

jh230031

原子力気液二相流体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界面モデルの高度化に向けて、気泡上昇計算における Phase Field 変数の最適化や気泡流入条件の改良、Multi-Phase Field 法を用いた界面捕獲手法の高度化を実施した。基礎検証として円管内気泡流解析に開発手法を適用し、ボイド率分布および平均流速分布を実験と比較した結果、定量的に良い一致が得られた。

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

東京大学 情報基盤センター

(2) 課題分野

大規模計算科学課題分野

(3) 共同研究分野(HPCI 資源利用課題のみ)

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。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特性があるため、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 Multi-Phase Field 法を導入し、気泡上昇問題に適した Phase Field 変数や気泡流入条件の最適化なども実施することによりバンドル体系解析の解析精度向上を目指す。

本報告では GPU スパコンに適した Multi-Phase Field 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シミュレーションを可能にする。基礎検証として円管内の気泡流解析を実施し、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。

3. 当拠点の公募型共同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、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 向けの高高速化として、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 解法の高高速化とバンドル体系の気液二相流解析を以下に示す。

(a) 圧力 Poisson 解法の高高速化・安定化

ブロック型 AMR 法を適用した直交格子に対して、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) 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 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。そこで 2021 年度課題にて混合精度の前処理手法を用いた高速化を実施

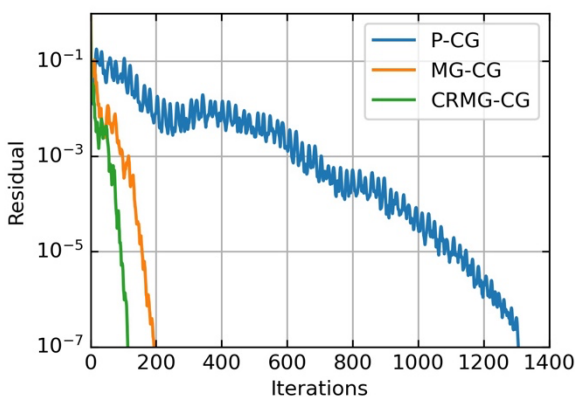


図 1 8x8 バンドル体系に対する Poisson 解法の収束履歴。1024x1024x3072 格子相当。

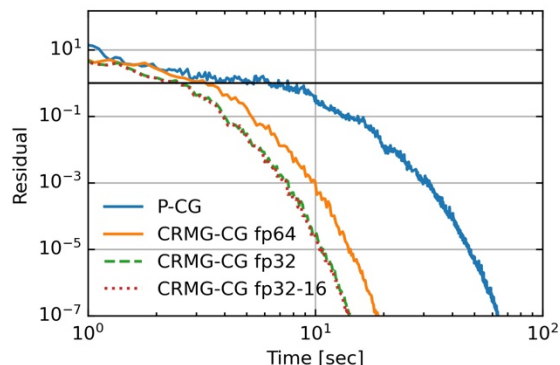


図 2 P-CG 法および CRMG-CG 法 (倍精度計算 fp64、単精度計算 fp32：単精度計算-半精度通信 fp32-16) の収束履歴)

した[参考文献 2]。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。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。

2022 年度には低精度演算における収束性の悪化を防ぐために、対角優位丸めによる安定化を実施した。ヤコビ前処理を用いた混合精度クリロフソルバは、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 回だけ呼ばれる為、コストは無視できるほど小さい。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[参考文献 3]

(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、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。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される結果となった。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。

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、2022 年度には Phase Field 変数の最適化を実施し、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、界面拡散の大きさに応じて空間的に変化させる手法を適用した結果、ボイド率分布は僅かに改善したものの実験結果を再現することはできなかった。界面の運動を詳細に解析した結果、シミュレーションでは気泡同士の

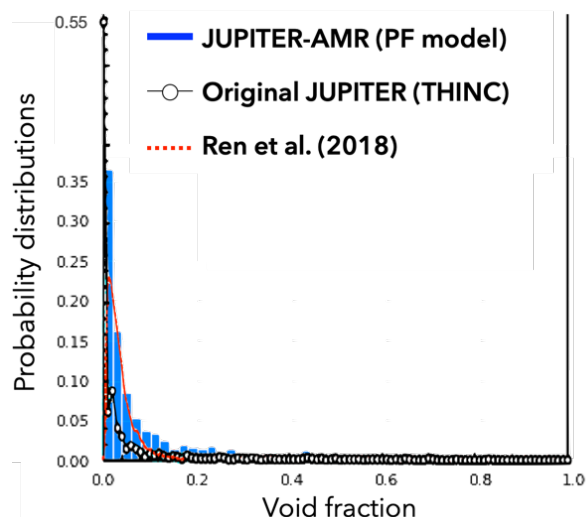


図 3 サブチャンネル内のボイド率の確率密度分布。JUPITER-AMR (0.58mm 解像度)、直交格子版 JUPITER (1mm 解像度)、実験結果

合体頻度が高く、連鎖的に合体を繰り返すことで流動様式が変化してしまう事が明らかになった。界面捕獲法では 2～3 格子程度まで接近した界面同士は数値的に合体してしまい、実験で観測される気泡反発現象を再現できないことが上記の原因と考えられる。そこで、気泡合体を制限可能な界面捕獲手法である Multi-Phase Field 法の導入を開始し、基礎検証として 2 つの気泡反発現象の再現に成功した。

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] 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)
- [3] 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)

5. 今年度の研究成果の詳細

本課題で実施する(A)気泡上昇計算における Phase field 変数の最適化、(B)バンドル体系解析における流入境界条件の最適化、(C)Multi-phase field 法を適用したバンドル体系解析、の研究成果の詳細を以下に記す。

(A)気泡上昇計算におけるフェーズフィールド変数の最適化

従来の Phase Field 法では、気液界面幅の修正強度に関するパラメータ γ を全計算領域に対して一様に設定されていた。また、 γ の大きさは小さすぎると界面幅が広がってしまい、大きすぎると界面幅は一定になるが界面形状の精度が低下するため、適切な値は計算毎に経験的に $\gamma = 0.7|u_{max}|$ のように決められてきた。本研究では、界面幅の拡散は移流計算の数値粘性と変形速度場の 2 点に起因すると考え、 $\gamma(x) = M|u(x)| + B|S| \delta$ のように速度分布 $u(x)$ と変形速度テンソル S に比例するように空間分布を設定する手法を考案した。本手法は 2 次元界面移流計算ではパラメータ最適化した従来手法よりも 31-37% 誤差を低減し、単一気泡上昇計算では同等以上の計算結果となる事が示された。本成果は JAEA の研究報告書にて公開した [研究成果 4]。

(B)バンドル体系解析における流入境界条件の最適化

バンドル体系解析では計算領域下部に流入境界としてオリフィスを設定しており、2022 年度までの計算ではオリフィス領域の計算格子に気相、それ以外は液相の VOF および流速を固定していた。この方法では流入する気泡のサイズをコントロールする事が難しく、流入時点で実験よりも大きな気泡が生成されてしまう問題があった。2023 年度はその問題を解決するために図 4 のように水と空気を同じオリフィスから交互に流入させる手法を考案し、流入気泡サイズのコントロールが可能となった。また、本手法を用いてバンドル体系解析を実施した (図 5) が、気泡同士の連鎖的な合体によって大きな気泡が発生し、実験のボイド率分布を

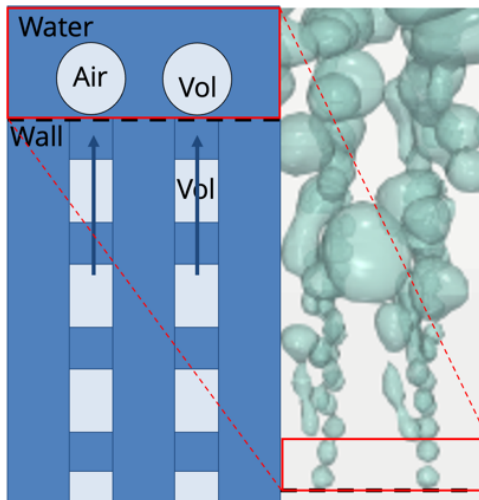


図 4 オリフィス流入境界条件の改良

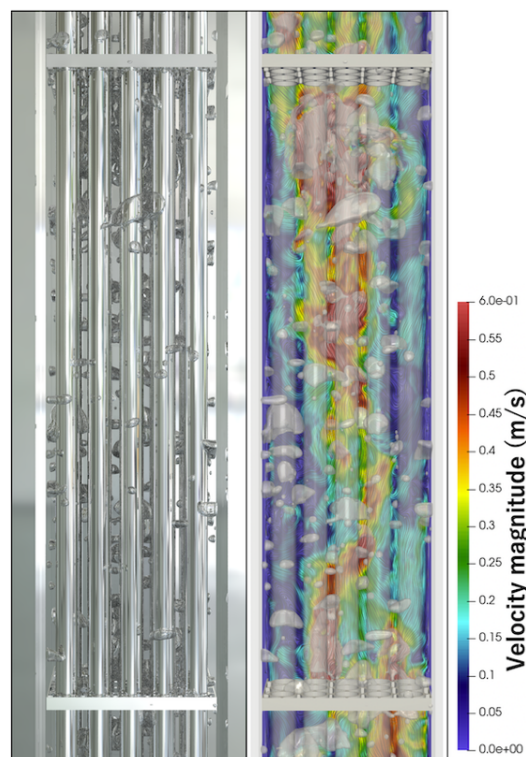


図 5 バンドル計算体系解析。気液界面やバンドル間断面の速度分布の様子。

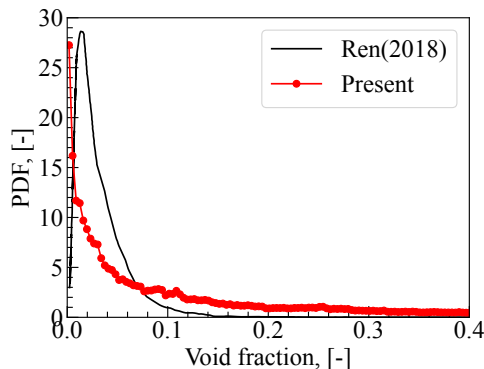


図 6 ボイド率の確率密度関数

再現することはできなかった (図 6)。

(C) マルチフェーズフィールド法を適用したバンドル体系の実証解析

従来の界面捕獲法を用いたバンドル体系解析では気泡合体が連鎖的に発生して気泡径が過大評価された流動様式になってしまう問題があった。そこで、Multi-Phase Field 法を用いて非物理的な気泡合体を防ぎ、流動様式やボイド率の解析精度向上を目指す。数百を超えるような多数の気泡を取り扱う場合、ナイーブな実装では気泡の数と同数の変数配列が必要になってしまうため、省メモリ化手法の導入が必須となる。本研究では GPU スパコン向けにコード開発を進めているため、従来手法と比べてステンシル計算におけるメモリアクセス効率を向上させた Ordered Active Parameter Tracking(OAPT)法を適用して省メモリ化を実現した。

基礎検証問題として直径 $D=40\text{mm}$ の円管内の気泡流解析を実施した (図 7)。Colin らの実験 (2012) 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%、気泡直径 4.2mm の気泡 153 個をランダムに配置し、圧力勾配 $dp/dz=8662\text{ Pa/m}$ を設定した。計算領域は $(L_x, L_y, L_z)=(D, D, \pi D)$ 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。図 8 は Phase ID で色付けされた気泡界面の様子を示している。Multi-Phase Field 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、マルチカラー型の手法が必要となる。図 8(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 番目のメモリ層は液相に割り当て、残りの 6 つのメモリ層は 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ともに変化するが、本計算では 4 階層程度で十分であることがわかった。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、



図 7 円管内気泡流計算

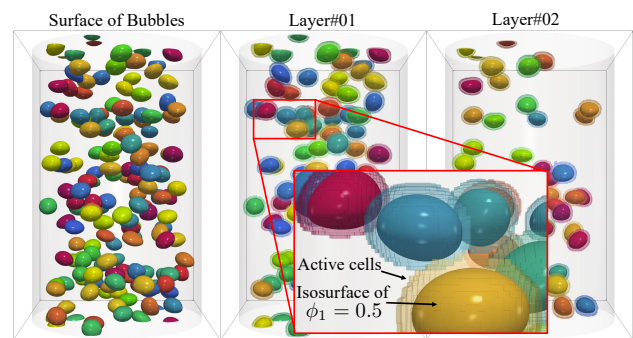


図 8 メモリ階層毎の気泡界面とアクティブ格子

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 Phase Field 法と同様にしてステンシル計算を行うことができる。図 8 の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 9 はボイド率 α と平均流速 U の半径分布を示す。ここで、 r_+ は規格化した半径であり、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央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。また、流速分布も妥当な一致を示しており (図 10) 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 11 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%を閉めているが、10 ステップに 1 回実行しているため、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を行っており高コストとなっている為である。また、質量補正では相数(Nb=153)分の多くの総和計算が必要となるため高コストとなる。

6. 進捗状況の自己評価と今後の展望

本年度は(A)気泡上昇計算における Phase field 変数の最適化、(B)バンドル体系解析における流入境界条件の最適化、(C)Multi-phase field 法を適用したバンドル体系解析、の 3 項目を実施した。

(A)と(B)については 100%達成できたが(C)については要素技術のコード開発と基礎検証まで完了したが予定していたバンドル体系解析までは実施できなかったため達成度としては 60%と考えている。

今後の展望としては、引き続きバンドル体系の解析精度向上に繋がる要素技術の開発を進める予定である。本年度は気泡同士の合体を制限した状況下での解析を実施したが、次年度課題では気泡合体モデルを開発して気泡合体も発生する気泡の集団的挙動の解析精度向上を目指す。流動様式のシームレスな変化を正しく再現することによりバンドル体系のボイド率解析精度向上が期待できる。

7. 研究業績

(4) 国内会議発表（査読なし）

- [1]杉原 健太、小野寺 直幸、井戸村 泰宏、山下 晋、"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 (5/31-6/2、つくば市)
- [2]杉原健太、小野寺直幸、井戸村泰宏、山下晋、"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 (12/15-17、名古屋)
- [3]杉原健太、小野寺直幸、井戸村泰宏、シトンプル ヨス、山下晋、"Phase Field 法を用いた気液二

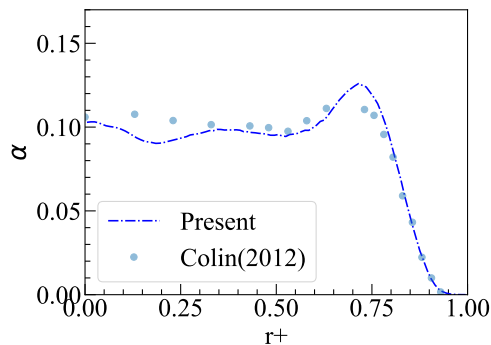


図 9 円管内気泡流の半径方向のボイド率分布

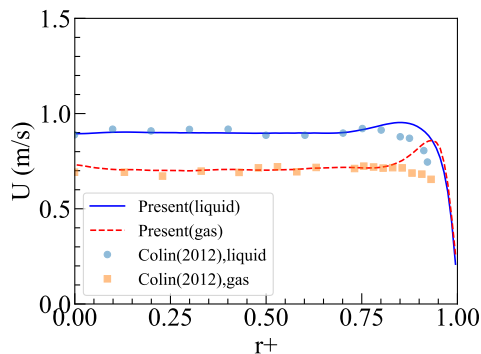


図 10 円管内気泡流の半径方向の平均流速分布

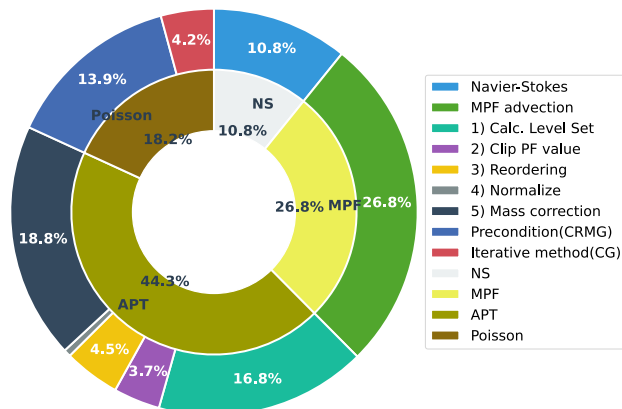


図 11 気泡流解析の計算コストの割合

相流解析"、日本原子力学会 2024 年春の年会 (3/26-28、東大阪)

(6) その他（特許，プレスリリース，著書等）

- [4] K.Sugihara, N.Onodera, Y.Idomura and S.Yamashita, "Optimized phase-field modeling using a modified conservative Allen-Cahn equation for two-phase flows", JAEA-Research-2023-006.
- [5] 受賞：杉原健太、小野寺直幸、井戸村泰宏、山下晋、「Phase Field 法を用いた 5x5 バンドル体系の気泡流解析」、日本計算工学会 第 28 回計算工学講演会グラフィックスアワード特別賞 (Visual Computing 賞) (6/1)