

jh220032

原子力気液二相流解析における界面捕獲手法の高度化

杉原 健太（日本原子力研究開発機構）

概要

エクサスケールスパコンを活用した原子力気液二相流解析の実現に向けて、混合精度前処理を用いた圧力 Poisson 解法の改良、および界面捕獲手法の高度化を実施した。前処理に半精度演算を用いる際に、対角優位となるように低精度へのデータ変換することにより収束性の悪化を防ぐことに成功した。気液二相流解析の界面捕獲手法として最適化を行った Phase Field 法を適用し、5x5 バンドル体系解析においてボイド率の確率密度分布を評価した結果、前年の結果を改善する事ができた。

1. 共同研究に関する情報

- (1) 共同利用・共同研究を実施している拠点名
東京工業大学 学術国際情報センター
- (2) 課題分野
大規模計算科学課題分野
- (3) 共同研究分野
超大規模数値計算系応用分野
- (4) 参加研究者の役割分担

杉原健太 (JAEA) : 研究の主導、多相流体解析の実施

青木尊之 (東工大) : Phase field 法に関する助言

小野寺直幸(JAEA) : 多相流体解析の実施

下川辺隆史 (東大) : GPU 計算に関する最適化の助言

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 GPU 最適化

2. 研究の目的と意義

原子力工学分野の多相流体解析は、構造物と気液界面の相互作用に起因する複雑な流動形式を捉えたマルチスケール現象の計算が必須となる。そのような大規模解析の実現に向けて、日本原子力研究開発機構 (JAEA) では、スーパーコンピュータ (スパコン) を活用した数値流体力学 (CFD) 解析手法 JUPITER の開発、およびその計算速度のボトルネックとなる圧力 Poisson 解法の高速化を実施してきた。

その研究成果として、CPU スパコンを用いた 1mm 格子解像度のバンドル体系の多相流体解析、さらに GPU スパコンを用いた高速化 (2021 年度課題) により 0.6mm 格子解像度の解析を実現した。しかしながら、以上の解析においても、実験結果 [Ren et al., Meas. Sci. Technol., 2018] のボイド率を定量的に再現できておらず、更なる高解像度化と気液界面モデルの高精度化が必要となっている。

上記課題に対して、今年度の JHPCN 課題では、従来の界面追跡モデル (THINC-WLIC 法) と比較して、界面方向への逆拡散項を加えることで数値拡散を抑えることが可能な手法である Phase Field 法の改良版、およびその発展系である Multi-Phase Field 法を適用することで気液界面捕獲手法を高精度化する。

以上の開発により、原子力分野の熱流動解析や産業応用分野の冷却システム等、多数の気泡を含む工学問題における二相流体解析の高精度化が期待できる。

3. 当拠点の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 解析の高速化や、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

有する東工大・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

本課題の基盤となる JUPITER コードは、研究協力者の山下、小野寺等と共に実験の代替に向けた検証を進めてきた。また、研究代表者の所属するシステム計算科学センターでは、Poisson 解法の CPU・GPU 向けの高速度化として、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ってきた[参考文献 1-3]。前年度までの研究成果として、Poisson 解法の高速度化とバンドル体系の気液二相流解析を以下に示す。

(a) Poisson 解法の高速度化

ブロック AMR 法を適用した格子に対して、ブロック間およびブロック内の格子間の依存関係を階層的な参照により解決し、さらにブロック内の格子データを GPU キャッシュ (shared memory) に読み込み再利用することで、収束性と高速計算を両立した前処理手法 (CRMG-CG 法) を提案した。CRMG-CG 法では CG 法に MG 法前処理を適用し、さらに MG 法のスムーザとして CR-SOR 法を使用する。図 1 に 8x8 バンドル体系に対する Poisson 解法の収束履歴を示す。従来の RB-SOR 法前処理付き CG 法 (P-CG 法) では、収束まで約 1300 回の反復が必要なのに対して、MG 法を適用した MG-CG 法では約 200 回、提案手法である CRMG-CG 法では約 100 回と、大幅に収束性が改善した[参考文献 1]。一方で、Poisson 解法の前処理が計算時間の大部分を占めており、更なる高速化の余地が残っていることを確認した。

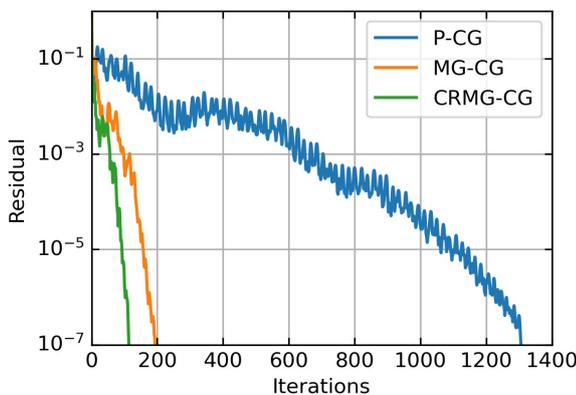
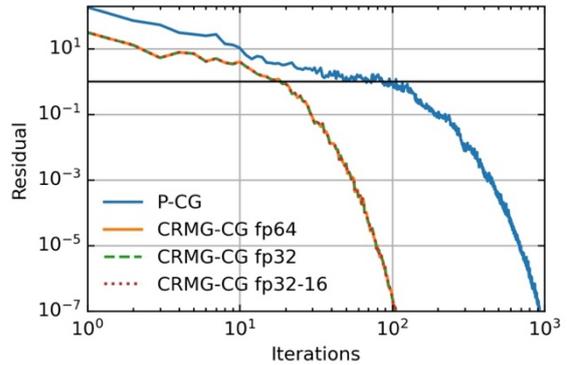
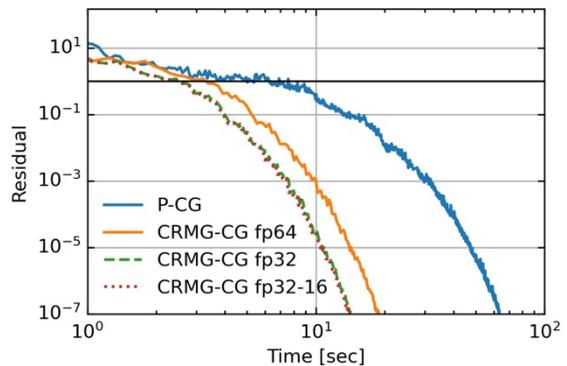


図 1 8x8 バンドル体系に対する Poisson 解法の収束履歴。1024x1024x3072 格子相当。

2021 年度には上記課題に対して、混合精度の前処理手法による前処理の高速化を実施した[参考文献 4]。性能測定の計算条件として、5x5 バンドル体系における直交格子の 384x384x6144 相当を設定した。図 2 に上記解析の収束履歴を示す。Poisson 解法として、P-CG 法および CRMG-CG 法を比較した。CRMG-CG 法の前処理として、倍精度計算 (fp64)、単精度計算 (fp32)、単精度計算・半精度通信 (fp32—fp16) を採用した。



(A) 反復回数—収束斬差



(B) 計算時間—収束斬差

図 2 P-CG 法 (青線) および CRMG-CG 法 (倍精度計算 fp64: 橙線、単精度計算 fp32: 緑破線、単精度計算・半精度通信 fp32-16: 赤点線) の収束履歴)

(A) の収束履歴より、P-CG 法の 900 回に対して、CRMG-CG 法では 100 回へと収束性を劇的に改善した。また、CRMG-CG 法の混合精度を用いた 2 つの条件では、いずれも倍精度と同様の収束履歴となることを確認した。(B) の計算時間の比較では、前処理に単精度を採用することで、倍精度に対して 75% 程度までコストを削減した。一方で、通信に半精度を用いた条件 (fp32-16) では、単精度の条件とほぼ同じコストとなり、期待通りの高速化が実現されなかった。また、前処理に半精度計算 (float16、もし

くは bfloat16) を採用した条件での計算も実施したが、Poisson 解法が収束しない結果となった。

(b) バンドル体系の気液二相流解析

原子力工学分野の CFD に対する大規模計算として、バンドル体系の気液二相流体解析を実施した。計算条件として、ブロック構造 AMR 格子版の JUPITER-AMR に 0.58mm 解像度(直交格子の 128x128x2048 相当)を設定すると共に、10 秒間(約 500,000 ステップ)の解析を実施した。統計量として、サブチャンネル内のボイド率の確率密度分布を、直交格子版 JUPITER (1mm 格子解像度) および実験結果[Ren et al., Meas. Sci. Technol., 2018]と比較した(図 3)。実験の流動形式として、ボイド率が 0 付近の確率密度分布が最も高い気泡流(bubbly flow)が観測されているが、ボイド率が 0 (流路内が液体のみ)の確率密度分布が実験と比較して過大評価する結果となった。GPU を用いた JUPITER-AMR の開発により、CPU を用いた従来の直交格子版 JUPITER と比較して、高解像度かつ高速な解析を実現し、実験結果により近い確率密度分布を再現できたものの、ボイド率 0.1 以上の領域を過大評価しており、この改善が今後の課題として示された。

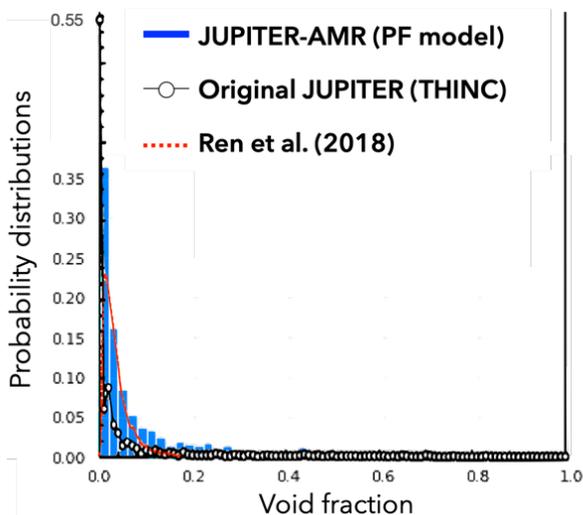


図 3 サブチャンネル内のボイド率の確率密度分布。青線：JUPITER-AMR (0.58mm 解像度)、白丸：直交格子版 JUPITER (1mm 解像度)、赤線：実験結果

参考文献

[1]N. Onodera, Y. Idomura, Y. Hasegawa, S. Yamashita, T. Shimokawabe, and T. Aoki, “GPU

Acceleration of Multigrid Preconditioned Conjugate Gradient Solver on Block-Structured Cartesian Grid”, HPC Asia 2021, 2021.

[2]Y. Idomura, T. Ina, Y. Ali, and T. Imamura, “Acceleration of fusion plasma turbulence simulations using the mixed-precision communication-avoiding Krylov method”, Proceedings of SC 2020, p. 1318 – 1330, 2020

[3] Y. Idomura, T. Ina, S. Yamashita, N. Onodera, et al., “Communication Avoiding Multigrid Preconditioned Conjugate Gradient Method for Extreme Scale Multiphase CFD Simulations”, ScalA'18 workshop in SC18, pp. 17 - 24, 2018.

[4] 小野寺 直幸、井戸村 泰宏、朝比 祐一、長谷川 雄太、下川辺 隆史、青木 尊之、”ブロック型適合細分化格子での Poisson 解法の混合精度演算による高速化”、日本計算工学会第 26 回計算工学講演会 (5/26-28、オンライン)

5. 今年度の研究成果の詳細

2022 年度は前年度に引き続き、Poisson 解法と原子力分野の気液二相流体解析の高度化を進める。Poisson 解法では半精度演算特有の課題の解決を実施し、気液二相流体解析ではバンドル体系解析の精度向上に向けて界面捕獲手法の改良を実施した。

(a) Poisson 解法の最適化

ヤコビ前処理を用いた混合精度クリロソルバは、前処理が fp16 や bf16 などの低精度で計算される場合に、著しく収束性が低下することがある。この収束性の低下は、低精度へのデータ変換の丸め誤差によって対角優位性が崩れることが原因であることが分かっている。そこで、上記問題を解決するために元の行列データの対角優位性を保つようにデータ変換する方法を提案した。提案手法の性能測定を P-CG 法、P-BiCGstab 法、P-GMRES(20)法に対して実施した。低精度の丸め方向は CUDA に備わっている round-nearest、round-up、round-down、round-towards-zero を利用して制御した。このデータ変換は、主反復の前に 1 回だけよばれる為、コストは無視できるほど小さい。図 4 に示すように、従来の

round-nearest に基づくデータ変換では、対角要素と非対角要素の丸め誤差の差によって収束特性が周期的に変化するが、提案する対角優位丸めでは周期的な収束性の悪化を防ぐことに成功した[研究成果 2]。

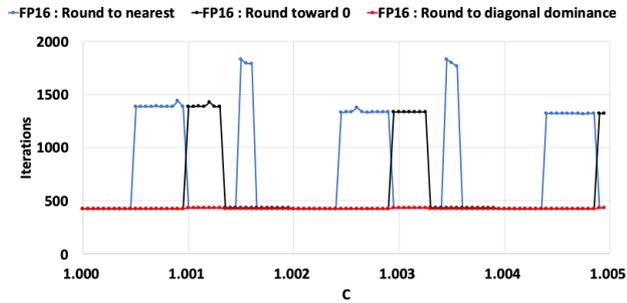


図4 P-CG 法の反復回数のスケーリング係数 c 依存性

(b) Phase Field 法を適用したバンドル体系解析

2021 年度に新たに導入した Phase Field 法 (Conservative Allen-Cahn (CAC) 方程式) に基づく界面捕獲手法によって、それ以前まで採用されていた界面モデル (THINC-WLIC 法) の VOF 剥がれを改善することに成功したが、依然としてバンドル体系の実験結果を再現するには至っていない。

2022 年度には、まず Phase Field 法の最適化を実施し、それをバンドル体系解析に適用した。従来の Phase Field 法では、界面に働く逆拡散は速度の最大値を用いて全計算領域に一様に定義されるが、本来ならば界面の修正強度は界面拡散の大きさに応じて空間的に変化させるのが適切であると考えられる。また、界面の修正強度を意味する Phase Field 変数のモビリティ M は、小さすぎると界面を一定幅に保てず、大きすぎると計算格子に沿った界面形状に変形してしまうため、一様分布では計算領域全体に適切な M を設定することができない。そこで、モビリティ M に空間分布を仮定し、局所的な速度場に応じて適切な M を設定可能な Modified conservative Allen-Cahn (MCAC) 方程式を提案し、2次元 Zalesak 問題や 3次元液滴振動問題などの基礎検証において CAC よりも精度良く計算できる事を確認した。本手法を原子力気液二相流解析に適用した。

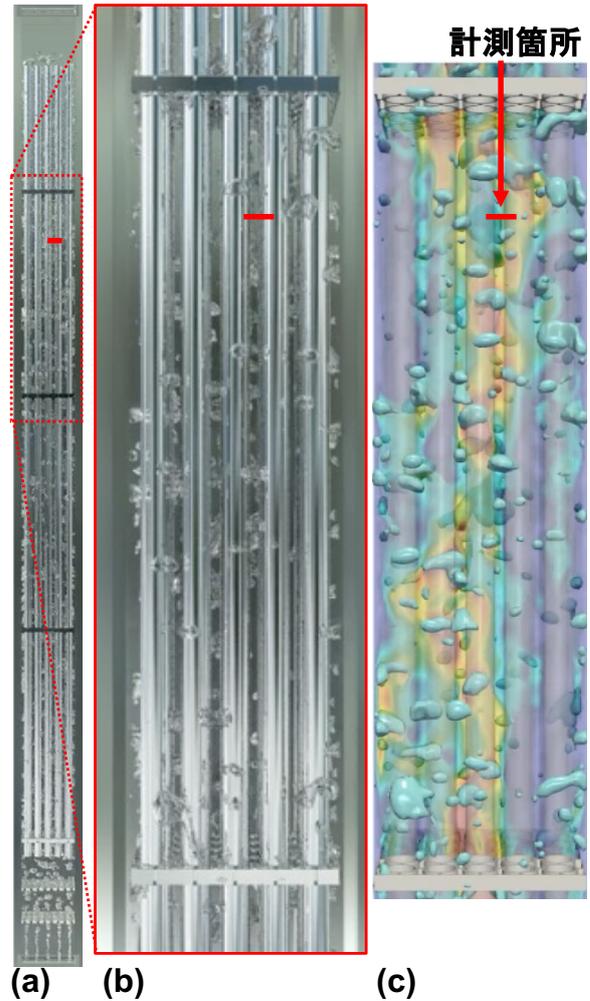


図5 (a) 5x5 バンドル計算体系, (b) 計測箇所近傍, (c) バンドル間断面の速度分布

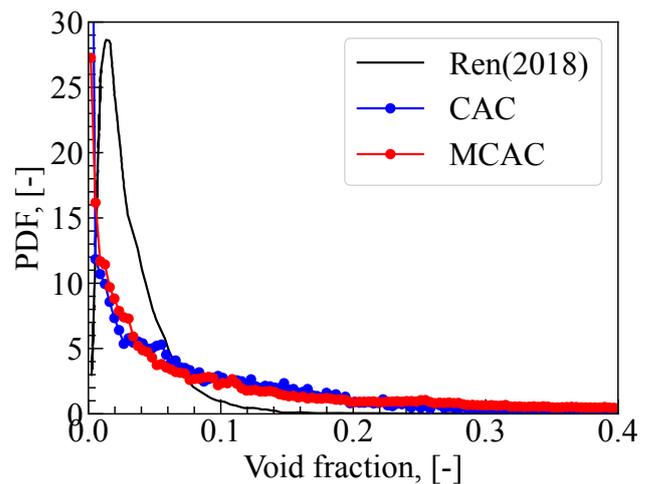


図6 サブチャンネル内のボイド率の確率分布

図5に 5x5 バンドル解析の(a)計算体系全体, (b)ボイド率計測箇所近傍の拡大図, (c)バンドル間断面の速度分布の様子を示す。計算条件としてブロック構造 AMR 格子版の JUPITER-AMR に 1.09 mm 格子解像度 (64 x 64 x 1088) を設定し、空気および水

の見かけ速度 $j_i=0.10\text{m/s}$, $j_g=0.034\text{m/s}$ を計算領域下部のオリフィスから流入させ、10 秒間（約 60 万ステップ）の解析を実施した。統計量としてサブチャンネル内のボイド率の確率密度分布を計測し、提案手法 (MCAC) を従来手法 (CAC) および実験結果 [Ren et al., Meas. Sci. Technol., 2018] と比較した (図 6)。流動様式としてボイド率が 0.0 付近にピークをもつ気泡流が観測された。CAC や 2021 年度以前の結果 (図 3) と比較してピークが MCAC で改善されたが、全体的な分布は実験結果と一致せず、ボイド率が高めの結果となった。気泡上昇計算結果の界面の動きを観察すると、オリフィスから流入した気泡は周りの気泡との合体を繰り返しながら上昇しており、特に流路中央にて連鎖的な合体が多く観測された。Phase Field 法をはじめとする界面捕獲手法では数格子程度まで接近した気泡同士は物理条件とは関係なく合体してしまうという特徴があり、ボイド率の増大に繋がったと考えている。

(c) Multi-Phase Field 法を用いたバンドル体系解析

気泡同士の非物理的な合体を抑制し、バンドル体系解析におけるボイド率の解析精度を向上させる目的で CAC-type の Multi-Phase Field (MPF) 法の導入に着手した。

従来の MPF 法は複数の相の合計値は保存するが、個別の相は保存しないという特徴があり、バンドル体系解析のように長距離・長時間解析を実施すると気泡が消滅する可能性があるという問題があった。そこで、基礎方程式を保存形式に修正することで、相の合計値だけでなく個別の相も保存させることに成功した。検証テストとして、3 相の 2 次元界面移流計算を実施し、保存していることを確認した。

従来の界面捕獲手法で発生していた「気泡同士の非物理的な合体」を抑制する効果の検証として、水平に並んだ 2 つの気泡上昇解析を実施した。先行研究 [Zhang et al., Phys. Rev. Fluids, 2018] の報告によると、実験で観測された気泡同士の反発現象を計算で再現するためには界面付近の格子解像度を気泡直径に対して $1/1600$ 以下にする必要があるが、実問題においてそのような高解像度計算を実施すること

は困難である。そこで、開発した保存型 MPF 法を気泡上昇計算に適用し、気泡反発の再現を試みたところ Zhang(2018) らの計算結果の $1/50$ の解像度で再現可能であることが明らかになった (図 7) [研究成果 4]。

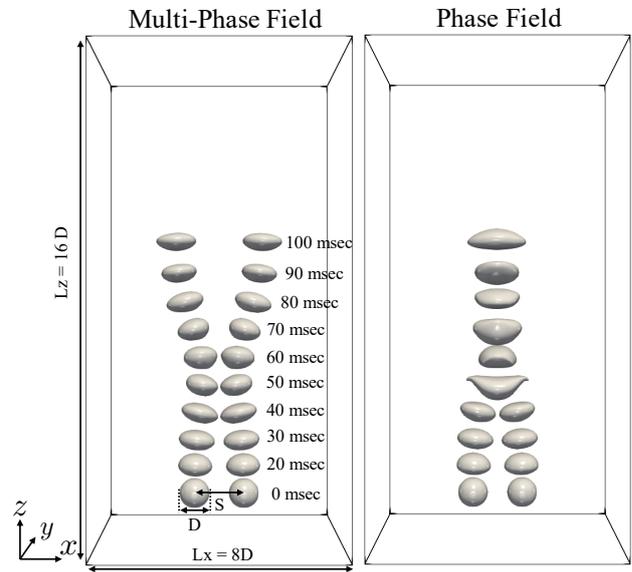


図 7 MPF および PF を用いた 2 つの気泡上昇の軌跡 ($D=2.8\text{mm}$, $S=1.65D$, $D=32\Delta x$)。

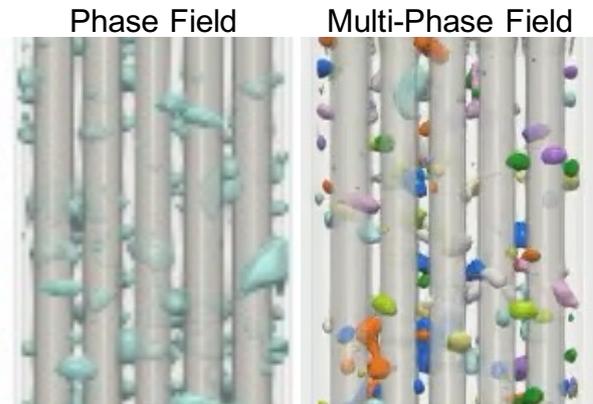


図 8 バンドル体系解析における気泡界面の様子 MPF を用いたバンドル体系解析に適用するためには数千個以上の気泡を個別に計算する必要があり、Active Parameter Tracking (APT) 法による省メモリ化を用いないと計算はできない。現在、解析コードに APT を実装していないため、10 相 (水 1 相、気泡 9 相) を用いた試し計算を実施して気泡サイズの分布を PF の結果と比較した (図 8)。MPF の結果で同じ色の気泡合体が確認されるものの、気泡合体が抑制された事によって PF よりもサイズの小さな気泡が分布することを確認した。

6. 進捗状況の自己評価と今後の展望

2022 年度は、(a)Poisson 解法の最適化、(b)Phase Field 法を適用したバンドル体系の解析、および (c)Multi-Phase Field 法を適用したバンドル体系解析、を実施した。

(a)の Poisson 解法の最適化では、混合精度前処理を fp16 や bf16 のような低精度で計算する際に収束性が著しく低下することがある問題を、対角優位丸めによるデータ変換を用いることで解決した。今後は気液二相流体解析のような収束性が厳しい問題に対して本手法を適用し、バンドル体系解析の高速化を実施する。

(b)の Phase Field 法を適用したバンドル体系の解析では、まず Phase Field 変数の最適化を実施した。局所的な速度場から最適なモビリティを適用できるように、モビリティに空間分布を仮定した手法 (MCAC) を提案し、界面捕獲法の精度を向上した。本手法を用いて原子力工学分野の CFD 解析である 5x5 バンドル体系解析を実施し、ボイド率の確率密度関数を評価した結果、2021 年度以前の結果を改善することができたが、ボイド率が 0.1 以上の分布を過大評価している。この原因として、2~3 格子程度まで接近した気泡の非物理的な合体が考えられるが、通常界面捕獲法による解決は難しい。そこで、個別の気泡に対して独立に界面捕獲を行う Multi-Phase Field 法を適用し、その合体を制御するモデルを構築することでボイド率分布を改善できると考えている。

(c)の Multi-Phase Field 法を適用したバンドル体系解析では、相全体の合計値だけでなく個別の相も保存するような基礎方程式の修正や、気泡反発現象の再現などの基本的な検証を実施した。バンドル体系解析では数千以上の気泡を計算する必要があるため、Active Parameter Tracking (APT) 法と呼ばれる省メモリ化手法を実装しなければならないが、本年度の研究では未実装であるため、MPF によるバンドル体系解析は未達となった。2022 年度の継続課題にて、APT による省メモリ手法を実装や気泡上昇計算に対する PF 変数の最適化、流入出境界条件の最適

化を実施し、バンドル体系解析の更なる高精度化を目指す予定である。

7. 研究業績

(2) 国際会議プロシーディングス (査読あり)

T. Ina, Y. Idomura, T. Imamura, and N. Onodera, "A new data conversion method for mixed precision Krylov solvers with FP16/BF16 Jacobi preconditioners", HPC Asia 2023(2/27-3/2, Singapore).

(4) 国内会議(査読なし)

杉原健太、小野寺直幸、井戸村泰宏、山下晋、"マルチフェーズフィールド法を用いた気液二相流解析"、第 36 回数値流体力学シンポジウム (12/14-16、オンライン)