jh240071

界面捕獲法を用いた気液二相流体計算における気泡合体 モデルの開発

杉原 健太(日本原子力研究開発機構)

概要

界面捕獲法を用いた気泡流計算において、ボイド率分布の解析精度を向上させるため、Multi-Phase Field (MPF)法に基づく気泡合体モデルを開発した。このモデルでは、気泡合体の判定条 件として、気泡同士のサイズおよび相対速度に基づく関係式を採用している。合体条件を満たす気 泡のペアについては、MPF 法における気泡 ID を同一に変更することで、合体現象を数値的に表現 した。モデルの妥当性を確認するため、無重力条件下での気泡流解析を実施し、その結果として得 られた気泡径分布の変化を実験結果と比較した。従来の界面捕獲法では、気泡が数値的に連続して 合体してしまうため、実験で観測される気泡径を再現することが困難だった。しかし、今回開発し た合体モデルを適用した結果、気泡径分布の変化を実験と良好に一致させることができた。

1 共同研究に関する情報

1.1 共同研究を実施した拠点名

- 東京大学 情報基盤センター
- 東京科学大学 情報基盤センター

1.2 課題分野

• 大規模計算科学課題分野

1.3 参加研究者の役割分担

杉原健太 (JAEA) 研究の主導、二相流解析
青木尊之 (科学大) Phase Field に関する助言
小野寺直幸 (JAEA) 圧力 Poisson の高速化
下川辺隆史 (東大) GPU 計算に関する助言
井戸村泰宏 (JAEA) 計算結果の考察
山下晋 (JAEA) 計算結果と実験の比較・考察
河村拓馬 (JAEA) 計算結果の可視化
伊奈拓也 (JAEA) Poisson 解法の最適化
Sitompul Yos (JAEA) MPF 法の最適化

2 研究の目的と意義

原子力工学分野では炉心設計や安全評価にお いて気液二相流解析が重要な役割を果たしてい る。従来の平均化二流体モデルに代わる手法と して、VOF 法のように気液界面を直接計算す る手法が様々な問題に適用され始めているが、 界面同士が格子サイズ程度まで接近すると数値 的に合体してしまうという特徴があり、気泡サ イズや分布が流動様式に大きな影響を及ぼす気 泡流解析では問題となっている。今年度の課題 では、界面捕獲法に Multi-Phase Field (MPF) 法を適用することで気泡同士の数値的合体を 防ぎ、気泡合体モデルと組み合わせることによ り、従来手法では計算が困難であった気泡流解 析を実現する。検証問題として、無重力化にお ける円管内気泡流計算を実施し、気泡径分布を Kamp 等の実験結果 [6] と比較する。

3 当拠点公募型研究として実施した 意義

本研究課題では、原子力気液二相流解析コー ドを GPU スーパーコンピュータ向けに開発し ており、ブロック型 AMR 法を適用した圧力 Poisson 解法の高速化や、最新の界面捕獲手法 である Multi-Phase Field 法などの知見が必須 となる。そこで、それらを有する科学大・東大 と共同研究を実施することで、初めて研究課題 が達成できる。

4 前年度までに得られた研究成果の 概要

研究代表者の所属するシステム計算科学セン ターでは、気液二相流解析のボトルネックとな る圧力 Poisson 解法の CPU・GPU 向けの高 速化として、マルチグリッド (MG) 法や省通信 手法などの計算アルゴリズムおよび最適化を行 なってきた。また、バンドル体系における気液 二相流解析の界面モデルの改良も進めてきた。 以下にそれ等の概要を示す。

4.1 圧力 Poisson 解法の高速化・安定化

圧力 Poisson 解法の高速化と安定化のため、 ブロック型 AMR 法を用いた直交格子に対し、 階層的な参照で格子間依存を解決し、GPU の shared memory を活用する前処理手法 CRMG を提案した [1]。CRMG-CG 法では CG 法に MG 法を前処理として適用し、スムーザには CR-SOR 法を使用する。従来法と比較して、 CRMG-CG 法は反復回数を大幅に削減し、収 束性を向上させた (図 1)。さらに、混合精度に よる高速化を試み、単精度前処理により倍精度 に対し約 25 %のコスト削減を達成したが、半 精度通信や半精度前処理では期待通りの効果は 得られなかった。

低精度演算での収束性悪化を防ぐため、対



図 1: 8x8 バンドル体系に対する Poisson 解法 の収束履歴。1024x1024x3072 格子相当。

角優位性を保つ丸め手法を導入した [2]。ヤコ ビ前処理を伴う混合精度クリロフソルバでは、 fp16 や bf16 による低精度前処理時に丸め誤差 で対角優位性が損なわれ、収束性が低下する。 これに対し、元の行列の対角優位性を維持する ようにデータ変換を行う方法を提案し、P-CG、 P-BiCGstab、P-GMRES(20) 法で評価した。 CUDA の丸めモードを用いて制御し、主反復 前に一度のみ実行されるためコストは非常に小 さい。従来の丸め方式では収束が周期的に悪化 することがあったが、本手法によりそれを防ぐ ことに成功した。

4.2 気液二相流解析

原子力工学分野の CFD において、燃料集 合体を模擬したバンドル体系の気液二相流解 析を進めてきた。JUPITER-AMR に 0.58mm 解像度を設定し、10 秒間の解析を実施した。 ボイド率の確率密度分布は実験結果と比較し て、液相のみの領域が過大評価される傾向が見 られたが、GPU 対応によって高解像度かつ高 速な解析を実現した。2021 年度から導入した Phase Field 法により従来の界面モデルの欠点 を改善し、2022 年度には界面拡散の空間的変 化を考慮した最適化も行ったが、実験結果の



図 2: 5x5 バンドル体系における気泡流解析

完全な再現には至らなかった。詳細解析の結果 (図 2)、シミュレーションでは気泡が過剰に合 体する傾向があり、これが流動様式の変化の一 因であることが判明した [3]。これは界面捕獲 法の解像度限界による気泡同士の数値的合体に よるものである。そこで、気泡反発を再現可能 な Multi-Phase Field 法の導入を進めることに した。

4.3 Multi-Phase Field 法の実装

従来の界面捕獲法では気泡合体が連鎖的に発 生し、気泡径が過大評価される問題があった。 そこで、Multi-Phase Field 法を導入し、気泡 合体を防ぎ流動様式やボイド率の解析精度向上 を目指した。多数の気泡を扱う場合、省メモリ 化が必要であり、GPU 向けに Ordered Active Parameter Tracking (OAPT) 法を適用し、メ モリアクセス効率を向上させた。基礎検証とし て、直径 40mm の円管内で気泡流解析を実施



図 3: MPF 法におけるメモリ階層毎の気泡界 面とアクティブ格子

し、OAPT 法により気泡データの格納に必要 なメモリ階層数が削減され、計算のメモリサイ ズを大幅に削減できた [4]。気泡の分布と流速 分布は実験結果と良い一致を示したが、後に長 時間計算を進めるに従って計算領域全体の流速 が加速することが判明した。周期境界条件にお いて流量を一定に保つ手法の導入が必要である ことが明らかになった。

5 今年度の研究成果の詳細

昨年度開発した MPF 法を用いた気泡流解析 コードに気泡合体モデルを導入し、検証解析を 実施した。気泡合体モデルの検証解析の際に必 要となった周期境界条件における流量の動的制 御や、圧力 Poisson 解法の高速化手法について も併せて報告する。

5.1 PID 制御を用いた流量の動的制御

前年度から実施してきた円筒内の気泡流計算 では、鉛直流路方向に周期境界条件を設定して おり流れ場は次式のような圧力勾配および浮力 による外力 F によって駆動される。

$$\mathbf{F} = -\beta \,\,\hat{\mathbf{z}} + (\rho - \bar{\rho})\mathbf{g} \tag{1}$$

ここで、*β* は系全体に一様に働く外力、**2** は z 方向の単位ベクトル、*ρ*,*ρ* はそれぞれ密度と平 均密度、**g** は重力加速度ベクトルである。上式 の右辺第2項は浮力、右辺第1項は流路全体に



対して鉛直方向に働く外力であり、次式のよう に平均圧力勾配と流体に働く重力の和で表さ れる。

$$\beta = \frac{dP}{dz} + \bar{\rho}g \tag{2}$$

ここで、*P*は流路断面の平均圧力である。前年 度は一定の平均圧力勾配を設定した計算を行っ たが、長時間計算を行うと流速が時間と共に 加速してしまう結果となった。そこで、先行研 究 (Lu et.al(2005), Cifani et.al.(2018))と同様 に、流路内の流量が一定となるように圧力勾配 を動的に制御する手法を適用した。本研究では 制御理論で広く利用されている PID 制御を用 いて外力 β を制御する。制御方程式を次式で 定義した。

$$\beta(t) = \beta(t - \Delta t)$$
$$- K_p \left[e(t) + \frac{1}{T_i} \int_0^t e(\tau) d\tau + T_d \frac{de(t)}{dt} \right]$$
(3)

β は指定流量 $j_{f,target}$ と計測流量 j_f の差 $e(t) = j_{f,target} - j_f$ の比例、積分、微分項 を用いて計算され、時間ステップ毎に更新さ れる。本研究では PID 制御パラメータとして $K_p = 45, T_i = 2.0 \times 10^{-5}, T_d = 4.0$ を採用し た。PID 制御を用いた気泡流解析における β および体積流束の時間履歴を図 4 に示す。βを 動的に制御することで計算領域内の流量が一定 に保たれていることが確認できる。本手法を後 述する弱圧縮性半陰解法や気泡合体モデルの検 証計算にも適用した。

5.2 弱圧縮性半陰解法による圧力 Poisson 解 法の高速化

気液二相流計算における圧力 Poisson 解法 の高速化手法として、圧縮性半陰解法 (SI-C: Semi-Implicit Compressible) を考案した。圧 縮性 Navier-Stokes 方程式から導出される圧力 Poisson 方程式は以下のように表される。

$$\left(\nabla \cdot \left(\frac{1}{\rho^{n+1}}\nabla\right) - \frac{1}{\rho^{n+1}c^2\Delta t^2}\right)\delta p = \frac{1}{\Delta t}\nabla \cdot \mathbf{u}^*$$
(4)

ここで、 ρ^{n+1} は次の時間ステップの密度、cは音速、 Δt は時間刻み幅、 δp は解くべき圧力 変動量、u^{*} は Navier-Stokes 方程式において 音波項を除いて時間発展させた速度の中間値 である。従来の非圧縮性半陰解法 (SI-I: Semi-Implicit Incompressible) の圧力 Poisson 方程 式とは異なり、左辺第2項に音波項が追加さ れる。音波項が加わることによって行列が非圧 縮の場合よりも優対角となり、収束性が向上す る。さらに、上式の音速 c に対して実際の音 速よりも遅い速度(人工音速) ca を適用する SI-WC(Semi-Implicit Weakly Compressible) 法では優対角性が向上して収束性がさらに向 上する。本研究ではマッハ数をMa = 0.03に 設定し、最大流速 Umax を用いて人工音速を $c_a = U_{max}/M_a$ とした。

基礎検証問題として、前年度と同様に直径 40mm、長さ 63mm の円管内の下降気泡流解析 を実施した。Colin らの実験 [5] の条件 D3 と 同様に気液物性は空気と水と設定し、平均ボイ ド率 7.5 %,気泡直径 4.2mm の気泡 153 個を ランダムに配置し、体積流束 0.823m/s となる ように PID 制御で外力を動的に制御した。計 算結果を図5に示す。流れが定常状態に達した



後、1 秒間のデータを時間平均した。ただし、 計算領域内には気泡が 153 個しか存在しない ため、各手法においてボイド率分布に若干のば らつきが見られた。それでも、すべての計算手 法で得られた結果は、概ね一致していた。ここ で、"EX-WC"は弱圧縮性陽解法の結果である。

下降気泡流解析における圧力 Poisson 解法の 反復回数の比較を図 6 に示す。SI-I と比べて SI-C では約半分、SI-WC では約 1/4 の反復回 数となっており、大幅な高速化となった。本課 題の主目的となる気泡合体モデルの開発におけ る検証解析には SI-WC を適用した。



5.3 気泡合体モデルの開発および気泡径分布 の検証解析

気泡合体現象の理論には主に薄膜排除理論、 臨界 Weber 数モデル、確率的合体モデルなど が挙げられ、それぞれ気泡間の液膜が排出され る時間や、気泡の衝突速度や角度、合体は確率 的に発生すると捉える、などのように様々な観 点から気泡合体の条件をモデル化している。本 研究では気泡間の薄膜を直接計算することは計 算コスト的に難しいという考えから、界面捕獲 法を用いた気液二相流計算への導入が比較的容 易と考えられる臨界 Weber 数モデルを採用し た。臨界 Weber 数(或いは臨界速度)モデル では Weber 数 ($We = \rho u_{rel}^2 d_e / \sigma$) を変数とし て、臨界 Weber 数 We_c 以下であれば合体が可 能でそれを超えると気泡が反発するとされる。 ここで、urel は気泡同士の相対速度、de は気泡 の等価直径、σは表面張力係数である。このモ デルでは気泡同士の相対速度やサイズ、表面張 力などの関係が合体の判定基準に用いられる。 気泡の衝突角度も合体に影響があり、図7のよ うな正面衝突では界面間の液膜がトラップされ やすく液膜排出に時間がかかるため反発が生じ やすい。一方で、角度がついた衝突の場合には 液膜が排出されやすいので合体が発生しやすい



図 7: 気泡同士の衝突角度

とされているが、気泡がかすめるような大きな 角度の衝突の場合には気泡は反発する。

本研究では Ribeiro らの臨界速度モデル [8] および Ozan らの衝突角度モデル [7] を用いて 以下のような合体確率 *P* を設定した。

$$P = \begin{cases} 1, & \text{if } u_{rel} \cos \alpha < u_c \text{ and } \alpha < \alpha_u \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases}$$

(5)

ここで、 u_{rel} は気泡の相対速度、 α は衝突角度、 α_u は合体が発生する可能性のある角度の上限値、 u_c は臨界速度である。Ozan らと同様に $\alpha_u = 58^\circ$ を用いた。

Ribeiro らの実験結果によると、水温 20 °C における気泡の臨界速度は次式で表される。

$$u_c = \begin{cases} ad_e + b & d_e \le \delta \\ a\delta + b & d_e > \delta \end{cases}$$
(6)

ここで、 d_e は等価直径であり $d_e = 2(1/d_1 + 1/d_2)^{-1}$ で表される。また、 $a = -92.18s^{-1}$, b = 0.3128m/s, $\delta = 2.32 \times 10^{-3}$ m である。

MPF 法を用いた気泡流解析では個々の気泡 は独立した Phase ID で管理されており、異な る ID 同士の気泡合体は発生しないが、同一の ID に変更すれば合体が可能となる。同一 ID の気泡同士が接触すると、phase field 値の等高 線に尾根状の構造が数値的に形成され、表面張 カベクトルの向きを決める界面の法線ベクトル が修正されてしまうため、気泡合体が必ず発生 する。この合体は界面捕獲法の性質による数値



(a) 実験結果 (Kamp et al.(2001))



(b) 気泡の初期配置



(c) 初期の流速分布

図 8: 気泡流実験の入口付近で観測された気泡 径分布と同じ分布の初期条件

的な合体であり、物理的な合体よりも過剰な合体挙動を示すため、本研究では MPF 法によって数値合体を抑制しつつ気泡合体モデルによって物理的な気泡合体を実現する。

具体的には、各気泡毎に位置、速度、体積直 径を取得し、接触した気泡ペアには上記の臨界 速度モデルによって合体の可否を判定して合 体する場合には気泡 ID(Phase ID) を同一の値 に変更する。接触判定には各気泡毎に作成した Level Set 関数を用い、格子サイズの5%以下 まで接近した気泡ペアに対して接触フラグを立 てる。

Kamp 等は無重力環境下で直径 40mm、長 さ約 3m の円管における気泡流実験を実施し ており、流入口近傍 (図 8a) および、流出口近 傍(図 9a)における観測から気泡径分布の変 化を計測している [6]。上記2地点の観測場所 は L = 2.86m 離れており、実験条件における 平均流速 U = 1.082m/s の場合は流入口の観 測点を通過した気泡群は約 L/U = 2.64 秒後に 流出口側の観測点を通過すると考えることがで きる。本研究の計算では実験流路全体の計算は 行わず、直径 40mm、長さ 82mm の円筒領域 に対して周期境界条件を適用することで計算の 効率化を行なった。初期条件としては、前もっ て単相流の計算を4秒分実施して、その速度場 および圧力場を使用した (図 8c)。気泡分布は 図 8b のように、実験における気泡径分布とボ イド率 9.1 %に合わせるようにして 3mm から 7mm までのサイズの気泡を重ならないように ランダムに配置した。計算は実験における2つ の観測点間の流体の移動時間に相当する 2.64 秒まで実施し、その時点での気泡分布のスナッ プショットおよび気泡径分布を実験および理論 と比較する。

図9はそれぞれ実験結果、Phase Field(PF) 法を用いた計算結果、気泡合体モデルを適用し た MPF 法(MPF-BCM: Multi-Phase Field method with Bubble Coalescence Model)の 計算結果である。界面捕獲法として PF 法を用 いた場合は気泡合体の頻度が非常に高く、1つ の大きな気泡になってしまって実験結果を再 現できなかった。その一方で、開発した MPF-BCM を用いた計算結果(図9c)では実験結果 の気泡分布に近い気泡径分布となっているのが 確認できる。

図 10 は気泡径の確率密度関数 (PDF) であ る。気泡サイズの統計を得るために、本研究で は計算領域が周期境界条件により狭く、気泡の 数が限られていることから、16 通りのアンサ ンブル計算を行ってデータを取得した。アンサ



a) 実験結果 (Kamp et al.(2001))



(b) 従来手法 (PF) の計算結果



(c) 開発手法 (MPF-BCM) の計算結果
 図 9: 気泡流実験の出口付近で観測された気泡
 分布と同等の計算時刻における計算結果



ンブル計算では、初期の気泡の配置のみをラン ダムに変え、それ以外の初期条件、すなわち流 速や圧力場はすべて同じデータを使用した。本 研究にて導入した気泡合体の臨界速度モデルの 計算結果(BCM)はKamp等の理論解に対し てある程度近い気泡径分布となることが確認で きたが、小さい気泡の合体が過小評価される結 果となった。

6 今年度の進捗状況と今後の展望

今年度は Multi-Phase Field 法を用いた気泡 同士が合体しないという制約があった気泡流 計算に対して気泡合体モデル (MPF-BCM) を 導入し、Kamp 等の実験および理論結果との 比較を行なった。従来手法では気泡同士が数 値的に合体してしまい気泡流実験を再現する ことはできなかったが、本研究にて開発した MPF-BCM を用いることで物理的に妥当な気 泡合体を再現することができ、気泡径分布の再 現に対して改善することに成功した。これは気 泡流解析における界面捕獲法の大きな進展であ ると考えている。今後は気泡流だけでなくスラ グ流、環状流などの高ボイド率の流動様式への 遷移も扱えるよう改良を施し、燃料集合体周り の気液二相流解析に応用する予定である。

参考文献

- N. Onodera et. al., "GPU Acceleration of Multigrid Preconditioned Conjugate Gradient Solver on Block-Structured Cartesian Grid", HPC Asia 2021, 2021.
- [2] T. Ina et. al., "A new data conversion method for mixed precision Krylov solvers with FP16/BF16 Jacobi preconditioners", HPC Asia2023, 2023.
- [3] 杉原健太、他、"気泡上昇解析におけるPhase Field 変数の最適化",第 28 回計

算工学講演会, 2023.

- [4] 杉原健太、他, "Multi-Phase Field 法を用 いた気泡流解析", 第 37 回数値流体力学シ ンポジウム, 2023.
- [5] C.Colin et. al., "Turbulent bubbly flow in pipe under gravity and microgravity conditions", J. Fluid Mech. 711 (2012).
- [6] A.M. Kamp et. al., "Bubble coalescence in turbulent flows: A mechanistic model for turbulence-induced coalescence applied to microgravity bubbly pipe flow", Int. J. Multiph. Flow 27 (2001) 1363-1396.
- [7] S.C. Ozan et. al., "A bubble coalescence kernel combining the characteristics of the film drainage, energy, and critical velocity models", Chem. Eng. Sci. 269 (2023) 118458.
- [8] C.P.Ribeiro Jr. et. al., "The effect of electrolytes on the critical velocity for bubble coalescence", Chem. Eng. J. 126 (2007) 23-33.