

圧縮性 Navier-Stokes 方程式の定式化による気液二相流体計算の Poisson 高速化

Compressible Navier-Stokes formulation for accelerating Poisson solver of gas-liquid two-phase fluid simulations

小野寺 直幸¹⁾, 杉原 健太¹⁾, 伊奈 拓也¹⁾, 井戸村 泰宏¹⁾
Naoyuki Onodera, Kenta Sugihara, Takuya Ina, and Yasuhiro Idomura

¹⁾日本原子力研究開発機構 (千葉県柏市若柴 178-4 柏の葉キャンパス 148 街区 4, E-mail: onodera.naoyuki@jaea.go.jp)

Gas-liquid two-phase flow analysis is one of the most important research topics in nuclear engineering because it is essential for safety evaluation and reactor design. However, it requires large-scale multi-scale simulations, and advanced numerical approaches are needed. To meet this challenge, we have continued to develop the Poisson solver for the multiphase flow analysis code JUPITER. In this study, we aim to improve the convergence of the pressure Poisson solver by formulating the Navier-Stokes equation without using the incompressible approximation. The convergence performance was measured on 8 GPUs for bubbly flow analysis in a circular tube. The results show that the computation time and the number of iterations are reduced by half compared to those using the incompressible approximation, which indicates the usefulness of the formulation in the present study.

Key Words : GPU, Multigrid preconditioning, Poisson solver, Compressible Navier-Stokes equation, Two-phase flow

1. 緒言

気液二相流体解析は炉設計や安全性評価に適用できるなど、原子力工学分野において重要な研究テーマの一つである。特に、原子炉内の多相流体解析では、巨大かつ複雑な構造物と細かな気泡の合体・分裂等を捉えたマルチスケールの大規模計算が必要となる。そのような課題に対して、日本原子力機構 (JAEA) では、多相多成分熱流動解析コード JUPITER[1] に対する Poisson 解法の開発を進めている。先行研究 [2] では、複雑物体に対して効率的な解析が可能な適合細分化 (AMR) 格子、およびそれに対するマルチグリッド (MG) 前処理手法を開発することで、元の MG 法無しのクリロフ部分空間 (CG) 法と比較して、約 5.9 倍の高速化を達成した。しかしながら、依然として圧力 Poisson 解法の計算時間の割合が多く、更なる高速化が求められている。

本研究では支配方程式となる Navier-Stokes (NS) 方程式に対して、非圧縮性の近似を行わないことで、圧力 Poisson 方程式の行列の性質が良くなることに着目し、それによる行列の反復回数の削減および高速化に期待する。気液二相流体問題の検証として、円管内の気泡流解析を実施し、従来の非圧縮性近似を行った定式化との収束性および計算速度を評価する。

2. 二相流体解析手法 JUPITER-AMR

(1) 支配方程式

界面捕獲法を用いた気液二相流の解析手法は、気体と液体を密度や粘性などの物性値が異なるだけの同じ流体として扱い、気体と液体の界面は識別関数により区別する。気液界面の表現手法として、気体・液体の流体の体積率分布を用いる VOF 法や、界面からの距離関

数で陰的に表現する Level-Set 法などが代表的である。本研究では VOF 法の一つであり体積保存性と界面形状の滑らかさの両方を満足する Phase Field (PF) 法に基づいて、流体の体積率の時間発展を行う。

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{\partial u_j \phi}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\gamma \epsilon \frac{\partial \phi}{\partial x_j} - \gamma \left(\phi(1-\phi) \frac{\partial \phi}{\partial x_j} / \left| \frac{\partial \phi}{\partial x} \right| \right) \right) \quad (1)$$

ϕ は流体率であり 0 ~ 1 の値をとる。流体の物性値である密度 ρ 、粘性係数 μ 、および、音速 c は、流体率から空気と水の物性値の線形補間により計算する。

$$\rho = \rho_l \phi + \rho_g (1 - \phi), \quad (2)$$

$$\mu = \mu_l \phi + \mu_g (1 - \phi), \quad (3)$$

$$c = c_l \phi + c_g (1 - \phi). \quad (4)$$

ここで、下付き添え字 l, g は水および空気の物性値を表す。

音速に対して十分遅い現象に対する気液二相流体解析においては、NS 方程式の連続の式に非圧縮性の近似を行った定式化が一般的である。一方で、近年では非圧縮性の近似を行わずに、速度や圧力項に影響を及ぼす音波項を陽的に取り扱う手法が提案されており [3]、気液二相流体解析において有効性が確認されている [4]。本研究でも、同様に、非圧縮性の近似を行わない NS 方程式の速度・圧力・温度場の時間発展式を解く。

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\partial \rho}{\partial p} & \frac{\partial \rho}{\partial T} \\ 0 & \frac{\partial h}{\partial p} - \frac{1}{\rho} & \frac{\partial h}{\partial T} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{Du_i}{Dt} \\ \frac{Dp}{Dt} \\ \frac{DT}{Dt} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_j} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} \\ -\rho \frac{\partial u_j}{\partial x_j} \\ \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(k \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) + \frac{\sigma_{ij}}{\rho} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \end{pmatrix}, \quad (5)$$

ここで演算子 $D/Dt = \partial/\partial t + u_j \partial/\partial x_j$ はラグランジュ微分、 σ_{ij} は粘性応力テンソルである。

$$\sigma_{ij} = 2\mu \left(S_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right). \quad (6)$$

(2) SMAC 法による圧力分離解法

NS 方程式の時間発展の定式化として、速度の CFD 条件や粘性の時間刻み幅の安定性条件に関連した項と、音速 c により計算が不安定となる項を分離した、SMAC 型の圧力分離解法を用いた。式 (5) において、陽的に時間発展が可能な項として、ラグランジュ微分項、速度に対する右辺第二項の粘性応力項、温度に対する第一項・第二項が挙げられる。ここで、上記を解析した後の中間値 u_i^*, p^*, T^* を得たとする。この中間値を用いて、残りの音速に関連した項に対して、陰的な時間発展法を適用すると、

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\partial p}{\partial p} & \frac{\partial p}{\partial T} \\ 0 & \frac{\partial h}{\partial p} - \frac{1}{\rho} & \frac{\partial h}{\partial T} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{u_i^{n+1} - u_i^*}{\Delta t} \\ \frac{p^{n+1} - p^*}{\Delta t} \\ \frac{T^{n+1} - T^*}{\Delta t} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{\rho^{n+1}} \frac{\partial p^{n+1}}{\partial x_j} \\ -\rho^{n+1} \frac{\partial u_j^{n+1}}{\partial x_j} \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (7)$$

が得られる。ここで、左辺の Jacobian は、理想気体を仮定すると、

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial p}{\partial p} & \frac{\partial p}{\partial T} \\ \frac{\partial h}{\partial p} - \frac{1}{\rho} & \frac{\partial h}{\partial T} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\rho}{p} & -\frac{\rho}{T} \\ -\frac{1}{\rho} & C_p \end{pmatrix}, \quad (8)$$

となり、その逆行列は、

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial p}{\partial p} & \frac{\partial p}{\partial T} \\ \frac{\partial h}{\partial p} - \frac{1}{\rho} & \frac{\partial h}{\partial T} \end{pmatrix}^{-1} = \begin{pmatrix} c^2 & \frac{1}{C_v} \frac{p}{T} \\ (\gamma - 1) \frac{T}{\rho} & \frac{1}{C_v} \end{pmatrix}, \quad (9)$$

となる。

式 (7) を SMAC 型の圧力分離解法に基づく定式化により、圧力勾配により更新される速度の中間値 u^{**} および圧力の修正値 δp を用いて整理すると、以下の式となる。

$$u_i^{**} = u_i^* - \frac{1}{\rho^{n+1}} \frac{\partial p^*}{\partial x} \Delta t, \quad (10)$$

$$u_i^{n+1} = u_i^{**} - \frac{1}{\rho^{n+1}} \frac{\partial \delta p}{\partial x} \Delta t, \quad (11)$$

$$\delta p = -\rho^{n+1} c^2 \frac{\partial u_j^{n+1}}{\partial x_j} \Delta t, \quad (12)$$

$$p^{n+1} = p^* + \delta p. \quad (13)$$

(3) 圧力 Poisson 方程式

式 (12) の右辺の速度場の発散項に対して、式 (11) を代入し、圧力の修正値 δp に対して整理すると、圧力 Poisson 方程式が導かれる。

$$\left(\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{1}{\rho^{n+1}} \frac{\partial}{\partial x_j} \right) - \frac{1}{\rho^{n+1} c^2 \Delta t^2} \right) \delta p = \frac{1}{\Delta t} \frac{\partial u_j^{**}}{\partial x_j}, \quad (14)$$

上記の式は、非圧縮性流体に対する圧力 Poisson 方程式の左辺（行列の係数）に対して、音速や時間刻み幅に関

する項が対角項に加わった式である。音速を無限大と仮定した場合には、左辺の第二項が零となり、下記の非圧縮性流体に対する圧力 Poisson 方程式が導かれる。

$$\left(\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{1}{\rho^{n+1}} \frac{\partial}{\partial x_j} \right) \right) \delta p = \frac{1}{\Delta t} \frac{\partial u_j^{**}}{\partial x_j}, \quad (15)$$

非圧縮性の近似をしている従来手法に対する利点として、式 (14) において、ステンシル i, j, k 上の圧力の修正値 $\delta p_{i,j,k}$ の係数となる左辺第一項と左辺第二項は同符号となり、周囲のステンシルに対する係数と比較して、優対角行列となるため、収束性が良くなることが期待できる。また、音速が水の音速のように非常に大きい ($c = 1500 \text{ m/s}$) 場合においては、加わる対角項が非常に小さいものとなるが、圧力 Poisson 方程式の中心差分は既約優対角となり、境界以外では非対角要素の絶対値の和と対角要素の絶対値が等しくなるため、僅かな修正量であっても数値安定性を改善することが期待できる [5]。

(4) 圧力 Poisson 解法

圧力 Poisson 方程式に対して、2 次精度の中心差分法を用いて離散化し、反復解法として 3 段の V-cycle MG 前処理付き CG 法を適用した。V-cycle 内の前処理手法として GPU キャッシュを再利用した反復解法 (CR-SOR) 法 [2] を採用した。計算格子として、ブロック型 AMR 法の本構造の葉ノード (Leaf) に 8^3 格子を割り当てると共に、MG 法の格子には、Leaf の格子点数を 8^3 (Lv.0)、 4^3 (Lv.1)、 2^3 (Lv.2) と設定した。表 1 に V-cycle の各段での反復および内部反復回数を示す。

3. 円管内の気泡流解析の速度測定

Poisson 解法の性能測定として、直径 $D = 40 \text{ mm}$ の円管内の気泡流解析を実施した。温度は一樣であると仮定するとともに、空気と水の物性値として、密度を $(\rho_g, \rho_l) = (1.205, 1000) \text{ kg/m}^3$ 、音速を $(c_g, c_l) = (340, 1500) \text{ m/s}$ を設定した。計算領域は $(L_x, L_y, L_z) = (D, D, \pi D)$ 、格子解像度は $\Delta x = D/192$ を設定するとともに、 z 方向に対して周期境界条件を与えた。時間刻み幅は $CFL = 0.1$ を満たすように変化させた。

図 1 に圧縮性および非圧縮性 NS に対する Poisson 解法の収束履歴を示す。横軸が収束回数、縦軸が残差となる。計算結果から、非圧縮性近似を行わないことで、収束時間が 0.44 から 0.20 秒への短縮、および、反復回数が 69 から 32 回に改善することが確認され、二倍以上の高速化が達成された。

表-1 Configuration of the Cache-reuse SOR (CR-SOR) method at each MG level.

CR-SOR ($\omega = 1$) MG level	(Outer) Iterations	Internal iterations
Fine	4×2 stages = 8	8
Middle	4×2 stages = 8	4
Coarse	4×8 types = 32	4

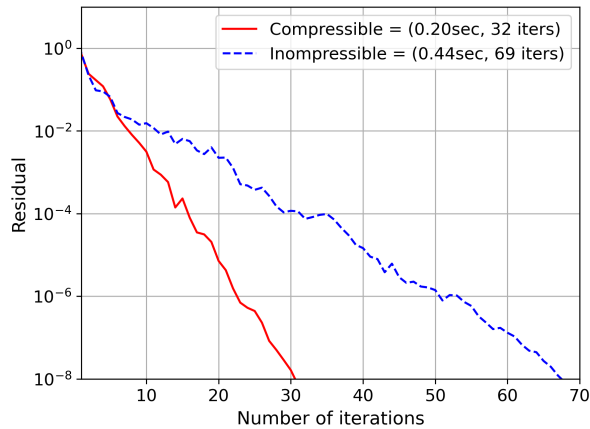


図-1 Convergence histories of the CRMG-CG solvers in compressible and incompressible formulations using 8 GPUs.

4. 結言

非圧縮性の近似を行わない NS 方程式の定式化により、陰的な時間発展で現れる圧力 Poisson 方程式の行列を優対角とすることで、行列の反復計算の収束性の改善を目指した。円管内の気泡流解析において、8 台の GPU を用いた収束性能測定では、非圧縮性近似を行ったものに対して、半分の計算時間および収束回数となり、本研究の定式化の有用性が示された。今後は、Poisson 方程式の対角項にある音速と行列の性質（例えば条件数）の関係に対して、より詳細な調査を予定している。

謝辞 本研究の一部は科学研究費補助金・基盤研究(C) 課題番号 24K14973、学際大規模情報基盤共同利用・共同研

究拠点課題番号:jh240071 から支援を頂いた。本計算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。記して謝意を表す。

参考文献

- [1] Susumu Yamashita, Takuya Ina, Yasuhiro Idomura, and Hiroyuki Yoshida. A numerical simulation method for molten material behavior in nuclear reactors. *Nuclear Engineering and Design*, Vol. 322, pp. 301–312, 2017.
- [2] 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, 01 2021.
- [3] Takashi Yabe and Pei-Yuan Wang. Unified numerical procedure for compressible and incompressible fluid. *Journal of the Physical Society of Japan*, Vol. 60, No. 7, pp. 2105–2108, 1991. doi: 10.1143/JPSJ.60.2105.
- [4] Matsushita Shintaro and Aoki Takayuki. Gas-liquid two-phase flows simulation based on weakly compressible scheme with interface-adapted amr method. *Journal of Computational Physics*, Vol. 445, p. 110605, 2021.
- [5] Takuya Ina, Yasuhiro Idomura, Toshiyuki Imamura, and Naoyuki Onodera. A new data conversion method for mixed precision krylov solvers with fp16/bf16 jacobi preconditioners. *Proceedings of the International Conference on High Performance Computing in Asia-Pacific Region*, 2023.