

# 気泡上昇解析における Phase Field 変数の最適化

## Optimization of phase field variables in bubble rise analysis

杉原健太<sup>1)</sup> 小野寺直幸<sup>2)</sup> 井戸村泰宏<sup>3)</sup> 山下晋<sup>4)</sup>

Kenta Sugihara, Naoyuki Onodera, Yasuhiro Idomura and Susumu Yamashita

<sup>1)</sup>博 (工) 原子力研究開発機構 (〒 277-0871 千葉県柏市若柴 178-4-4-4F, E-mail: sugihara.kenta@jaea.go.jp)

<sup>2)</sup>博 (工) 原子力研究開発機構 (〒 277-0871 千葉県柏市若柴 178-4-4-4F, E-mail: onodera.naoyuki@jaea.go.jp)

<sup>3)</sup>博 (工) 原子力研究開発機構 (〒 277-0871 千葉県柏市若柴 178-4-4-4F, E-mail: idomura.yasuhiro@jaea.go.jp)

<sup>4)</sup>博 (工) 原子力研究開発機構 (〒 319-1195 茨城県那珂郡東海村白方 2-4, E-mail: yamashita.susumu@jaea.go.jp)

An optimization method for conservative Allen-Cahn type phase field method for bubble rise analysis is proposed. The spatial distribution of the strength of the phase field allows for the minimum necessary interface correction. By using optimized parameters, this method has the same or better calculation accuracy as conventional CAC method.

**Key Words :** Phase field method, Conservative Allen-Cahn eq., Modified conservative Allen-Cahn eq., Two-phase flow

### 1. 諸言

多数の気泡を含むような気液二相流現象は原子力分野をはじめとする様々な工学問題で重要となっている。そのような流体現象に対し、Volume of Fluid (VOF) 法や Level Set 法、Phase Field 法などの界面捕獲手法が広く適用されてきた。近年では Phase Field 法を発展させ、多数の相を同時に計算可能な Multi-Phase Field 法の開発や応用計算が盛んに進められており [1][2]、多数の気泡が集まった泡沫のように、従来の界面モデルでは表現できなかった現象を扱える可能性が示された [3]。このように Phase Field 法は多相流体解析分野の界面捕獲手法として広く利用されているが、界面幅を一定に保つために必要な変数  $\gamma$  の設定方法として、 $\gamma = 0.7|\mathbf{u}_{\max}|$  のように計算領域内の最大流速が採用されている [4]。しかし、複雑な流路内の流れや、気体が液体によって押し出されて加速するような問題では、界面の移動速度に比べて計算領域内最大速度は大きな値となり  $\gamma$  の過大評価に繋がる。 $\gamma$  が小さすぎると界面が拡散してしまい、大きすぎると界面形状が計算格子に沿った形状に変形してしまうため、界面の移動現象に応じて適切な値を設定する必要がある。

本報告では Conservative Allen-Cahn (CAC) 方程式 [4] をベースにして、Phase Field 法による界面修正強度  $\gamma$  に空間分布を仮定し、その評価方法として速度分布と変形速度テンソルの局所的な値を用いる手法を提案する。代表的な 4 種類の気泡形状パラメータにおける気泡上昇問題に提案手法を適用し、適切な Phase Field 変数  $\gamma$  の設定方法を検討する。また、本研究にて得られた Phase Field 変数を 5x5 バンドル体系解析に適用する。

### 2. Modified conservative Allen-Cahn 方程式

本研究では界面追跡手法として流体率 (Volume of Fluid) の保存方程式を Conservative Allen-Cahn (CAC) 方程式 [4] を拡張した Modified conservative Allen-Cahn

(MCAC) を提案する。

CAC は界面補正強度を意味する定数  $\bar{\gamma}$  と界面幅に関する変数  $\varepsilon$  を用いて次式のように表される。

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\phi) = \bar{\gamma} \left( \varepsilon \nabla \cdot (\nabla \phi) - \nabla \cdot \left( \phi(1-\phi) \frac{\nabla \phi}{|\nabla \phi|} \right) \right). \quad (1)$$

ここで、 $\phi$  は流体率 (VOF 値)、 $t$  は時刻、 $\mathbf{u}$  は速度ベクトルである。

本研究では CAC の定数  $\gamma$  に空間分布を仮定し、流れ場に適した値を適用できるように拡張する。また、フラックス形式の離散化によって保存性を満たすために、次式のように  $\gamma$  は Divergence の内側に定義する。

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\phi) = \nabla \cdot \left( \gamma \varepsilon (\nabla \phi) - \gamma \left( \phi(1-\phi) \frac{\nabla \phi}{|\nabla \phi|} \right) \right), \quad (2)$$

ここで、 $\varepsilon = \delta/4 \tanh^{-1}(1-2\lambda)$  であり、本研究では特に断りのない限り界面幅  $\delta = 3\Delta x$ 、 $\lambda = 0.05$  を用いる。本研究では直交等間隔格子を採用しており  $\Delta x$  は格子幅である。

#### (1) $\gamma$ の空間分布

Phase Field による界面の修正強度は  $\gamma(t) = M|\mathbf{u}_{\max}|$  のように計算領域内における速度の最大値に比例する値が採用されており、定数  $M$  はテスト計算における試行錯誤によって得られた値が経験的に用いられている。

MCAC は空間分布を有する  $\gamma$  を想定した方程式となっており、界面補正が必要な場所に必要な大きさの値を設定できる。界面捕獲法を用いた界面移流計算において VOF 値の拡散の原因となるのは、主に以下の 2 点である。1 つ目は VOF 値の移流計算の離散化に伴う数値拡散であり、その大きさは移流速度に比例する。2 点目は圧縮、膨張、剪断などのような速度勾配を有する速度場によって界面幅を引き伸ばされる。以上のような

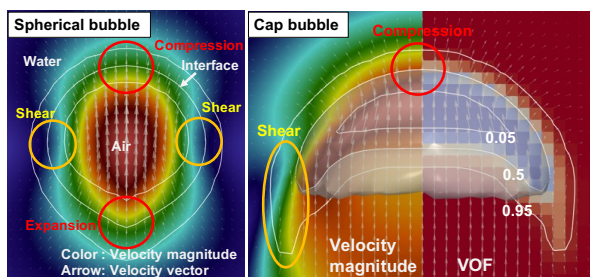
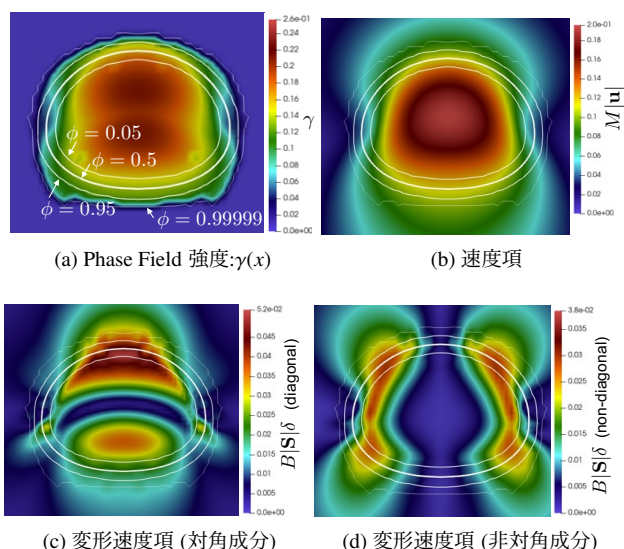


図-1: 気泡周りの速度勾配の様子

図-2:  $\gamma$  の空間分布の例.

な界面拡散を Phase Field 方程式によって修正するために、次式のように速度場および速度勾配の空間分布を仮定した  $\gamma$  を使用する。

$$\gamma(t, \mathbf{x}) = M |\mathbf{u}| + B |\mathbf{S}| \delta, \quad (3)$$

ここで、 $M, B$  は 1 程度の大きさの定数であり、 $\mathbf{S}$  は変形速度テンソルである。変形速度項には、速度の次元に合わせるために界面幅  $\delta$  を乗じる。定数  $M$  は一様速度場における 3 次元界面移流計算の誤差解析にて導出された最適値  $M = 0.8$  を採用する。変形速度テンソルは、

$$\mathbf{S} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 2u_x & u_y + v_x & u_z + w_x \\ v_x + u_y & 2v_y & v_z + w_y \\ w_x + u_z & w_y + v_z & 2w_z \end{pmatrix}, \quad (4)$$

で表される。ここで、 $u, v, w$  は速度ベクトル  $\mathbf{u}$  の  $x, y, z$  成分、下付き添字  $x, y, z$  は偏微分方向成分である。 $\mathbf{S}$  の対角成分は圧縮・膨張を、非対角成分は剪断を意味しており、そのような速度場が支配的な界面移流計算では Phase Field 法による界面補正が十分でないと界面拡散の原因となる。

単一気泡上昇計算における  $\gamma$  の空間分布の例を図 2 に示す。(a)~(d) はそれぞれ  $\gamma$  の空間分布、式 (3) の速度項  $M|\mathbf{u}|$ 、変形速度項  $B|\mathbf{S}|\delta$  の対角成分と非対角成分である。気泡の解析では浮力の影響により気泡中央の速度が大きくなるため、気泡上部で圧縮、気泡下部で膨

張、気泡側面で剪断速度場が発生するが、そのような界面拡散の原因となる場所を抽出することが可能であることが確認できる。

### 3. 変形速度項の定数 $B$ の最適値の調査

$\gamma$  の空間分布の最適化には式 (3) の定数  $M, B$  を導出する必要がある。速度項  $M|\mathbf{u}|$  は界面移流の離散化に伴う数値拡散を抑えるための項であり、一様速度場における界面移流の誤差解析から求めることができる。本研究では界面幅  $\delta = 3\Delta x$  における最適値は  $M = 0.8$  であることを確認しており、特に断りのない限りこの値を使用している。変形速度項  $B|\mathbf{S}|\delta$  は圧縮・膨張・剪断のような形状変形によって界面が拡散してしまうのを抑える項となっており、定数  $B$  の適切な値を検証計算によって導出する必要がある。

定数  $B$  の最適値を導出するために単一気泡上昇問題を取り扱う。気泡上昇計算における速度場は、図 1 のように圧縮・膨張・剪断が生じるような速度勾配を伴う流れとなる。特に、球形気泡の下部界面の膨張速度場や Cap bubble の側面の剪断速度場は VOF 値の拡散を引き起こす原因となるため、変形速度項によって、上記速度が発生する場所を評価して式 (3) のように Phase Field 法による界面修正強度を設定する。

#### (1) 単一気泡上昇計算

静止流体中における単一気泡の形状や上昇速度の実験データは、モルトン数  $Mo$ 、エトベス数  $EO$ 、気泡レイノルズ数  $Re$  の 3 つの無次元数を用いて Grace 等によってまとめられている [5]。モルトン数は主に粘性に関するパラメータである。エトベス数は気泡に働く浮力と表面張力に関する無次元数であり、気泡形状や終端速度の整理に用いられている。気泡レイノルズ数は気泡の慣性力と粘性の比となっており、数値計算結果の気泡上昇速度から算出されて実験結果との比較によく用いられているパラメータである。

Annaland らは Grace diagram から 4 つの典型的な気泡形状パターン、

(A) Spherical:  $Mo = 1.26 \times 10^{-3}, EO = 0.971$

(B) Ellipsoidal:  $Mo = 0.100, EO = 9.71$

(C) Skirted:  $Mo = 0.971, EO = 97.1$

(D) Dimpled:  $Mo = 1000, EO = 97.1$

を選んで計算を行い気泡レイノルズ数を Grace diagram の実験結果との比較を行なっている [6]。

本研究では MCAC を上記 4 ケースの気泡上昇計算に適用し、式 (3) の変形速度項の定数  $B$  の感度調査を実施する。速度項の定数  $M$  は界面移流計算の誤差解析から導出した最適値  $M = 0.8$  を使い、 $B$  を 0 から 2 まで変化させて気泡レイノルズ数を Grace や Annaland、CAC の結果と比較する。図 3 のような計算領域および初期位置を設定し、気泡直径に対して 16、32 格子割り当てた。Phase Field 法の離散化には移流項に 5 次精度 WENO 法、拡散項には 4 次精度 FVM を適用し、時間積分には 3 次精度 TVD Runge-Kutta 法を使用した。Arakawa-C

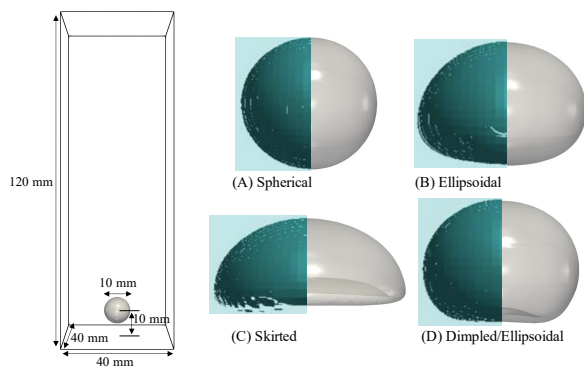


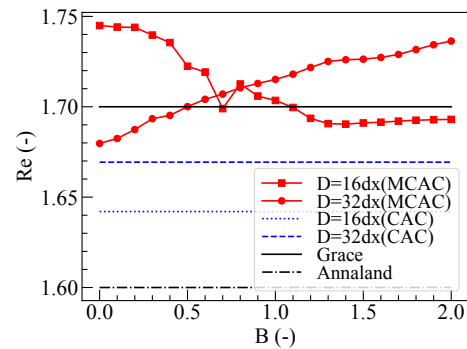
図-3: 計算領域と計算結果の気泡形状 (a, b, c, d). 気泡形状の左半分は Annaland 等の計算結果 [6]. ( $M = 0.8$ ,  $B = 1.0$ ,  $D = 32dx$ )

タイプのスタaggerド格子を用い、移流項には5次精度WENO法、粘性項には4次精度FDM、表面張力計算にはBalanced-forceアルゴリズムを用いたDensity-scaled CSFモデル [7] を適用した。

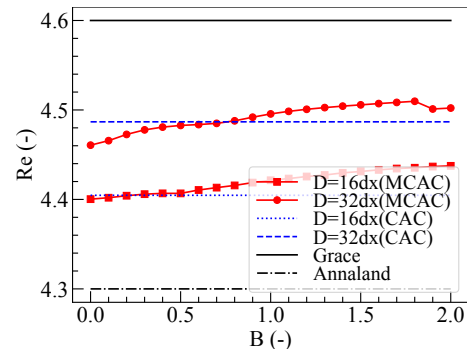
気泡形状を Annaland らの結果と比較したところ、図3のように定性的によく一致した結果が得られることを確認した。また、終端速度から気泡レイノルズ数を算出して Grace の実験や Annaland らの計算との比較を実施した。図4は変形速度項の定数  $B$  の値を0.0から2.0まで変化させた場合の気泡レイノルズ数  $Re$  である。Spherical、Ellipsoidal、Dimpledの3ケースについては Annaland らの結果よりも Grace の実験に近い結果を示しており Skirted は Annaland らの結果を僅かに下回るものの近い値となっている。また、MCAC の結果は CAC の結果と同等以上の結果が得られており、Phase Field 変数  $\gamma$  の値を界面近傍の局所的な速度場から導出できる点において優位性があると考えられる。図4の結果から変形速度項の定数  $B$  には0.7から1.0程度の値を用いるのが適していると考えられる。

#### 4. 5x5 バンドル体系流路内の気泡上昇計算

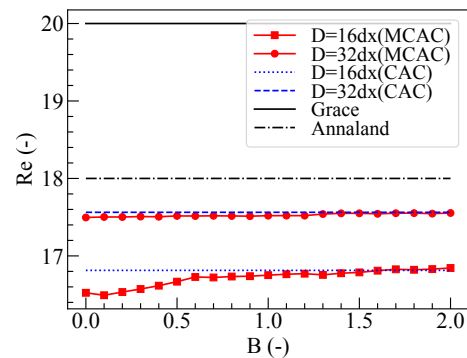
本研究にて開発した MCAC を原子力工学分野の気液二相流体問題に適用し、複雑な流れ場においても界面捕獲が機能することを確認する。図5に5x5バンドル体系の計算領域概要を示す。Ren らの実験 [8] の条件を参考にして、燃料棒を模擬した直径  $D = 9.5\text{mm}$  の円筒物体を12.6mm間隔で5x5個設定し、バンドル支持スペーサーを高さ方向に27.2D間隔で4個設置する。計算領域下部の流入境界とバンドルの間には気泡の流れを攪拌するためのメッシュを設定する。流入境界には11x11のオリフィスを設定し、各オリフィスからは空気と水を交互に流入させる。流入条件として Bubbly flow の条件、 $j_f = 0.10\text{m/s}$ ,  $j_g = 0.034\text{m/s}$  で計算を実施する。ここで  $j_f, j_g$  は5x5バンドルの流路における水と空気の見かけ速度である。5x5バンドル流路断面積を  $A_{channel}$ 、流入オリフィスの総断面積を  $A_{orifice}$  とすると、オリフィスの流速は  $v_{orifice} = (j_f + j_g)A_{channel}/A_{orifice}$  となる。オリフィス境界の流体率は、流入する気液の割合が  $j_g : j_f$  となるように交互に時間変化させる。時間変化の間隔は、ひとつのオリフィスから一周期の間に流



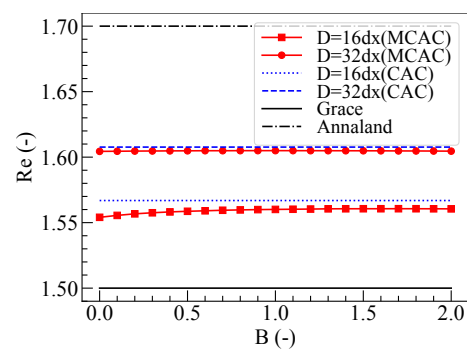
(a) Spherical



(b) Ellipsoidal



(c) Skirted



(d) Dimpled

図-4: 気泡レイノルズ数の  $B$  依存性

入する空気が指定サイズ(直径2mm)の気泡となるように調整する。

図6は時刻  $t = 9\text{sec}$  における計算結果のスナップショットである。水の屈折率を考慮した気泡の可視化結果と、チャンネル間の断面における速度場の様子を示し



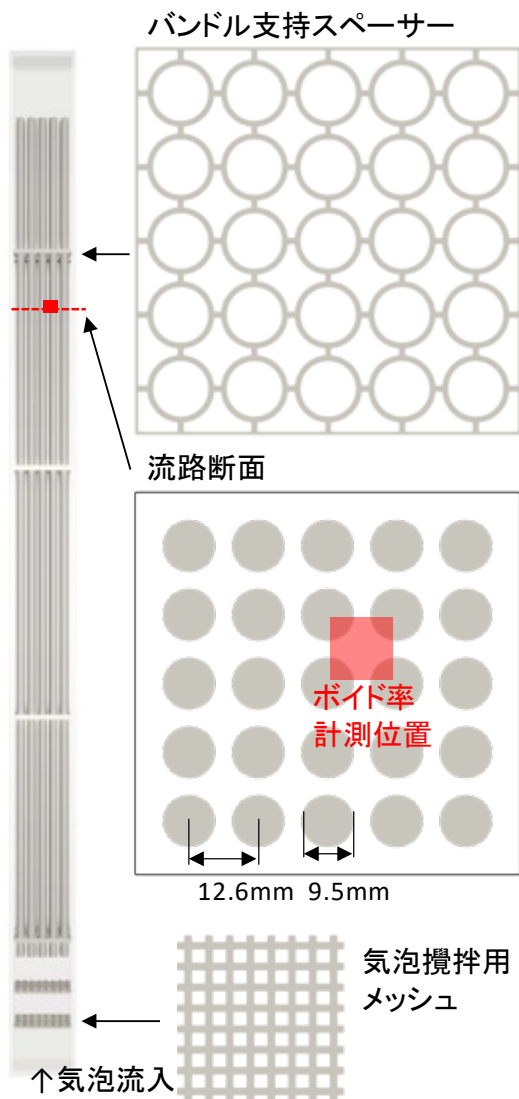


図-5: 5x5 バンドル体系流路

ている。気泡はサブチャンネル間を移動しながら上昇し、気泡の通過経路の流速が上昇していることが確認できる。また、Ren らの実験 [8] における気泡のスナップショットでは、気泡サイズはバンドル直径の 0.5 倍から 1 倍程度のサイズの楕円型気泡となっているが、本計算では接近した気泡同士が連鎖的に合体を繰り返し、バンドル直径を超えるサイズの気泡が発生している。これは界面捕獲手法による非物理的な合体が原因であると考えられる。一般的に、界面捕獲手法を用いた多相流解析では界面同士の合体・分離条件は陽的には定義されておらず、主に表面張力計算における法線ベクトルや曲率のトポロジーに左右され、界面同士が 2～3 格子程度まで接近すると数値的に合体してしまう。

図 5 に示すサブチャンネルのボイド率の時間履歴を計測し、時刻 6 秒から 25 秒までのボイド率の確率密度関数を図 7 に示す。Ren らの実験結果 [8] と比較した結果、低ボイド率の割合が多いという大まかな特徴は一致しているものの、0.1 以上のボイド率の割合が実験よりも高くなってしまっている。計算において、小さな

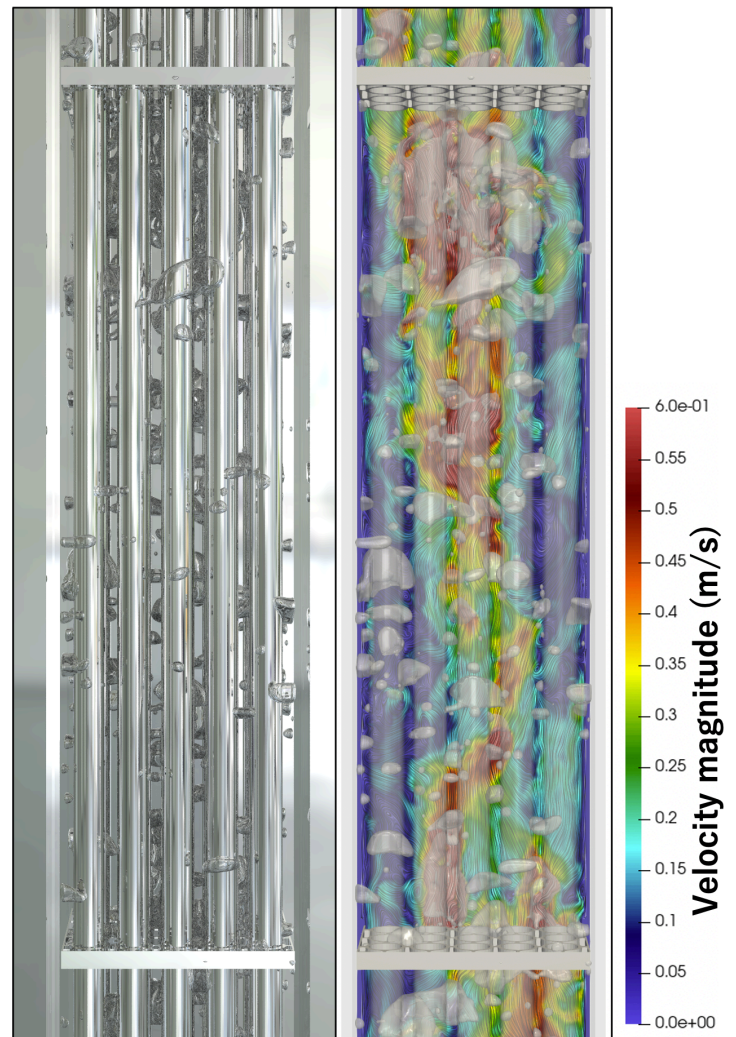


図-6: 気泡流解析結果

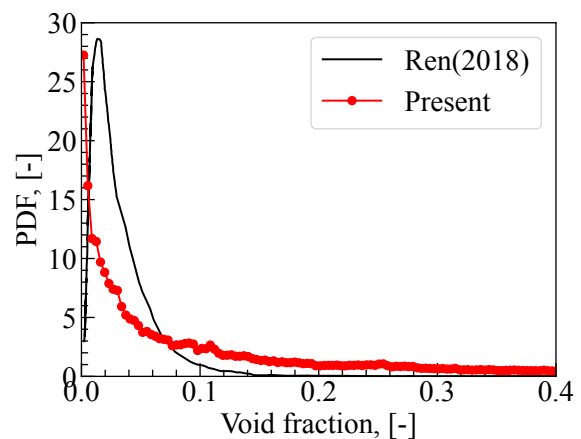


図-7: 中央サブチャンネル内ボイド率の確率密度関数

気泡が過剰に合体してしまった事が影響していると考えられる。上記課題は、通常の界面捕獲手法では根本的な解決は難しいため、Multi-Phase Field モデルを用いた気泡合体モデルの検討を進めている。

## 5. 結言

Phase Field 法による界面修正強度  $\gamma$  に空間分布を仮定し、局所的な速度分布および速度勾配を用いて重み付ける MCAC を提案した。代表的な 4 種類の形状の気泡上昇計算に対して MCAC を適用し、Grace や Annaland らの結果と比較して妥当な結果が得られることが確認できた。また、CAC と同等以上の結果が得られることから、計算領域の一部で大きな速度差が発生するような場合でも適切な  $\gamma$  を使用可能である点において MCAC に優位性があると考えられることができる。最後に本手法をバンドル体系解析に適用し、複雑な流路における流れでも気液界面を捕獲可能であることを確認できた。

**謝辞:** 本研究の一部は JSPS 科研費（課題番号 21K11911）および学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点、革新的ハイパフォーマン・コンピューティング・インフラの支援を通じて、東京工業大学が提供するスーパーコンピュータ TSUBAME3.0 の計算資源の提供を受け、実施した（課題番号：jh220032）。本研究の計算の一部は日本原子力研究開発機構の大型計算機「HPE SGI8600」を使用した。記して謝意を示す。

## 参考文献

- [1] Shintaro Aihara, Tomohiro Takaki, and Naoki Takada. Multi-phase-field modeling using a conservative Allen – Cahn equation for multiphase flow. *Computers and Fluids*, Vol. 178, pp. 141–151, 2019.
- [2] Yos Panagaman Sitompul, Takayuki Aoki, and Tomohiro Takaki. Simulation of turbulent bubbly pipe flow with high density ratio and high reynolds number by using the lattice boltzmann method and a multi-phase field model. *International Journal of Multiphase Flow*, Vol. 134, p. 103505, 2021.
- [3] Sitompul Yos, Aoki Takayuki, Watanabe Seiya, and Takaki Tomohiro. Liquid-gas Foam Simulations using Cumulant Lattice Boltzmann Method with Adaptive Mesh Refinement. 計算工学講演会論文集, Vol. 26, pp. 728–731, 2021.
- [4] Pao Hsiung Chiu and Yan Ting Lin. A conservative phase field method for solving incompressible two-phase flows. *Journal of Computational Physics*, Vol. 230, No. 1, pp. 185–204, 2011.
- [5] J.R.Grace. Shapes and Velocities of Bubbles Rising in Infinite Liquids. *Transactions of the Institution of Chemical Engineers*, Vol. 51, pp. 116–120, 1973.
- [6] M. Van Sint Annaland, N. G. Deen, and J. A.M. Kuipers. Numerical simulation of gas bubbles behaviour using a three-dimensional volume of fluid method. *Chemical Engineering Science*, Vol. 60, No. 11, pp. 2999–3011, 2005.
- [7] Marianne M Francois, Sharen J Cummins, Edward D Dendy, Douglas B Kothe, James M Sicilian, and Matthew W Williams. A balanced-force algorithm for continuous and sharp interfacial surface tension models within a volume tracking framework. *Journal of Computational Physics*, Vol. 213, pp. 141–173, 2006.
- [8] Quan Yao Ren, Liang Ming Pan, Wen Xiong Zhou, Hang Liu, Ting Pu Ye, Bin Yu, and Zhong Chun Li. Measurement of subchannel void fraction in  $5 \times 5$  rod bundles using an impedance void meter. *Measurement Science and Technology*, Vol. 29, No. 10, 2018.