

Multi-Phase Field 法を用いた気泡流解析

Optimization of phase field variables in bubble rise analysis

杉原健太¹⁾ 小野寺直幸²⁾ シトンプル ヨス³⁾ 井戸村泰宏⁴⁾ 山下晋⁵⁾

Kenta Sugihara, Naoyuki Onodera, Yos Sitompul, Yasuhiro Idomura and Susumu Yamashita

¹⁾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)

²⁾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)

³⁾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: sitompul.yos@jaea.go.jp)

⁴⁾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)

⁵⁾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)

When calculating a flow containing many bubbles, it is difficult to reproduce the flow pattern observed in experiments because bubbles that are close to each other merge numerically in gas-liquid two-phase flow analysis using the conventional interface capturing method. In this study, the Multi-Phase Field method is used to prevent the numerical bubble merging by representing each bubble using an independent fluid fraction function. The applicability of the proposed method is verified by comparing bubbly flow analysis with experimental results.

Key Words : Multi-Phase Field method, Ordered APT, Bubbly flows, GPU computing

1. はじめに

原子力工学において、気液二相流解析は炉心設計や安全性評価において重要な役割を担っている。気液二相流のシミュレーションでは、界面捕獲法と界面追跡法が広く用いられており、気液界面の複雑な運動を解析することができる。界面捕獲法は、Front tracking 法などの界面追跡法と異なり、界面の合体や分離などの幾何学的変化を明示的に取り扱う必要がないため、数値計算手法が簡便である。数値計算手法としては、体積保存を保証する VOF (Volume of Fluid) 法と、界面形状の平滑性に優れる LS (Level Set) 法が広く用いられている。また、近年では気液二相流シミュレーションにおいて、体積保存性と界面形状の滑らかさの両方を満足する PF (Phase Field) 法が界面捕獲法として利用され始めた。

しかし、界面捕獲法は界面同士が近接したときに数値的に合体してしまう傾向があるため、多数の界面が密集するような問題は不得手である。このことは、多数の気泡を含む気液二相流の流動パターンを正確に予測する上で大きな課題となる。Zhang らによると、実験的に観測された気泡間の反発を計算で再現するためには、界面近傍の格子解像度を気泡径の 1/1600 以下にする必要があるが、ほとんどの実用的な問題でこのような高解像度の計算を行うことは困難である。この問題を解決するために、各気泡に独立した流体率関数を適用することで気泡の合体を制限する MPF (Multi-Phase Field) 法を導入する。図 1 は、従来の PF 法と MPF 法を用いた下降気泡流シミュレーションの比較である。初期条件は、Colin らの実験 [1] 条件 D3 におけるボイド率、気泡径、圧力勾配をもとに与えている (図 1-a 参照)。PF 法では連続的な気泡の合体が見られ、流動パターンが大きく異なる (図 1-b 参照)。一方、MPF 法では気泡の

合体が起こらないため、実験データから得られた初期流動様式を維持することができる (図 1-c 参照)。

本研究では、MPF 法の効率的な実装を開発し、多数の気泡を含む気液二相流のシミュレーションを可能にする。開発した手法を円管内の気泡流解析に適用し Colin らの実験結果と比較することにより妥当性を検証する。

2. Multi-Phase Field 法

MPF 法はもともと金属結晶成長計算のために開発された手法であるが、近年、混相流計算の界面捕捉手法の一つとして用いられている。相原らによって CAC (conservative Allen-Cahn) [2] 方程式に基づく MPF 法が開発され [3][4]、その発展として三重接合点問題を解くための N-phase モデルが Mirjalili らによって提案された [5]。本研究では、Mirjalili らの N-phase モデルを用いる。

3. Phase Field 法

CAC 方程式における PF 変数あるいは流体率 ϕ は、 $\phi = 0$ の気相と $\phi = 0.5$ で定義される界面を挟んで $\phi = 1$ の液相を滑らかに急峻に接続する。支配方程式は次のように記述される。

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

ここで、 \mathbf{u} は界面の動きを記述する速度ベクトル、 γ は PF モデルの界面修正強度を記述する PF パラメータ、 ε は PF モデルの拡散項と反拡散項の相対的な大きさに関係する定数であり界面幅の調整パラメータである。

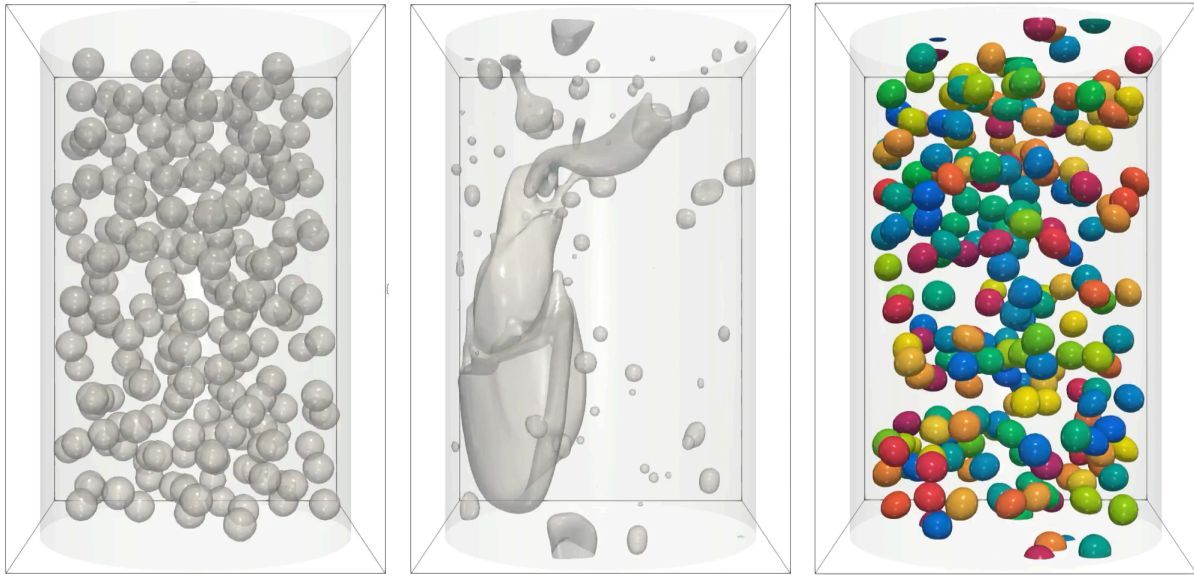


図-1-a: Initial bubble profile

図-1-b: Single Phase Field

図-1-c: Multi-Phase Field

図-1: Example of bubble flow calculation for a 4.2 mm size bubble flowing in a 40 mm diameter pipe ($D_b = 10\Delta x$).

(1) Mirjalili's N-phase model

Mirjalili らは、N 相系に対する新しい MPF 法を開発した。この方法は、体積保存、相に関する対称性、そしていわゆる Reduction consistency を満たすことができる。これは N 相系から M 相を削除した場合に、モデルが N-M 相のものに帰着することを意味する。N-phase モデルは次のように記述される。

$$\frac{\partial \phi_p}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u} \phi_p) = \nabla \cdot \left(\gamma \varepsilon (\nabla \phi_p) - \gamma \sum_{q \neq p} \phi_p \phi_q \mathbf{n}_{pq} \right) \quad (2)$$

for $1 \leq p \leq N$,

ここで、 p と q は相インデックス、 N は相の数、 \mathbf{n}_{pq} は次のように定義される界面のペア法線ベクトルである。

$$\mathbf{n}_{pq} = \frac{\nabla \phi_{pq}}{|\nabla \phi_{pq}|} \quad \text{for } p \neq q. \quad (3)$$

また、 ϕ_{pq} は p と q の組み合わせ毎に定義される体積率である。

$$\phi_{pq} = \frac{\phi_p}{\phi_p + \phi_q} \quad \text{for } p \neq q. \quad (4)$$

この方法では、 N 個の個別の相だけでなく、各計算格子の全相の和 ($\sum \phi_p = 1$) も保存される。 $\mathbf{n}_{pq} = -\mathbf{n}_{qp}$ なので、式 (2) の N 個の相を全て足すと逆拡散項がキャンセルされ、次のようになる。

$$\frac{\partial}{\partial t} \sum_p \phi_p + \sum_p \nabla \cdot (\mathbf{u} \phi_p) = \varepsilon \sum_p \nabla \cdot (\gamma \nabla \phi_p). \quad (5)$$

したがって、初期条件で $\sum_p \phi_p = 1$ が満足されれば、移流項と拡散項に線形離散化を適用する限り、時間発展を計算しても必ず $\sum_p \phi_p = 1$ が満足される。WENO や Slope limiter を用いた離散化などの数値計算方式は上記の条件を満たさない。このような場合、すべての計

算セルで $\sum_p \phi_p = 1$ を満たすように正規化する必要がある。本研究では、時間積分に 3 次の TVD ルンゲクッタ法、移流項に 3 次の MUSCLE 法、その他に 2 次の FVM 法を適用する。この手法は上記の条件を満たし、 $\sum_p \phi_p = 1$ が保証される。

(2) Ordered Active Parameter Tracking (OAPT) method

MPF 法のナイーブな実装では、 N 個の PF 変数の配列をメモリに格納し、すべての計算格子について計算する必要がある。しかし、多数の相 (数百以上) を計算する場合、計算コストが非常に高くなる。メモリと計算コストを節約するためには、Active Parameter Tracking (APT) 法 [6] のような効率化が必要になる。本研究では、GPU 計算の最適化に重要な連続メモリアクセスを考慮して APT を改良した Ordered APT (OAPT)[7] を適用した。

図 2(上) は、ナイーブな実装で N 個の相を保存する例であり、各相が各メモリ層に記憶される。PF 変数が 0 でないアクティブなセルは色付けされ、白いセルは計算に使用されず、メモリの無駄と計算コストの増加につながる。図 2(下) は OAPT 法を用いたデータ圧縮の例で、複数の PF 変数を同じメモリ層に格納することで圧縮している。同一メモリ層内の PF 変数は、位相インデックス (Phase ID) の配列でラベル付けされる。PF 変数の再配置 (Reordering) は、同じメモリ層内でアクティブセル同士が近接したときに実行される。5. 節の気泡流計算では、約 500 ステップに 1 回再配置が実行される。

本研究では、MPF 法の界面捕獲計算の後に、以下に示す手順を 10 ステップに 1 回実施する。

1. 符号付距離関数の計算

各メモリ階層に対して、界面から 3 セル程度までの距離で Level Set 関数 [8] を作成し、アクティブ

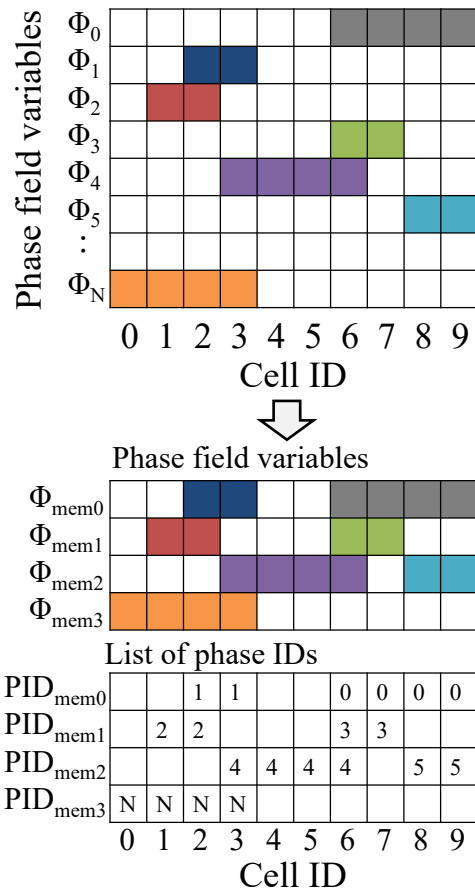


図-2: Ordered Active Parameter Tracking method[7].

セルを決定する。

2. PF 値のカットオフとアクティブセルの再設定

符号付距離関数からアクティブセルを更新し、その外側の PF 値を 0 に設定する。

3. Reordering

異なるフェーズ ID のアクティブセル間の距離が 2 セル以下である場合、これらのフェーズ ID の一方のアクティブセルは、互いに重ならないように異なるメモリ層に移動される。

4. Normalize

各 PF 値を、各計算セルでの合計が 1 になるように規格化する。

5. Mass correction

ステップ 2 とステップ 4 における質量の変化は、Chiu らの質量再分布法 [2] と同様に補正する。ここで、参照質量はステップ 2 の前に計算される。

PF 方程式の平衡解は無限連続関数であるため、界面が移動するに従って微小な PF 値が広がってしまうという特徴がある。PF 値がアクティブセルの外側に広がれば、それらは計算から除外されるため、アクティブセルのサイズはほぼ一定となり、OAPT 法は有限のメモリ層数で動作する。本研究では、符号付き距離関数を使用して、アクティブセルの範囲を界面から $3\Delta x$ に制限する(ステップ 2)。この方法は OAPT 法と親和性があり、同じ位相 ID を持つセルは常に同じメモリ層に格納される

ため、LS 関数の計算が容易である。

4. 二相流計算手法概要

本研究では以下に示す Navier-Stokes 方程式を基礎方程式として採用する。

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (6)$$

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = \frac{1}{\rho} \nabla \cdot (\mu (\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T)) - \frac{1}{\rho} \nabla p + \frac{1}{\rho} \mathbf{F}_s + \frac{1}{\rho} \mathbf{F}_b, \quad (7)$$

ここで、 \mathbf{u} は速度、 ρ は密度、 μ は粘性係数、 p は圧力、 \mathbf{F}_s は表面張力、 \mathbf{F}_b は重力および圧力勾配などの外力である。PF または MPF 法を用いて計算される PF 変数は、界面を特定するためだけでなく、気液二相流の物理的特性を定義するためにも使用される。本研究では、Balcazar ら [9] と同様に流体率 ϕ を計算する、

$$\phi(\mathbf{x}, t) = 1 - \max(\phi_1(\mathbf{x}, t), \dots, \phi_{N-1}(\mathbf{x}, t), \phi_N(\mathbf{x}, t)), \quad (8)$$

ここで ϕ_1, \dots, ϕ_N はそれぞれ N 個の気泡の PF 値である。上記手法は異なる ID の気泡同士が接触した際に、気泡間に薄膜が定義される。これによって、各気泡内の圧力や速度場を計算することが可能となり、圧力場や速度場の合体を抑制することが可能となる。

密度と粘性係数は次式で定義される。

$$\rho = \rho_l \phi + \rho_g (1 - \phi), \quad (9)$$

$$\mu = \mu_l \phi + \mu_g (1 - \phi), \quad (10)$$

ここで ρ_l, ρ_g は液相および気相の密度、 μ_l, μ_g は液相および気相の粘性係数である。

表面張力 \mathbf{F}_s の計算には次式のように Continuum surface force (CSF) モデルを採用する。

$$\mathbf{F}_s = \sigma \sum_i \kappa_i \nabla \phi_i, \quad (11)$$

ここで σ は表面張力係数、 κ_i および ϕ_i は i 番目気泡の曲率および PF 値である。

非圧縮性流体の計算には SMAC 法を用いて圧力場と速度場の修正を行う。圧力 Poisson 方程式は、非圧縮性流体計算の中で最もコストのかかる部分であり、特に密度比が大きい気液二相流シミュレーションでは行列の条件が厳しくなる。圧力 Poisson 解法には GPU 計算に最適化した Cache-reuse multi-grid preconditioned conjugate gradient (CRMG-CG) 法 [10] を適用した。Navier-Stokes 方程式 (7) の陽解法部分や MPF 方程式 (2) などの時間積分には 3 次精度 TVD Runge-Kutta 法を適用した。

5. 円管内の気泡流解析

本研究にて開発した MPF 法と OAPT 法を適用した気液二相流解析の基礎検証として、円管内の気泡乱流計算を実施する。

(1) 解析条件

基礎検証として直径 $D = 40$ mm の円管内の気泡流解析を実施した。Colin らの実験 [1] 条件 D3 と同様に気液物性は空気と水を設定し、平均ボイド率 7.5%、気

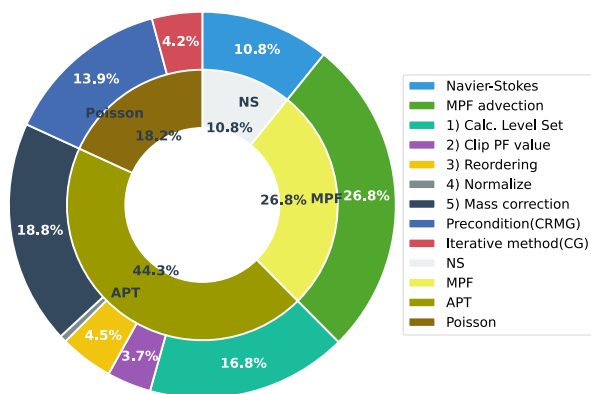


図-3-a: Breakdown of computation time(V100, 1GPU).

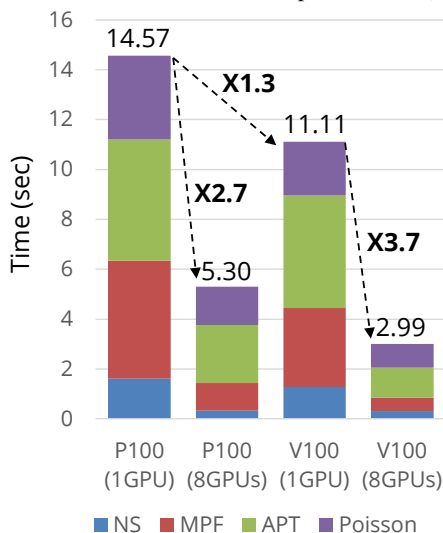


図-3-b: Strong scaling test.

図-3: Measurement of computation time for calculations with $192 \times 192 \times 288$ cells.

泡直径 4.2 mm の気泡を 153 個ランダムに配置し (see Fig.1-a)、圧力勾配 $\frac{dP}{dz} = 8662 \text{ Pa/m}$ を設定した。計算領域は $L_x \times L_y \times L_z = D \times D \times \pi D$ として $dx = D/192$ の直交等間隔格子を設定し z 方向は周期境界条件とした。

Navier-Stokes 方程式 (7) の外力項を次式で与える。

$$\mathbf{F}_b = \beta \hat{\mathbf{z}} + (\rho - \bar{\rho}) \mathbf{g}, \quad (12)$$

ここで $\hat{\mathbf{z}}$ は z 方向の単位法線ベクトル、 $\bar{\rho}$ は円管内の平均混合密度、 \mathbf{g} は重力加速度ベクトル、 β は次式で定義される。

$$\beta = \frac{dP}{dz} + \bar{\rho} g, \quad (13)$$

ここで $g = -9.8 \text{ m/s}^2$ は重力加速度である。

(2) 計算環境およびコスト

本研究の計算は NVIDIA DGX-2 に搭載されている NVIDIA V100 GPU および TSUBAME3.0 に搭載されている NVIDIA P100 GPU を使用した。

図 3-a は初期ステップにおけるデータ出力を除いた計算時間の内訳を示している。APT によるデータ再格納

は計算全体の 44.3% を占めているが、毎ステップ実行しているわけではなく、10 ステップに一回実施しているため、この平均コストは 1/10 となる。APT のコストの大部分は Level Set 関数の作成や Mass-redistribution 法を用いた質量補正が占めている。この原因としては Level Set 関数の作成には各メモリ階層で反復計算による初期化計算を行っており高コストとなっているのである。また、質量補正では相数 ($N_b = 153$) 分の多くの総和計算が必要となるため高いコストとなる。

図 3-b に TSUBAME3.0 の NVIDIA P100 GPU と DGX-2 の NVIDIA V100 GPU による計算性能の比較を示す。単一 GPU 計算では V100 GPU を使った計算は P100 GPU を用いた計算より 1.3 倍速かった。また、V100 GPU を 8 台用いた並列計算によって 3.7 倍高速化されることが確認された。

(3) 計算結果

図 4-a (左) は Phase ID で色付けされた気泡界面の様子を示している。MPF 法を用いることにより、このように密集した多数の気泡を計算することが可能となった。このような計算は従来型の界面捕獲法では難しく、MPF 法のようなマルチカラー手法が必要となる。可視化ソフト POV-Ray を用いたレイトレーシング可視化も図 5 に示す。

図 4-a (中右) は OAPT 法を用いたデータ格納の様子を示している。本計算では、0 番目のメモリ階層は液相に割り当てられ、残りの 6 つのメモリ階層は 153 個の気泡データを格納するために気相用に割り当てた。気泡データの格納に必要なメモリ階層の数は問題設定によって異なり、さらに計算の進行と共に変化するが、本計算では 4 階層程度で十分であることが分かった (図 4-b 参照)。これは、今回の計算では 1 つの気泡のアクティブ格子と同時に接触する気泡の最大数が 3 つ程度であることを意味する。また、OAPT 法はナイーブな実装と比較してメモリサイズを 7/153 程度に削減することを可能にした。同一の相は必ず同じメモリ階層に格納されるという特徴を有する OAPT 法を用いているため、界面捕獲計算の部分では従来の PF 法と同様にしてステンスル計算を行うことができる。拡大画像でわかるように、アクティブ格子は界面から 3 格子離れた格子まで定義され、各アクティブ格子は互いに接触しないように制御されている。

図 6 はボイド率 α と平均流速 U の半径分布を示す。ここで、 r_+ は規格化した半径を示し、分布は同一の半径 r_+ において周方向および流路方向 (z) に対して平均処理をしている。下降流の場合、壁面剪断応力、圧力勾配、重力のバランスにより、気泡は円管の中心に集まる傾向があることが知られている。今回の計算ではこの傾向が再現され、気泡分布は実験と定量的に良い一致が得られた (図 6-a 参照)。流速分布も妥当な一致を示しており、浮力の影響による空気と水の流速差を再現できている (図 6-b 参照)。

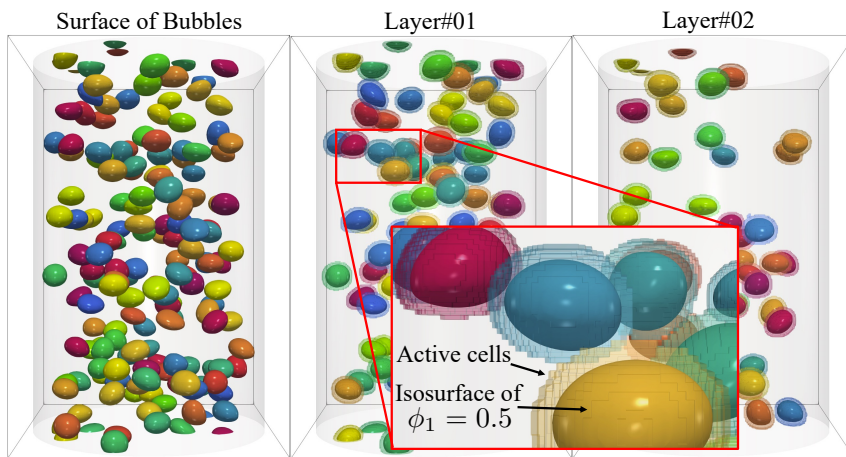


図-4-a: Storage of phase field variables at active cells.

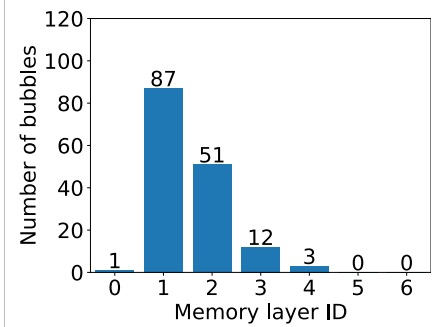


図-4-b: Number of bubbles stored in each memory layer.

図-4: View of 153 bubbles data storage.



図-5: Visualization of bubble flow with ray tracing.

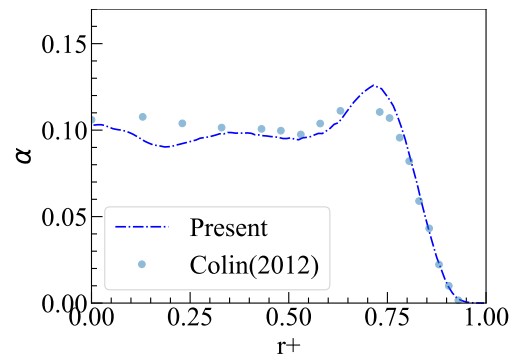


図-6-a: Void fraction.

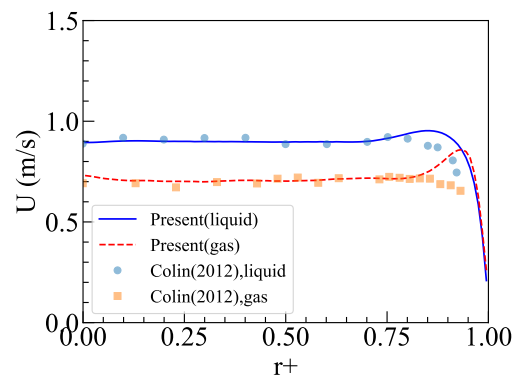


図-6-b: Flow velocity.

図-6: Radial distributions of the void fraction and the flow velocity.

6. まとめ

Mirjalili らの N-phase モデルをベースとした MPF 法に対して OAPT 法を適用し、GPU スパコンを利用した気液二相流解析コードを開発した。開発した手法を用いて円管内気泡流計算を実施し、Colin らの実験結果との比較検証を行った結果、気泡の数値的合体を回避することに成功し、気泡分布や空気および水の流速分布に関して妥当な一致が確認された。MPF 法の省メモリ化手法として OAPT 法を適用することで、153 個の気泡 (PF データ) を 6 個程度のメモリ層に保存するだけでナイーブな実装に比べて消費メモリサイズと計算コストが 1 桁削減された。

謝辞: 本研究の一部は JSPS 科研費 (課題番号 24K14973) 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ス・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: jh230031)。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] Catherine Colin, Jean Fabre, and Arjan Kamp. Turbulent bubbly flow in pipe under gravity and micro-gravity conditions. *Journal of Fluid Mechanics*, Vol. 711, pp. 469–515, 2012.
- [2] 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.
- [3] 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.
- [4] Shintaro Aihara, Naoki Takada, and Tomohiro Takaki. Highly conservative allen–cahn-type multiphase-field model and evaluation of its accuracy. *Theoretical and Computational Fluid Dynamics*, 2023.
- [5] Shahab Mirjalili and Ali Mani. A conservative second order phase field model for simulation of n-phase flows. *Journal of Computational Physics*, Vol. 498, p. 112657, 2024.
- [6] Akinori Yamanaka, Tomohiro Takaki, Takayuki Aoki, and Takashi Shimokawabe. Multiphase field simulation of austenite-to-ferrite transformation accelerated by gpu computing. *Journal of Computational Science and Technology*, Vol. 6, No. 3, pp. 182–197, 2012.
- [7] Yos Panagaman Sitompul, Takayuki Aoki, Seiya Watanabe, and Tomohiro Takaki. An ordered active parameter tracking method for efficient multiphase field simulations. *Journal of Computational Science*, Vol. 64, p. 101834, 2022.
- [8] Mark Sussman, Peter Smereka, and Stanley Osher. A level set approach for computing solutions to incompressible two-phase flow. *Journal of Computational Physics*, Vol. 114, No. 1, pp. 146–159, 1994.
- [9] Néstor Balcázar, Oriol Lehmkuhl, Joaquim Rigola, and Assensi Oliva. A multiple marker level-set method for simulation of deformable fluid particles. *International Journal of Multiphase Flow*, Vol. 74, pp. 125–142, 2015.
- [10] Naoyuki Onodera, Yasuhiro Idomura, Yuta Hasegawa, Susumu Yamashita, Takashi Shimokawabe, and Takayuki Aoki. Gpu acceleration of multigrid preconditioned conjugate gradient solver on block-structured cartesian grid, 2021.