こす二相間の流速差は、 $e = 0.5$  程度以上において、流路幅の影響をほとんど受けないことが示されている。このことからも、 $e = 0.5$  程度以上では、流れの三次元性がほとんど見られなくなると考えることができる。

以上の結果から、格子ボルツマン法 HCZ モデルによる矩形断面流路中の水平層状二相流のシミュレーションにおいて、その密度分布及び流速分布はほぼ妥当であることが見られた。また、流動状態と界面成長との関係を表す流動様式線図の界面成長・非成長境界を再現できることが分かった。さらに、この界面成長・非成長境界は、矩形流路のアスペクト比に關係し、その値が小さくなる（流路幅が高さに対して狭くなる）と、流速分布が三次元性の影響を受け、Taitel-Dukler の理論曲線によって与えられる  $F$  の値（ $F$  は低密度相のみかけ流速に比例するので、言いかえると低密度相のみかけ流速）より、大きな値が界面成長に必要であることが分かった。

## 7. HCZ モデルによる水平層状二相流における液滴発生シミュレーション

前章において、格子ボルツマン法によって、矩形断面を持つ流路内における水平層状二相流の界面成長のシミュレーションがなされ、流動状態と界面成長との関係を表す理論的流動様式線図(T-D 線図)の再現が可能であることが示された。本章では、さらに複雑な界面形状を現す水平層状流の界面からの液滴発生現象のシミュレーションを行ない、その界面形状変化を観察する。さらに、液滴発生と流動状態との相関を表す Ishii-Grolmes 実験相関式<sup>(93)</sup>の再現を試みる。尚、本章は、文献(94, 95, 96)に基づいて記述する。

液滴発生現象は、原子炉や熱交換器内において見られる現象であり、液滴の飛散や壁への付着が熱の輸送効率に影響を与える<sup>(5)</sup>。そのような現象に対する数値計算では、液滴を液膜と気相とは別の相とする三流体モデルを用いているが、液滴の発生条件や発生量などについては、やはり実験結果に基づく相関式等によって与えられる。従って、格子ボルツマン法により、液滴発生現象がシミュレーションされ、実験相関式が再現されれば、実験によらずに、様々な条件における相関式を得ることが可能になると思われる。

### 7.1 Ishii-Grolmes 実験相関式

Ishii と Grolmes は、幾つかの条件における実験結果に基づき、液膜からの液滴発生が起こる時の流動状態を無次元数で整理した以下の実験相関式を提案した<sup>(93)</sup>。

$$V_l = \begin{cases} N_\mu^{0.8} & \text{for } N_\mu \leq \frac{1}{15} \\ 0.1146 & \text{for } N_\mu > \frac{1}{15} \\ 11.78N_\mu^{0.8}Re_h^{-1/3} & \text{for } N_\mu \leq \frac{1}{15} \\ 1.35Re_h^{-1/3} & \text{for } N_\mu > \frac{1}{15} \\ 1.5Re_h^{-1/2} & \end{cases} \begin{cases} Re_h \geq 1635, \\ 160 \leq Re_h \leq 1635, \\ Re_h \leq 160, \end{cases} \quad (7.1)$$

この式において、 $V_l$  は無次元気体速度 (dimensionless gas velocity)、 $N_\mu$  は粘性数 (viscosity number)、 $Re_h$  は液膜 Reynolds 数であり、それぞれ、

$$V_l = \frac{j_l \mu_h}{\sigma} \sqrt{\frac{\rho_l}{\rho_h}}, \quad N_\mu = \mu_h \left( \rho_h \sigma \sqrt{\frac{\sigma}{g(\rho_h - \rho_l)}} \right)^{-1/2}, \quad Re_h = \frac{4\rho_h u_h \eta}{\mu_h}, \quad (7.2)$$

と、界面張力  $\sigma$ 、重力加速度  $g$ 、気相みかけ流速  $j_l$ 、気相密度  $\rho_l$ 、液相 (液膜) の粘性率  $\mu_h$ 、液相密度  $\rho_h$ 、液相流速  $u_h$ 、液相厚さ (界面高さ)  $\eta$  を用いて定義されている。以下におけるシミュレーションでは、これらの無次元数の測定、及び液滴発生の観測を行ない、それらの関係と式(7.1)との比較を行なった。

## 7.2 水平層状二相流における液滴発生シミュレーション

本論文では、界面に波が現われない定常な水平成層二相流をシミュレーションし、さらに流入境界において、界面に1つの凸状の波(擾乱)を発生させ、そこからの液滴の発生を観察した。このように、擬似的な擾乱から液滴を発生させる手法は、実験においても用いられている<sup>(97)</sup>。以下において、この波からちぎれた高密度相の塊を液滴と呼ぶ。

### 7.2.1 成層二相流シミュレーション

#### シミュレーション条件

本章では、シミュレーションで得られる流動状態を Ishii-Grolmes 実験相關式と比較するため、シミュレーションにおいて両相の流速を独立に変化させる必要がある。さらに、液滴発生現象は流体の粘性に影響されることから、比較するすべての場合において、各相の粘性条件を同一にする必要がある。これらのこと考慮し、以下のようにシミュレーション条件を設定する。

計算格子の形状は、前章の図 6.1 と同様とする。前章では、流入流出境界間の圧力差を固定し、二相の動粘性係数の比を変化させることにより、流速差を生じさせたが、本章では、上記の理由から、各相の粘性を固定し、流入境界において各相の流速分布を与えることとする。しかし、前章でも触れたが、高さ方向及び幅方向が共に粘着壁境界の場合に対する流速分布の理論解析解は得られていない。そこで、理論解析によって流速分布が得られるように壁境界の条件を変え、流入境界においてその理論解析解の流速分布を与えることとする。二次元成層二相流については、その流速分布の理論解析解を得ることができる。そこで、三次元流路において流速に関して二次元流動を再現できるよう、高さ方向を粘着壁境界、幅方向をすべり壁境界に設定する。それぞれの境界の設定方法は、前々章及び前章で記述した方法を用いている。このような壁境界条件では、幅方向の境界条件が流速分布に影響を与えないことから、流速分布は二次元成層二相流に対する分布となり、それは以下に示す式によって与えられる。この式では、理論解析によって得られた流速であることを添え字 *th* によって示している。

$$u_x^{th} = \begin{cases} a_l z^2 + b_l z + c_l, & \text{for } z \geq \eta_0 \\ a_h z^2 + b_h z + c_h, & \text{for } z < \eta_0 \end{cases},$$

$$a_l = -2u_l^m \frac{\left(1 - \frac{1}{2}\frac{u_h^m}{u_l^m}\right) + \sqrt{1 - \frac{u_h^m}{u_l^m}}}{(H - \eta_0)^2}, \quad a_h = \frac{-u_h^m}{\eta_0^2}, \quad (7.3)$$

$$b_l = \frac{-u_l^m - a_l(H^2 - \eta_0^2)}{H - \eta_0}, \quad b_h = -2a_h\eta_0,$$

$$c_l = \frac{H}{H - \eta_0}u_l^m + a_lH\eta_0, \quad c_h = 0.$$

ここで、 $u_h^m$   $u_l^m$  は、それぞれ高密度相及び低密度相の流速の最大値である。また、 $H$  は流路高さ、 $\eta_0$  は初期界面高さを表す。この式では、界面高さ、最大流速値をそれぞれ独立に与えることがで

きる。以上のことから、成層二相流の生成シミュレーションの初期条件を、

$$\begin{aligned}\rho^{init}(x, y, z) &= \begin{cases} \rho_l & \text{for } z \geq \eta_0 \\ \rho_h & \text{for } z < \eta_0 \end{cases}, \\ p^{init}(x, y, z) &= \begin{cases} p_0 - (a_l/\mu_l)(L-x) & \text{for } z \geq \eta_0 \\ p_0 - (a_h/\mu_h)(L-x) & \text{for } z < \eta_0 \end{cases}, \\ u_x^{init}(x, y, z) = u_y^{init}(x, y, z) = u_z^{init}(x, y, z) &= 0,\end{aligned}\quad (7.4)$$

と設定する。さらに流入及び流出境界条件は、

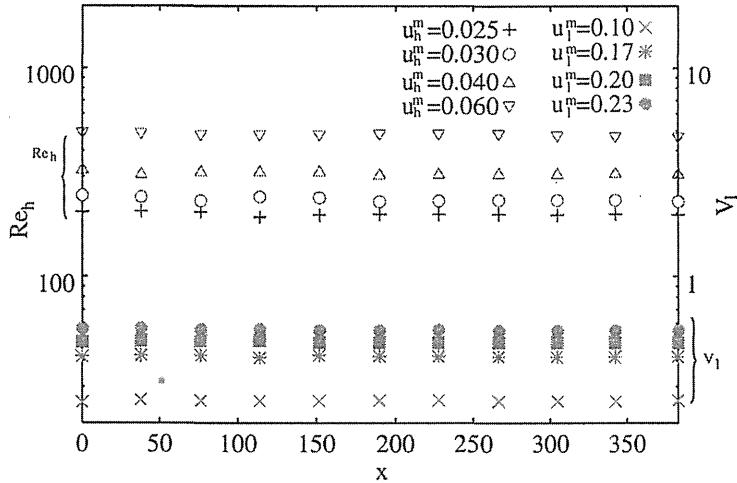
$$\begin{aligned}\rho^{in} &= \rho^{init}(0, y, z), \\ p^{in} &= \begin{cases} p(1, y, z) - (a_l/\mu_l), & \text{for } z \geq \eta_0 \\ p(1, y, z) - (a_h/\mu_h), & \text{for } z < \eta_0 \end{cases}, \\ u_i^{in} &= u_i^{init}(0, y, z), \\ \rho^{out} &= \rho(L-1, y, z), \\ p^{out} &= p_0, \\ u_x^{out} &= u_x(L-1, y, z), \quad u_y^{out} = u_z^{out} = 0,\end{aligned}\quad (7.5)$$

と設定する。ここで  $i = x, y, z$  を表し、また  $p_0$  は定数である。この式から分かるように、流入境界では、密度分布及び流速分布を設定し、圧力分布は、流入境界の格子点より 1 つ下流の格子点の値を用いており、流出境界では、圧力分布及び流速分布の  $y, z$  成分を固定し、密度分布および流速分布の  $x$  成分に流出境界の格子点より 1 つ上流の格子点での値を与えていている。また前々章及び前章と同様、流入流出境界における巨視的物理量から、平衡分布関数  $\bar{f}^{eq}, \bar{g}^{eq}$  を計算し、それらを格子内へ進入する分布関数とする。

このシミュレーション条件において、格子間隔及び時間刻み幅を、それぞれ  $\delta = 1, \delta_t = 1$  とし、その他のパラメータを、 $H = 38, \eta_0 = 10, g = 1.0 \times 10^{-5}, \sigma = 1.368 \times 10^{-3}, \rho_l = 1.0, \rho_h = 4.0, \mu_l = \mu_h = 0.013, p_0 = 0.2$  と設定した。これらの変数は、成層二相流の生成及び液滴発生が、数値的に安定にシミュレーションされるよう、幾つかの試験的な計算を行なうことによって経験的に決定した。以下では、 $W, L, u_h^m, u_l^m$  を変化させ、まず液滴を発生させる成層二相流の生成シミュレーションを行なう。

### 無次元数の測定

Ishii-Grolmes 実験相關式に現われる無次元数、特に流動状態に関する無次元数である  $Re_h$  及び  $V_l$  は、測定する位置によって変化する可能性がある。それを見るため、定常に達した成層二相流を生成し、 $x$  方向を 10 等分する流れ方向に垂直な断面上それぞれにおいて  $Re_h$  と  $V_l$  を測定し、比較を行なった。図 7.1 に、 $W = 37, L = 383, u_h^m = 0.025, 0.03, 0.04, 0.06, u_l^m = 0.1, 0.17, 0.2, 0.23$  の場合を例として示す。この図において、それぞれの位置における  $Re_h, V_l$  は、ほとんど変化が見られない。このことから、本論文では、成層流において  $x = 0$  で得られる無次元数の値をシミュレーション結果の整理に用いることとする。

Fig. 7.1  $Re_h$  and  $V_l$  measured on the cross section at several points in the x direction

### シミュレーション結果

幅を  $W = 37$ 、長さを  $L = 383$ とした計算格子の流入境界において  $Re_h = 324$ 、 $V_l = 0.263$  となる流速分布及び密度分布を与え、定常状態に達した後のシミュレーション結果を、一例として図 7.2 に示す。この図では、 $\rho_m = \frac{1}{2}(\rho_l + \rho_h)$  の値を持つ位置を界面として表示してある。この図から、成層二相流の界面は、概ね妥当なシミュレーションがなされていると考えられる。また、この

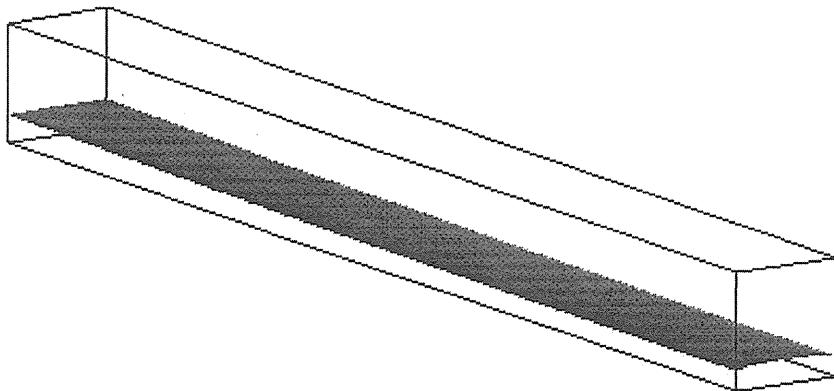


Fig. 7.2 Simulation result of the stratified two-phase flow ( $Re_h = 324, V_l = 0.263, L = 383, W = 37$ ): The flow direction is from the left side to the right. This image is the snapshot at a certain time step after the simulation becomes the stable state.

結果に対する、密度分布、流速分布、及び圧力分布を図 7.3 に示す。この図において、上段に密度分布、中段に流速分布、下段に圧力分布を示している。密度分布と圧力分布については、 $y = W/2$  に位置する  $xz$  平面上の分布と、その分布図に垂直な直線で示した位置にある  $yz$  平面上の分布を示す。それぞれの分布は、値が大きい場合に濃く、小さい場合に淡くなる濃淡図として示している。速度分布では、密度分布及び圧力分布に示す  $yz$  平面の位置を始点とした流速ベクトルを示し

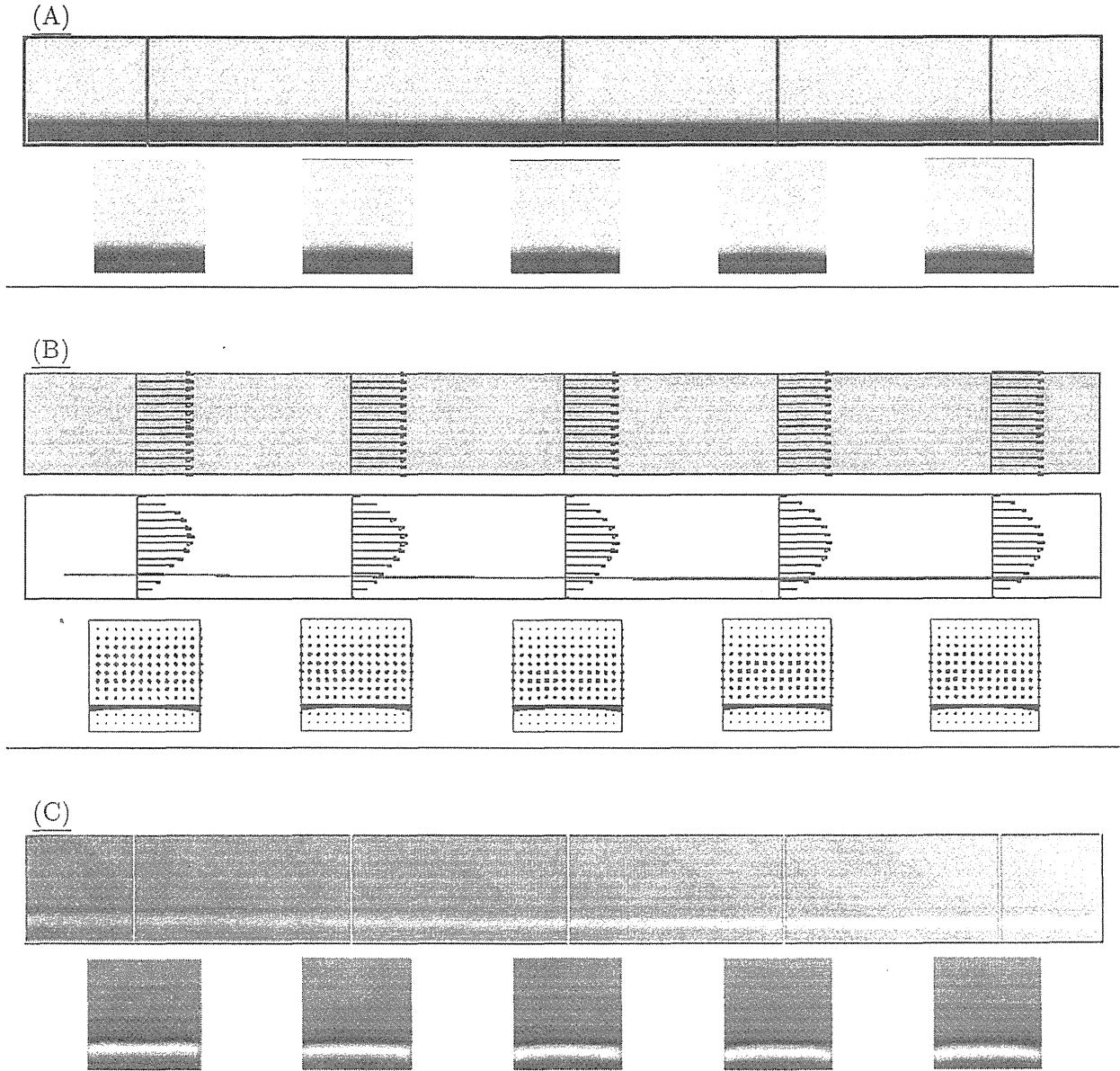


Fig. 7.3 Distribution of density, flow velocity, and pressure of the stratified two-phase flow ( $Re_h = 324, V_t = 0.263, L = 383, W = 37$ ): The density distribution, the flow velocity distribution, and the pressure distribution are shown in the field of (A), (B), and (C), respectively. In each field, the upper image is for the  $xz$  plane at  $y = W/2$  and the lower images are for the cross section at the position of the vertical line on the upper image. The lower images align in the same order with the vertical lines. The density and pressure distribution are represented by the gray scale in which dark intensity means the large value and light intensity is the small value. The velocity distribution is represented by the velocity vector whose tail is on the cross section.

ている。流速分布の $yz$ 平面上の分布は、ベクトルを正面から見た図であり、ベクトルの先端の大きさが、ベクトルの大きさに比例して示している。さらに、その分布を側面及び上方から見た図も示してある。また、流速分布には、界面も同時に示してある。

さらに、流路幅の流動への影響を見るために、 $W = 11$ 、 $W = 63$ の場合のシミュレーションを、上記の場合と同様の流動条件で行なった。それぞれの場合に対して、幅方向で平均した界面高さ及び流速分布を比較した結果を図 7.4 に示す。この図において、 $W = 11$  と  $W = 37$  の流速分布は、互いに重なっているため区別できない。この図から、 $W = 63$ の場合、流出境界付近において

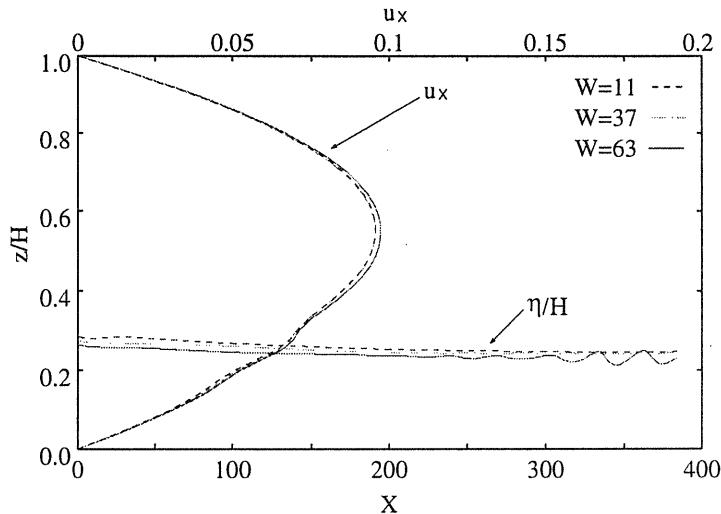


Fig. 7.4 Comparison of  $\eta$  and  $u_x$  averaged in lattice width among different lattice widths: The velocity profiles for  $W = 11$  and  $W = 37$  cannot be distinguished because they overlap each other.

て界面に多少波が現われているが、界面高さに差は見られない。また流速分布についても大きな違いは現われない。これらのことから、 $W = 11 \sim 63$  の範囲において、定常成層二相流のシミュレーション結果は、幅方向の影響をほとんど受けていないことが分かる。これは、幅方向をすべり壁境界としたことによると考えられる。

また、文献<sup>(92)</sup>に示されている低密度相の流速分布の変化傾向を、前章と同様に、図 7.5 に示す。ここでは、流路幅方向の境界をすべり壁境界としているため、この図において、前章と異なり、どの流速分布も放物線形となり、また低密度相の Reynolds 数が増加するに伴い、流速の最大値の位置が上方へ移動する様子が見られる。これらのことからも成層二相流シミュレーションは、妥当な結果を与えているとと考えられる。

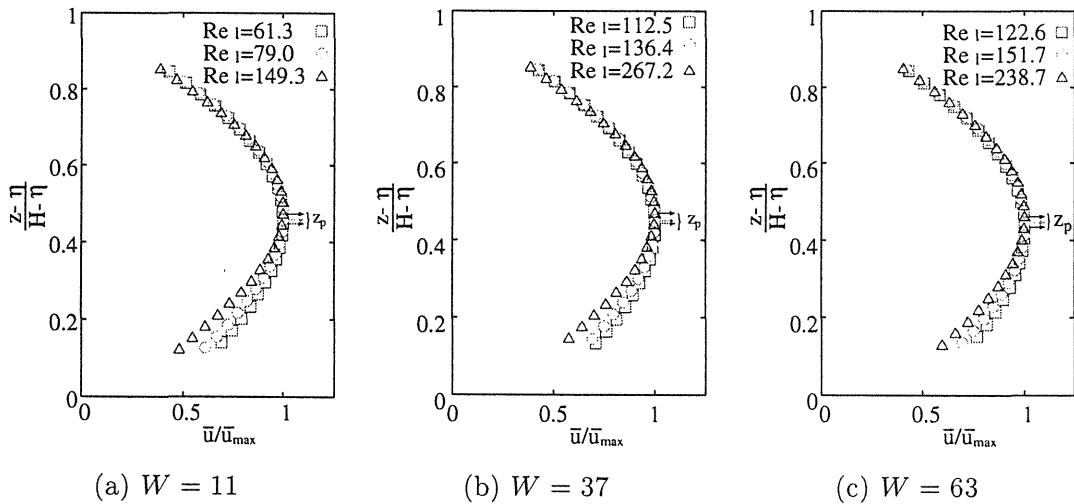


Fig. 7.5 The  $x$ -component flow velocity profile of the rare phase which is obtained by averaging in the  $y$  direction( $\eta_0/H = 0.25$ ): In these figures, the position of the maximum speed of the rare phase is shown as  $z_p$ .

## 7.2.2 液滴発生シミュレーション

### シミュレーション条件

液滴発生のシミュレーションでは、流入境界において、界面上に図 7.6 に示す形状の波(擾乱)を発生させる。この図において  $a$ ,  $b$  は、それぞれ波の高さ及び長さを表す。この際、Ishii-Grolmes の実験相関式と比較することを考慮し、低密度相の流入流量( $j_l$ )が、波を発生させない成層流の場合と変わらないように  $u_l^m$  を変化させた。以下では、 $a = 5$ ,  $b = 40$ 、としてシミュレーションを行なう。

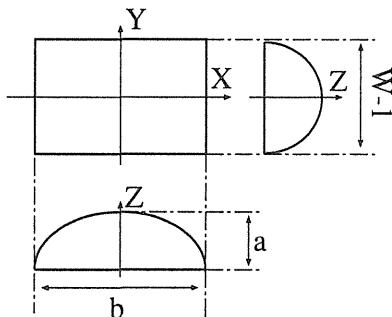


Fig. 7.6 Wave generated at the inlet

### 液滴の検出

液滴発生の検出については、 $\rho_m$  を閾値としたクラスタリングの手法<sup>(22)</sup>を用い、計算格子内のすべての領域を高密度相と低密度相のいずれかの領域に分割し、連続した高密度相の塊の数を計測することにより行なった。計測された高密度相の数が 2 以上になった場合に液滴が発生したと判断した。このクラスタリング手法では、各格子点を、その点の密度の大きさにより高密度相また

は低密度相に分類し、界面は各相の間にあるとしている。そのことから、本論文では、1つの格子点が1つの高密度相となる場合も液滴と見なした。

### シミュレーション結果

図7.2に示した定常な成層二相流の流入境界において図7.6に示す波を生成し、液滴を発生させた場合のシミュレーション結果を図7.7に示す。図では、液滴が発生した瞬間を示している。また、液滴を見やすくするため、液滴を含む領域を抽出拡大した図も示してある。この図において、

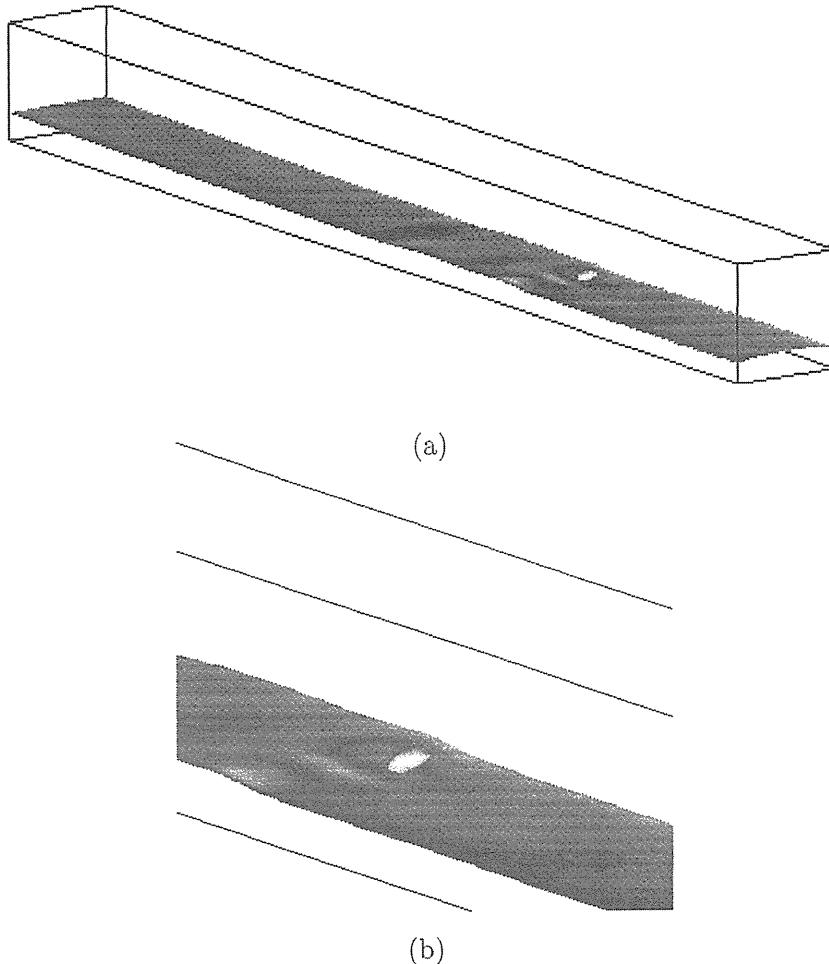


Fig. 7.7 Simulation result of the droplet creation ( $Re_h = 324, V_l = 0.263, L = 383, W = 37$ ): The bird's-eye view of the entire interface is shown in (a). The flow direction is from the left side to the right. The region including the droplet is extracted and magnified to see the droplet clearly and shown in (b). The image is the snapshot at  $t=5190$  which is the time step counted after starting the generation of the wave.

高密度相が界面の波からちぎれ、液滴が発生している様子が見られる。また成層二相流の場合と同様、密度分布、流速分布、及び圧力分布を図7.8に示す。この図において、液滴が発生している場所において、いずれの分布でも成層二相流の分布と異なる様子を示している。また、図7.9及び図7.10には、流路幅を  $W = 11, W = 63$ とした場合のシミュレーションにおける、液滴発生

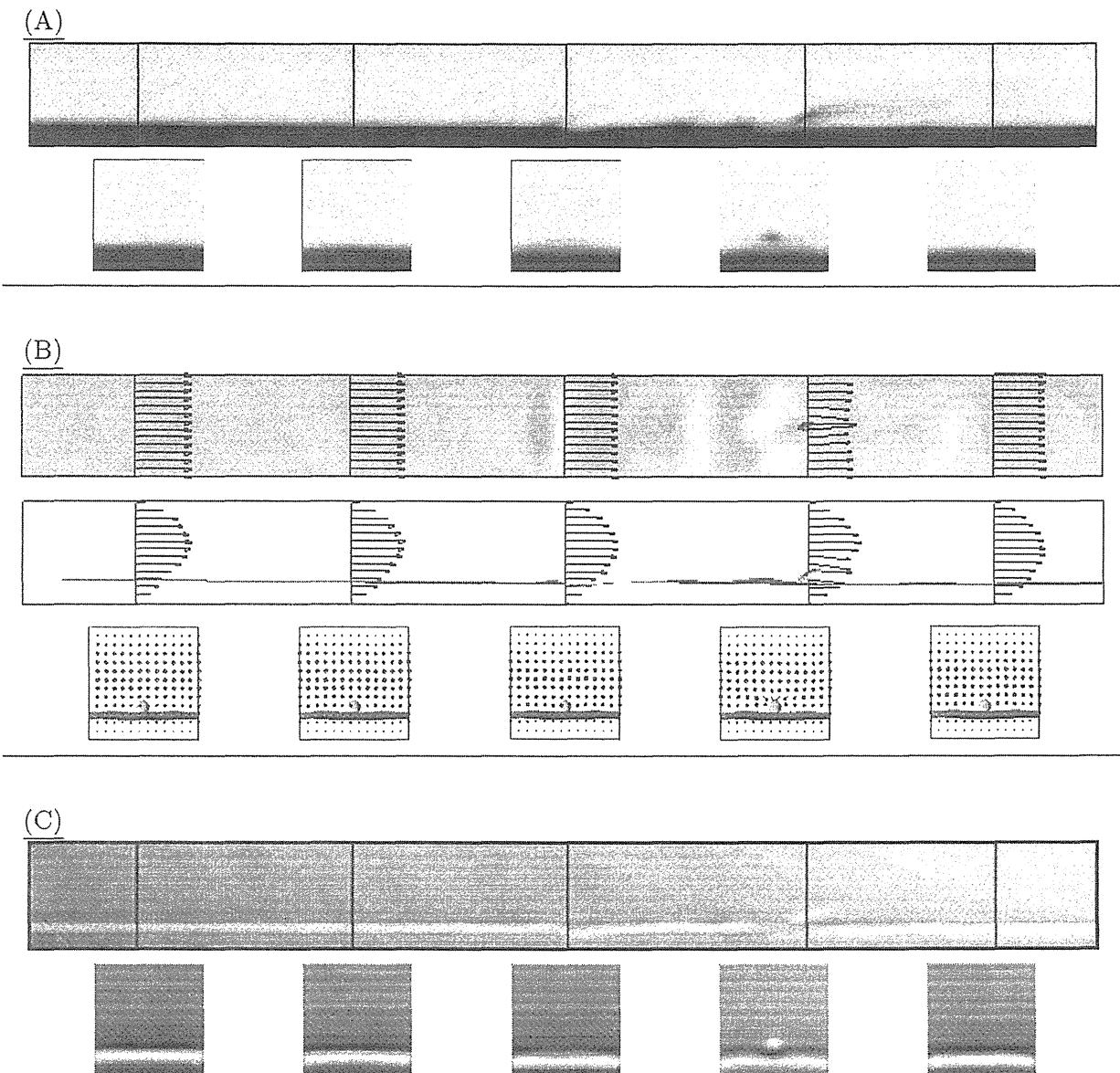


Fig. 7.8 Distribution of density, flow velocity, and pressure in the case of the droplet creation in the stratified two-phase flow ( $Re_h = 324, V_t = 0.263, L = 383, W = 37$ ): The arrangement of the images is same with that of Fig.7.3.

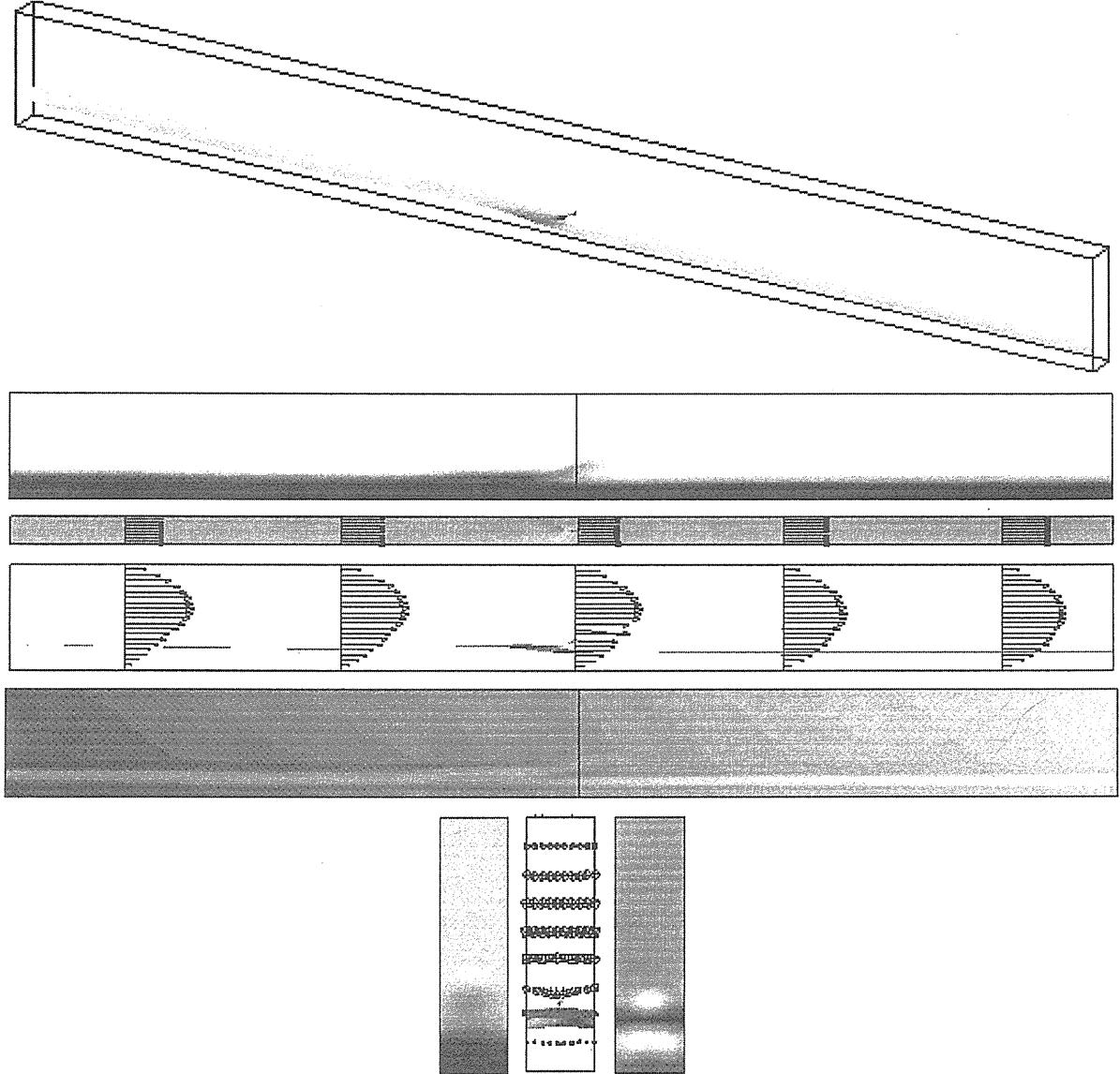


Fig. 7.9 Interface and the distribution of density, flow velocity ,and pressure in the case of the droplet creation in the stratified two-phase flow ( $Re_h = 324$ ,  $V_l = 0.311$ ,  $L = 383$ ,  $W = 11$ ): The top image is the bird's-eye view of the interface. The second image is the density distribution on the xz plane at  $y = W/2$ . The third and forth images are the top and the side view of the velocity distribution with the interface, respectively. The fifth image is the pressure distribution on the xz plane at  $y = W/2$ . The bottom images from the left to the right are the density, the velocity, and the pressure distribution on the yz plane at the position of the vertical line on the density and the pressure distribution, respectively. The bottom images are shown as the magnified image of the distribution on the cross section to make them clear. These are the snapshot at  $t=3770$  which is counted after starting the generation of the wave.

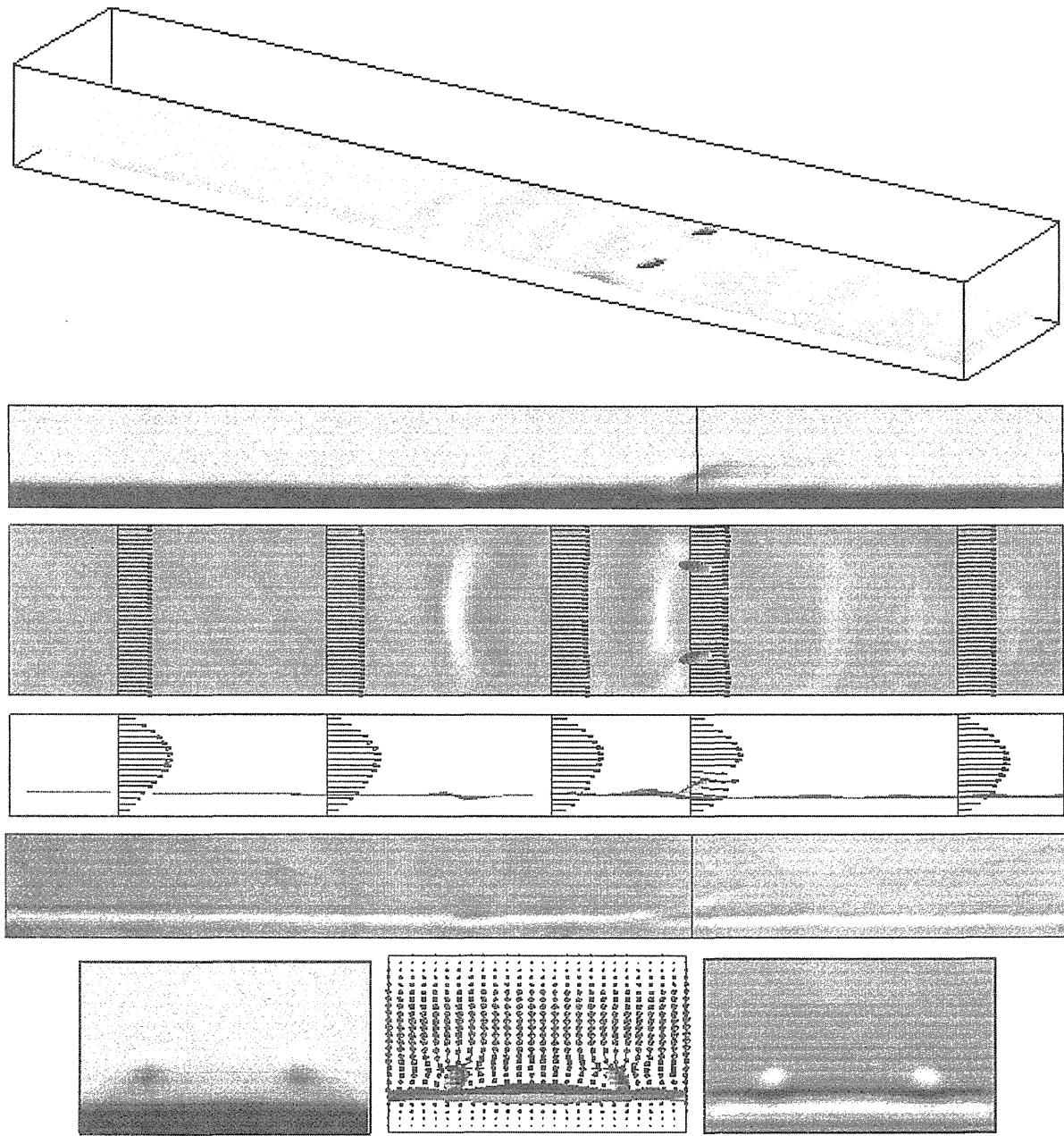


Fig. 7.10 Interface and the distribution of density, flow velocity ,and pressure in the case of the droplet creation in the stratified two-phase flow ( $Re_h = 324, V_l = 0.263, L = 383, W = 63$ ): The arrangement of the images is same with that of Fig.7.9. These are the snapshot at  $t=4710$  which is counted after starting the generation of the wave.

の様子、界面形状、及び物理量の分布も示す。これらの図において、流れ方向に垂直な断面上における物理量分布については、液滴発生場所付近の値のみを示している。図 7.10 に示す  $W = 63$  の場合には、液滴が流路の中央ではなく、左右の壁の近くに二つ対称的に発生している様子が見られる。これは、生成した波が図 7.6 の形状であり、流速分布は、高さ方向が放物線形、幅方向が不变であることから、図 7.11 に示すように、初め界面が流れ方向にシート状に引き伸ばされ、波の最も高い位置の中央付近が先にちぎれ、そのちぎれた個所から波が左右に広がり、続いて左右の界面が引き伸ばされ、そして二つの液滴にちぎれることによる。

次に、液滴発生位置と流動状態との関係を調べるため、 $u_h^m$  及び  $u_l^m$  を変えることにより  $Re_h$  と  $V_l$  を変化させた液滴発生シミュレーションを行なった。まず、 $W = 11$ ,  $L = 191, 287, 383$  の場合のシミュレーションを行ない、液滴発生位置と流動状態の関係に対する流路長さの影響を調べた。その結果を図 7.12(a) に示す。この図から、 $Re_h$  が比較的小さい場合、つまり高密度相の流速が小さい場合、液滴の発生位置は、いずれの  $L$  の場合もほぼ同一であり、 $Re_h$  の増加と共に流出境界の方へ移動する様子が見られる。さらに  $Re_h$  が増加し、液滴が流出境界付近で発生するようになった場合、 $Re_h$  に関係なく、液滴発生位置が一定となる。この様子は、 $L = 191, 287$  で見られている。これについては、以下のように解釈することができる。本章のシミュレーションでは、液滴が発生するまで低密度相の流速を増加させ、液滴が発生したときの  $V_l$  を計測している。そのため、流出境界付近において液滴が発生している場合、仮により大きい  $L$  の計算格子を用いたときには、計測された  $V_l$  より小さな  $V_l$  によって、さらに下流で液滴発生が観測される可能性を考えらえる。言いかえると、用いている計算格子の長さの範囲において液滴を発生させてしまう  $V_l$  を計測している可能性がある。つまり、これは、Ishii-Grolmes 実験相関式が与えている液滴発生のしきい値の  $V_l$ (ここでは、これを  $V_l^{I-G}$  とする。) ではない可能性がある。このことから、実験相関式と比較するには、液滴が流出境界より離れた位置で発生している場合の結果を用いる必要があると考えらえる。

また、同様に、液滴発生位置と流動状態の関係に対する流路幅の影響を調べた。その結果を図 7.12(b) に示す。この図において、 $W = 11$  の場合、 $Re_h$  が小さいところでは、液滴発生位置は  $Re_h$  にほとんど依存せず、 $Re_h$  が増加するとほぼ比例するようになる。一方、 $W = 37, 63$  の場合は、 $Re_h$  が小さいところから、液滴発生位置が  $Re_h$  にほぼ同程度に比例している傾向が見られる。つまり、 $W = 11$  の場合は、 $W = 37, 63$  に比べ、全体的に流入境界に近い位置において液滴が発生していることとなる。また  $W = 37, 63$  の場合、両者の液滴発生位置は、ほとんど格子幅と関係がないと考えられる。さらに、この比例関係によると、 $Re_h = 500$  程度までは、液滴が流出境界から離れた位置で発生しているので、この  $Re_h$  の値までは、 $L = 383$  の計算格子内で液滴発生を起こしている  $V_l$  は、 $V_l^{I-G}$  と比較される値となっていると考えられる。

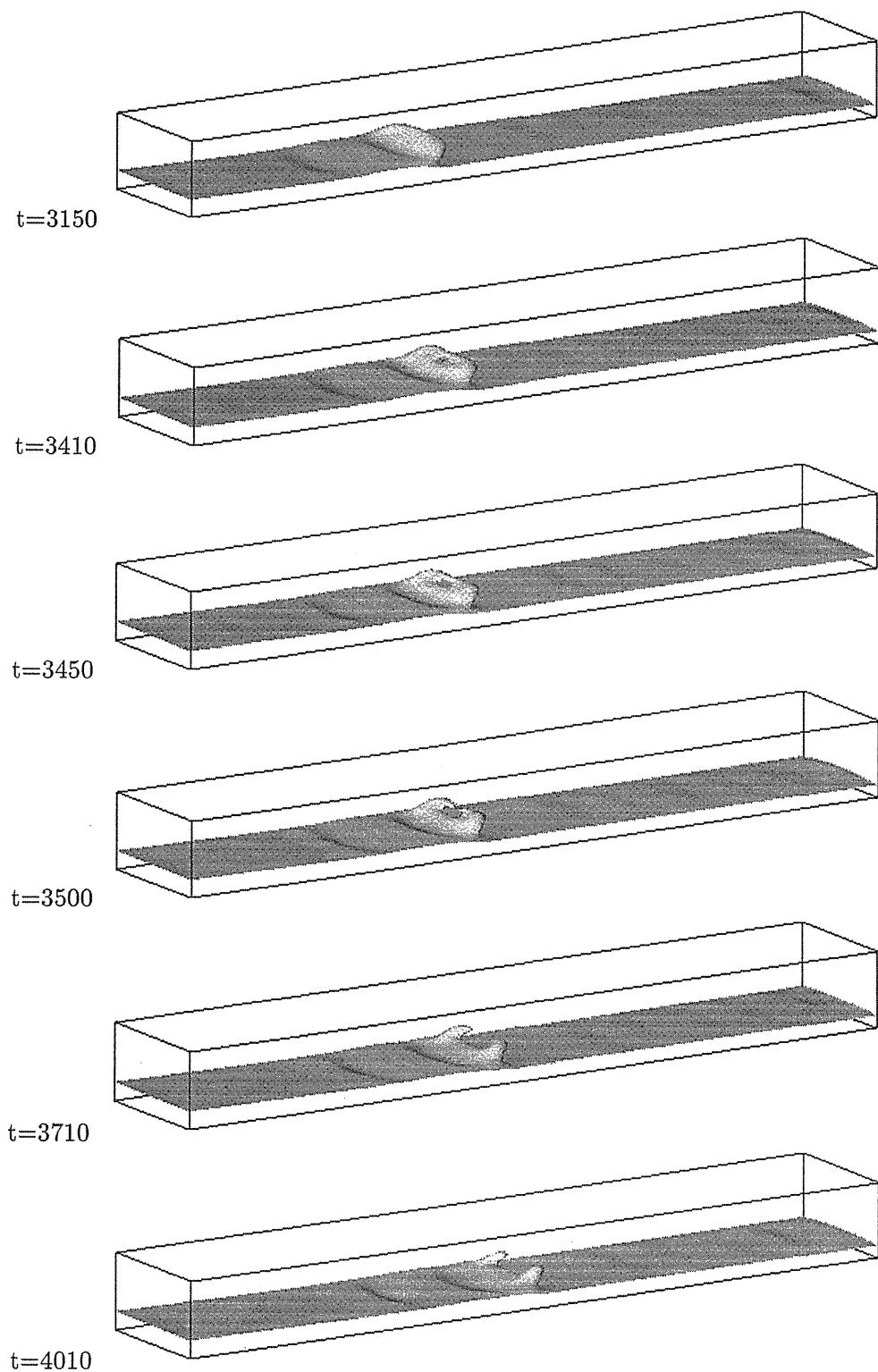


Fig. 7.11 Time evolution of the deformed interface before the droplet creation ( $Re_h = 324$ ,  $V_l = 0.263$ ,  $W = 63$ ): Time step,  $t$ , is counted after starting the generation of the wave at the inlet. The droplet creation at  $t = 4710$  in Fig. 7.10 is observed after the state of the image of  $t = 4010$ .

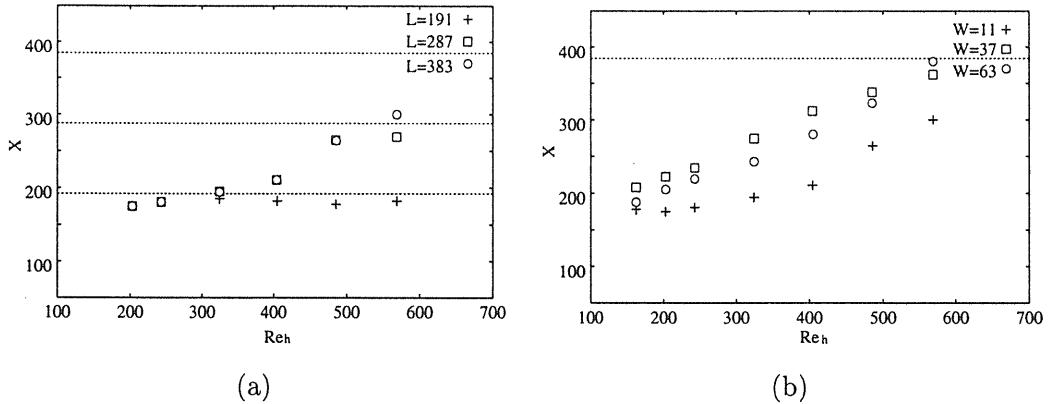


Fig. 7.12 Comparison of the position of the droplet creation among different lattice lengths  
 (a) : The horizontal dot lines show the positions of  $L_s$ . Comparison of the position of the droplet creation among different lattice widths (b) : The horizontal dot line shows  $L = 383$ .

### 7.3 Ishii-Grolmes 実験相関式との比較

#### 7.3.1 比較の結果

以上の考察に基づいて、 $L = 383$ 、 $W = 11, 37, 63$  の場合について液滴発生のシミュレーションを行ない、そのシミュレーションでの液滴検出及び無次元数測定の結果を 7.1 節の実験相関式と比較した。式 (7.1) によると、Ishii-Grolmes 実験相関式は、 $Re_h$  及び  $N_\mu$  の値によって異なる関数形となっている。ここでは、 $N_\mu = 6.9 \times 10^{-2} > 1/15$  であることと、図 7.12(b) の結果から、式 (7.1) の  $V_l = 1.35 Re_h^{-1/3}$  の相関式と比較した。図 7.13 にシミュレーション結果と相関式との比較を示す。この図におけるシミュレーション結果は、各  $Re_h$  に対し  $V_l$  を漸増させ、始めて液滴が観測さ

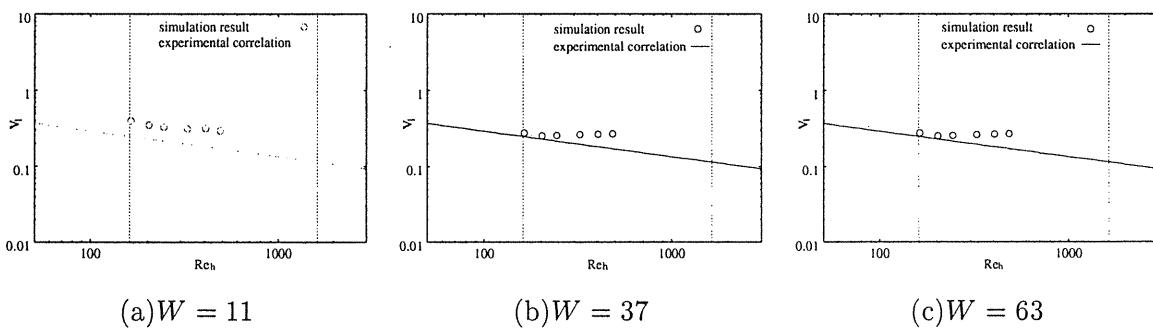


Fig. 7.13 Comparison between the simulation result and the experimental correlation proposed by Ishii and Grolmes for each width: The vertical dot lines show  $Re_h = 160$  and  $Re_h = 1635$ , respectively.

れた時の  $V_l$  の値を示している。この図から、 $W = 11$  の場合、シミュレーション結果は、相関式との差があるものの、その変化傾向は、相関式の変化傾向とほぼ同様である。一方、 $W = 37, 63$  の場合、両者の結果にほとんど相違が見られず、 $Re_h$  が小さいところでは、その変化傾向を保ちつつ相関式との差が、 $W = 11$  の場合より小さくなっている。また  $Re_h$  が大きいところでは、その傾向が見られないが、いずれの流路幅の場合もほぼ同程度の  $V_l$  によって液滴が発生していることが見られる。

さらに、本論文における計算結果と実験相関式との関係と、実験データと実験相関式との関係を比較するため、文献<sup>(93)</sup>の Fig.12 から引用した図を図 7.14 に示す。この図では、式(7.1)の粘性数  $N_\mu \leq \frac{1}{15}$  に対応する場合の相関式を  $N_\mu^{0.8}$  で規格化した式とその周りのデータを示している。また、本論文では、 $N_\mu > \frac{1}{15}$  の場合の相関式  $V_l = 1.35 Re_h^{-1/3}$  と計算結果を比較している。しかし、本論文における粘性数  $N_\mu = 6.9 \times 10^{-2}$  は、 $\frac{1}{15}$  に近いことから、本論文の計算結果の分布を図 7.14 と比較することには意味がある思われる。両者を比較した場合、図 7.14 における実験データの実験相関式周囲の分布の幅と、図 7.13 における計算結果の実験相関式との差が概ね同程度であることから、本論文のシミュレーション条件において、格子ボルツマン法による液滴発生シミュレーションは、実験相関式と矛盾していない結果を示していると考えられる。

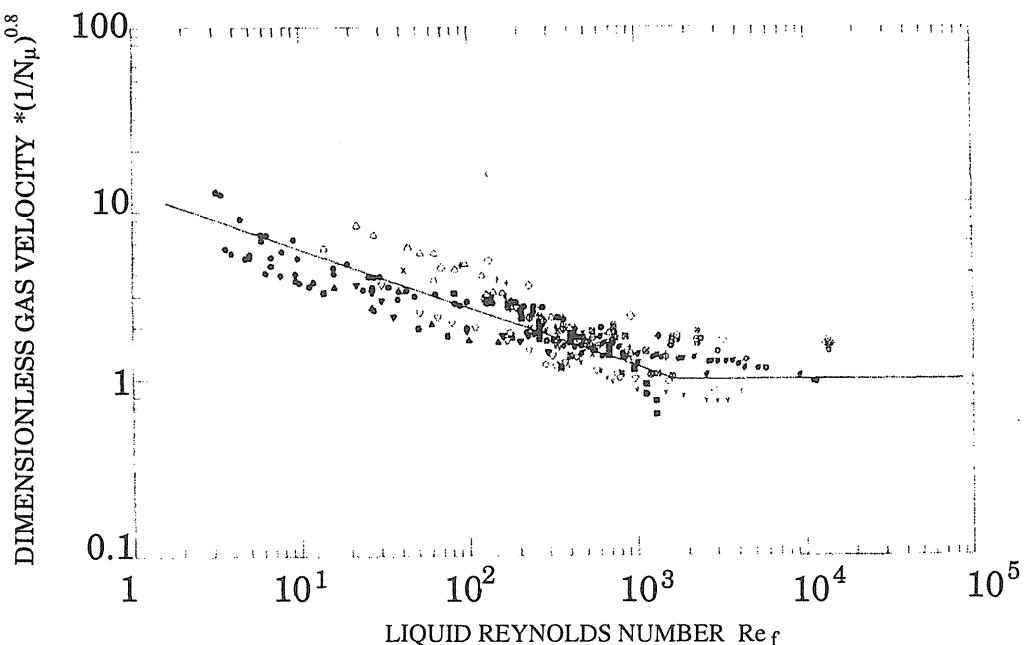


Fig. 7.14 Figure cited from the reference<sup>(93)</sup>: The solid line shows the experimental correlation.

### 7.3.2 比較に関する考察

液滴発生のシミュレーションにおいて、液滴の発生と流動条件との関係は、概ね Ishii-Groemes 実験相関式を、実験データの分布の範囲内においてほぼ再現していることが見られた。しかし、

$W = 11$  の場合の関係と  $W = 37, 63$  の場合の関係との間、特に、 $Re_h$  が比較的小さい範囲において大きな違いが見られた。この違いについて、二つの可能性が考えられる。一つは、流路幅方向の計算格子における離散化が荒く、それがシミュレーション結果に影響を与えていた数値計算的原因であり、もう一つは、流速や界面形状等の物理的原因である。

まず数値計算的原因について考察する。仮に計算格子の離散化が結果に影響していない場合、計算対象の領域を一定に保ち、その離散化の細かさの割合を変化させても結果に変化が現われないと考えられる。そこで、計算格子サイズに定数  $\alpha$  を乗じ、格子間隔を  $\alpha$  で除することにより、元の計算格子によって表されていた領域の大きさを変化せず、 $\alpha$  倍だけ離散化を細かくした場合を考える。これを数式的に表現すると、

$$L \times W \times H \rightarrow \alpha L \times \alpha W \times \alpha H, \quad \delta \rightarrow \frac{1}{\alpha} \delta, \quad (7.6)$$

となる。ここで  $\delta$  は格子間隔である。本論文で用いている HCZ モデルにおいて、格子間隔は、時間刻み幅  $\delta_t$  と、 $\delta = \sqrt{3RT}\delta_t$  によって関係しているので、 $\delta \rightarrow \frac{1}{\alpha} \delta$  は、 $\delta_t \rightarrow \frac{1}{\alpha} \delta_t$  によってなされる<sup>1</sup>。そして、これらの変換は、計算過程における長さ及び時間の単位を変えたことになる。そのため、計算パラメータにおいて  $\delta$ 、 $\delta_t$  を単位とした次元を持つ量を、変換された単位における値に変換する必要がある。

$$\sigma \rightarrow \sigma/\alpha^2 ([\sigma] = m/t^2), \quad g \rightarrow g/\alpha ([g] = l/t^2), \quad \nu \rightarrow \alpha \nu ([\nu] = l^2/t), \quad (7.7)$$

ここで、 $[X]$  は物理量  $X$  の次元を表し、 $m$ 、 $l$ 、 $t$  は、それぞれ質量、長さ、時間の次元を表している。また流速及び  $R$ 、 $T$  も次元を持つ量と考えられるが、それらはここで変換によって変化しない。この変換を元の計算格子  $L \times W \times H = 383 \times 11 \times 38$  の場合に施し、 $Re_l = 162, 242, 485$  の場合についてシミュレーションを行なった。その結果を図 7.15 に示す。この図において、横軸は変

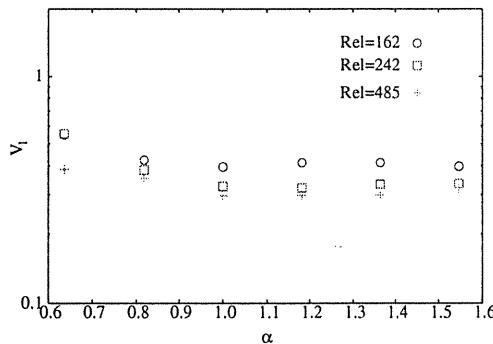


Fig. 7.15 Influence of the space discretization to the simulation result: The cases of  $Re_l = 162, 243, 486$  are shown.

換パラメータ  $\alpha$  を、縦軸は液滴が発生する時の  $V_l$  を表している。この図から、 $\alpha = 1.0$  ( $W = 11$ ) より狭い場合には、液滴が発生する  $V_l$  が大きくなっているが、 $\alpha = 1.0$  ( $W = 11$ ) 以上においては

<sup>1</sup>  $R$  や  $T$  を変換する可能性も考えられるが、その変換は状態方程式の形に影響を与えるため望ましくない。(付録 C)

ほぼ一定となっている。このことから、計算結果は計算格子における離散化の割合に影響を受けるが、 $W = 11$  におけるシミュレーション結果は、離散化の影響を受けていないことが分かる。よって、図 7.13 に見られる  $W = 11$  の結果の  $W = 37, 63$  の場合の結果との差異は、数値計算的原因によるものではないと考えられる。

次に物理的原因について考察する。一般に、液滴の発生は、流れによる界面でのせん断力によって引き起こされ、そのせん断力は、流れの大きさや分布、界面の形状や状態に依存すると考えられている(93, 98)。ここでのシミュレーションでは、 $y$  方向の境界がすべり境界であるため、その方向の流速分布に対して、前章のような流路幅の違いによる影響はないと考えられる。したがって、界面の形状や状態の違いによるものと考えられる。このことから、流入境界において生成する波の形状の違いの影響を考察する。文献(98)では、波の流れ方向に垂直な断面形状が、液滴発生に影響することが述べられている。よって、図 7.6 で示した液滴の断面形状を変化させてシミュレーションを行ない、液滴の発生と実験相関式の関係への影響を考察する。図 7.13 によると、 $W = 37, 63$  の場合はほぼ同様の結果であり、それらは  $W = 11$  の場合と異なっていることから、 $W = 11$  と  $W = 37$  の場合に対して波の形状の影響を調べた。また流路長さは  $L = 383$  を用いた。まず、 $W = 11$  の場合、図 7.6 に示す波以外に、図 7.16 の形状の波を生成させた。両者の場合に得られた結果を図 7.17(a) に示す。次に、 $W = 37$  の場合では、図 7.6 に示す波以外に、図 7.16 の形状の波、及び図 7.6 においてその高さを 5、幅を 10 とした波を生成させた。この場合に対する結果を図 7.17(b) に示す。この図によると、 $W = 11$  の場合において、生成される波の形状の影響が見られ、 $Re_h$  が

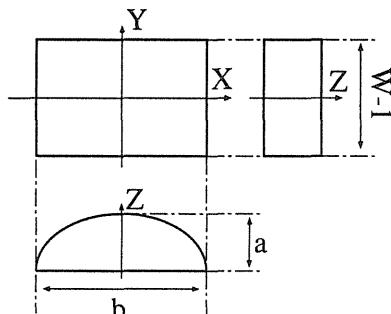


Fig. 7.16 Another wave which is generated at the inlet: The shape on the cross section perpendicular to the flow direction is the rectangle.

小さいところでその影響が大きく、 $Re_h$  が大きくなるに従って影響が小さくなっていることが分かる。また、 $W = 37$  の場合、図 7.16 の波 ("flat surface") に対しては、それほど大きな影響を受けないが、高さ 5、幅 10 とした図 7.6 の波 ("curved surface 2") に対しては、 $Re_h$  が小さいところで大きな影響が見られ、 $Re_h$  が大きくなるとその影響が小さくなることが分かる。

これらの結果は、波の流れ方向に垂直な断面上の界面の曲率に関係していると考えられる。図 7.17(a) では、その曲率が 0 である図 7.16 の波 ("flat surface") の場合、図 7.6 の波 ("curved surface") の場合より小さな  $V_l$  で液滴が発生している。図 7.17(b) でも、若干そのような傾向が見られるが

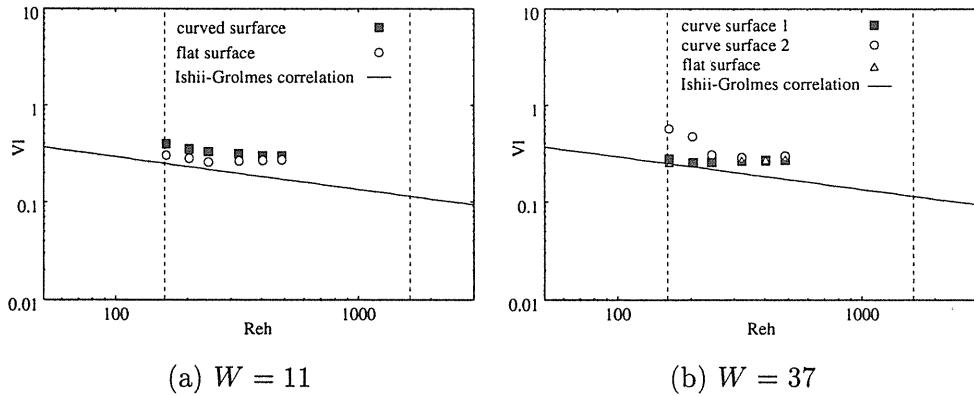


Fig. 7.17 Influence of the wave shape which is generated at the inlet on the relation between the simulation result and the experimental correlation proposed by Ishii and Grolmes for (a) $W = 11$ , (b) $W = 37$ . In the case of (a), the waves in Fig.7.6 and Fig.7.16 are generated. The waves in Fig.7.6 and in Fig.7.16 are named "curved surface" and "flat surface" in the figure, respectively. In the case of (b), the waves in Fig.7.6 and Fig.7.16 and the wave in Fig.7.6 whose height is 5 and width is 10 are generated. The waves in Fig.7.6 and Fig.7.16 are named "curved surface 1" and "flat surface", respectively. The last wave is named "curved surface 2".

図 7.17(a) の場合ほど顕著でない。これは、 $W = 11$  の方が  $W = 37$  より流路幅が狭いため、図 7.6 と図 7.16 の波の曲率の差が大きいことによると考えられる。また、図 7.17(b) では、図 7.6において高さを 5、幅を 10 とした波 ("curved surface 2") に対する結果は、いずれの場合より大きな  $V_t$  が液滴発生に必要なことを示している。この波の形状は、 $W = 11$  の場合に生成した図 7.6 の波と同じであるが、図 7.17 の (a) と (b) ではその結果に違いが見られる。このことから、波の断面の曲率以外に、波の断面積と流路断面積との比も液滴発生に影響していると思われる。

さらに、いずれの場合も、これらの影響は、 $Re_h$  が小さい範囲において見られ、 $Re_h$  が大きい範囲では見られない。このことは、波が高密度相の流れによって、下流に移動するに従って、その形状が変化することによると考えられる。図 7.18 から図 7.23 に、 $W = 37$  の流路に図 7.6 の波を生成した場合の界面形状の変化を、それぞれの  $Re_h$  に対して示す。この図において見られるように、 $Re_h$  が小さい場合には、流入境界で生成した波の形状がある程度残った状態で液滴が発生しているが、 $Re_h$  が大きくなるに従い、液滴の発生位置は下流に移動し、生成した波の形状がほとんど崩れた状態で液滴が発生するようになる様子が見られる。このことから、 $Re_h$  が比較的小さい場合、シミュレーション結果は生成した波の形状に影響されており、また  $Re_h$  が大きい場合は、生成した波が崩れた後に液滴が発生しているため、生成した波の形状の影響を受けず、いずれの流路幅の場合もほぼ同程度の  $V_l$  によって液滴が発生していると考えられる。

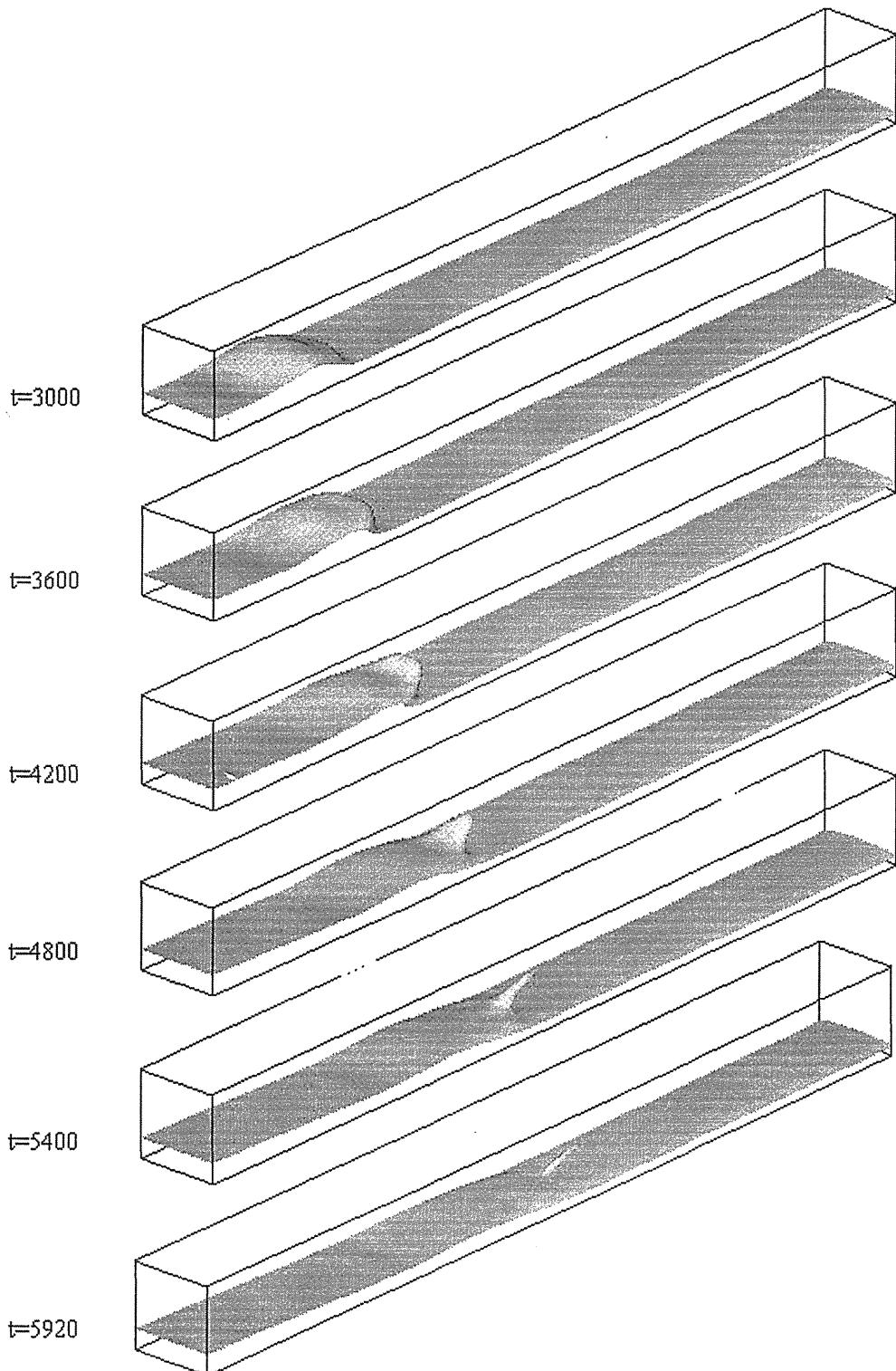


Fig. 7.18 Time evolution of the deformed interface for  $Re_h = 163, V_l = 0.276, L = 383, W = 37$ : The interface is represented in the same way with Fig.7.11. The time step,"t", is counted after starting the generation of the wave at the inlet.

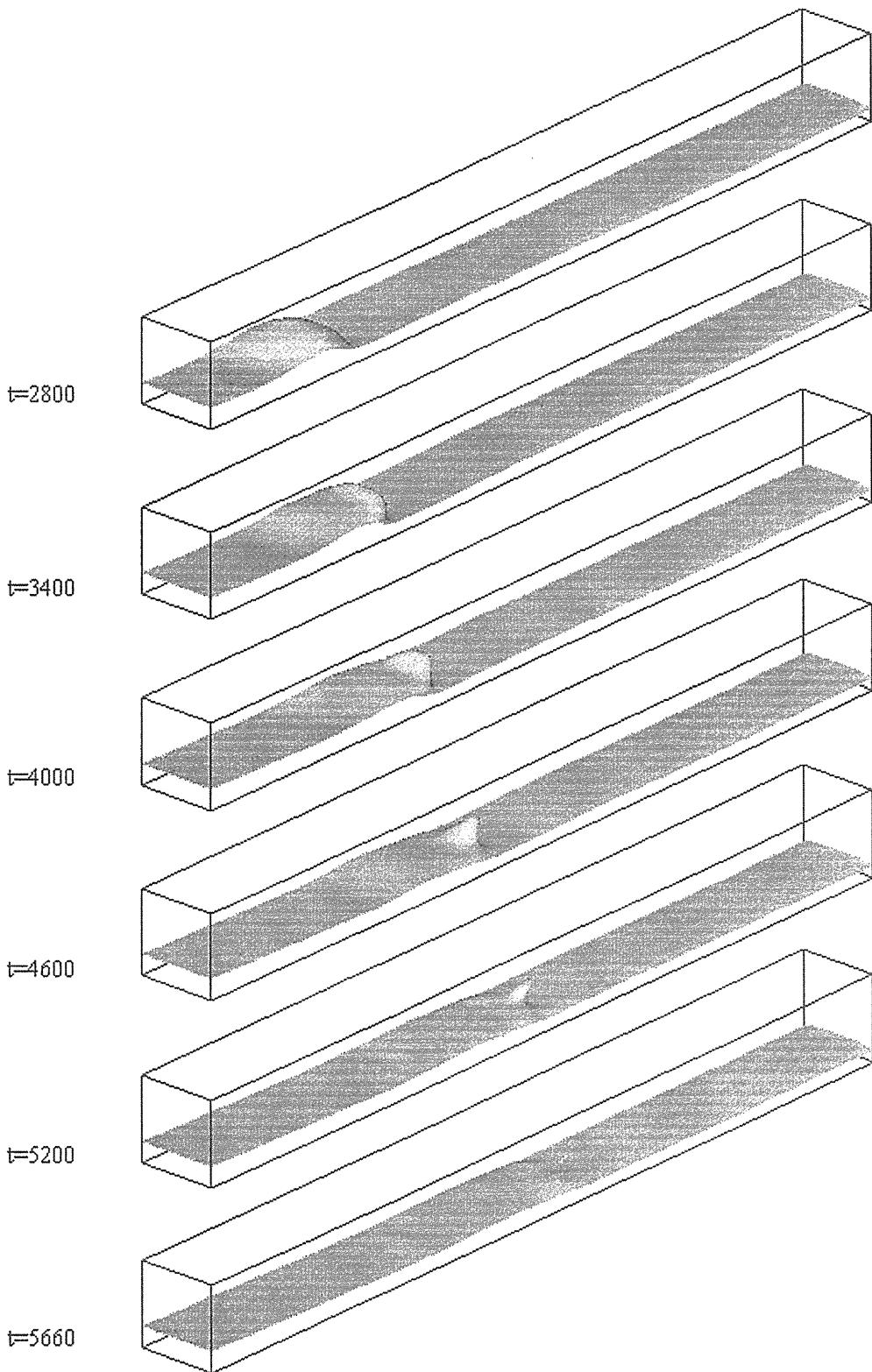


Fig. 7.19 Time evolution of the deformed interface for  $Re_h = 203, V_l = 0.254, L = 383, W = 37$

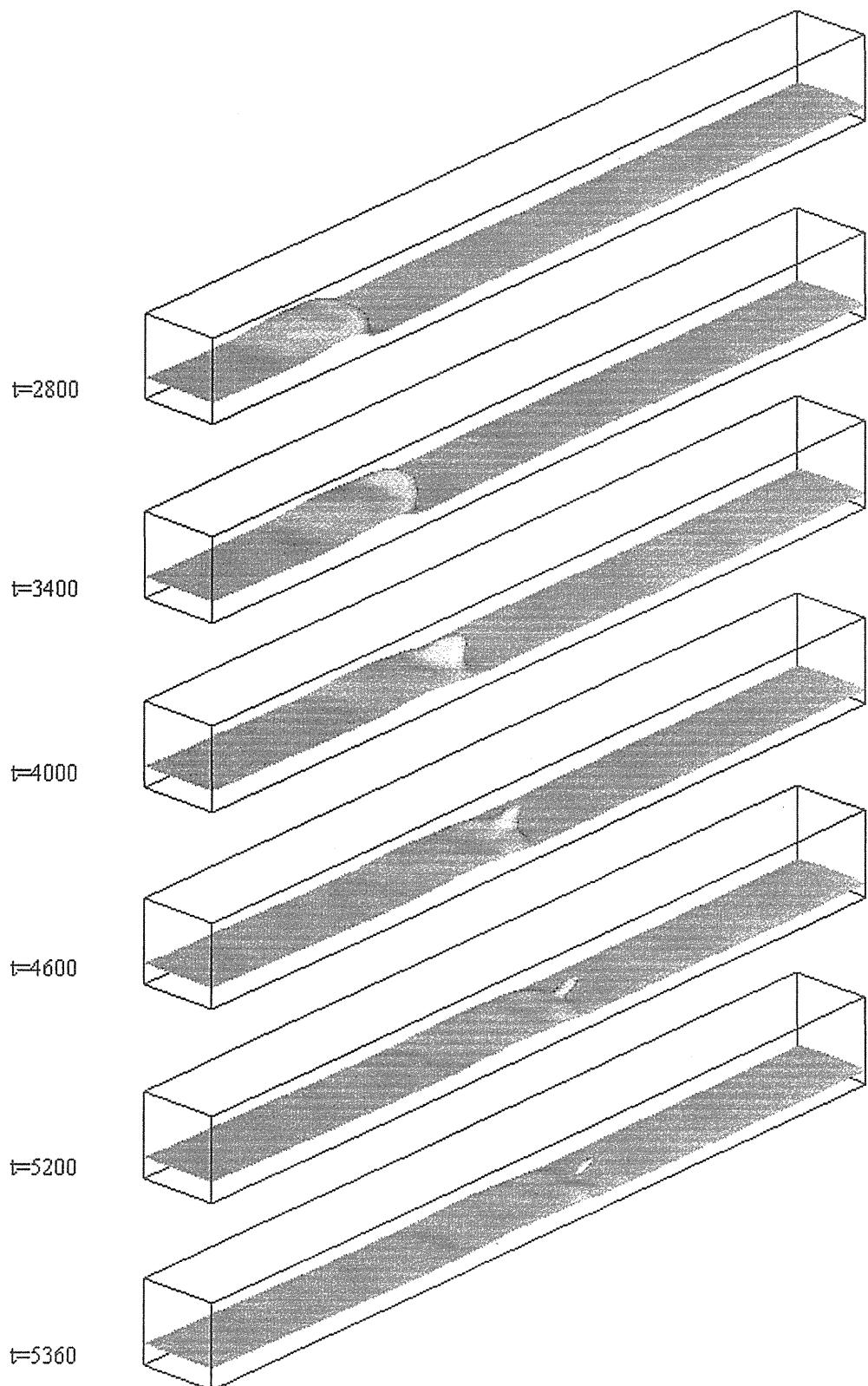


Fig. 7.20 Time evolution of the deformed interface for  $Re_h = 243, V_l = 0.258, L = 383, W = 37$

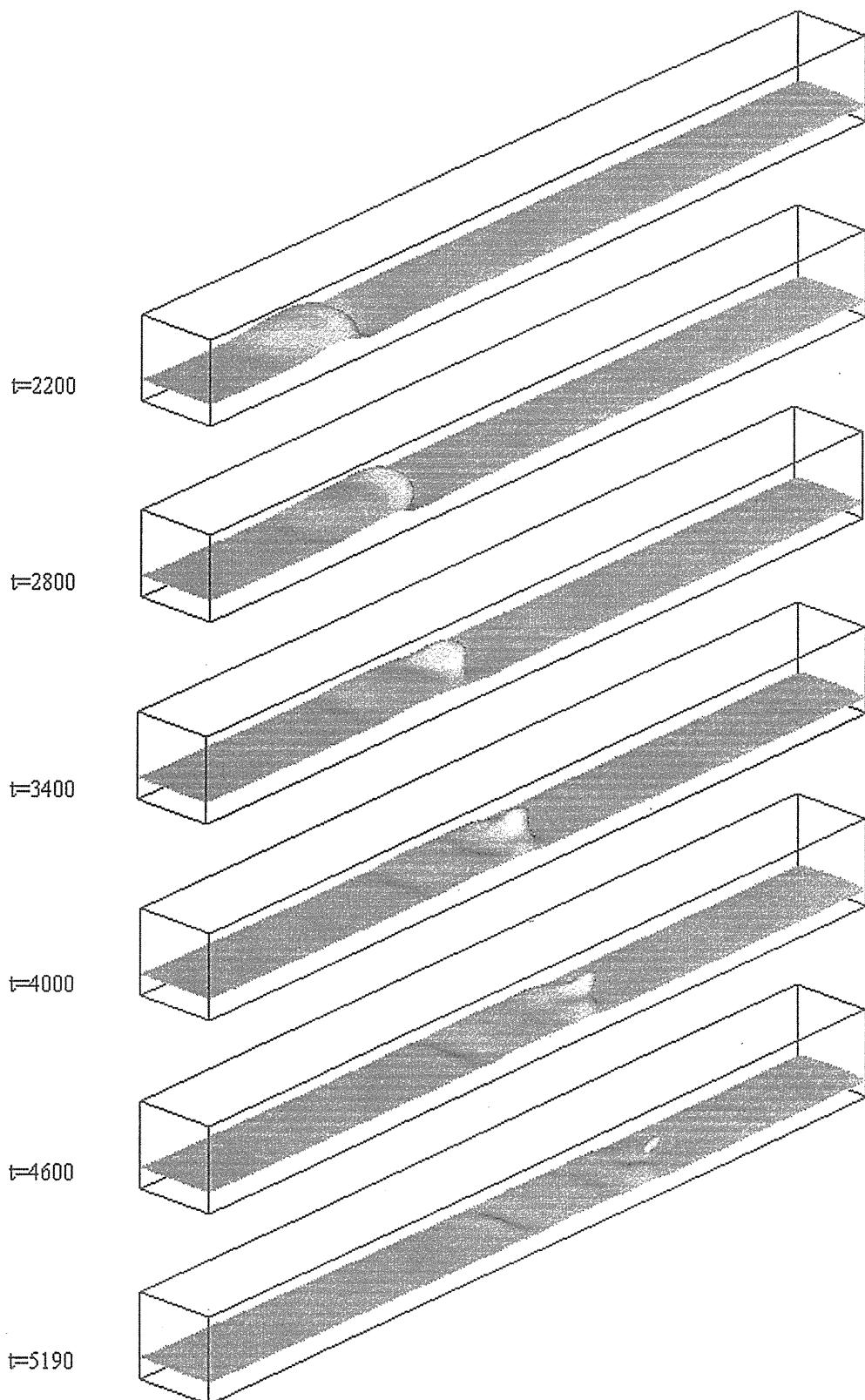


Fig. 7.21 Time evolution of the deformed interface for  $Re_h = 324, V_l = 0.263, L = 383, W = 37$

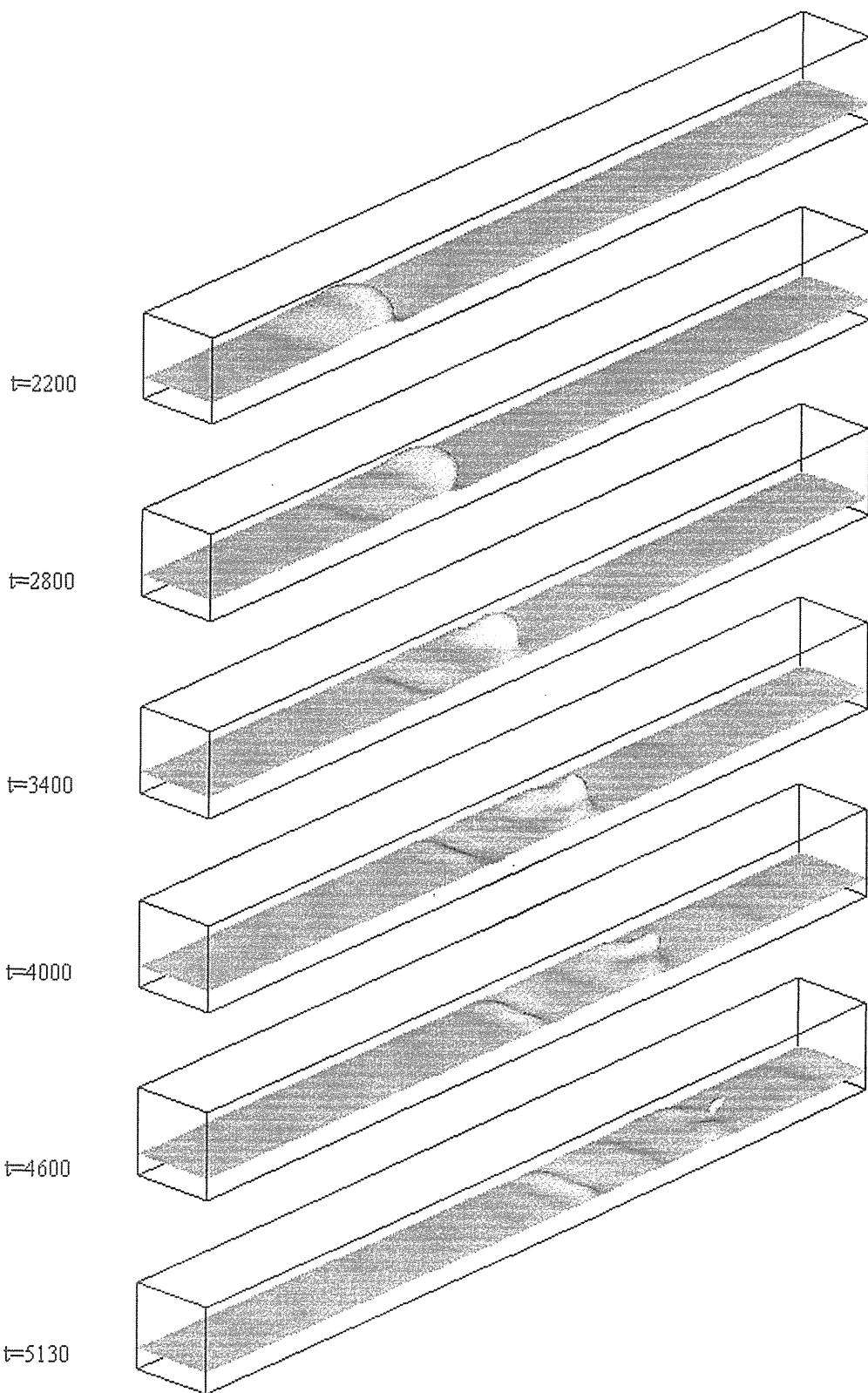


Fig. 7.22 Time evolution of the deformed interface for  $Re_h = 405, V_l = 0.267, L = 383, W = 37$

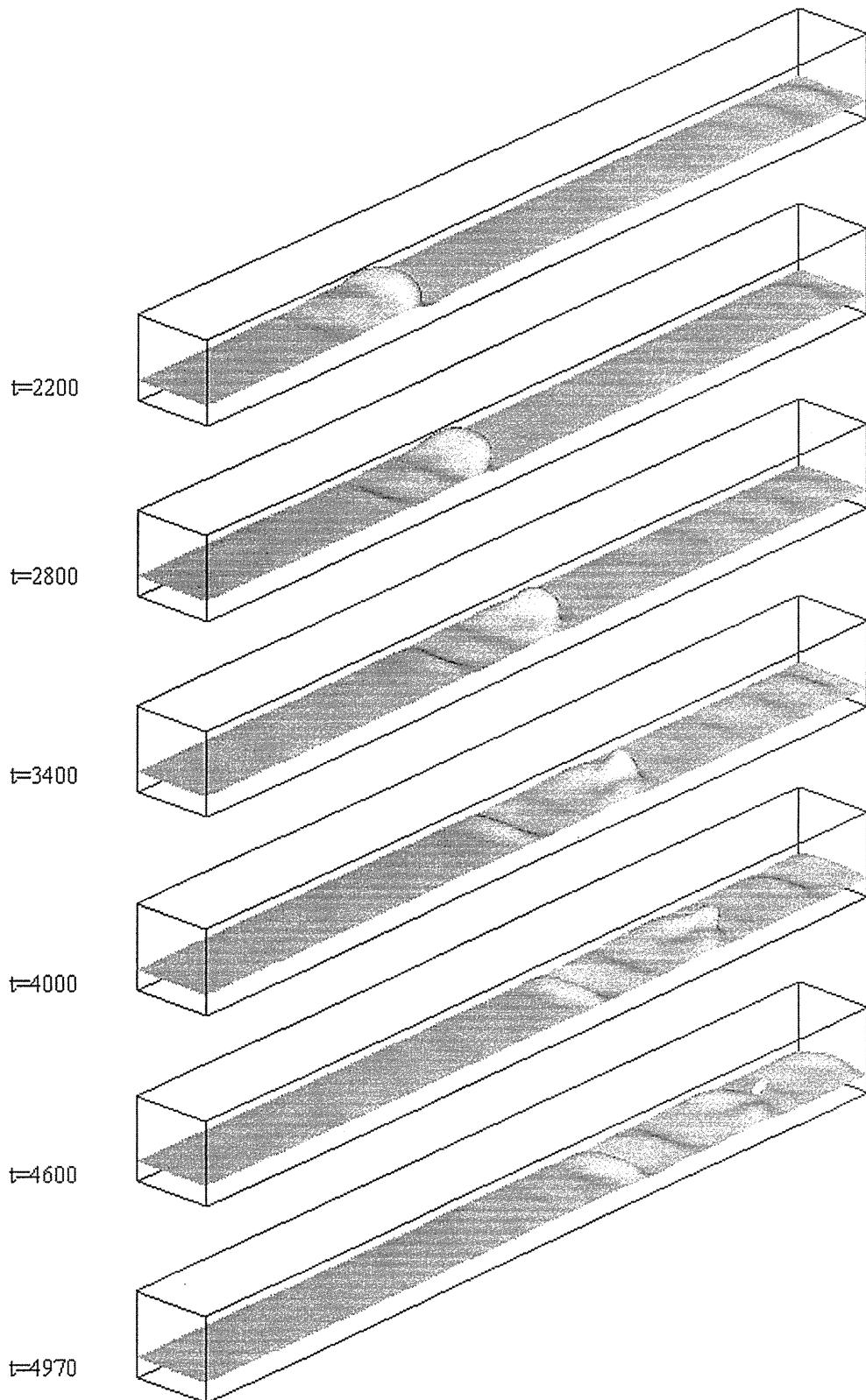


Fig. 7.23 Time evolution of the deformed interface for  $Re_h = 486$ ,  $V_t = 0.270$ ,  $L = 383$ ,  $W = 37$

次に、物理的な影響の1つとして、流路幅方向の流速分布の影響を考える。以上では、流路幅方向の境界をすべり壁境界とし、そのため流路幅方向にせん断効果が働くかず、その方向の流速分布が一定の場合でのシミュレーションを行なった。ここでは、その結果と比較するため、流路幅方向の境界を粘着壁境界とし、幅方向にせん断効果が作用する場合について、同様のシミュレーションを行なった。本章初めて触れたように、このような境界条件における流速分布の理論解析解は得られていない。しかし、式(7.3)に対して、幅方向に放物線形となる分布を重ね合わせた、以下の近似的な初期流速分布及び流入流速分布を与える。

$$u_x^{init}(x, y, z) = u_x^{th} \left\{ 1 - \left( \frac{y - W/2}{W/2} \right)^2 \right\}, \quad u_y^{init}(x, y, z) = 0, \quad u_z^{init}(x, y, z) = 0, \quad (7.8)$$

$$u_x^{in} = u_x^{init}(0, y, z), \quad u_y^{in} = 0, \quad u_z^{in} = 0, \quad (7.9)$$

$W = 37$  及び  $W = 63$  の場合についてのシミュレーションを行なった。ここで  $u_x^{th}$  は、式(7.3)で与えられる値である。また、生成する波は図7.6を用いた。図7.24に、このシミュレーション条件で得られる定常成層二相流の界面形状の俯瞰図を、図7.25には、それに対する密度分布、流速分布、及び圧力分布を示す。図7.25における分布図は、図7.3と同様に配置している。これらの

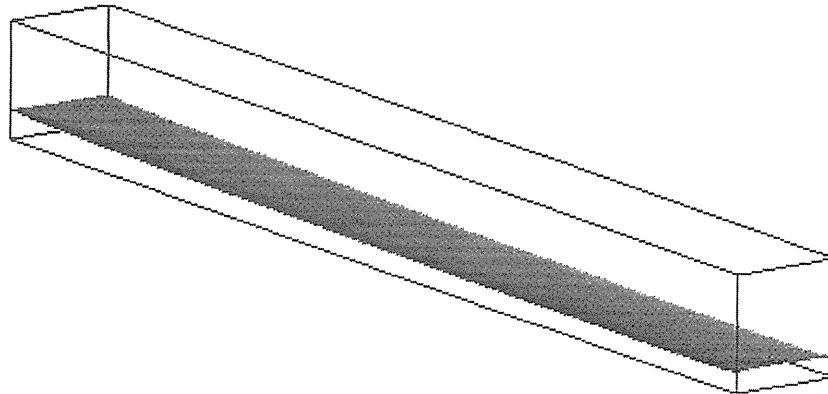


Fig. 7.24 Simulation result of the stratified two-phase flow in the case of the no-slip side walls ( $Re_h = 322, V_l = 0.296, L = 383, W = 37$ ): This image is the snapshot at a certain time step after the simulation becomes the stable state.

図から、界面形状及び物理量の分布は、ほぼ妥当な結果を与えていると考えられる。特に、流路幅方向の流速分布は、その方向の境界がすべり壁境界の場合と異なり、放物線形状であることが分かる。また、図7.26に、液滴が発生している状態の界面形状の俯瞰図と、発生した液滴の周囲の領域を拡大した図を示す。さらに、図7.27には、図7.25と同様に、密度分布、速度分布、及び圧力分布を示す。これらの図から液滴が発生している周辺で、界面が変形し、それによって、物理量の分布も変化している様子が見られる。界面形状に関しては、流路幅方向のせん断効果によって、すべり壁境界の場合には見られていなかった、界面の波の左右側面が引きずられている様子が見られる。

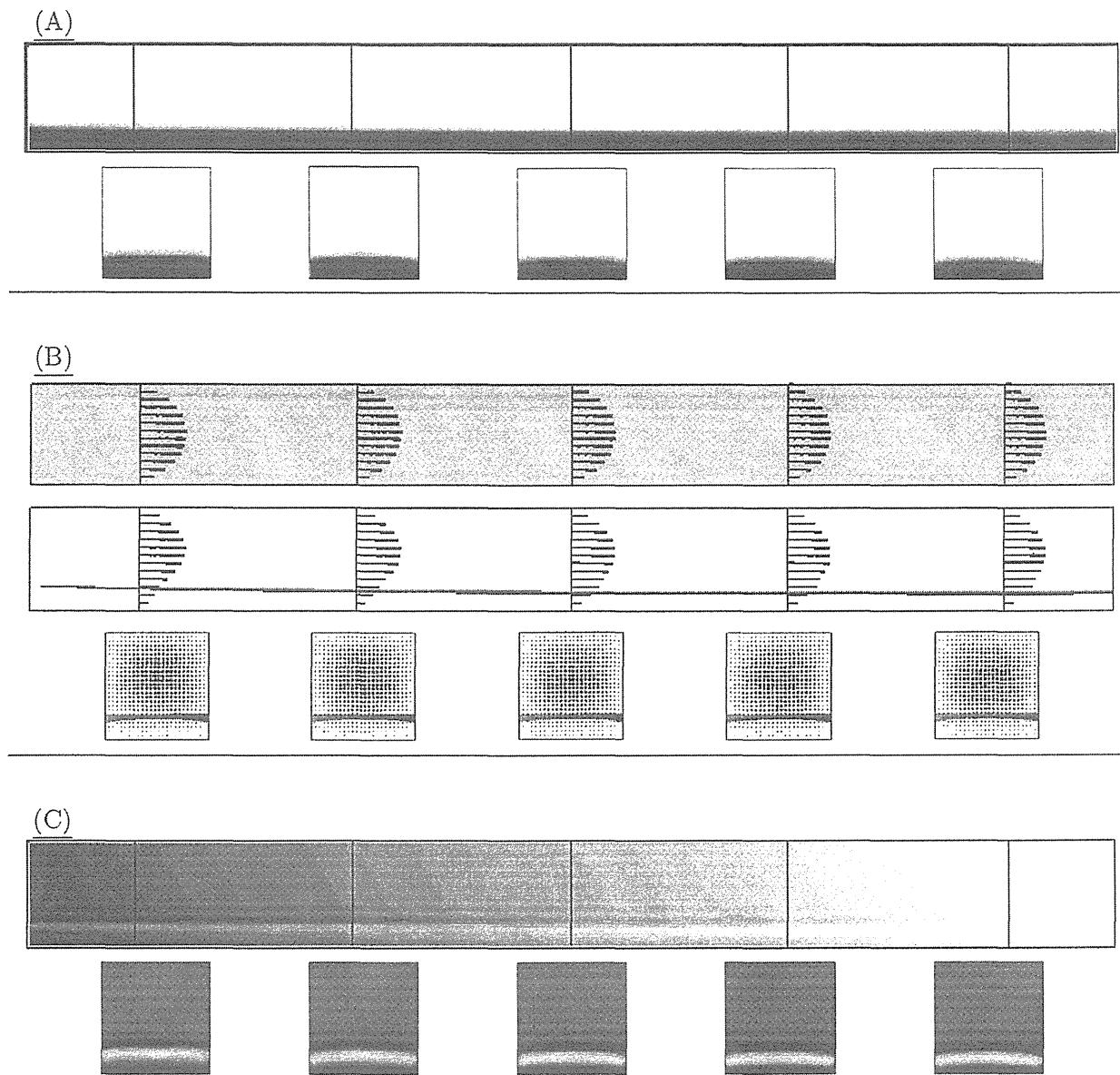


Fig. 7.25 Distribution of density, flow velocity, and pressure of the stable stratified two-phase flow in the case of the no-slip side walls ( $Re_h = 322, V_l = 0.296, L = 383, W = 37$ ) : The image arrangement is same with that of Fig.7.3.

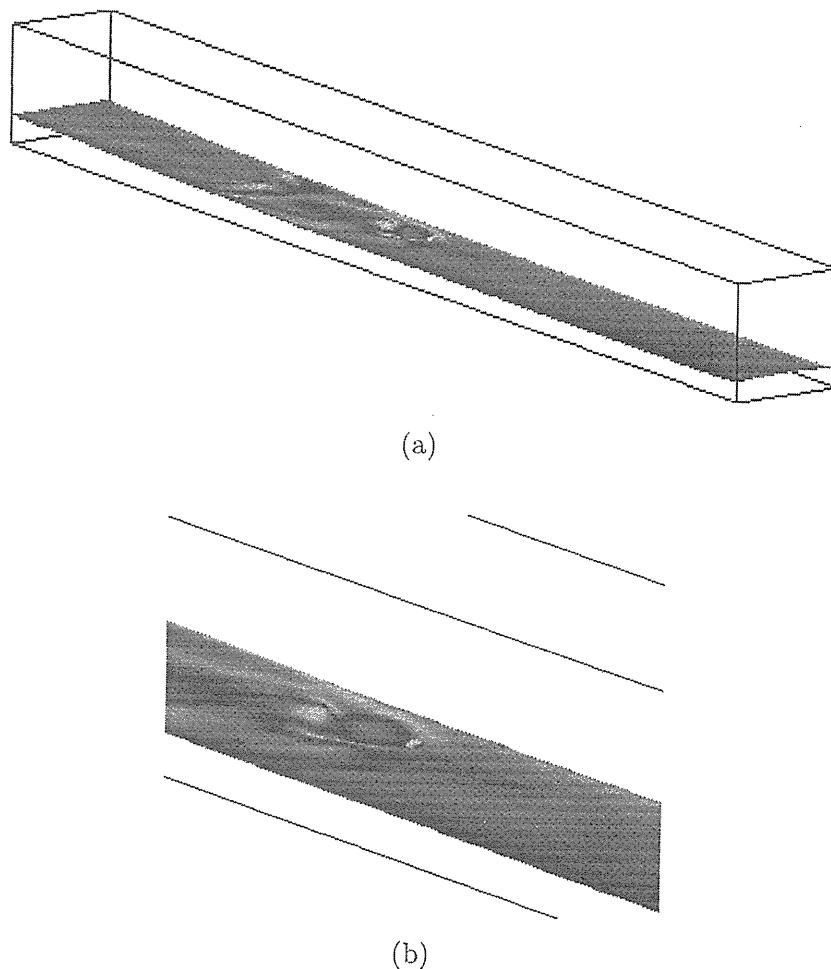


Fig. 7.26 Simulation result of the droplet creation in the case of the no-slip side walls ( $Re_h = 322$ ,  $V_l = 0.296$ ,  $L = 383$ ,  $W = 37$ ): The bird's-eye view of the entire interface is shown in (a). The region including the droplet is extracted and magnified to see the droplet clearly and shown in (b). The image is the snapshot at  $t=2740$  which is the time step counted after starting the generation of the wave.

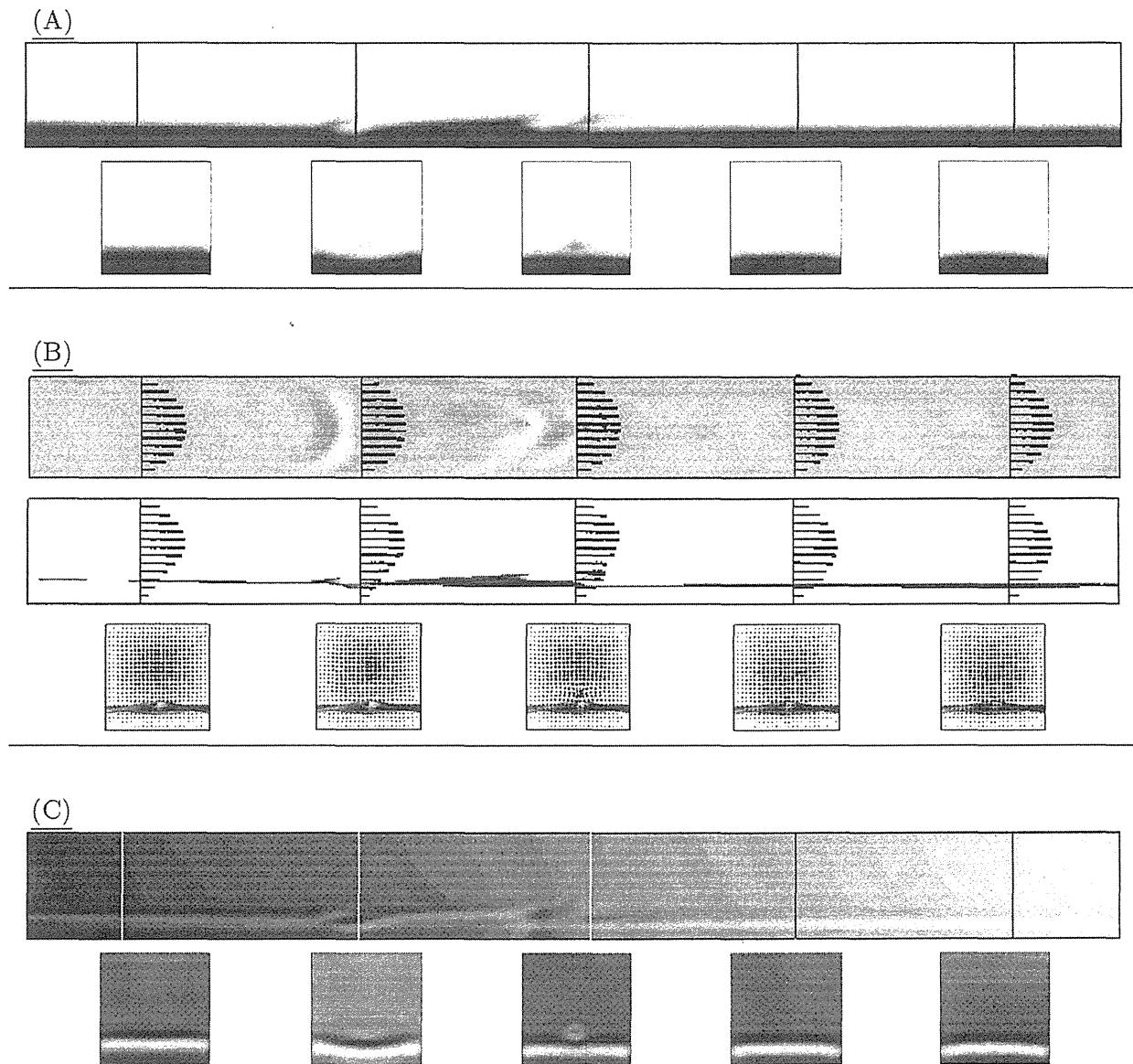


Fig. 7.27 Distribution of density, flow velocity, and pressure of the droplet creation in the case of the no-slip side walls ( $Re_h = 322, V_t = 0.296, L = 383, W = 37$ ): The image arrangement is same with that of Fig.7.3.

図 7.28 には、Ishii-Grolmes 実験相関式と比較の結果を示す。この図から、流路幅方向を粘着壁境界とした場合も、ほぼ実験相関式を再現しており、さらに、その変化傾向(傾き)が、すべり壁境界の場合より、実験相関式に近い様子が見られる。しかし、すべり壁の場合には、 $W = 37$  と  $W = 63$  の場合で両者の結果に違いが見られなかつたが、粘着壁境界の場合は、両者の結果に違いが生じ、 $W = 37$  の結果より  $W = 63$  の結果が、全体的に実験相関式に近づいていることが分かる。これは、流路幅方向の壁を粘着壁境界としたために生じる幅方向のせん断効果、つまり流れの三次元性の影響によるものと思われる。言いかえると、すべり壁境界の場合には幅方向のせん断効果がなく、流れの三次元性が影響しなかつたため、 $W = 37$  の場合と  $W = 63$  の場合の間に違いが見られなつたと考えられる。

図 7.29 から図 7.34 には、すべり壁の場合と同様、 $W = 37$  の場合について、それぞれの  $Re_h$  に対する界面変形の様子を示す。これらの図から、粘着壁境界の場合は、流路幅方向に生じるせん断効果のため、いずれの  $Re_h$  の場合も生成した波の形状が早い段階で崩れ、液滴が発生していることが分かる。このことが、すべり境界の場合の実験相関式との比較(図 7.13)における  $W = 37$  と  $W = 63$  の結果の関係と、粘着壁境界の場合(図 7.28)における両者の結果の関係との間に違いを生じさせていると思われる。

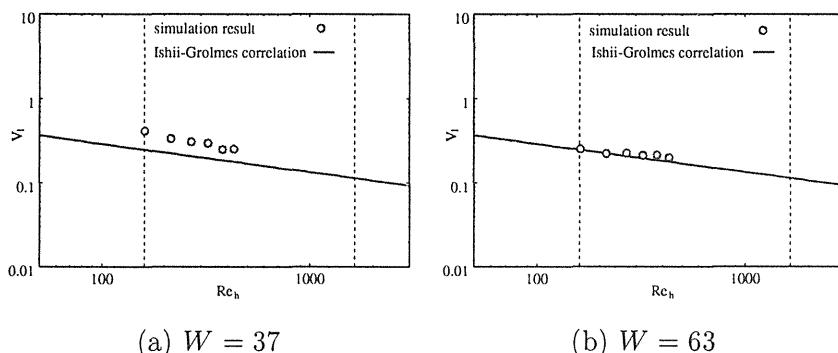


Fig. 7.28 Comparison between the simulation result in the case of the no-slip side walls and the experimental correlation proposed by Ishii and Grolmes for (a)  $W = 37$ , (b)  $W = 63$ : The vertical dot lines show  $Re_h = 160$  and  $Re_h = 1635$ , respectively.

以上、本章では、格子ボルツマン法 HCZ モデルによって水平層状二相流における液滴発生シミュレーションを行ない、液滴が発生する場合の界面形状変化の様子を観察することができるこことを示した。さらに、そのシミュレーションの流動状態と液滴発生が、対応する Ishii-Grolmes 実験相関式を、実験データの分布範囲で、ほぼ再現できることができた。さらに、流路幅方向がすべり壁境界の場合、実験相関式との比較において、 $Re_h$  が比較的小さい場合は、生成した波の形状にシミュレーション結果が影響を受けるが、 $Re_h$  が大きい範囲では、いずれの流路幅の場合もほぼ同程度の  $V_l$  によって液滴が生成することが見られた。また、流路幅方向を粘着壁境界とした場合、シミュレーション結果が、すべり壁境界の場合より実験相関式に近い変化傾向を示し、その結果は流路幅の大きさの影響を受けていることが分かった。これは、流路幅方向にせん断効果、つまり流れの三次元性の影響が生じたためと考えられる。

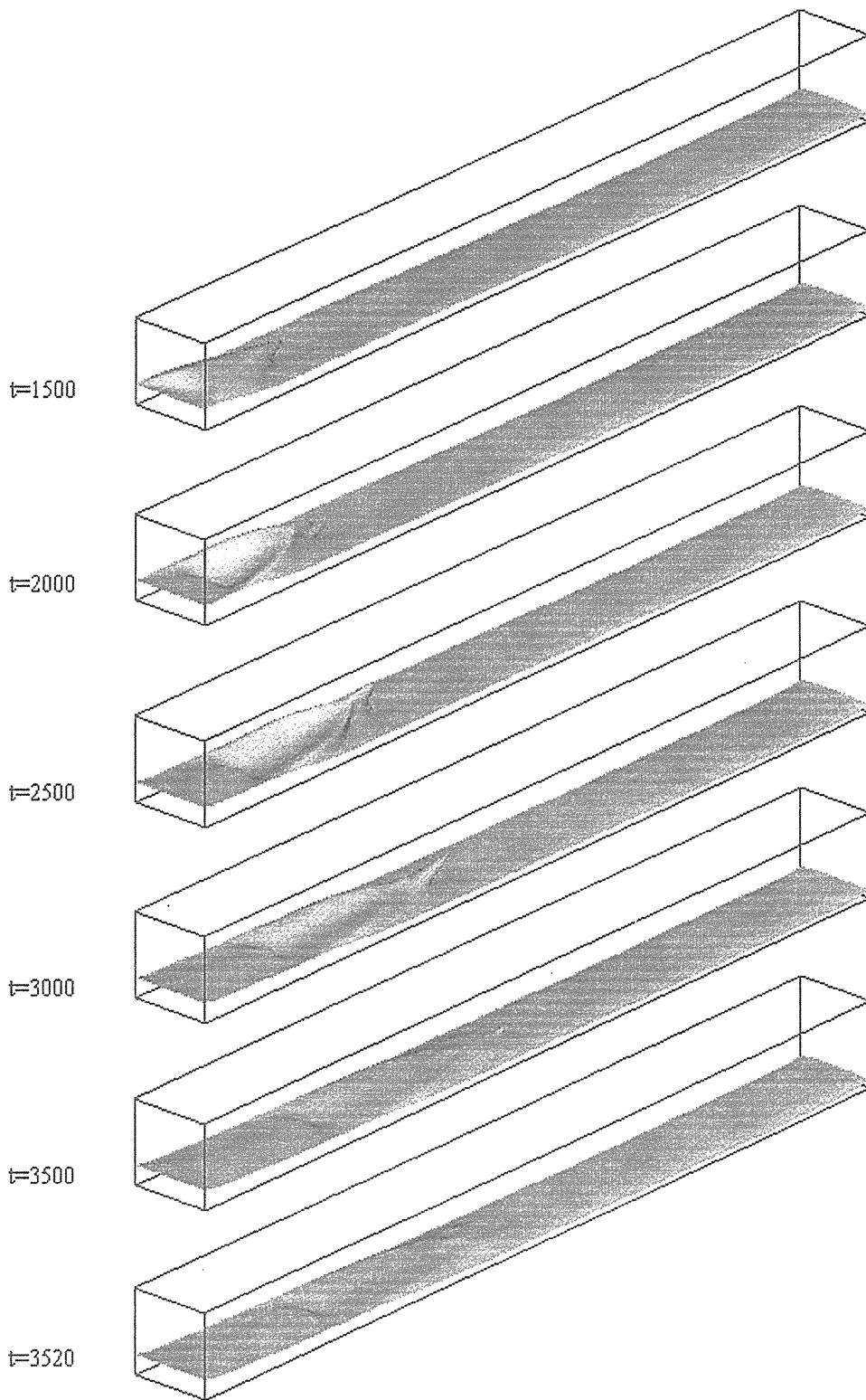


Fig. 7.29 Time evolution of the deformed interface in the case with no-slip side walls for  $Re_h = 161, V_l = 0.414, L = 383, W = 37$ : The interface is represented in the same way with Fig.7.18.

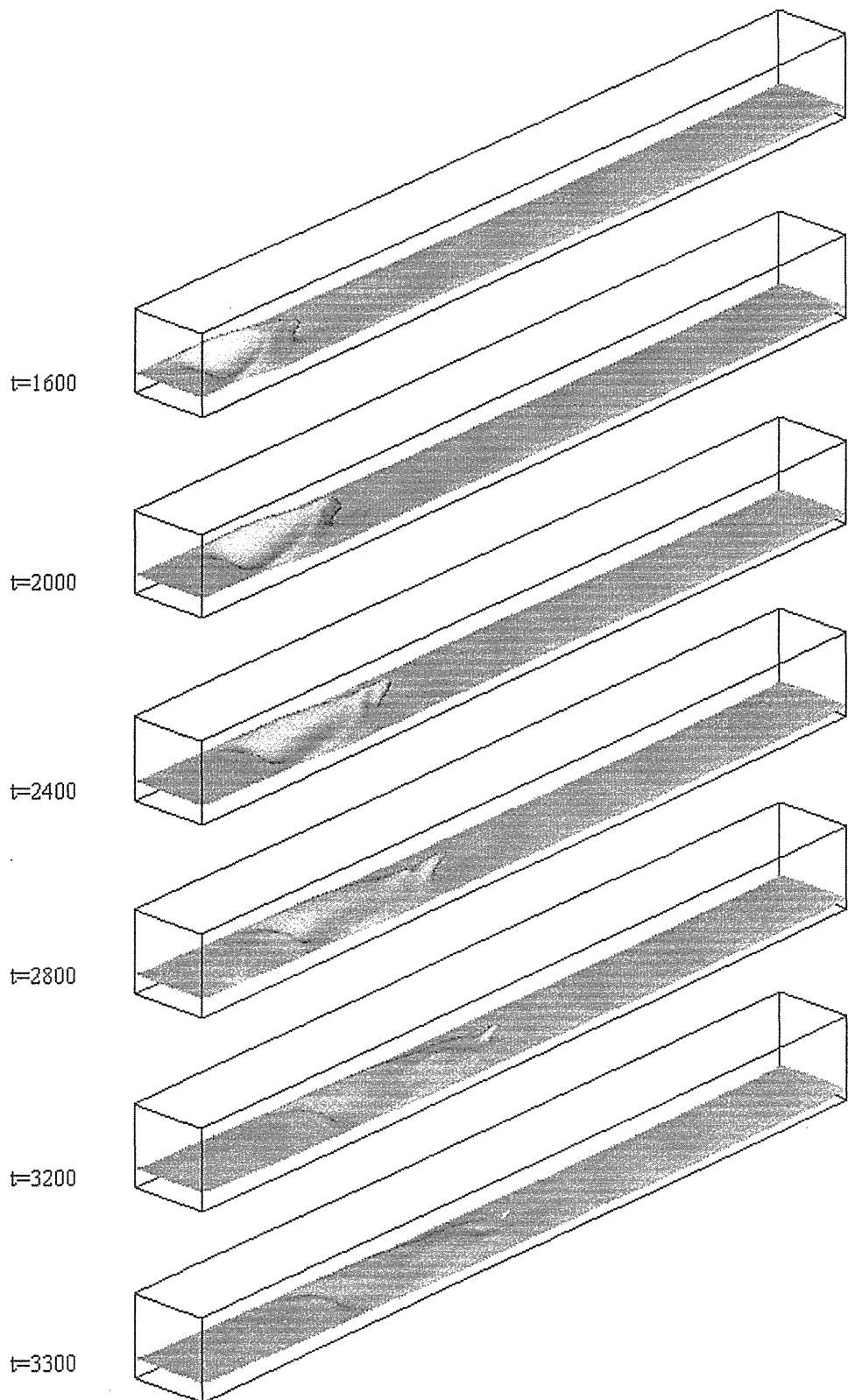


Fig. 7.30 Time evolution of the deformed interface in the case with no-slip side walls for  $Re_h = 215$ ,  $V_l = 0.337$ ,  $L = 383$ ,  $W = 37$

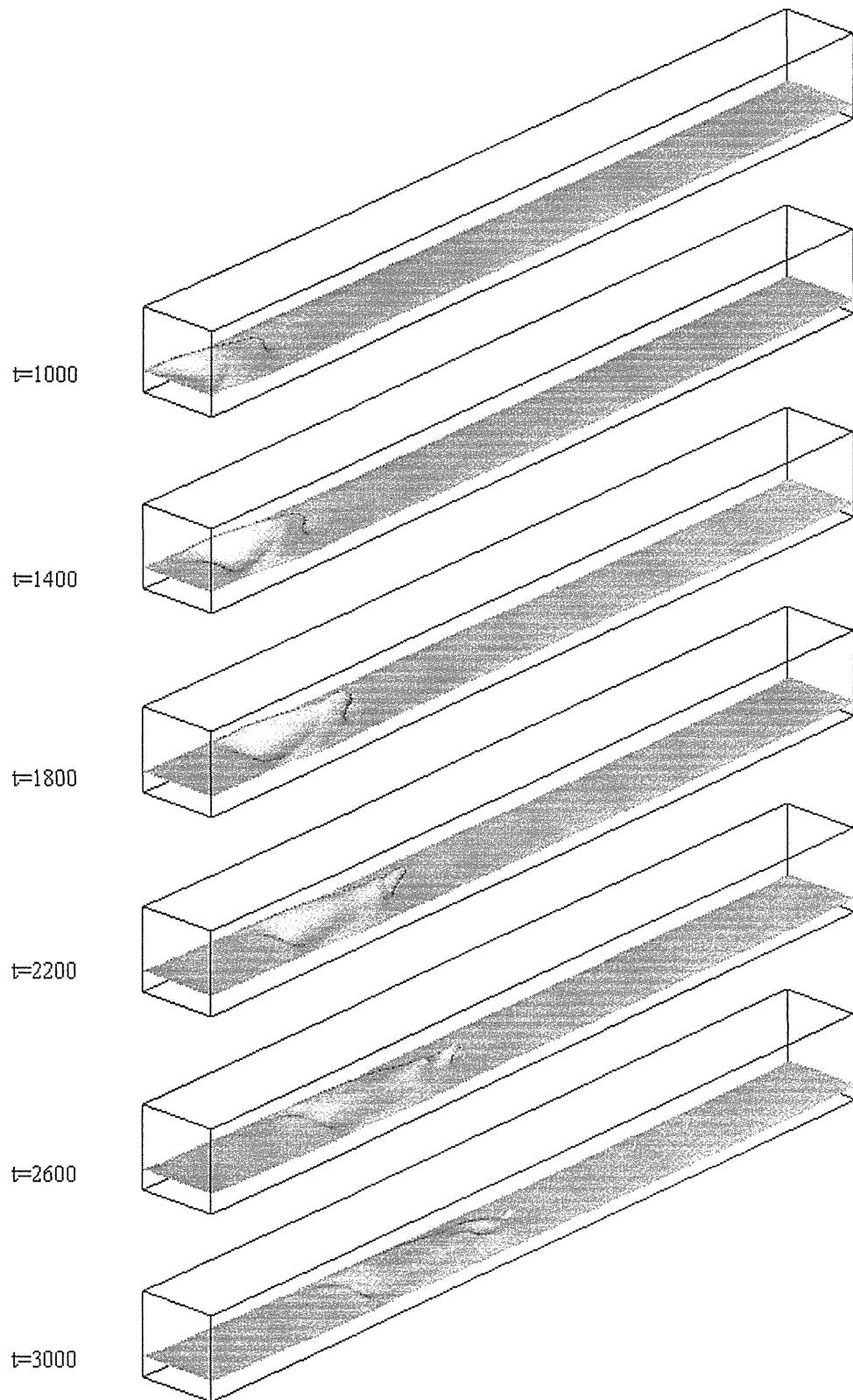


Fig. 7.31 Time evolution of the deformed interface in the case with no-slip side walls for  $Re_h = 270, V_l = 0.306, L = 383, W = 37$

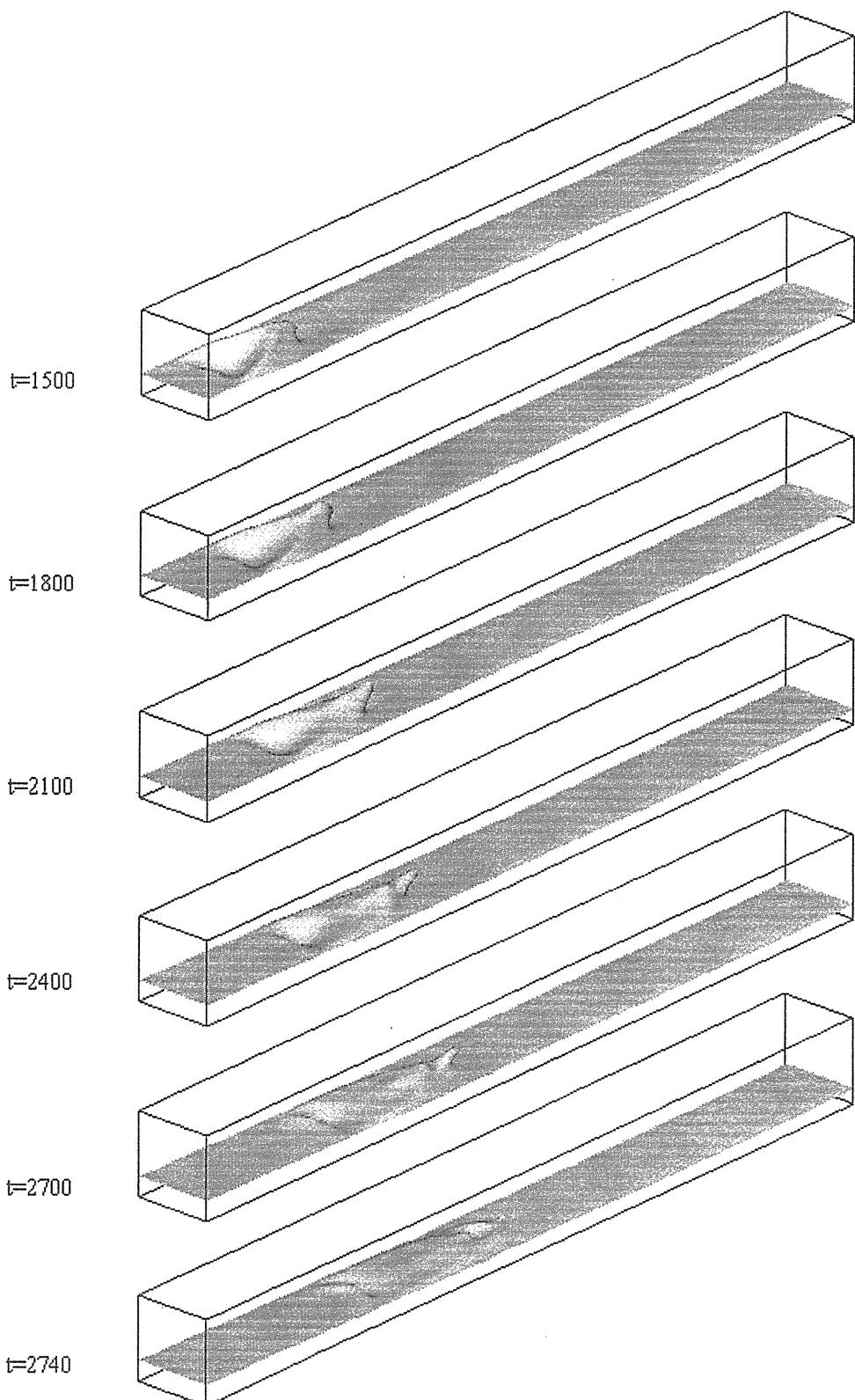


Fig. 7.32 Time evolution of the deformed interface in the case with no-slip side walls for  $Re_h = 322, V_l = 0.296, L = 383, W = 37$

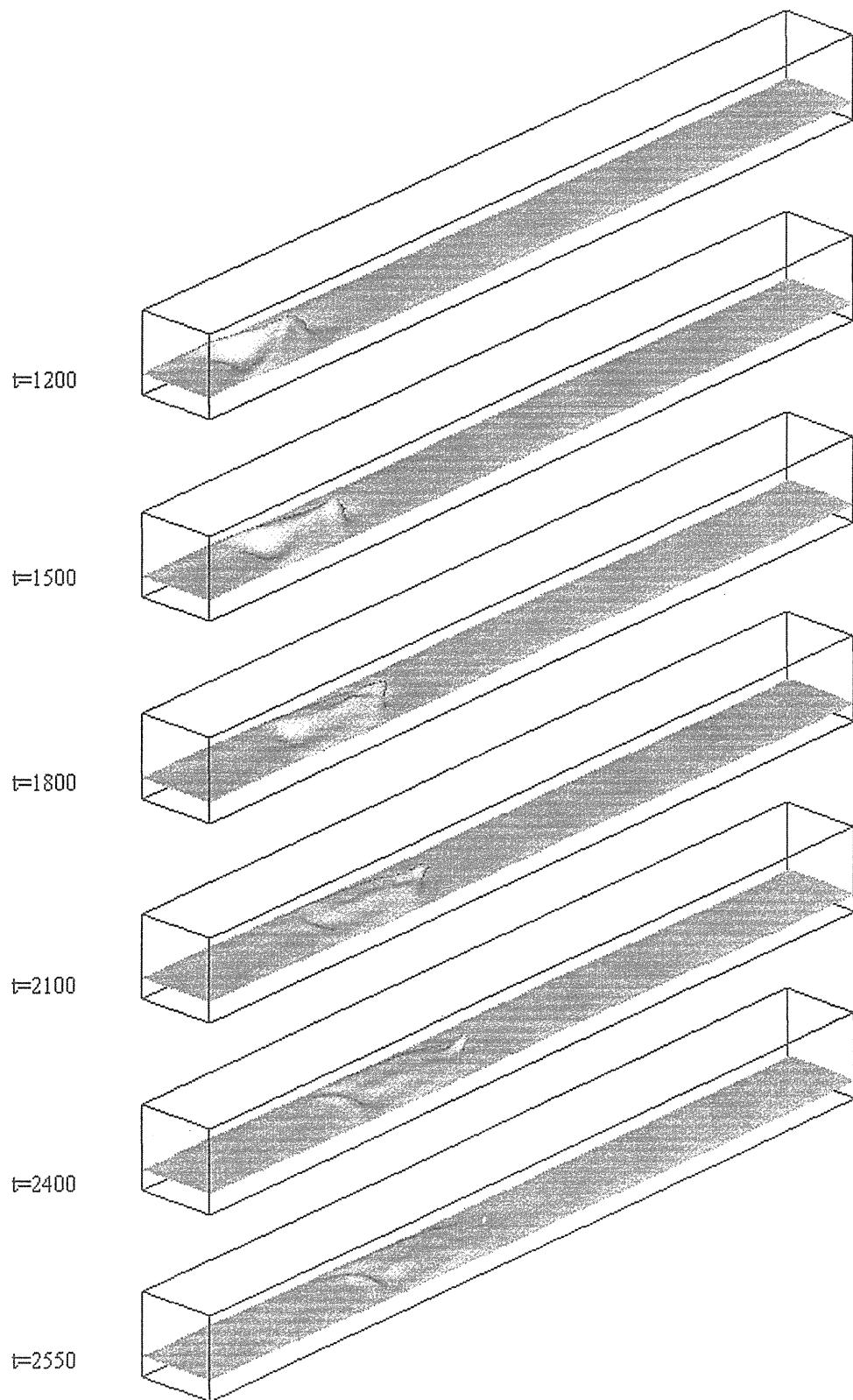


Fig. 7.33 Time evolution of the deformed interface in the case with no-slip side walls for  $Re_h = 377, V_l = 0.250, L = 383, W = 37$

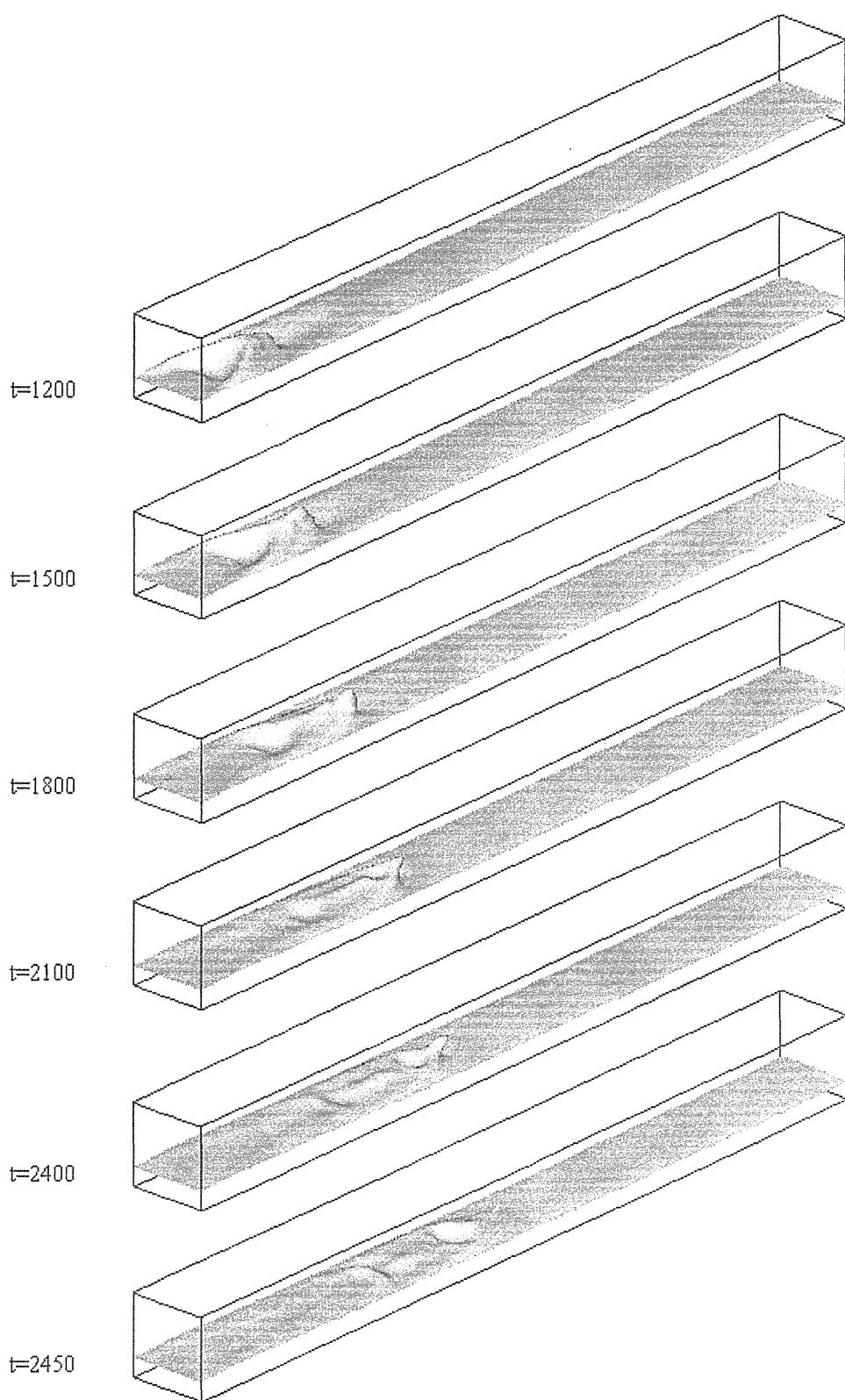


Fig. 7.34 Time evolution of the deformed interface in the case with no-slip side walls for  $Re_h = 428, V_l = 0.354, L = 383, W = 37$

## 8. 結言

格子法と呼ばれる格子ガス法及び格子ボルツマン法の二相流体モデルである格子ガス気液モデル、格子ボルツマン法 HCZ モデルを用いて、二相流動のシミュレーションを行ない、二相界面現象に注目し、その妥当性及び有用性を検討した。さらに、格子ボルツマン法 HCZ モデルを、複雑界面現象を示す水平層状二相流への適用を試み、界面成長に関する理論的流動様式線図、及び液滴発生に関する実験相関式を再現し、また界面現象を観察した。

格子ガス気液モデルについては、二次元の最大相互作用モデルと最小相互作用モデルを、重力による液滴落下現象に適用した。最小相互作用モデルでは、液滴が落下方向へ延び、左右が潰れる非物理的な液滴変形が観察され、それは、モデルに内在する圧力の非等方性が、界面付近で顕著となるためであることが分かった。最大相互作用モデルでは、現実に見られる落下液滴と類似の液滴形状が観察され、その形状と Morton 数、Eötvös 数の関係は、Grace の実験相関図における関係とほぼ一致していた。しかし、終端速度に関する Reynolds 数については、シミュレーションから得られる値と Grace の相関図が示す値との間に差が見られた。これは計算格子サイズが十分でないこと、二次元シミュレーションであることが原因と考えられる。また、最大相互作用モデルにおいても、界面張力の非等方性が存在し、長距離相互作用距離が大きくなるほどそれが顕著になることが分かった。

次に、格子ボルツマン法の二相流現象のシミュレーションへの適用を試みた。まず、格子ボルツマン法の二相流体モデルである HCZ モデルによって、気泡上昇及び液滴落下の三次元シミュレーションを行なった。その結果、上昇気泡及び落下液滴の形状と Morton 数、Eötvös 数の関係は、共に Grace の実験相関図における関係とほぼ一致していた。また、終端速度に関する Reynolds 数についても、ほぼ一致した結果が得られた。

さらに、HCZ モデルのより実際的な二相流である水平層状二相流のシミュレーションへの適用を試みた。まず、モデルの界面が、二相流の流動様式変化の基本的機構である Kelvin-Helmholtz 不安定性理論を満たしている結果が得られた。矩形断面流路中の水平層状二相流のシミュレーションでは、界面の波の成長と Martinelli パラメータ、Froude 数との関係が、Taitel と Dukler の理論的考察により導かれた流動様式線図 (T-D 線図) の成長・非成長境界曲線を再現することが示された。さらに、流路幅が狭い場合のシミュレーションから、流れの三次元性の影響により、界面成長には、T-D 線図で与えられる値より大きな値の Froude 数、つまり低密度相のみかけ流速が必要であることが明らかとなった。水平層状二相流における液滴発生のシミュレーションでは、液滴が発生する場合の界面形状変化の様子が観測され、液滴発生と液膜 Reynolds 数及び無次元気相速度との関係が、Ishii-Grolmes 実験相関式を、実験結果の分布の範囲においてほぼ再現できることが示された。

これらの結果から、格子ボルツマン法 HCZ モデルは、基本的かつ実際的な水平層状二相流における界面現象のシミュレーションが可能であり、そのような二相流動に関する理論的流動様式線図や実験相関式を再現できることが明らかとなった。また、さらに現実的な流動への適用を考えた場合には、実際的な密度差の実現や熱効果の導入など、まだ改良すべき点があると考えられる。

謝 辞

本研究を行なうにあたり、並々ならぬ御支援、御助言を下さいました日本原子力研究所計算科学技術推進センター 渡辺 正 主任研究員に心から感謝致します。本報告書の元となった学位論文を執筆する機会を与えてくださいました、筑波大学大学院システム情報工学研究科 阿部 豊 教授、日本原子力研究所計算科学技術推進センター 繁木 英雄 主任研究員に深く感謝致します。

## 参考文献

- (1) Lewis E. E.: "Nuclear Power Reactor Safety", John Wiley & Sons Inc., (1977).
- (2) Whalley P.B.: "BOILING CONDENSATION AND GAS-LIQUID FLOW", Oxford University Press, (1987).
- (3) 植田辰洋: "気液二相流 一流れと熱伝導—", 養賢堂, (1981).
- (4) 日本機械学会編: "気液二相流技術ハンドブック", コロナ社, (1989).
- (5) 秋山守, 有富正憲 監修, "新しい気液二相流数值解析 —多次元流動解析—", コロナ社, (2002).
- (6) Rothman D. H. and Zaleski S.: "Lattice-gas Cellular Automata: *Simple models of complex hydrodynamics*", Cambridge University press, (1997).
- (7) Succi S.: "The Lattice Boltzmann Equation for Fluid Dynamics and Beyond", OXFORD SCIENCE PUBLICATION, (2001).
- (8) Hardy J. and Pomeau Y.: J. Math. Phys., 13, 1042 (1972); Hardy J., Pomeau Y., and de Pazzis O.: J. Math. Phys., 14, 1746 (1973); Hardy J., Pomeau Y., and de Pazzis O.: Phys. Rev. A, 13, 1949 (1976).
- (9) Frisch U., Hasslacher B., and Pomeau Y.: Phys. Rev. Lett., 56, 1505 (1986).
- (10) Frisch U., et al, :Complex Systems, 1, 649 (1987).
- (11) d'Humières D. and Lallemand P.: Complex Systems, 1, 599 (1987).
- (12) Rothman D. H. and Zaleski S.: Rev. Mod. Phys., 66, 1417 (1994).
- (13) Wolfram S.: J. Stat. Phys., 45, 471(1986).
- (14) d'Humières D., et al: Europhys. Lett., 2, 291(1986).
- (15) Somers J. A. and Rem P. C.: Lecture Notes in Physics, 398, 59(1992).
- (16) Rothman D. H. and Keller J. K.: J. Stat. Phys., 52, 1119 (1988).
- (17) Appert C. and Zaleski S.: Phys. Rev. Lett., 64, 1 (1990).
- (18) Landau L. D. and Lifshitz E. M.: "STATISTICAL PHYSICS", Pergamon Press, (1959).
- (19) Appert C., et al: Fields Institute Communication 6, 1 (1996).
- (20) Appert C., et al: Trans. Theo. and Stat. Phys., 23, 107 (1994).
- (21) 海老原健一, 渡辺正: JAERI-Research 2000-042, "格子ガス気液モデルを用いた外力場中に  
おける液滴変形に関する研究" (2000).

- (22) Ebihara K., et al.: Int. J. Mod. Phys. C, 9, 1417(1998).
- (23) Ebihara K. and Watanabe T.: Eur. Phys. J. B, 18, 319(2000).
- (24) McNamara G. and Zanetti G.: Phys. Rev. Lett., 61, 2332(1988).
- (25) Benzi R., et al: Phys. Rep., 222, 145(1992).
- (26) Bhatnagar P., Gross P. E., and Krook K. M.: Phys. Rev., 94, 511(1954).
- (27) Chen H., et al: Phys. Rev. Lett., 67, 3776(1991).
- (28) Chen S., et al: Phys. Rev. A, 45, 5339(1991).
- (29) Qian Y. H., et al: Europhys. Lett., 17, 479(1992).
- (30) He X. and Luo L.-S.: Phys. Rev. E, 55, R6333(1997).
- (31) Chen S. and Doolen G. D.: Annu. Rev. Fluid Mech., 30, 329(1998).
- (32) He X. and Luo L.-S.: Phys. Rev. E, 56, 6811(1997).
- (33) He X., et al: Phys. Rev. E, 57, R31(1998).
- (34) Luo L.-S.: Phys. Rev. E, 62, 4982(2000).
- (35) Gunstensen A. K., et al: Phys. Rev. A, 43, 4320(1991).
- (36) Grunau D., et al: Phys. Fluids A, 5, 2557(1993).
- (37) Shan X. and G. Doolen G.: J. Stat. Phys., 81, 379(1993).
- (38) Shan X. and Chen H.: Phys. Rev. E, 47, 1815(1993).
- (39) Shan X. and Chen H.: Phys. Rev. E, 49, 2941(1994).
- (40) Swift M. R., et al: Phys. Rev. Lett., 75, 830(1995).
- (41) Swift M. R., et al: Phys. Rev. E, 54, 5041(1996).
- (42) Chen S. and Qian Y. H.: Int. J. Mod. Phys. C, 8, 763(1997).
- (43) 濱田剛 他: 日本機械学会論文集 B 編, 64, 1955(1999).
- (44) He X., et al: J. Comp. Phys., 152, 642 (1999).
- (45) He X., et al: Phys. Fluids, 11, 1143(1999).
- (46) Chapman S. and Cowling T. G.: "THE MATHEMATICAL THEORY OF NON-UNIFORM GASES", CAMBRIDGE AT THE UNIVERSITY PRESS, (1970).

- (47) Appert C. and Zaleski S.: J. Phys. II France, 3, 309 (1993).
- (48) Drtina P., et al: J. Aerosol Sci., 22, S249(1991).
- (49) Schelkle M., et al: J. Aerosol Sci., 24, S513(1993).
- (50) Cieplak M.: Phys. Rev. E, 51, 4353(1995).
- (51) 松隈洋介, 高橋亮一: 日本機械学会論文集B編, 61, 3145(1995).
- (52) 渡辺悟, 高橋亮一: 日本機械学会論文集B編, 63, 194(1997).
- (53) Watanabe T. and Ebihara K.: Nucl. Eng. Des., 188, 111(1999).
- (54) 松隈洋介, 他: 日本機械学会論文集B編, 66, 3049(2000).
- (55) 松隈洋介, 他: 日本機械学会論文集B編, 66, 315(2000).
- (56) 松隈洋介, 他: 日本機械学会論文集B編, 67, 1654(2001).
- (57) 栃尾大輔, 他: 日本機械学会論文集B編, 68, 2511(2002).
- (58) Buick J., et al: Int. J. Numer. Meth. Fluids, 22, 312(1996).
- (59) Buick J., et al: Phys. Fluids, 9, 2585(1997).
- (60) Pietro L. B. D., et al: Water Resources Research, 30, 2785(1994).
- (61) Clift R., et al: "Bubbles, Drops, and Particles", ACADEMIC PRESS, (1978).
- (62) Gerits M., et al: Phys. Rev. E, 48, 988(1993).
- (63) Croxton C. A.: "Statistical Mechanics of The Liquid Surface", John Wiley & Sons, (1980).
- (64) Gibbs, J. W. :"Collected Works Vol.1", Yale University Press, (1928).
- (65) Diemer K., et al: "Lattice-Gas Methods for Partial Differential Equations", Addison Wesley, 137(1990).
- (66) Kadanoff L. P., et al: Phys. Rev. A, 40, 4527(1989).
- (67) Halliday I., et al: Phys. Rev. E, 54, 2573(1996).
- (68) Xi H. and Duncan C.: Phys. Rev. E, 59, 3022(1999).
- (69) Inamuro T., et al: Int. J. Mod. Phys. B, 17, 21(2003).
- (70) Sankaranarayanan K., et al: Chem. Eng. Sci., 54, 4817(1999).
- (71) Inamuro T., et al: Lecture Notes in Comp. Sci., 2657, 1015(2003).

- (72) Watanabe T. and Ebihara K.: J. Fluids Eng., 124, 576(2002).
- (73) Takada N., et al: J. Nucl. Sci. Tech., 38, 330(2001).
- (74) Zhang R., et al: Comp. Phys. Comm., 129, 121(2000).
- (75) Hirt C. W., et al: J. Comp. Phys., 39, 201(1981).
- (76) Bhaga D. and Waber M. E.: J. Fluid Mech., 105, 61(1981).
- (77) 富山明男, 他: 日本機械学会論文集 B 編 60, 58(1994).
- (78) Zhang R., et al: Advances in Water Resources, 24, 461 (2001).
- (79) Tsutahara M., et al: Comp. Phys. Comm., 129, 131(2000).
- (80) Buick J. M. and Greated C. A.: Phys. Fluids, 10, 1490(1998).
- (81) Chandrasekhar S.: "Hydrodynamics and Hydromagnetic stability", Oxford University press, New York, (1961).
- (82) Ebihara K. and Watanabe T.: Int. J. Mod. Phys. B, 17, 113(2003).
- (83) Plouraboué F. and Hinch E. J.: Phys. Fluids, 14, 922 (2002).
- (84) Maier R. S., et al: Phys. Fluids, 8, 1788(1996).
- (85) Taitel Y. and Dukler A. E.: AIChE J., 22, 47(1976).
- (86) 海老原健一, 渡辺正: 日本機械学会論文集 B 編, 70, 1393(2004).
- (87) Ebihara K. and Watanabe T.: "Proc. of ASME Int. Mechanical Engineering Congress and Exposition", IMECE2004-59679(2004).
- (88) 深野徹, 他: 日本機械学会論文集 B 編 49, 2704(1983).
- (89) Meignin L., et al: Phys. Rev. E, 64, 26308(2001).
- (90) Plouraboué F. and Hinch E. J.: Phys. of Fluid, 14, 992(2002).
- (91) Gondret P., et al: Phys. of Fluid, 9, 1841(1997).
- (92) Akai M., et al: Int. J. Multiphase Flow, 6, 173(1979).
- (93) Ishii M. and Grolmes M. A.: AIChE J., 21, 308(1975).
- (94) 海老原健一, 渡辺正: "第 17 回数值流体力学シンポジウム講演論文集 (CD-ROM)" , B5-3(2003).
- (95) 海老原健一, 渡辺正: 日本流体力学会誌「ながれ」, 23, 253(2004).

- (96) 海老原健一, 渡辺正: "第 18 回数值流体力学シンポジウム講演論文集 (CD-ROM)" , C5-3(2004).
- (97) 深野徹, 他: 日本機械学会論文集 B 編, 68, 1849(2002).
- (98) Holowach M. J., et al: Int. J. Heat and Fluid Flow, 23, 807(2002).
- (99) Hènon M.: Complex Systems, 1, 763(1987).
- (100) Hènon M.: J. Stat. Phys., 68, 353(1992).
- (101) He X., Chen S., Doolen G. D.: J. Comp. Phys., 146, 282(1998).
- (102) Carnahan N. F. and Starling K. E.: J. Chem. Phys., 51, 635(1969).
- (103) Gomer R. and Smith C. S.: "Structure and properties of solid surface", The university of Chicago press, (1953).

## 付録 A. 非圧縮性 Navier-Stokes 方程式の導出

本節では、格子ガス法の微視的な時間発展方程式からの巨視的な流体力学方程式（非圧縮性 Navier-Stokes 方程式）の導出について記述する。尚、この導出過程は、文献(10, 12)に基づいて記述されている。

### A.1 格子ガス法の時間発展方程式

格子ガス法における粒子の運動は、ブーリアン変数に対する時間発展方程式によって、

$$n_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i, t + 1) = n_i(\mathbf{x}, t) + \Delta_i[\mathbf{n}(\mathbf{x}, t)], \quad (\text{A.1})$$

と書くことができる。ここで  $n_i(\mathbf{x}, t)$  は、時刻  $t$  における格子点  $\mathbf{x}$  の  $i$  方向の粒子の有 ( $n_i = 1$ ) 無 ( $n_i = 0$ ) を表すブーリアン変数である。粒子の方向は、添字  $i$  ( $i = 0 \sim b$ ) によって表され、 $\mathbf{c}_i$  はその方向の粒子の速度を表す。また  $i = 0$  の時は、格子点に停止している停止粒子を表す。右辺第二項の  $\Delta_i[\mathbf{n}(\mathbf{x}, t)]$  は、格子点での粒子の衝突項であり、以下の式で表される。

$$\Delta_i[\mathbf{n}(\mathbf{x}, t)] = \sum_{s_i, s'_i} a_{ss'}(\mathbf{x}, t)(s'_i - s_i) \prod_j n_j(\mathbf{x}, t)^{s_j} \{1 - n_j(\mathbf{x}, t)\}^{(1-s_j)}. \quad (\text{A.2})$$

ここで、 $s = \{s_i\}$ 、 $s' = \{s'_i\}$  は、それぞれ、格子点での衝突前及び衝突後の粒子の配置を表し、 $a_{ss'}(\mathbf{x}, t)$  は、配置  $s$  から配置  $s'$  への遷移の仕方を表すブーリアン変数である。ある粒子配置が決まった配置へ遷移する場合、決定論的モデルと呼び、ある配置の遷移がある確率によって決まる場合を非決定論的モデルと呼ぶ。衝突項の式 (A.2) は、格子ガス法のすべての衝突演算を表現することができる。

### A.2 格子ガス法の時間発展方程式から格子ボルツマン方程式

格子ガス法の時間発展方程式の統計平均（アンサンブル平均）を取り、 $\langle n_i(\mathbf{x}, t) \rangle$  を一粒子分布関数  $N_i(\mathbf{x}, t)$  (以下 分布関数とする) で表すことによって、式 (A.1) は、

$$N_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i, t + 1) = N_i(\mathbf{x}, t) + \langle \Delta_i[\mathbf{n}(\mathbf{x}, t)] \rangle, \quad (\text{A.3})$$

となる。さらに、この式の衝突項の統計平均を分布関数で表すために、ボルツマンの分子カオス仮定に基づくボルツマン近似を採用する。ボルツマンの分子カオス仮定とは、衝突前後において粒子間に相関がないことを仮定し、

$$\langle n_a n_b \cdots n_x \rangle = \langle n_a \rangle \langle n_b \rangle \cdots \langle n_x \rangle, \quad (\text{A.4})$$

であることを意味する。これをボルツマン近似と呼ぶ。この近似により、式 (A.3) は、

$$\begin{aligned} N_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i, t + 1) &= N_i(\mathbf{x}, t) + \Delta_i[\mathbf{N}(\mathbf{x}, t)], \\ \Delta_i[\mathbf{N}(\mathbf{x}, t)] &= \sum_{s_i, s'_i} A(s, s')(s'_i - s_i) \prod_j N_j(\mathbf{x}, t)^{s_j} \{1 - N_j(\mathbf{x}, t)\}^{(1-s_j)}, \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

と書き換えることができる。ここで  $A(s, s') = \langle a_{s, s'} \rangle$  であり、衝突によって、ある分布関数の配置  $s$  が配置  $s'$  へ遷移する割合を表している。式 (A.5) は格子ボルツマン方程式となっている。巨視的な物理量である密度  $\rho(\mathbf{x}, t)$  と流速  $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$  は、格子ボルツマン方程式に従う分布関数から、

$$\rho(\mathbf{x}, t) = \sum_{i=0}^b N_i(\mathbf{x}, t), \quad \rho(\mathbf{x}, t)\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \sum_{i=0}^b N_i(\mathbf{x}, t)\mathbf{c}_i, \quad (\text{A.6})$$

と得ることができる。

### A.3 平衡粒子分布関数及び低 Mach 展開

格子ボルツマン方程式 (A.5) の平衡分布関数  $N_i^{eq}$  は、時間変化において一定である。つまり  $\Delta_i[\mathbf{N}^{eq}] = 0$  を満たしていることから、

$$N_i^{eq} = \frac{1}{1 + \exp(h + \mathbf{q} \cdot \mathbf{c}_i)}, \quad (\text{A.7})$$

のように Fermi-Dirac 分布の形で表すことができる。また、この平衡分布関数は、時間、空間に対して一様である。ここで、 $h$ 、 $\mathbf{q}$  は、この分布を決定するための任意パラメータであり、式 (A.6) の関係を満たすことから、対象としている系全体の密度  $\rho$  及び流速  $\mathbf{u}$  のみの関数として表すことができる。そこで、流速が小さいとして、 $h(\rho, \mathbf{u})$ 、 $\mathbf{q}(\rho, \mathbf{u})$  を、

$$h(\rho, \mathbf{u}) = h_0(\rho) + h_2(\rho)u^2 + O(u^4), \quad \mathbf{q} = \mathbf{q}_1(\rho) \cdot \mathbf{u} + O(u^3), \quad (\text{A.8})$$

と展開し、式 (A.6) を用いてパラメータ  $h_0$ 、 $h_2$ 、 $\mathbf{q}_1$  を決定し、平衡分布関数の展開形を流速の二次のオーダーまで求めることができる。

$$\begin{aligned} N_i^{eq} &= \frac{\rho}{b} \left[ 1 + \frac{Db}{c^2 b_m} c_{i\alpha} u_\alpha + G(\rho) \frac{b^2}{b_m^2} \left\{ Q_{i\alpha\beta} + \frac{c^2}{Db} \delta_{\alpha\beta} \right\} u_\alpha u_\beta \right] + O(u^3) \quad (\text{for } i = 1 \sim b), \\ N_0^{eq} &= \frac{\rho}{b} \left[ 1 - G(\rho) \frac{c^2 b}{Db_m} u^2 \right] + O(u^3). \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

ここで、 $D$  は次元、 $b_m = b - 1$ 、

$$G(\rho) = \frac{D^2}{2c^4} \frac{b - 2\rho}{b - \rho}, \quad Q_{i\alpha\beta} = c_{i\alpha} c_{i\beta} - \frac{c^2}{D} \delta_{\alpha\beta}, \quad (\text{A.10})$$

である。空間座標の添字については Einstein の規約を用いている。さらに計算過程において、

$$\sum_{i=0}^b c_{i\alpha} c_{i\beta} = \frac{b_m c^2}{D} \delta_{\alpha\beta}, \quad (\text{A.11})$$

の関係を用いた。

### A.4 多重スケール展開 (Chapman-Enskog 展開)

ここでは、多重スケール展開 (Chapman-Enskog 展開) を適用し、巨視的な流体力学方程式の導出を行なう。分布関数  $N_i(\mathbf{x}, t)$  は、局所的に平衡な分布関数とそれに対して小さな揺らぎの項

によって展開されるとする。

$$N_i(\mathbf{x}, t) = N_i^{(0)}(\mathbf{x}, t) + N_i^{(1)}(\mathbf{x}, t) + N_i^{(2)}(\mathbf{x}, t) + \dots \quad (\text{A.12})$$

この時、分布関数の揺らぎは、巨視的物理量の  $\rho(\mathbf{x}, t)$ 、 $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$  の揺らぎに起因している。そして、これらの物理量の揺らぎは、空間的スケールの異なる揺らぎによるものである。よって、それぞれのスケールに対する揺らぎを  $N_i^{(k)}$  で表し、 $N_i^{(k)}$  は  $k$  階の空間微分のオーダー  $O(\nabla^k)$  であるとする。また、時間のスケールについては、 $O(\nabla^k)$  の空間的揺らぎに対応する時間変化を  $\partial_{t_k}$  とし、時間微分を、

$$\partial_t = \partial_{t_1} + \partial_{t_2} + \dots, \quad (\text{A.13})$$

と展開する。このような展開を多重スケール展開 (Chapmann-Enskog 展開) と呼ぶ。また  $N_i^{(0)}(\mathbf{x}, t)$  は、流速及び密度が、時間と空間に依存した  $N_i^{eq}$  によって表せるとする。つまり  $N_i^{(0)}(\mathbf{x}, t) = N_i^{eq}(\mathbf{x}, t)$  とする。以下において、この多重スケール展開を用いて、オーダーごとに巨視的方程式の導出を行なう。

### (a) 一次オーダー

まず、質量保存、運動量保存の式、

$$\sum_i N_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i, t + 1) = \sum_i N_i(\mathbf{x}, t), \quad \sum_i c_{i\alpha} N_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i, t + 1) = \sum_i c_{i\alpha} N_i(\mathbf{x}, t), \quad (\text{A.14})$$

に対して Taylor 展開、多重スケール展開を適用し、一次のオーダーまでを取り出す。

$$\sum_i \partial_{t_1} N_i^{(0)} + \sum_i c_{i\alpha} \partial_\alpha N_i^{(0)} = 0, \quad \sum_i c_{i\alpha} \partial_{t_1} N_i^{(0)} + \sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} \partial_\beta N_i^{(0)} = 0. \quad (\text{A.15})$$

この式に対して式 (A.6) を適用することによって、

$$\partial_{t_1} \rho + \partial_\alpha \rho u_\alpha = 0, \quad (\text{A.16})$$

$$\partial_{t_1} \rho u_\alpha + \partial_\beta \Pi_{\alpha\beta}^{(0)} = 0, \quad (\text{A.17})$$

と得られる。ここで  $\Pi_{\alpha\beta}^{(0)} = \sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} N_i^{(0)}$  である。式 (A.16) は一次オーダーの連続の式である。さらに、式 (A.9) の  $N_i^{eq}$  を使って、 $\Pi_{\alpha\beta}^{(0)}$  を書き換えると、

$$\begin{aligned} \Pi_{\alpha\beta}^{(0)} &= p(\rho, u^2) \delta_{\alpha\beta} + g(\rho) \rho u_\alpha u_\beta, \\ g(\rho) &= \frac{D}{D+2} \frac{b}{b_m} \frac{1-2\rho/b}{1-\rho/b}, \\ p(\rho, u^2) &= c_s^2 \rho - g(\rho) \rho \frac{c_s^2}{c^2} \left(1 + \frac{D}{2} - \frac{c^2}{2c_s^2}\right) u^2, \end{aligned} \quad (\text{A.18})$$

となる。ここで  $c_s^2 = \frac{b_m c^2}{b D}$  は格子ガスモデルの音速である。この計算過程において関係式 (A.11) と

$$\sum_i^b c_{i\alpha} c_{i\beta} c_{i\gamma} c_{i\delta} = \frac{b_m c^4}{D(D+2)} (\delta_{\alpha\beta} \delta_{\gamma\delta} + \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\delta} + \delta_{\alpha\delta} \delta_{\beta\gamma}), \quad \sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} c_{i\gamma} = 0, \quad (\text{A.19})$$

を用いた。さらに式 (A.17) は、

$$\partial_{t_1} \rho u_\alpha + \partial_\beta [g(\rho) \rho u_\alpha u_\beta] = -\partial_\alpha [p(\rho, u^2)], \quad (\text{A.20})$$

となり、巨視的な流体力学方程式の Euler 方程式が得られる。

## (b) 二次オーダー

一次のオーダーの場合と同様に、式 (A.14) の質量保存、運動量保存の式に Taylor 展開と多重スケール展開を適用し、二次のオーダーの項を取り出すと、それぞれ、

$$\sum_i \left[ \partial_{t_2} N_i^{(0)} + \frac{1}{2} c_{i\alpha} c_{i\beta} \partial_\alpha \partial_\beta N_i^{(0)} + \partial_{t_1} c_{i\alpha} \partial_\alpha N_i^{(0)} + \frac{1}{2} \partial_{t_1} \partial_{t_1} N_i^{(0)} \right] = 0, \quad (\text{A.21})$$

$$\sum_i \left[ \partial_{t_2} c_{i\alpha} N_i^{(0)} + \frac{1}{2} \partial_{t_1} c_{i\alpha} (\partial_{t_1} + c_{i\beta} \partial_\beta) N_i^{(0)} + \frac{1}{2} \partial_\beta c_{i\alpha} c_{i\beta} (\partial_{t_1} + c_{i\gamma} \partial_\gamma) N_i^{(0)} + \partial_{t_1} c_{i\alpha} N_i^{(1)} + \partial_\beta c_{i\alpha} c_{i\beta} N_i^{(1)} \right] = 0 \quad (\text{A.22})$$

となる。ここで、

$$\sum_i N_i^{(l)} = \sum_i \mathbf{c}_i N_i^{(l)} = 0 \quad (l > 0), \quad (\text{A.23})$$

の関係を用いている。式 (A.21) から

$$\partial_{t_2} \rho + \frac{1}{2} \partial_\alpha \partial_\beta \Pi_{\alpha\beta}^{(0)} + \partial_{t_1} \partial_\alpha (\rho u_\alpha) + \frac{1}{2} \partial_{t_1} \partial_{t_1} \rho = 0, \quad (\text{A.24})$$

が得られ、これに式 (A.16) と式 (A.17) から得られる  $\partial_{t_1} \partial_{t_1} \rho = -\partial_{t_1} \partial_\alpha (\rho u_\alpha)$ ,  $\partial_\alpha \partial_{t_1} (\rho u_\alpha) = -\partial_\alpha \partial_\beta \Pi_{\alpha\beta}^{(0)}$  の関係を用いると、

$$\partial_{t_2} \rho = 0, \quad (\text{A.25})$$

が得られる。よって、この式と式 (A.16) から二次のオーダーまで巨視的な連続の式が成り立っていることが分かる。

次に、式 (A.22) について考える。この式の左辺第 2、3 項は、平衡分布関数の展開形 (A.9)、一次オーダーの連続の式 (A.16)、Eular 方程式 (A.20) を用いて得られる関係式、

$$(\partial_{t_1} + c_{i\beta} \partial_\beta) N_i^{(0)} = \left( \frac{D}{c^2 b_m} Q_{i\alpha\beta} + \frac{1}{b b_m} \delta_{\alpha\beta} \right) \partial_\beta (\rho u_\alpha), \quad (\text{A.26})$$

の関係式によって変形され、

$$\partial_{t_2} \rho u_\alpha + \frac{1}{2} \partial_\beta \sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} \left( \frac{D}{c^2 b_m} Q_{i\gamma\delta} + \frac{1}{b b_m} \delta_{\gamma\delta} \right) \partial_\gamma (\rho u_\delta) + \partial_\beta \sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} N_i^{(1)} = 0, \quad (\text{A.27})$$

となる。ここに現れる  $N_i^{(1)}$  は、空間座標についてスカラーであること、スケールの次数において一次であることから、最も一般的に、

$$N_i^{(1)} = \sigma c_{i\alpha} \partial_\alpha \rho + (\psi c_{i\alpha} c_{i\beta} + \chi \delta_{\alpha\beta}) \partial_\alpha (\rho u_\beta) \quad (\text{for } i > 0), \quad (\text{A.28})$$

$$N_0^{(1)} = Y \delta_{\alpha\beta} \partial_\alpha (\rho u_\beta), \quad (\text{A.29})$$

と書くことができる。ここで  $\sigma$ 、 $\psi$ 、 $\chi$ 、 $Y$  は任意定数である。さらに式 (A.23) より、 $\sigma = 0$ ,  $\chi = -\frac{c^2}{D} \psi - \frac{1}{b_m} Y$  となるので、

$$N_i^{(1)} = (\psi Q_{i\alpha\beta} - X \delta_{\alpha\beta}) \partial_\alpha (\rho u_\beta) \quad (\text{for } i > 0), \quad (\text{A.30})$$

$$N_0^{(1)} = b_m X \partial_\alpha (\rho u_\alpha), \quad (\text{A.31})$$

となる。ここで文献と表記を合わせるため  $Y = b_m X$  とした。この  $N_i^{(1)}$  を式 (A.27) に代入し、変形すると、

$$\begin{aligned}\partial_{t_2}(\rho u_\alpha) &= \partial_\beta [\nu \{\partial_\beta(\rho u_\alpha) + \partial_\alpha(\rho u_\beta)\}] + \partial_\alpha [\nu_2 \partial_\beta(\rho u_\beta)], \\ \nu &= -\frac{b_m c^4}{D(D+2)} \psi - \frac{c^2}{2(D+2)}, \\ \nu_2 &= -\frac{b_m c^2}{D} X + \frac{2b_m c^4}{D^2(D+2)} \psi + \frac{c^2}{D(D+2)} - \frac{c^2}{2bD},\end{aligned}\quad (\text{A.32})$$

が得られる。ここで、 $\nu$  は動せん断粘性係数 (kinematic shear viscosity) であり、 $\nu_2$  は体積粘性係数 (bulk または compression viscosity) を密度で割った係数である。そして Eular 方程式 (A.20) と式 (A.32) から Navier-Stokes 方程式を得ることができる。しかし、これらの係数には、まだ任意定数が含まれている。粘性係数は方程式の輸送係数であることから、含まれる任意定数は、保存の式のみから決定することができない。そのため、これらを決定するためには粒子の衝突の詳細を考慮する必要がある。

## A.5 粘性係数

格子ボルツマン方程式から  $N_i^{(1)}$  を解くことによって、粘性係数の任意定数を決定する。格子ボルツマン方程式 (A.5) を線形化し、多重スケール展開の一次の項を取り出す。

$$(\partial_{t_1} + c_{i\alpha} \partial_\alpha) N_i^{(0)}(\mathbf{x}, t) = \sum_j \Lambda_{ij} N_j^{(1)}, \quad \Lambda_{ij} = \left. \frac{\partial \Delta_i}{\partial N_j} \right|_{N_i=\rho/b}. \quad (\text{A.33})$$

衝突項の係数行列  $\Lambda_{ij}$  を、

$$\Lambda_{ij} = \begin{pmatrix} \lambda_{01} & \lambda_{1j} \\ \lambda_{1i} & A_{ij} \end{pmatrix}, \quad (\text{A.34})$$

と停止粒子と移動粒子に関して分割する。ここで衝突の対称性から、すべての  $i$  に対して  $\lambda_{1i} = \lambda_{11}$  である。また質量保存から  $\Lambda_{ij}$  の成分は、

$$\sum_{j=1}^{b_m} A_{ij} + \lambda_{11} = 0, \quad \lambda_{01} + b_m \lambda_{11} = 0, \quad (\text{A.35})$$

の関係をみたす。線形化された格子ボルツマン方程式も停止粒子部分と移動粒子部分に分割すると、

$$\partial_{t_1} N_0^{(1)} = -\frac{1}{b} \partial_\alpha(\rho u_\alpha) = \lambda_{01} N_{01}^{(1)} + \lambda_{11} \sum_{j=1}^{b_m} N_j^{(1)}, \quad (\text{A.36})$$

$$(\partial_{t_1} + c_{i\alpha} \partial_\alpha) N_i^{(0)} = \left( \frac{D}{c^2 b_m} Q_{i\alpha\beta} + \frac{1}{b b_m} \delta_{\alpha\beta} \right) \partial_\beta(\rho u_\alpha) = \sum_{j=1}^{b_m} A_{ij} N_j^{(1)} + \lambda_{11} N_0^{(1)}, \quad (\text{A.37})$$

となり、この関係式に、式 (A.28)、式 (A.29) の  $N_i^{(1)}$  を代入することによって、 $X$  と  $\psi$  は、

$$X = \frac{1}{b^2 b_m \lambda_{11}}, \quad \psi^{-1} = \frac{c^2 b_m}{D} \frac{\sum_{ij} Q_{i\alpha\beta} A_{ij} Q_{i\alpha\beta}}{\sum_i Q_{i\alpha\beta}^2}, \quad (\text{A.38})$$

となる。係数行列  $\Lambda_{ij}$  の具体的な形は、採用するモデルの衝突規則によって決まるため、粘性係数はそれぞれのモデルについて異なる。いくつかのモデルに対する粘性係数については、文献 (10, 12, 99) に詳しい。

### A.6 導出された流体力学方程式の考察

多重スケール展開、低流速展開によって、巨視的流体力学方程式である連続の式と Navier-Stokes 方程式が導出された。

$$\partial_t \rho + \partial_\alpha (\rho u_\alpha) = 0, \quad (\text{A.39})$$

$$\partial_t \rho u_\alpha + \partial_\beta \Pi_{\alpha\beta}^{(0)} = \partial_\beta S_{\alpha\beta}, \quad (\text{A.40})$$

$$\Pi_{\alpha\beta} = c_s^2 \rho - g(\rho) \rho \frac{c_s^2}{c^2} \left( 1 + \frac{D}{2} - \frac{c^2}{2c_s^2} \right) u^2 \delta_{\alpha\beta} + g(\rho) \rho u_\alpha u_\beta = p(\rho, u^2) + g(\rho) \rho u_\alpha u_\beta, \quad (\text{A.41})$$

$$S_{\alpha\beta} = [\nu \{ \partial_\beta (\rho u_\alpha) + \partial_\alpha (\rho u_\beta) \}] + [\nu_2 \partial_\gamma (\rho u_\gamma) \delta_{\alpha\beta}], \quad (\text{A.42})$$

ここで、式 (A.41) の圧力項の流速依存、移流項の係数  $g(\rho)$  によって、導出された方程式は Galileo 不変でないことが分かる。しかし、巨視的流体力学方程式の導出では、Mach 数が小さいことを仮定しているため、対象となる流体は非圧縮性であるとすることができる。そこで、式 (A.41) の中辺の第 1 項の  $\rho$  以外をすべて  $\rho_0 = \text{定数}$  で置き換える、

$$\begin{aligned} t &\rightarrow \frac{t}{g(\rho_0)}, \quad \nu, \nu_2 \rightarrow g(\rho_0)\nu', g(\rho_0)\nu'_2, \\ c_s^2 \rho - g(\rho_0) - \rho_0 \frac{c_s^2}{c^2} \left( 1 + \frac{D}{2} - \frac{c^2}{2c_s^2} \right) u^2 &\rightarrow \rho_0 g(\rho_0) P', \end{aligned} \quad (\text{A.43})$$

とスケーリングをすることによって、非圧縮性の流体力学方程式、

$$\partial_\alpha u_\alpha = 0, \quad \partial_t u_\alpha + u_\beta \partial_\beta u_\alpha = -\partial_\alpha P' + \nu' \partial_\beta \partial_\beta u_\alpha, \quad (\text{A.44})$$

を得ることができる。

## 付録 B. 格子ガス法の三次元への拡張

ここでは、格子の対称性と Navier-Stokes 方程式の導出可能性の関係、格子ガス法の三次元への拡張について記述する。

### B.1 格子の対称性と Navier-Stokes 方程式の導出可能性

ここでは、格子の対称性と巨視的極限での Navier-Stokes 方程式の導出可能性の関係について具体的に記述する。

格子ガス法における粒子分布の時間発展方程式は、

$$n_i(t+1, \mathbf{x} + \mathbf{c}_i) = n_i(t, \mathbf{x}) + \Delta_i[\mathbf{n}(t, \mathbf{x})], \quad (\text{B.1})$$

と書くことができる。ここで、 $n_i(t, \mathbf{x})$  は  $(t, \mathbf{x})$  における格子点の  $i$  方向 ( $i$  方向は、採用する格子に依存する) の粒子の有無を表し、0 または 1 を取る。また、 $\mathbf{c}_i$  は粒子の速度ベクトル、 $\Delta_i[\mathbf{n}(t, \mathbf{x})]$  は衝突項を表す。この式に対して 平均場近似、ボルツマンの分子カオス仮定を適用し、 $N_i(t, x)$ (粒子分布関数) についての 格子ボルツマン方程式を導出し、さらに、その式をスケール展開 (Chapmann-Enskog 展開)、低 Mach 数展開、スケーリングすることによって、Navier-Stokes 方程式を得ることができる (10, 12)。この導出の過程において、速度ベクトルの直積の和として、2 階及び 4 階のテンソル

$$A_{\alpha\beta} = \sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta}, \quad A_{\alpha\beta\gamma\delta} = \sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} c_{i\gamma} c_{i\delta}, \quad (\text{B.2})$$

が運動量流束テンソル  $P_{\alpha\beta}(t, \mathbf{x}) = \sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} N_i(t, \mathbf{x})$  の中に現れる。ここで、ギリシャ文字は空間方向の添字を表す。また、テンソルの形から上記のテンソルは、対称テンソル（成分の添字の入れ換えによって、その成分の値が変化しないテンソル）であることが分かる。格子ガスの時間発展方程式の巨視的極限から Navier-Stokes 方程式を得るためにには、この運動量流束テンソルの等方性が要求され、そのためには、この上記の 2 階及び 4 階のテンソルが空間的に等方である必要がある。

テンソルが空間的に等方であるとは、テンソルの独立成分が 1 つであることを意味する (13)。つまり、あるテンソルの独立成分を空間対称性によって、1 つに減らすことができる場合、そのテンソルは空間的に等方であると言える。例えば、2 次元の正方格子において、上記の 2 階のテンソルは空間的に等方であるが、4 階のテンソルは等方でない。しかし、三角形格子を用いた場合には、両方のテンソルが等方である。このことは、次のように示すことができる。二次元空間を正方格子で離散化した場合、空間対称性として、図 B.1 の軸  $l_i$  ( $i = 1 \sim 4$ ) に関する軸対称性と点 O に対する回転対称性が存在する。それらの対称変換のうち、以下の 4 つのみが独立の変換となり 1 つの変換群を作る。

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{B.3})$$

このうち、1つは単位元であるので、実際にテンソルの成分どうしを関係づける変換は3つである。この変換群により、上記の2階の対称テンソルの成分には、

$$A_{11} = A_{22} = a, \quad A_{12} = 0, \quad (B.4)$$

の関係式が成り立ち ( $a$  は任意定数)、独立成分が1つであることが分かる。4階の対称テンソルの場合、その成分に対して、

$$A_{1111} = A_{2222} = a, \quad A_{1122} = b, \quad A_{1112} = A_{1222} = 0, \quad (B.5)$$

の関係式が得られ ( $a, b$  は任意定数)、2つの独立成分が存在する。このため、正方格子の空間対称性では、式(B.2)の4階のテンソルが空間的に等方とならない。三角形格子の場合、空間対称性は、図B.1の軸  $l_i$  ( $i = 1 \sim 6$ ) に関する軸対称性と点Oに関する回転対称性が存在する。これらの対称性に関する変換に対して、変換群をつくる独立な変換は、

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & \sqrt{3} \\ \sqrt{3} & -1 \end{pmatrix}, \quad \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -1 & \sqrt{3} \\ \sqrt{3} & 1 \end{pmatrix} \quad (B.6)$$

の5つである。この変換群により、2階の対称テンソルの成分に対して、

$$A_{11} = A_{22} = a, \quad A_{12} = 0, \quad (B.7)$$

の関係式が得られる。これにより、2階の対称テンソルは、1つの独立成分を持ち、空間的に等方である。また、4階の対称テンソルは、その成分に対して、

$$A_{1111} = A_{2222} = a, \quad A_{1122} = \frac{1}{3}a, \quad A_{1112} = A_{1222} = 0, \quad (B.8)$$

の式が成り立ち、2階のテンソルと同様に、独立成分が1つであるので等方であることが分かる。

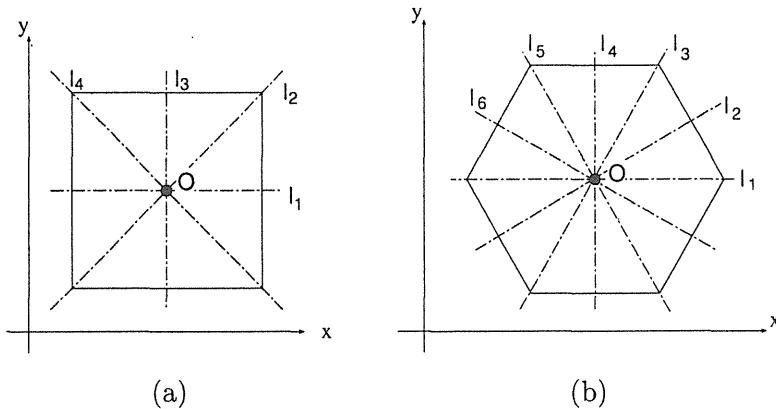


Fig. B.1 Symmetry of (a) the square lattice and (b) the hexagonal lattice

次に、三次元の場合について考える。三次元空間を離散化する正規格子のうち、最も対称性の高い格子は立方格子であり、その空間対称性は、図B.2に示す軸  $l_i$  ( $i = 1 \sim 13$ ) に関する回転

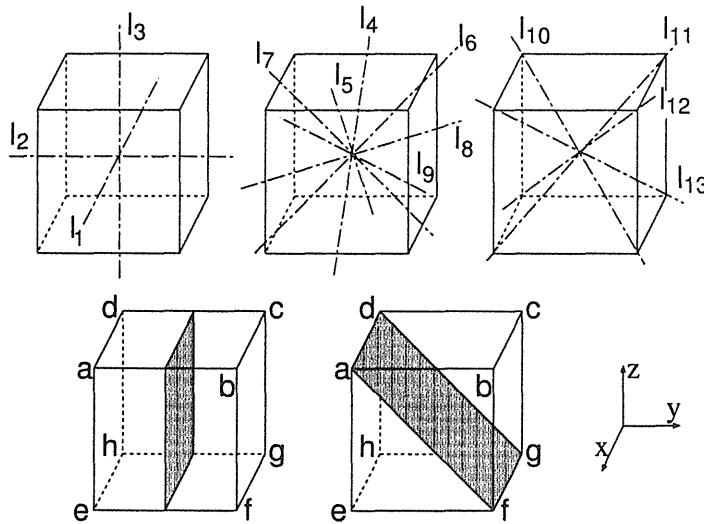


Fig. B.2 Symmetry of the cubic lattice

対称性と、各座標軸に垂直な面と面 afgd、bche、abgh、cdef、aegc、bfhd に関する鏡面対称性である（図には、2種類の対称面についての一例を示している）。これらの対称変換のうち、変換群を作る独立な変換は、

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (B.9)$$

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

の7つである。この変換群より、2階の対称テンソルの成分に対して、

$$A_{11} = A_{22} = A_{33} = a, \quad A_{12} = A_{13} = A_{23} = 0, \quad (B.10)$$

の関係が得られる。これにより、2階の対称テンソルは1つの独立成分を持つことが分かる。しかし、4階の対称テンソルの成分に対しては、

$$\begin{aligned} A_{1111} &= A_{2222} = A_{3333} = a, \\ A_{1122} &= A_{1133} = A_{2233} = b, \\ A_{1112} &= A_{1113} = A_{1123} = A_{1222} = A_{1223} = A_{1233} = A_{1333} = A_{2223} = A_{2333} = 0, \end{aligned} \quad (B.11)$$

の関係式しか得られないので、独立成分が2つ存在し、4階の対称テンソルは等方でないことが分かる。このことから、三次元空間を離散化できる最も対称性の高い正規格子である立方格子を用いても、4階の対称テンソルは空間的に等方でないことが分かった。つまり、三次元空間のど

のような正規格子を用いても、格子ガスの時間発展方程式の巨視的極限で Navier-Stokes 方程式を導出することができないことになる。そのため、d'Humières、Lallemand、Frisch<sup>(14)</sup> は、次節で記述する四次元空間の面心立方格子である FCHC 格子を導入し、この困難を解決した。

## B.2 FCHC 格子

FCHC 格子は、各格子点において、以下に示す速度ベクトル（リンク）を持つ<sup>(15, 100)</sup>。

$$\begin{aligned}
 c_1 &= (1, 0, 0, 1), & c_7 &= (-1, 0, 0, -1), & c_{13} &= (1, 1, 0, 0), & c_{19} &= (-1, -1, 0, 0), \\
 c_2 &= (0, 1, 0, 1), & c_8 &= (0, -1, 0, -1), & c_{14} &= (0, 1, 1, 0), & c_{20} &= (0, -1, -1, 0), \\
 c_3 &= (0, 0, 1, 1), & c_9 &= (0, 0, -1, -1), & c_{15} &= (1, 0, 1, 0), & c_{21} &= (-1, 0, -1, 0), \\
 c_4 &= (1, 0, 0, -1), & c_{10} &= (-1, 0, 0, 1), & c_{16} &= (1, -1, 0, 0), & c_{22} &= (-1, 1, 0, 0), \\
 c_5 &= (0, 1, 0, -1), & c_{11} &= (0, -1, 0, 1), & c_{17} &= (0, 1, -1, 0), & c_{23} &= (0, -1, 1, 0), \\
 c_6 &= (0, 0, 1, -1), & c_{12} &= (0, 0, -1, 1), & c_{18} &= (-1, 0, 1, 0), & c_{24} &= (1, 0, -1, 0).
 \end{aligned} \tag{B.12}$$

図 B.3 にこれらの速度ベクトルを示す。この図において、速度ベクトルは 2 つのグループに分けて示してある。これらの速度ベクトルの種類を変化させない元を持つ変換群は、

$$\begin{array}{cccc}
 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \\
 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \\
 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} & \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & 1 \\ -1 & 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} & \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 \end{pmatrix}
 \end{array} \tag{B.13}$$

である<sup>(100)</sup>。これらのうち、単位元の次の 4 つは、各座標軸に垂直な面に関する鏡面変換を、その次の 5 つは、2 つの座標軸の入れ換えを表しており、これらは、前節で示した三次元立方格子の場合の自然な拡張となっていることが分かる。残りの変換は、FCHC 格子特有の変換であり、それぞれ、

$$x + w = y + z, \quad x = y + z + w, \tag{B.14}$$

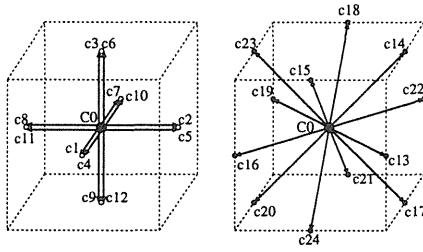


Fig. B.3 Microscopic particle velocity of the FCHC lattice: The velocity is classified to two groups for easily understanding.

で表される四次元空間の平面に対する鏡面変換を表している(100)。ここで、第4番目の方向をw方向としている。上記の変換群によって、2階の対称テンソルの成分は、

$$A_{11} = A_{22} = A_{33} = A_{44} = a, \quad A_{12} = A_{13} = A_{14} = A_{23} = A_{24} = A_{34} = 0, \quad (B.15)$$

の関係を満たし、その独立成分は1つである。また、4階の対称テンソルの成分は、

$$\begin{aligned} A_{1111} &= A_{2222} = A_{3333} = A_{4444} = a, \\ A_{1122} &= A_{1133} = A_{1144} = A_{2233} = A_{2244} = A_{3344} = \frac{1}{3}a, \\ A_{\alpha\alpha\beta\gamma} &= 0 \quad (\alpha, \beta, \gamma = 1 \sim 4, \alpha < \beta < \gamma), \\ A_{\alpha\beta\gamma\delta} &= 0 \quad (\alpha, \beta, \gamma, \delta = 1 \sim 4, \alpha < \beta < \gamma < \delta), \end{aligned} \quad (B.16)$$

の関係を満たす。よって、4階の対称テンソルは、1つの独立成分を持ち、空間的に等方であることが分かる。以上により、四次元空間のFCHC格子を採用することによって、運動量流束テンソルに現れる速度ベクトルの直積の和の2階及び4階対称テンソルが、空間的に等方であることが分かった。

しかし、これは、各格子点での格子ガス法の時間発展方程式が、巨視的極限において Navier-Stokes 方程式となることを示しているだけである。そこで、次に FCHC 格子上の格子ガスで三次元空間内の現象を表すことについて記述する。まず、1つ次元を落し、三次元空間の現象で、二次元の現象を表現することを考える。これは、三次元空間の1つの方向を周期的境界とし、その方向の現象が他の方向の現象に影響を与えないような現象を三次元空間で表現し、それを二次元空間での現象とみなすことである。この方法の類推から、FCHC 格子の場合は w 方向を周期境界とし、さらに、w 方向は二つの座標値のみ（例えば、 $w = 0, w = 1$ ）を持つものとする。そして、このような四次元座標系における w 方向以外の方向に影響を与えない現象を、三次元空間の現象と見なすこととする。式 (B.12) の速度ベクトルと w 方向が2層で周期境界であることから、ある格子点の x 方向、y 方向、z 方向の最近接格子点への粒子の移動は、必ず w 方向の座標値が変化し、粒子が2単位だけ同じ方向に移動すると、w 方向の座標値は元の値に戻ることが分かる。つまり、ある格子点とその最近接格子点の w 座標は、必ず異なる値をとることになる。そこで、この異なる w 座標を持った格子点を同じ三次元空間に表示することが可能となり、FCHC

格子を三次元空間に射影することができる(15)。このことを1つの例で図B.4に示す。この図において、黒丸を  $w=0$  の格子点とすると白丸は  $w=1$  の格子点と見なすことができる。以上のようなFCHC格子の座標系を用いて、格子ガスを三次元に拡張することができる。

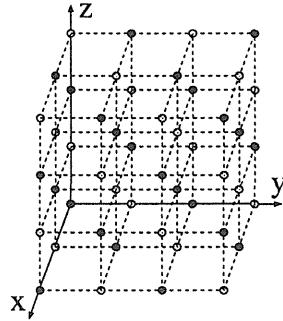


Fig. B.4 FCHC lattice: The image shows the example of  $3 \times 4 \times 4 \times 2$  lattice.

### B.3 衝突則

格子ガスの粒子の衝突は、各格子点での粒子配置の変化の規則（衝突則）によって表される。この時、各格子点での粒子数及び運動量を保存する必要がある。このような衝突則を計算機上のプログラムに組み込むには、次の2つの方法がある。1つは、衝突前の粒子配置と衝突後の粒子配置の対応を記述した参照テーブルを使う方法であり、もう1つは、boolean演算によって衝突前の粒子配置から衝突後の粒子配置を計算する方法(11)がある。前者の場合は、どのような衝突則も組み込むことができるが、一格子点上の可能な粒子数が増加すると極端に大きな参照テーブルが必要になる。後者の場合は、衝突則のboolean演算の計算式を作ることができれば、プログラムの記憶領域及び計算時間を減らすことができるが、規則的な衝突則しか組み込むことができない。多くの衝突則を採用すると、非物理的な保存量(10, 12)を減らすことができることから、ここでは、参照テーブルを使ったFCHC格子の衝突則について簡単に記述する。

FCHC格子は、速度ベクトル24方向と1つの停止粒子のため、格子点上の粒子配置は、 $2^{25} = 33554432$ 通りある。ここで粒子数及び運動量保存、格子の対称性を考慮すると、衝突則を適用できる粒子配置の代表数は221通り、衝突則は316273通りとなり、計算機に組み込むことができる大きさの参照テーブルを得ることができる。格子の対称性の考慮は、前節のFCHC格子の変換群を用いたReduction Algorithm(100)によってなされる。

### B.4 三次元格子ガス気液モデルによるシミュレーション例

ここでは、以上において、紹介したFCHC格子を用いた格子ガスに対して、図2.4に示す長距離相互作用の(a)のみを含んだ三次元最小相互作用モデルによる、相分離現象のシミュレーションと3章で記述した液滴落下現象のシミュレーションの結果を紹介する。図B.5には、三次元格子

## ガス気液モデルの最小相互作用モデルの状態方程式

$$p = 12d - 12rd^2(1-d)^2 \quad (\text{B.17})$$

を示す。ここで、 $p$  は圧力、 $d$  は換算密度、 $r$  は長距離相互作用距離を表す。また図には、シミュレーションによって測定した圧力の値も同時に示している。この図において、二次元の場合と同様、状態方程式の不安定領域において圧力の測定値が理論値からずれ Maxwell 構築を成していることが見られる。

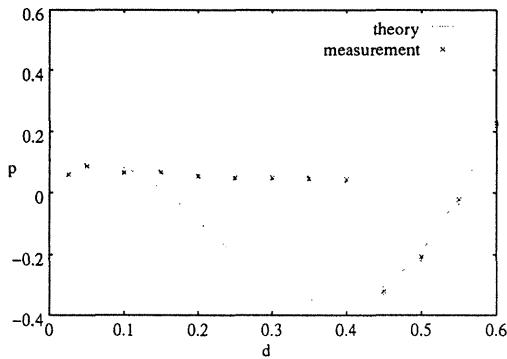


Fig. B.5 Equation of state 3D minimal interaction model: The measurement values are also shown.

次に、全方向周期境界とした  $60 \times 60 \times 60$  の計算格子に、換算密度  $d = 0.15$  で粒子を一様に分布させた状態を初期状態として、 $r = 9$  の場合の相分離現象をシミュレーションした結果を、図 B.6 に示す。この図において、両相の平均換算密度となる格子を界面として示している。この図から、一様に分布していた粒子が徐々に集まり、密度の異なる相への分離現象の様子が見られる。ここで、 $d = 0.15$  は、図 B.5 において、系が不安定となる範囲であり、相分離が起こっていることも理解される。

さらに、このモデルによって液滴落下のシミュレーションを行なった。シミュレーション条件は、計算格子を  $x \times y \times z = 180 \times 180 \times 176$ 、長距離相互作用距離を  $r = 9$ 、換算密度を  $d = 0.07$  とした。境界条件は、 $z$  方向を「跳ね返り壁」境界とし、 $x$  方向及び  $y$  方向を周期境界とした。初期状態では、計算格子上方の境界近くに平衡状態の液滴を生成させた。外力は、 $\alpha = 0.0005$  の割合で格子点を選び、図 B.3 に示す粒子速度ベクトルの  $c_{12}, c_9, c_{17}, c_{21}, c_{20}, c_{24}$  をそれぞれ  $c_3, c_6, c_{14}, c_{18}, c_{23}, c_{15}$  へ向け直すことによって与えた。その結果の界面位置及び流速分布を図 B.7 に示す。この図において、粒子密度が両相の平均換算密度となる点を界面位置として表示し、流速分布は  $12 \times 12 \times 8$  で粗視化し、 $x$  方向中央の  $yz$  平面上の分布を表示している。この図から、二次元最小相互作用モデルの場合と同様に、液滴は外力方向に偏長している様子が見られる。既存の三次元格子ガス気液モデルとしては、最小相互作用モデルが報告(19, 20)されているのみであるので、現実の液滴落下を再現するためには、二次元の最大相互作用モデルに対応したモデルの開発が必要となる。

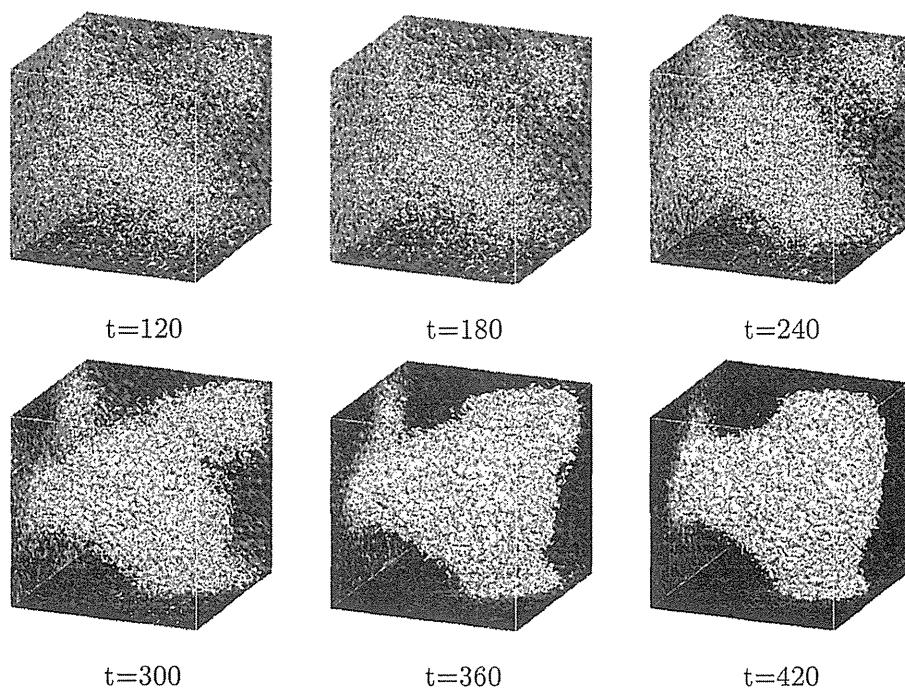


Fig. B.6 Example of the simulation of phase separation using the 3D minimal interaction model of the lattice-gas liquid-gas model

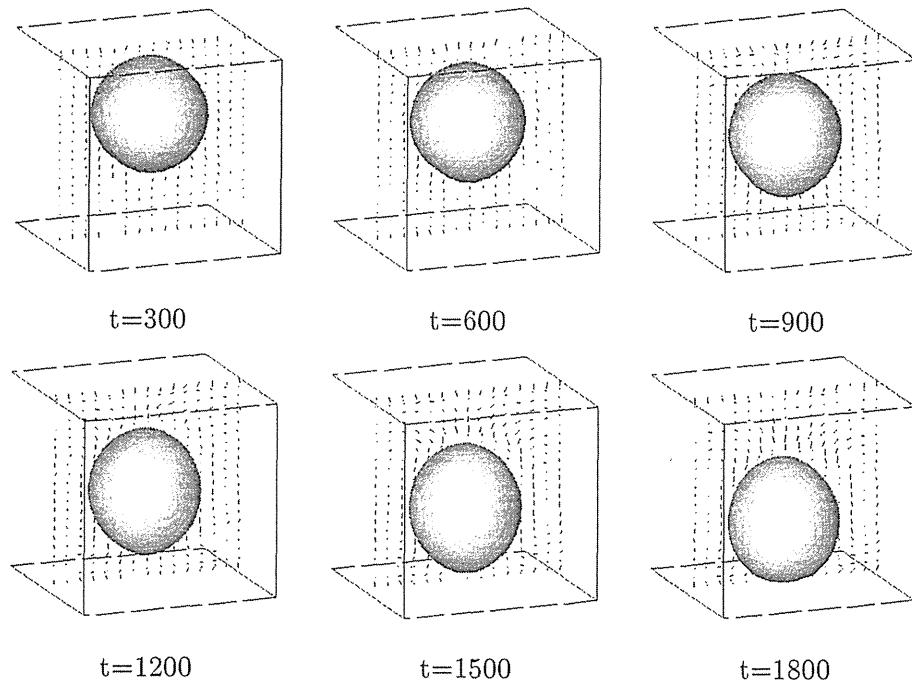


Fig. B.7 Density and flow velocity distribution of the simulation result by the 3D minimal interaction model

## 付録 C. HCZ モデルの基礎方程式の導出と計算コードの概要

ここでは、文献<sup>(44)</sup>に基づき、一成分二相流体格子ボルツマン法 HCZ モデルの基礎方程式の導出について記述する。

### C.1 離散化されるボルツマン方程式の導出

HCZ モデルは、一つの粒子分布関数に対する一成分二相のボルツマン方程式、

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{\xi} \cdot \nabla f = -\frac{f - f^{eq}}{\lambda} + \frac{(\vec{\xi} - \vec{u}) \cdot (\vec{F} + \vec{G})}{\rho RT} f^{eq}, \quad (C.1)$$

の離散化によって得られる。ここで、 $f$  は粒子分布関数、 $\vec{\xi}$  は微視的速度、 $R$  はガス定数、 $T$  は温度、 $\vec{u}$  は巨視的な流速、 $\rho$  は密度、 $\vec{G}$  は重力、 $\vec{F}$  は有効粒子間相互作用力である。また、 $\lambda$  はボルツマン方程式の衝突項を BGK モデルに書き換えたときの緩和時間定数である。平衡粒子分布関数は、Maxwell-Boltzmann 分布

$$f^{eq} = \frac{\rho}{(2\pi RT)^{D/2}} \exp \left[ -\frac{(\vec{\xi} - \vec{u})^2}{2RT} \right], \quad (C.2)$$

であった。ここで  $D$  は次元である。この方程式は、以下で示す排体積効果についての相互作用項を含めて、密な気体に対するボルツマン方程式 (Enskog 方程式) から導出される。密度、速度、温度は、粒子分布関数を用いて、

$$\rho = \int f d\vec{\xi}, \quad \rho \vec{u} = \int \vec{\xi} f d\vec{\xi}, \quad \frac{D}{2} \rho RT = \int \frac{(\vec{\xi} - \vec{u})^2}{2} f d\vec{\xi}, \quad (C.3)$$

と計算される。以下において温度は一定であるとする。有効粒子間相互作用力は、

$$\vec{F} = \rho \nabla (2a\rho + \kappa \nabla^2 \rho) - b\rho^2 RT \chi \nabla \ln(\rho^2 \chi), \quad (C.4)$$

と書かれ、第一項は引力を、第二項は斥力 (排体積効果による力) を表している。それぞれの項に含まれる係数は、それぞれの効果を変化させるパラメータである。特に、 $\chi$  は粒子密度が増加した場合に、粒子の衝突確率を増加させる効果を表しており、

$$\chi(\rho) = 1 + \frac{5}{8}b\rho + 0.2969(b\rho)^2 + 0.1103(b\rho)^3 + \dots, \quad (C.5)$$

と展開形で与えられる。また有効粒子間相互作用力は、

$$\begin{aligned} \vec{F} &= -\nabla(b\rho^2 RT \chi - a\rho^2) + \kappa \rho \nabla \nabla^2 \rho \\ &= -\nabla \psi + \vec{F}_s, \end{aligned} \quad (C.6)$$

と、粒子間ポテンシャル  $\psi$ 、界面張力に関する力の項  $\vec{F}_s$  によって書き換えることもできる。

以上のボルツマン方程式に対して、Chapman-Enskog 展開及び低 Mach 数展開を適用し、巨視的な流体力学方程式である、連続の式と Navier-Stokes 方程式を導くと、

$$\begin{aligned}\frac{\partial \rho}{\partial t} &= -\nabla \cdot \rho \vec{u}, \\ \rho \left( \frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + (\vec{u} \cdot \nabla) \vec{u} \right) &= -\nabla p - \nabla \cdot \Pi + \vec{F}_s + \vec{G}, \\ p &= \rho RT + \psi = \rho RT(1 + b\rho\chi) - a\rho^2, \\ \Pi &= \rho\nu(\vec{u}\nabla + \nabla\vec{u}), \\ \nu &= \lambda RT,\end{aligned}\tag{C.7}$$

となる。ここで  $\nu$  は動粘性係数である。これから、ボルツマン方程式 (C.1) に従う粒子の集合は、流体力学方程式 (C.7) によって支配される流体を表していることとなる。

ここで、ボルツマン方程式 (C.1) から格子ボルツマン方程式を導出することが可能であるが、相互作用項に含まれる  $\nabla\psi$  の項は、界面付近において非常に大きくなり、数値誤差が増加することとなる。これを回避するため、粒子密度分布関数  $f$  を

$$g = fRT + \psi\Gamma(0),\tag{C.8}$$

$$\Gamma(\vec{u}) = \frac{1}{\rho} f^{eq} = \frac{1}{(2\pi RT)^{D/2}} \exp \left[ -\frac{(\vec{\xi} - \vec{u})^2}{2RT} \right],\tag{C.9}$$

と修正し、さらに非圧縮性の条件、

$$\frac{D\rho}{Dt} = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla \rho = 0,\tag{C.10}$$

を課すことによって、修正された粒子分布関数  $g$  に対するボルツマン方程式、

$$\begin{aligned}\frac{\partial g}{\partial t} + \vec{\xi} \cdot \nabla g &= -\frac{1}{\lambda}(g - g^{eq}) \\ &+ (\vec{\xi} - \vec{u}) \cdot [\Gamma(\vec{u})(\vec{F}_s + \vec{G}) - (\Gamma(\vec{u}) - \Gamma(0))\nabla\psi],\end{aligned}\tag{C.11}$$

が得られる。この方程式において、 $\nabla\psi$  に、低 Mach 数の場合に比較的小さな値となる ( $\Gamma(\vec{u}) - \Gamma(0)$ ) が掛っているため、界面付近における  $\nabla\psi$  の増加を抑えることとなる。また修正された粒子分布関数  $g$  から得られる巨視的物理量は、

$$p = \int g d\vec{\xi}, \quad \rho RT \vec{u} = \int \vec{\xi} g d\vec{\xi},\tag{C.12}$$

である。これから、粒子分布関数の修正により、界面付近の数値誤差の増大を、離散化前の方程式の段階で抑えることができたが、新たな粒子分布関数から密度を単独で計算することができなくなったことになる。しかし、非圧縮性を仮定したことから、界面付近以外の各相では密度が一定であることを考慮すると、密度は、高密度相の密度または低密度相の密度のどちらかになる。そこで、元の粒子分布関数  $f$  は、数値誤差が大きくなるものの、それを判断するために用いることができると言えられる。よってボルツマン方程式 (C.1) において、界面を鋭く保つ相互作用項のみを残した方程式、

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{\xi} \cdot \nabla f = -\frac{f - f^{eq}}{\lambda} - \frac{(\vec{\xi} - \vec{u}) \cdot \nabla\psi(\phi)}{RT} \Gamma(\vec{u}),\tag{C.13}$$

を密度の判定に用いる指標関数  $\phi$  に対する分布関数が従う式とし、指標関数  $\phi$  は、

$$\phi = \int f d\vec{\xi}, \quad (\text{C.14})$$

と計算される巨視的物理量によって定義する。そして、各相の密度は、

$$\rho(\phi) = \rho_l + \frac{\rho_h - \rho_l}{\phi_h - \phi_l}(\phi - \phi_l), \quad (\text{C.15})$$

と、あらかじめ分かっている高密度相及び低密度相の密度  $\rho_h$ 、 $\rho_l$  と指標関数の最大値及び最小値  $\phi_h$ 、 $\phi_l$  によって計算される。また、同様に動粘性係数を

$$\nu(\phi) = \nu_l + \frac{\nu_h - \nu_l}{\phi_h - \phi_l}(\nu - \nu_l), \quad (\text{C.16})$$

と各相で与えることが可能である。

## C.2 空間の離散化

本節及び次節において、前節で導出された 2 つの分布関数に対するボルツマン方程式 (C.11) 及び (C.13) を、文献 (30, 101) の方法に従って離散化し、格子ボルツマン方程式を導出する。まず、微視的速度の離散化を行なう。これによって必然的に空間の離散化が行なわれる。ボルツマン方程式から流体力学方程式を導出する際、低 Mach 数の仮定を置いたことから、式 (C.9) を巨視的速度で展開し、その 2 次の項までとる。

$$\begin{aligned} \Gamma(\vec{u}) &= \frac{1}{(2\pi RT)^{D/2}} \exp\left(-\frac{\xi^2}{2RT}\right) \\ &\times \left[ 1 + \frac{\vec{\xi} \cdot \vec{u}}{RT} + \frac{(\vec{\xi} \cdot \vec{u})^2}{2(RT)^2} - \frac{u^2}{2RT} \right]. \end{aligned} \quad (\text{C.17})$$

これから、分布関数  $f$  や  $g$ 、つまり  $\Gamma$  を用いて計算される巨視的物理量は、まとめて、

$$I = \int \varphi(\vec{\xi}) \Gamma(\vec{\xi}) d\vec{\xi} = \int \Phi(\vec{\xi}) \exp\left(-\frac{\xi^2}{2RT}\right) d\vec{\xi}, \quad (\text{C.18})$$

の形で書くことができる。ここで、 $\varphi(\vec{\xi})$  は  $\vec{\xi}$  について最高 2 次であるので、 $\Phi(\vec{\xi})$  は  $\vec{\xi}$  の高々 4 次の多項式である。そこで、Gauss-Hermite の積分公式、

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \zeta(s) \exp(-s^2) ds &= \sum_{i=1}^n \varpi_i \zeta(s_i) + O\left(\frac{d^{2n}\zeta}{ds^{2n}}\right), \\ \varpi_i &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\Pi(x) e^{-x^2}}{(x - x_k) \Pi'(x_k)} dx, \\ \Pi(x) &= (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2}, \end{aligned} \quad (\text{C.19})$$

の  $n = 3$  場合、つまり、

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \zeta(s) \exp(-s^2) ds &= \\ \frac{\sqrt{\pi}}{6} \zeta(-\sqrt{3/2}) + \frac{2\sqrt{\pi}}{3} \zeta(0) + \frac{\sqrt{\pi}}{6} \zeta(\sqrt{3/2}), \end{aligned} \quad (\text{C.20})$$

を用いることにより、 $I$  を誤差項なしに離散的に表すことができる。よって、公式 (C.20) を 3 次元 ( $D = 3$ ) の場合の  $I$  に適用し、代数計算を行なうと、

$$\int \varphi(\xi_x, \xi_y, \xi_z) \Gamma d\xi_x d\xi_y d\xi_z = \sum_{\alpha=0}^{26} \varphi(\xi_{\alpha_x} \xi_{\alpha_y} \xi_{\alpha_z}) \Gamma_\alpha(\vec{u}),$$

$$\Gamma_\alpha(\vec{u}) = \omega_\alpha \left[ 1 + \frac{\vec{\xi}_\alpha \cdot \vec{u}}{RT} + \frac{(\vec{\xi}_\alpha \cdot \vec{u})^2}{2(RT)^2} - \frac{u^2}{2RT} \right], \quad (\text{C.21})$$

と離散化することができる。ここで、係数  $\omega_\alpha$ 、離散化された微視的速度  $\vec{\xi}_\alpha$  は、それぞれ、表 C.1、表 C.2 に示す。表 C.1 における  $c$  は  $\sqrt{3RT}$  である。この離散化によって得れるモデルは、三次元 27 速度モデル (D3Q27)(図 C.1) である。巨視的物理量は、それぞれ、

$$\begin{aligned} \phi &= \sum_\alpha f_\alpha^{eq}, \\ p &= \sum_\alpha g_\alpha^{eq}, \\ \rho RT \vec{u} &= \sum \vec{\xi}_\alpha g_\alpha^{eq}, \\ f_\alpha^{eq} &= \rho \Gamma_\alpha(\vec{u}), \\ g_\alpha^{eq} &= \rho RT \Gamma_\alpha(\vec{u}) - \psi \Gamma_\alpha(0), \end{aligned} \quad (\text{C.22})$$

と計算することができ、この  $f_\alpha^{eq}$ 、 $g_\alpha^{eq}$  を平衡分布関数とした格子ボルツマン方程式から、離散化された分布関数  $f_\alpha$ 、 $g_\alpha$  が計算される。

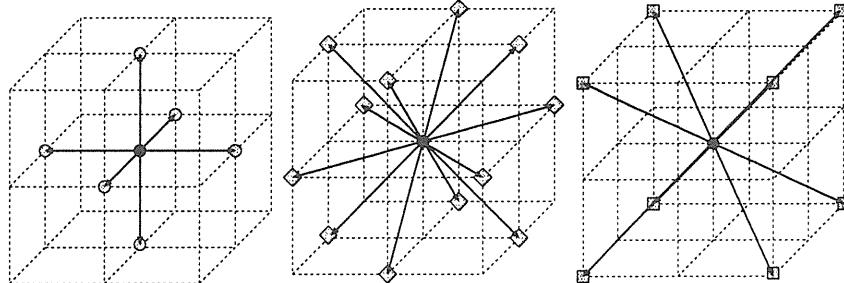


Fig. C.1 Three dimensional 27 velocities lattice: The microscopic particle velocity is shown by three groups with different speed.

Table C.1 Descretized microscopic velocity  $\vec{\xi}_\alpha$ 

$\alpha$	$\vec{\xi}_\alpha$	$\alpha$	$\vec{\xi}_\alpha$	$\alpha$	$\vec{\xi}_\alpha$
0	(0, 0, 0)	7	(c, c, 0)	19	(c, c, c)
1	(c, 0, 0)	8	(-c, -c, 0)	20	(-c, -c, -c)
2	(-c, 0, 0)	9	(c, -c, 0)	21	(c, c, -c)
3	(0, c, 0)	10	(-c, c, 0)	22	(-c, -c, c)
4	(0, -c, 0)	11	(c, 0, c)	23	(c, -c, c)
5	(0, 0, c)	12	(-c, 0, -c)	24	(-c, c, -c)
6	(0, 0, -c)	13	(c, 0, -c)	25	(c, -c, -c)
		14	(-c, 0, c)	26	(-c, c, c)
		15	(0, c, c)		
		16	(0, -c, -c)		
		17	(0, c, -c)		
		18	(0, -c, c)		

Table C.2 Coefficients  $\omega_\alpha$ 

$\alpha$	0	1, …, 6	7, …, 18	19, …, 26
$\omega_\alpha$	$\frac{8}{27}$	$\frac{2}{27}$	$\frac{1}{54}$	$\frac{1}{216}$

### C.3 時間の離散化

次に時間についての離散化を行なう。得られる格子ボルツマン方程式を陽的に保つために、以下の変数を導入する。

$$\begin{aligned} \bar{f}_\alpha &= f_\alpha - \delta_t \frac{(\vec{\xi}_\alpha - \vec{u}) \cdot \nabla \psi(\phi)}{2RT} f_\alpha^{eq}, \\ \bar{g}_\alpha &= g_\alpha - \delta_t \frac{1}{2} (\vec{\xi}_\alpha - \vec{u}) \cdot \left( \Gamma_\alpha(\vec{u})(\vec{F}_s + \vec{G}) - (\Gamma_\alpha(\vec{u}) - \Gamma_\alpha(0)) \nabla \psi(\rho) \right). \end{aligned} \quad (C.23)$$

ここで  $\delta_t$  を時間に関する微少量(以下、時間離散化定数とする。)とする。これらの新たな関数  $\bar{f}_\alpha$ 、 $\bar{g}_\alpha$  に対して、二次精度で時間を離散化<sup>(101)</sup>すると、それぞれ、

$$\begin{aligned} \bar{f}_\alpha(\bar{r} + \bar{\xi}_\alpha \delta_t, t + \delta_t) - \bar{f}_\alpha(\bar{r}, t) &= -\frac{1}{\tau + 1/2} (\bar{f}_\alpha - f_\alpha^{eq}) - \delta_t \frac{\tau}{\tau + 1/2} \frac{(\vec{\xi}_\alpha - \vec{u}) \cdot \nabla \psi(\phi)}{RT} f_\alpha^{eq}, \\ \bar{g}_\alpha(\bar{r} + \bar{\xi}_\alpha \delta_t, t + \delta_t) - \bar{g}_\alpha(\bar{r}, t) &= -\frac{1}{\tau + 1/2} (\bar{g}_\alpha - g_\alpha^{eq}) + \delta_t \frac{\tau}{\tau + 1/2} (\vec{\xi}_\alpha - \vec{u}) \\ &\quad \cdot \left( \Gamma_\alpha(\vec{u})(\vec{F}_s + \vec{G}) - (\Gamma_\alpha(\vec{u}) - \Gamma_\alpha(0)) \nabla \psi(\rho) \right), \end{aligned} \quad (C.24)$$

の時間発展方程式を得る。この式の導出過程において、 $\tau = \lambda/\delta_t$  とし、 $\frac{1}{\tau} - \frac{1}{2\tau^2} = \frac{1}{\tau+1/2} + O(\delta_t^3)$  を用い、 $O(\delta_t^3)$  を無視した。また巨視的物理量は、 $\bar{f}$ 、 $\bar{g}$  を用いて、

$$\begin{aligned}\phi &= \sum_{\alpha} \bar{f}_{\alpha}, \\ p &= \sum_{\alpha} \bar{g}_{\alpha} - \delta_t \frac{1}{2} \cdot \nabla \psi(\rho), \\ \rho R T \vec{u} &= \sum \vec{\xi}_{\alpha} \bar{g}_{\alpha} + \delta_t \frac{RT}{2} (\vec{F}_s + \vec{G}),\end{aligned}\tag{C.25}$$

と計算される。以上の式が HCZ モデルの基礎方程式となる。

#### C.4 粒子間ポテンシャルと状態方程式

以上において導出された基礎方程式に含まれる粒子間ポテンシャル  $\psi$  は、未決定の定数を含み、またその関数形も未定であるので、実際に計算機シミュレーションを行なうためには、それらを決定する必要がある。粒子間ポテンシャルは、式 (C.6) において、

$$\psi(\rho) = b\rho^2 RT \chi(\rho) - a\rho^2,\tag{C.26}$$

と与えられており、式 (C.7) では、

$$p = \rho R T + \psi(\rho),\tag{C.27}$$

と、粒子間相互作用がない場合の圧力  $p = \rho R T$  の補正項として現われ、この式は状態方程式に対応している。式 (C.5) において、 $\chi$  は  $\rho$  に関する級数であるが、すべての項は得られていない。また、文献<sup>(46)</sup>によると、 $\chi$  の第二項 ( $\rho$  の項) までは解析的に導かれており、第三項 ( $\rho^2$  の項) 以降は数値解析によって得られている。そこで、一般に、相分離は、粒子間の引力と排体積力との兼ね合いによって起こり、それは、巨視的には、状態方程式の関数形に現われることから、ここでは、逆に、状態方程式を与えることにより、粒子間ポテンシャルの関数形を決める。相分離を起こす場合の状態方程式としては、一般に van der Waals の状態方程式が知られているが、それを補正する形で幾つかの状態方程式も提案されており、ここでは、文献<sup>(44)</sup>に従い、Carnahan-Starling の式<sup>(102)</sup>、

$$p(\rho) = \rho R T \frac{1 + (b\rho/4) + (b\rho/4)^2 - (b\rho/4)^3}{(1 - (b\rho/4))^3} - a\rho^2,\tag{C.28}$$

を用いる。この式と用いた理由としては、この式を  $b\rho$  で展開し、式 (C.27) の  $\chi$  の部分を比較した場合、第二項まで一致することによると考えられる。一方、van der Waals の状態方程式  $p = \frac{\rho R T}{1 - b\rho} - a\rho^2$  の場合は、第一項までしか一致しない。未定定数  $a$ 、 $b$  については、状態方程式が、 $dp/dV < 0$  となる不安定領域を含むようにするために、 $a = bc^2 = b(3RT)$ 、 $b = 4$  と選んでいる。また、 $\psi$  は、 $\phi$  の関数として、基礎方程式に含まれているので、数値計算において利用する状態方程式は、

$$p(\phi) = \phi R T \frac{1 + (\phi) + (\phi)^2 - (\phi)^3}{(1 - \phi)^3} - 12 R T \phi^2,\tag{C.29}$$

となり、この式に対する図 C.2 における Maxwell の等面積則から  $\phi_l = 0.02381$ 、 $\phi_h = 0.2508$  が得られる。さらに、基礎方程式に現われる  $\psi(\phi)$  は、この状態方程式から

$$\psi(\phi) = \phi R T \left( \frac{1 + \phi + \phi^2 - \phi^3}{(1 - \phi)^3} - 1 \right) - 12 R T \phi^2,\tag{C.30}$$

となる。また運動量を変化させる  $\psi(\rho)$  は、 $\psi(\rho) = p - \rho(\phi)RT$  から計算される値を用いる。

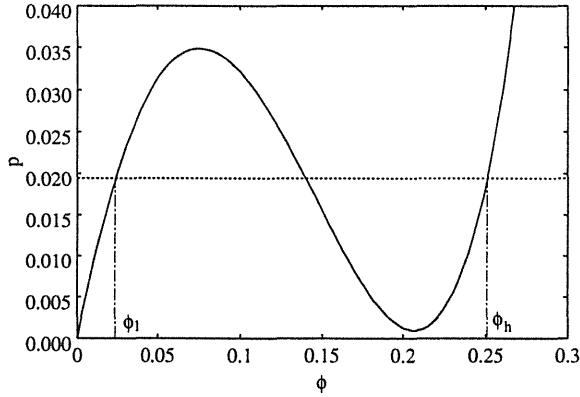


Fig. C.2 Equation of state used in the simulation code of the HCZ model: The Maxwell's equal-area rule is represented by the horizontal dashed line. The  $\phi_l$  and  $\phi_h$  are shown by the vertical dash-dotted line.

## C.5 HCZ モデルのシミュレーションコードの概要

ここでは、前節において得られた HCZ モデルの基礎方程式 (C.24) を用い、実際に計算機において数値シミュレーションを行なう方法について簡単に記述する。コードのフローチャートは図 C.3 である。

### (1) 初期データ読み込み

HCZ モデルでは、計算格子サイズ  $L(x) \times W(y) \times H(z)$ 、各相の密度  $\rho_h$ 、 $\rho_l$ 、気体定数  $R$ 、温度  $T$ 、時間刻み幅  $\delta_t$ 、界面張力の大きさに関する係数  $\kappa$ 、重力加速度  $\vec{g}$ 、各相の動粘性係数  $\nu_h$ 、 $\nu_l$  を計算パラメータとして独立に設定ことができ、これらを初期データとして読み込む。この設定により、格子間隔は  $\delta = \sqrt{3RT}\delta_t$  となる。また、ここで繰り返しのステップ数も設定する。

### (2) 初期マクロ変数設定

計算の初期条件として、各格子点での密度、流速、圧力を設定し、また壁の位置を設定する。また、式 (C.15) から各格子点での  $\phi$ 、式 (C.16) から  $\nu$  を設定する。さらに計算を始めるためには、各格子点において、各粒子分布関数を設定する必要があるので、ここでは、式 (C.23) から得られる平衡分布関数、

$$\begin{aligned} \bar{f}_\alpha^{eq} &= \phi \Gamma_\alpha(\vec{u}) - \delta_t \frac{(\vec{\xi}_\alpha - \vec{u}) \cdot \nabla \psi(\phi)}{2RT} \phi \Gamma_\alpha(\vec{u}), \\ \bar{g}_\alpha^{eq} &= p \Gamma_\alpha(0) + (\Gamma_\alpha(\vec{u}) - \Gamma_\alpha(0)) \rho RT \\ &\quad - \delta_t \frac{1}{2} (\vec{\xi}_\alpha - \vec{u}) \cdot \left( \Gamma_\alpha(\vec{F}_s + \vec{G}) - (\Gamma_\alpha(\vec{u}) - \Gamma_\alpha(0)) \nabla \psi(\rho) \right), \\ \Gamma_\alpha(\vec{u}) &= \omega_\alpha \left[ 1 + \frac{\vec{\xi}_\alpha \cdot \vec{u}}{RT} + \frac{(\vec{\xi}_\alpha \cdot \vec{u})^2}{2(RT)^2} - \frac{u^2}{2RT} \right], \end{aligned} \quad (C.31)$$

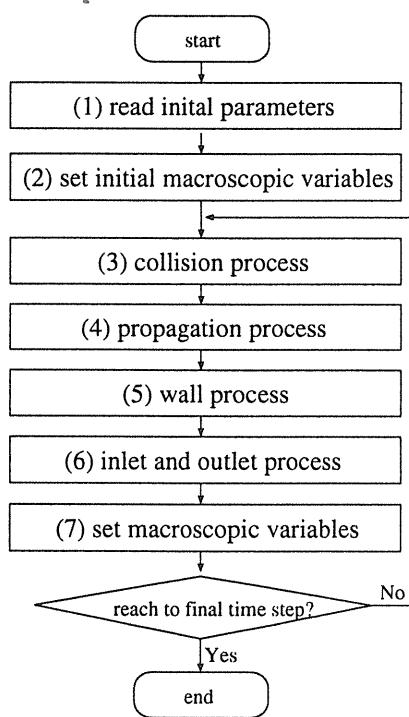


Fig. C.3 Flow chart of the simulation code of the HCZ model.

によって各方向の粒子分布関数とする。

### (3) 衝突過程

ここでは、式 (C.24) の右辺によって  $\bar{f}_\alpha$ 、 $\bar{g}_\alpha$  を書き換える。この時、 $\vec{G} = \rho \vec{g}$ 、 $\vec{F}_s = \kappa \rho \nabla \nabla^2 \rho$  とする。また  $\tau$  は、 $\nu = \tau \delta_t R T$  の関係によって、 $\nu$  から決定する。

### (4) 並進過程

衝突過程で書き換えられた  $\bar{f}_\alpha$ 、 $\bar{g}_\alpha$  を、各方向の格子点のその方向の値に割り当てる。

### (5) 壁境界過程

壁の存在が割り当てられた格子点では、その壁の条件に従って分布関数を処理する。例えば、粘着境界に対応する跳ね返り壁では、分布関数の方向を反転させ、すべり壁境界では、分布関数を鏡面反射に対応する方向へ向きを変える。

### (6) 流入流出境界過程

流入流出境界では、その境界の格子点における巨視的物理量(密度、流速、圧力)を与える粒子分布関数を設定する必要がある。しかし、巨視的物理量の数は 5 であり、分布関数の方向は 27 方向である。そのため、巨視的物理量からすべての方向の粒子分布関数を計算することができない。このことについては、幾つかの文献 ((7) 等を参照) において議論されているが、

ここでは、(2)「初期マクロ変数設定」の場合と同様に、流入流出境界の格子点での巨視的物理量を用いて、式(C.31)から得られる  $\bar{f}_\alpha^{eq}, \bar{g}_\alpha^{eq}$  を計算し、それらを境界における分布関数として与える。

#### (7) マクロ変数設定

ここでは、これまでの過程において更新された各格子点の各方向の分布関数から、式(C.25)、及び式(C.15)を用いて、各格子点での密度、流速、圧力を計算し、それらから、次のステップにおける衝突過程において、分布関数の緩和に用いる平衡分布関数を計算する。また式(C.16)からは、各格子点において動粘性係数を計算する。

以上の過程が終了した後、始めに設定した時間ステップに達していない場合は、(3)「衝突過程」の前に戻り、それぞれの過程を繰り返す。

## 付録 D. 格子ガス気液モデルの界面張力の非等方性と最小液滴半径の評価

ここでは、格子ガス気液モデルの界面張力の非等方性と最小液滴半径について、文献<sup>(23)</sup>に基づいて評価する。

### D.1 界面張力の非等方性

格子ガス気液モデルの界面張力は、界面の方向と格子方向との関係に依存しており、そのため非等方的である。このことは、直線界面の界面張力を考察することによって理解できる。直線界面の表面張力は、

$$\sigma = \int_{-\infty}^{\infty} [p_n - p_t(z)] dz \quad (\text{D.1})$$

の計算式<sup>(63)</sup>によって得ることができる。ここで、 $z$ は界面の法線方向、 $p_n$ 、 $p_t(z)$ は、それぞれ法線方向及び接線方向の圧力である。格子ガス気液モデルの圧力は、粒子の伝播と長距離相互作用による運動量流束から計算される<sup>(19, 47, 62)</sup>。法線方向及び接線方向圧力は、測定した格子の各方向の運動量流束を両方向に分解することによって得られる<sup>(19, 47)</sup>。界面が格子の一つの方向と平行な場合、その格子方向の長距離相互作用が同じ相内の粒子間に作用するため、その格子方向の運動量輸送は他の格子方向の運動量輸送と異なる。よって、この場合の界面張力は、界面がどの格子方向とも平行ではない場合の界面張力と異なることになる。これが格子ガス気液モデルの界面張力の非等方性である。図 D.1 に示す  $r = 9$  と  $r = 19$  の場合の静止液滴の粒子分布から、この界面張力の非等方性が液滴形状に影響を与えることが分かる。この図では、 $r$  が大きい場合、非等方性の影響が大きく、 $r = 19$  では六角形形状となっている。尚、このような形状は、Wulff construction<sup>(103)</sup> と呼ばれる。

### D.2 界面張力の解析的計算方法

前節のような界面張力の非等方性がある場合、Laplace 則の関係から界面張力を導出することは、厳密にはできないことになる。また、式(D.1)による計算では、特定の格子方向の界面張力のみを得ることになる。よって、ここで、界面張力の非等方性を考慮した、界面張力の解析的計算手法を提案し、次節において、その手法によって計算した界面張力と Laplace 則から得られる界面張力を比較する。

界面張力の非等方性を考慮し、界面が一つの格子方向に平行な場合の界面張力  $\sigma_{\parallel}$  とどの格子方向にも平行でない場合の界面張力  $\sigma_{\perp}$  を用いて、任意の界面の界面張力  $\sigma_c$  が、

$$\sigma_c = \alpha_{\parallel}\sigma_{\parallel} + \alpha_{\perp}\sigma_{\perp} \quad (\text{D.2})$$

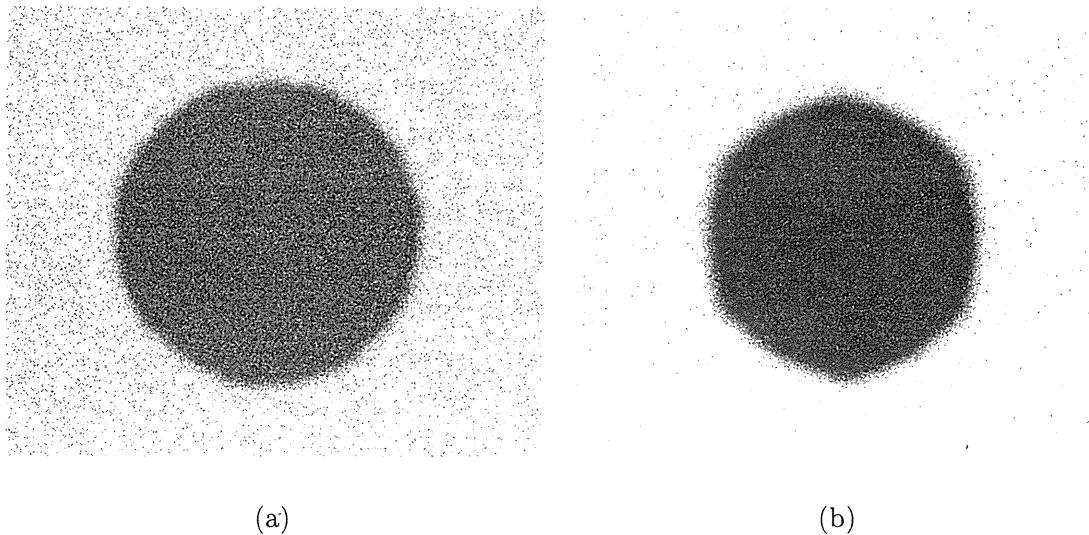


Fig. D.1 Droplets (a) for  $r=9$  and (b)  $r=19$ : Both droplets are generated in the  $600 \times 600$  lattice with  $d=0.17$ . The tone of the dot changes gradually from dark to light as the density of the node decreases.

と書けるとする。ここで、 $\alpha_{\parallel}$ 、 $\alpha_{\perp}$ は、対象としている界面において、それぞれ、 $\sigma_{\parallel}$ 、 $\sigma_{\perp}$ を与える部分の割合を表す。従って、次に界面が格子方向に平行である基準を考える。

格子ガス気液モデルの圧力は、粒子の伝播と長距離相互作用による運動量輸送から得られるので、ある点における運動量輸送を得ることにより界面張力を計算することができる。格子点でない点の運動量輸送は、その点の周りの格子点での運動量輸送を内挿することによって得られる。図 D.2 にある点での運動量輸送の測定について示す。この図から、ある点における運動量輸送は、その点を囲む長さ  $2r$  または  $2r - 1$  の線分上の粒子分布によって決定されることが分かる。ここで  $r$  は長距離相互作用距離である。このことから、ある曲線界面に対する接線の接点における運動量輸送は、その接線の方向と接点を囲む線分との位置関係によって決定されることになる。よって、界面の接線が接点を囲む  $2r$  又は  $2r - 1$  の長さの線分のいずれかと交わらない時、その接線は、格子方向と平行と考えることができ、そのような接点の集合が  $\alpha_{||}$  を与える。図 D.3 に接線が格子方向に平行となる場合を示す。

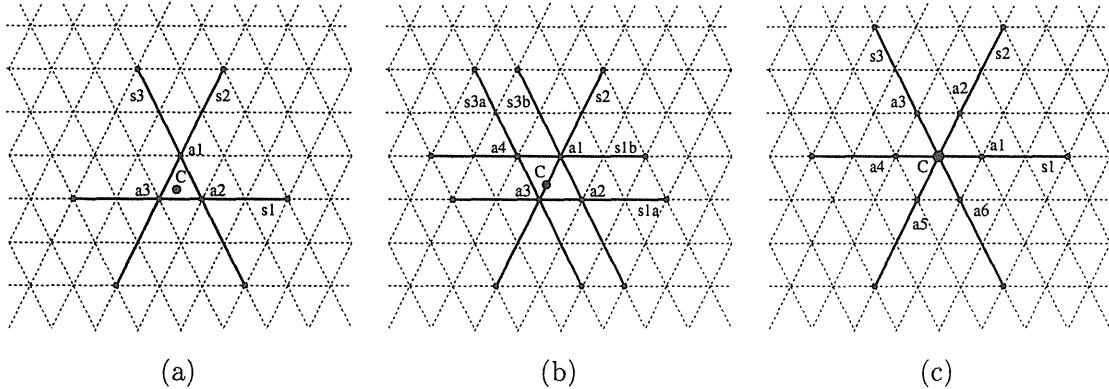


Fig. D.2 Measurement of the momentum flux at a certain point: The point concerned is C. In these figures, the distance of the long-range interaction is considered as  $r=3$ . (a) The point C is neither lattice links nor lattice nodes. The momentum flux at the point is obtained by interpolating the momentum flux on the links,  $a_1a_2$ ,  $a_2a_3$ , and  $a_1a_3$ , which is determined by the particle configuration on the segments,  $s_1$ ,  $s_2$ , and  $s_3$ , respectively. The length of these segments is  $2r - 1 = 5$ . (b) The point C is not on nodes but on the link,  $a_1a_3$ . The momentum flux at the point is obtained by interpolating the momentum flux on the links,  $a_1a_2$ ,  $a_2a_3$ ,  $a_1a_3$ ,  $a_1a_4$ , and  $a_3a_4$ , which is determined by the particle configuration on the segments,  $s_{3b}$ ,  $s_{1a}$ ,  $s_2$ ,  $s_{1b}$ , and  $s_{3a}$ , respectively. The length of these segments is also  $2r - 1 = 5$ . (c) The point C is on the node. The momentum flux at the point is obtained by interpolating the momentum flux on six links which surround this point. The momentum flux on links,  $Ca_1$  and  $Ca_4$ , is determined by the particle configuration on the segment  $s_1$ ,  $Ca_2$  and  $Ca_5$  is by  $s_2$ ,  $Ca_3$  and  $Ca_6$  is by  $s_3$ , respectively. The length of these segments is  $2r = 6$ .

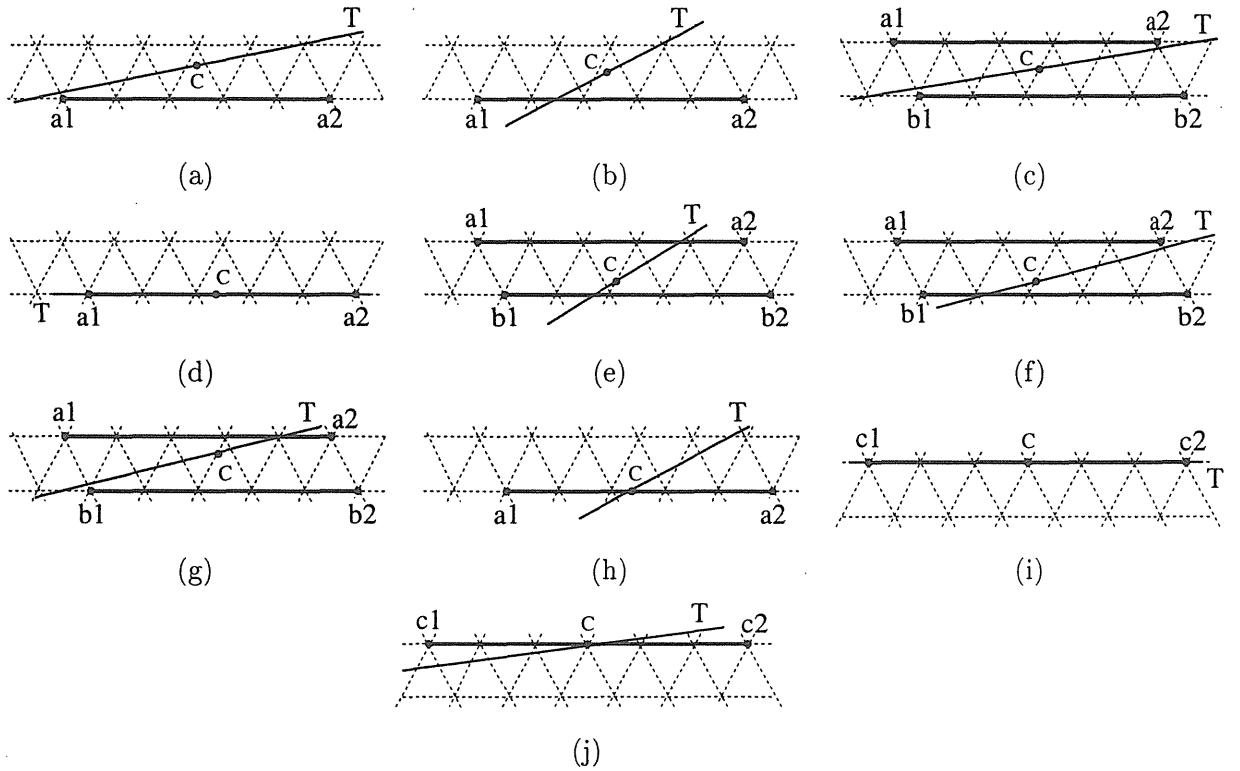


Fig. D.3 Examples of the relation between the tangent and the segment along the link direction: T is the tangent and C is the point of contact. The segments,  $a_1a_2$ ,  $b_1b_2$ , and  $c_1c_2$ , are along the direction 1. In these examples, the case of  $r = 3$  is shown and  $\overline{a_1a_2} = \overline{b_1b_2} = 2r - 1 = 5$  and  $\overline{c_1c_2} = 2r = 6$ . (a) and (b) are for the case that the point C is on neither the link nor the node. (c) ~ (h) are for the case of that the point C is on the link. (i) and (j) are for the case of that the point C is on the node. (a), (c), (d), and (i) are examples of the tangent parallel to the direction 1 because the tangent intersects neither the segment  $a_1a_2$  nor  $b_1b_2$  nor  $c_1c_2$ . (b), (e), (f), (g), (h), and (j) are examples of the tangent which is not parallel to the direction 1 because the tangent intersects the segment.

### D.3 シミュレーションによる検証

前節の計算方法を検証するために、この方法で液滴の界面張力を計算し、その結果を Laplace 則に従って計算した界面張力と比較する。

まず、 $\sigma_{\parallel}$ 、 $\sigma_{\perp}$ を得るために、図 D.4 に示す帯状の高密度相の界面張力を、式 (D.1) を用いて測定する。測定は、四方を周期境界とした  $600 \times 600$  の計算格子に換算密度  $d = 0.17$  で帯状高密度相を生成したシミュレーションにおいて、 $r = 9, 11, 13, 15, 17, 19$  の場合について行なった。得られた界面張力を図 D.5 に示す。

次に、 $d = 0.07$  又は  $d = 0.17$  を持つ計算格子を  $200 \times 200$  から  $700 \times 700$  に変化させ、異なる半径の液滴を生成し、それぞれの液滴の界面張力を Laplace 則で測定し、また前節の方法で計算し、両者を比較した。この比較は、 $r = 9, 11, 13, 15, 17, 19$  の場合について行なった。

Laplace 則による界面張力は、

$$\sigma_c = (p_{in} - p_{out})R \quad (\text{D.3})$$

の式から得た。ここで  $p_{in}$ 、 $p_{out}$  は、それぞれ、文献(22)で決定された液滴の内部領域及び外部領域における内部圧力と外部圧力であり、 $R$  は、同様に文献(22)の局所領域クラスタリング法によって決定した界面位置に当てはめた数学的円の半径を表している。

前節の方法によって界面張力を測定するために、界面の接線及びその接点を得る必要がある。そこで、局所領域クラスタリング法によって得た界面上の連続する三つ点の座標の平均値を接点とし、その三つの点に当てはめた直線を接線とした。この操作によって界面上のすべての点における接点と接線を決定し、それぞれに対して前節で示した格子との平行条件を調べ、 $\alpha_{\parallel}$  と  $\alpha_{\perp}$  を求めた。この  $\alpha_{\parallel}$ 、 $\alpha_{\perp}$  と上述の  $\sigma_{\parallel}$ 、 $\sigma_{\perp}$  を式 (D.2) に代入し、界面張力を計算する。

これらの結果を図 D.6 に示す。この図から、 $R \geq 6r$  の範囲では、2 つの方法で得られた界面張力がほぼ一致していることが分かる。この範囲以外における両者の違いは、液滴半径つまり液滴の内部領域が小さいことから、Laplace 則を用いて界面張力を得ることができないことによる。

以上の結果から、Laplace 則から得られた界面張力は、界面張力の非等方性があるにもかかわらず、概ね妥当な値となっていることが分かる。さらに、液滴半径  $R$  が  $6r$  以下の場合に、Laplace 則によって妥当な界面張力が計算できないことから、格子ガス気液モデル(最大相互作用モデルの場合)の液滴の最小半径は、およそ  $6r$  であると見積ることができると考えられる。

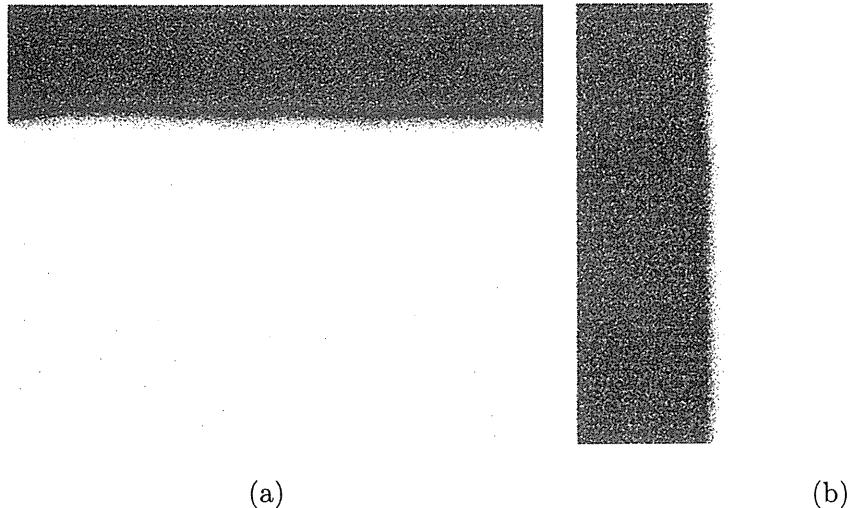


Fig. D.4 (a) Horizontal straight surface and (b) Vertical straight surface : Both dense phases are generated on one wall of two parallel walls in the  $600 \times 600$  lattice system with  $d = 0.17$  and  $r = 15$ . The tone of the dot changes gradually from dark to light as the density of the node decrease.

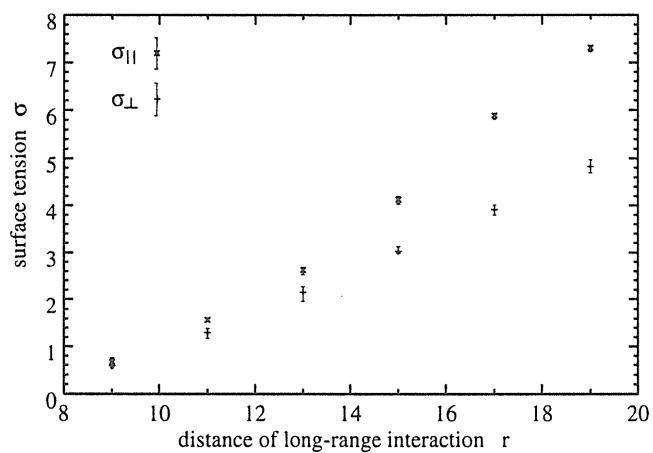


Fig. D.5 Surface tensions of the horizontal straight surface and the vertical straight surface against the distance of the long-range interaction: The numerical simulation is carried out in the  $600 \times 600$  lattice system with  $d = 0.17$  for each  $r$ .

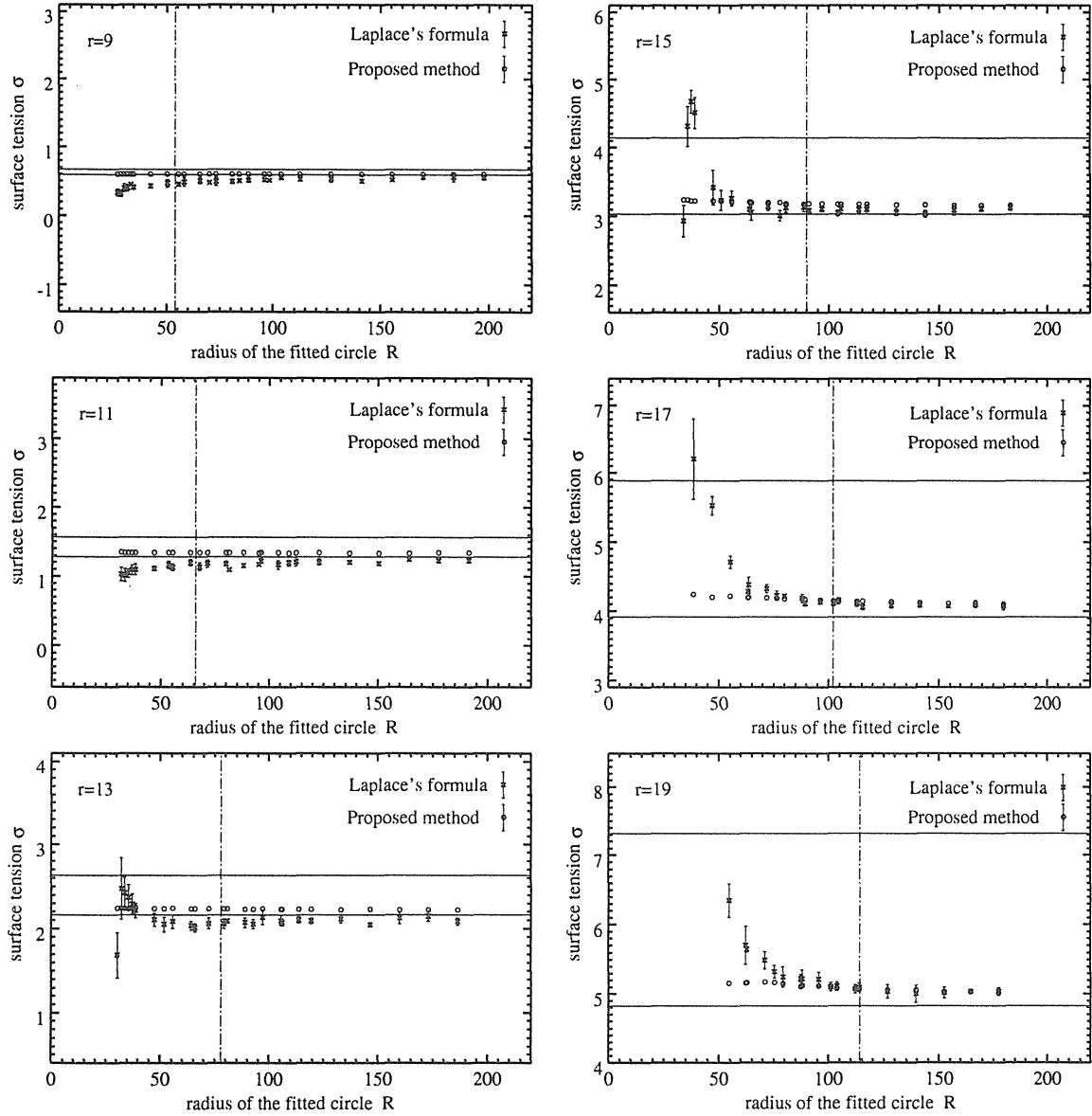


Fig. D.6 Surface tension against the radius of the fitted circle: The surface tension of the droplet measured by using the Laplace's formula is plotted and the surface tension calculated by using the proposed method is also plotted as the small circle. The error bars of the calculated surface tension are less than  $10^{-3}$  and smaller than the size of the small circle. The upper horizontal solid lines represent  $\sigma_{\parallel}$  and the lower is for  $\sigma_{\perp}$ , and the vertical dash-dotted line represents  $R=6r$ .

This is a blank page.

# 国際単位系(SI)と換算表

表1 SI基本単位および補助単位

量	名称	記号
長さ	メートル	m
質量	キログラム	kg
時間	秒	s
電流	アンペア	A
熱力学温度	ケルビン	K
物質量	モル	mol
光度	カンデラ	cd
平面角	ラジアン	rad
立体角	ステラジアン	sr

表3 固有の名称をもつSI組立単位

量	名称	記号	他のSI単位による表現
周波数	ヘルツ	Hz	s <sup>-1</sup>
力	ニュートン	N	m·kg/s <sup>2</sup>
圧力、応力	パスカル	Pa	N/m <sup>2</sup>
エネルギー、仕事、熱量	ジュール	J	N·m
功率、放射束	ワット	W	J/s
電気量、電荷	クーロン	C	A·s
電位、電圧、起電力	ボルト	V	W/A
静電容量	ファラード	F	C/V
電気抵抗	オーム	Ω	V/A
コンダクタンス	ジーメンス	S	A/V
磁束密度	ウェーバ	Wb	V·s
磁束密度	テスラ	T	Wb/m <sup>2</sup>
インダクタンス	ヘンリー	H	Wb/A
セルシウス温度	セルシウス度	°C	
光束度	ルーメン	lm	cd·sr
照度	ルクス	lx	lm/m <sup>2</sup>
放射能	ベクレル	Bq	s <sup>-1</sup>
吸収線量	グレイ	Gy	J/kg
線量当量	シーベルト	Sv	J/kg

表2 SIと併用される単位

名称	記号
分、時、日	min, h, d
度、分、秒	°, ', "
リットル	l, L
トン	t
電子ボルト	eV
原子質量単位	u

$$1 \text{ eV} = 1.60218 \times 10^{-19} \text{ J}$$

$$1 \text{ u} = 1.66054 \times 10^{-27} \text{ kg}$$

表5 SI接頭語

倍数	接頭語	記号
$10^{18}$	エクサ	E
$10^{15}$	ペタ	P
$10^{12}$	テラ	T
$10^9$	ギガ	G
$10^6$	メガ	M
$10^3$	キロ	k
$10^2$	ヘクト	h
$10^1$	デカ	da
$10^{-1}$	デシ	d
$10^{-2}$	センチ	c
$10^{-3}$	ミリ	m
$10^{-6}$	マイクロ	μ
$10^{-9}$	ナノ	n
$10^{-12}$	ピコ	p
$10^{-15}$	フェムト	f
$10^{-18}$	アト	a

(注)

- 表1～5は「国際単位系」第5版、国際度量衡局1985年刊行による。ただし、1eVおよび1uの値はCODATAの1986年推奨値によった。
- 表4には海里、ノット、アール、ヘクタールも含まれているが日常の単位なのでここでは省略した。
- barは、JISでは流体の圧力を表わす場合に限り表2のカテゴリーに分類されている。
- EC閣僚理事会指令ではbar、barnおよび「血圧の単位」mmHgを表2のカテゴリーに入れている。

表4 SIと共に暫定的に維持される単位

名称	記号
オングストローム	Å
バーン	b
バール	bar
ガル	Gal
キュリー	Ci
レンントゲン	R
ラド	rad
レム	rem

$$1 \text{ Å} = 0.1 \text{ nm} = 10^{-10} \text{ m}$$

$$1 \text{ b} = 100 \text{ fm}^2 = 10^{-28} \text{ m}^2$$

$$1 \text{ bar} = 0.1 \text{ MPa} = 10^5 \text{ Pa}$$

$$1 \text{ Gal} = 1 \text{ cm/s}^2 = 10^{-2} \text{ m/s}^2$$

$$1 \text{ Ci} = 3.7 \times 10^{10} \text{ Bq}$$

$$1 \text{ R} = 2.58 \times 10^{-4} \text{ C/kg}$$

$$1 \text{ rad} = 1 \text{ cGy} = 10^{-2} \text{ Gy}$$

$$1 \text{ rem} = 1 \text{ cSv} = 10^{-2} \text{ Sv}$$

## 換算表

力	N(=10 <sup>5</sup> dyn)	kgf	lbf
1	0.101972	0.224809	
9.80665	1	2.20462	
4.44822	0.453592	1	

$$\text{粘度 } 1 \text{ Pa}\cdot\text{s} = 10 \text{ P(ポアズ)} (\text{g}/(\text{cm}\cdot\text{s}))$$

$$\text{動粘度 } 1 \text{ m}^2/\text{s} = 10^4 \text{ St(ストークス)} (\text{cm}^2/\text{s})$$

圧力	MPa(=10 bar)	kgf/cm <sup>2</sup>	atm	mmHg(Torr)	lbf/in <sup>2</sup> (psi)
	1	10.1972	9.86923	7.50062 × 10 <sup>3</sup>	145.038
力	0.0980665	1	0.967841	735.559	14.2233
	0.101325	1.03323	1	760	14.6959
	1.33322 × 10 <sup>-4</sup>	1.35951 × 10 <sup>-3</sup>	1.31579 × 10 <sup>-3</sup>	1	1.93368 × 10 <sup>-2</sup>
	6.89476 × 10 <sup>-3</sup>	7.03070 × 10 <sup>-2</sup>	6.80460 × 10 <sup>-2</sup>	51.7149	1

エネルギー・仕事・熱量	J(=10 <sup>7</sup> erg)	kgf·m	kW·h	cal(計量法)	Btu	ft · lbf	eV
	1	0.101972	2.77778 × 10 <sup>-7</sup>		0.238889	9.47813 × 10 <sup>-4</sup>	6.24150 × 10 <sup>18</sup>
	9.80665	1	2.72407 × 10 <sup>-6</sup>	2.34270	9.29487 × 10 <sup>-3</sup>	7.23301	6.12082 × 10 <sup>19</sup>
	3.6 × 10 <sup>6</sup>	3.67098 × 10 <sup>5</sup>	1	8.59999 × 10 <sup>5</sup>	3412.13	2.65522 × 10 <sup>6</sup>	2.24694 × 10 <sup>25</sup>
	4.18605	0.426858	1.16279 × 10 <sup>-6</sup>	1	3.96759 × 10 <sup>-3</sup>	3.08747	2.61272 × 10 <sup>19</sup>
	1055.06	107.586	2.93072 × 10 <sup>-4</sup>	252.042	1	778.172	6.58515 × 10 <sup>21</sup>
	1.35582	0.138255	3.76616 × 10 <sup>-7</sup>	0.323890	1.28506 × 10 <sup>-3</sup>	1	8.46233 × 10 <sup>18</sup>
	1.60218 × 10 <sup>-19</sup>	1.63377 × 10 <sup>-20</sup>	4.45050 × 10 <sup>-26</sup>	3.82743 × 10 <sup>-20</sup>	1.51857 × 10 <sup>-22</sup>	1.18171 × 10 <sup>-19</sup>	1

1 cal = 4.18605 J (計量法)  
= 4.184 J (熱化学)  
= 4.1855 J (15 °C)  
= 4.1868 J (国際蒸気表)  
仕事率 1 PS (仏馬力)  
= 75 kgf·m/s  
= 735.499 W

放射能	Bq	Ci	吸収線量	Gy	rad
	1	2.70270 × 10 <sup>-11</sup>		1	0.01
	3.7 × 10 <sup>10</sup>	1			

照射線量	C/kg	R
	1	3876
	2.58 × 10 <sup>-4</sup>	1

線量当量	Sv	rem
	1	100
	0.01	1

(86年12月26日現在)

格子ボルツマン法による水平層状一相流の界面成長及び変形の数値解析

R100  
古紙配合率100%  
白色度70%再生紙を使用していま