



1. 研究背景と研究目的

放射性物質の拡散予測シミュレーションは社会的関心が非常に高く、迅速性および正確性が求められている。日本における数10km四方の予測システムとして、緊急時環境線量情報予測システム(SPEEDI)が用いられており、観測されたデータを基に放射性物質の拡散挙動を計算する。日本原子力研究開発機構では、放射性物質の放出源推定を目的としてOpenFoamに基づく局地的移行解析を進めているが、人が生活する路地や建物等を含んだ高解像度解析を行うためには、計算機性能を最大限に引き出すことと可能な解析手法の開発が必須となる。また、高密度に観測されているモニタリングデータを有効活用する点においても、高解像度計算が望まれる。本課題ではGPUスパコンに適した格子ボルツマン法によるラージエディ・シミュレーション手法を開発し、迅速性と精度を兼ね備えたリアルタイム予測システムの確立を目指す。

2. 研究計画

格子ボルツマン法を用いた高速な物質拡散シミュレーションの実現に向けて、GPUスパコンであるTSUBAMEに最適化した解析手法を開発する。実問題への適用を考え、データ同化手法を用いて観測値を利用する。最終的には構築した解析手法にて大規模計算を実施し有効性を確認する事で、解析および観測技術の発展へ貢献する。以下に、具体的な研究項目を示す。

- ・データ同化手法の導入および検証
- ・適合細分化格子(AMR)法の導入による高速化
- ・大気環境アセスメント手法のガイドラインに沿った解析モデルの検証
- ・物質拡散シミュレーションの実施および観測技術への貢献

3. 共同研究に関する情報

- (1)共同研究拠点：東京工業大学
 (2)共同研究分野：超大規模数値計算系応用分野
 (3)研究グループ：代表者 小野寺 直幸(日本原子力研究開発機構)
 副代表者 青木 尊之(東京工業大学)
 課題参加者 井戸村 泰宏(日本原子力研究開発機構)
 課題参加者 町田 昌彦(日本原子力研究開発機構)
 課題参加者 下川辺 隆史(東京大学)

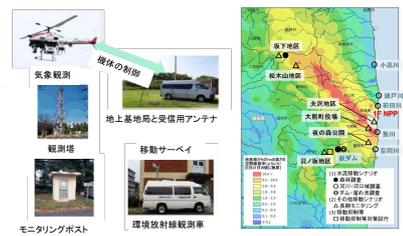
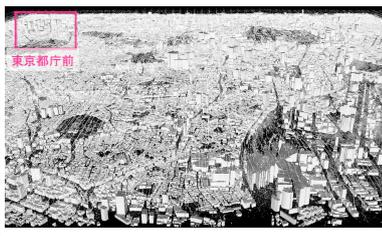
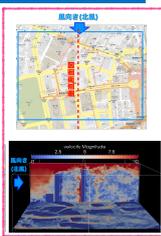
5. 研究進捗状況

5.1. TSUBAME2.0および2.5での実効性能

本課題の基となる格子ボルツマン法によるラージエディ・シミュレーションの実効性能を示す。GPUに適した格子ボルツマン法に対して、局所的な乱流モデルを適用する事で大規模並列計算が可能となり、TSUBAME2.5の3968台のGPUを用いた計算において1.14PFlops(単精度)の実効性能を達成した。この解析手法に対して、適合細分化格子(AMR)法を導入により計算時間の短縮を目指し、リアルタイムの物質拡散シミュレーション手法を開発する。

5.2. 格子ボルツマン法による物質拡散計算

本解析手法はTSUBAME2.0の4032台のGPUを用いた東京都心部10km四方の1m解像度の超大規模計算(約500億格子点)に成功している。この解析手法にデータ同化手法を導入する事で、実データを用いた物質拡散解析および物理モデルの最適化が可能となる。最終的には、得られた解析結果を基に観測位置の最適化等を提案することで、今後の観測と計算を繋いだ研究の発展に貢献する。



JAEA：福島県における放射性核種の環境中移動調査・研究より抜粋
<https://fukushima.jaea.go.jp/initiatives/cat01/pdf/project.pdf>

4.1. 格子ボルツマン法によるラージエディ・シミュレーション

格子ボルツマン法(LBM)は連続体である流体を格子点上を並進・衝突する粒子の集合と仮定し、格子上の粒子の速度分布関数に対して時間発展を行う手法である。LBMは規則的なメモリアクセスおよび高密度な演算を持つ陽的なアルゴリズムを持つため、GPUを用いた大規模計算に適している。本課題では、LBMに局所的にLESの渦粘性を求めることができるコヒーレント構造スマゴリンスキーモデルを適用する事で、高レイノルズ数の都市気流計算に対応した。

ボルツマン方程式

$$f_i(x + c_i \Delta t, t + \Delta t) = f_i(x, t) - \frac{1}{\tau} (f_i(x, t) - f_i^{eq}(x, t)) + F_i$$

コヒーレント構造スマゴリンスキーモデルによる渦粘性

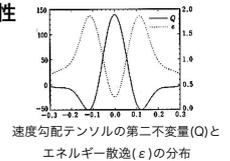
$$\tau = \frac{3\nu_*}{c^2 \Delta t} + \frac{1}{2}$$

$$\nu_* = \nu_0 + \nu_{SGS}$$

$$\nu_{SGS} = C \Delta^2 |S|$$

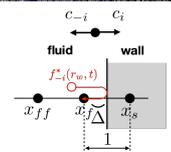
$$C = C_1 |F_{CS}|^{3/2}$$

$$F_{CS} = \frac{Q}{E} \quad (-1 \leq F_{CS} \leq 1)$$



4.2. Interpolated Bounce-back法による壁面境界条件

格子点間にある固体壁面に対して、Interpolated Bounce-back法を適用する事で2次精度の境界条件を課すことが可能となる。補間関数は局所的に構築され、速度分布関数は反射・補間により再構築される。計算中の建物データは、格子点上の符号付き距離関数にて表される。



$$f_{-i}^*(r_w, t) = 2\Delta f_i^*(r_f, t) + (1 - 2\Delta) f_i^*(r_{ff}, t) + F_{-i} \quad \Delta < \frac{1}{2}$$

$$f_{-i}^*(r_w, t) = \frac{1}{2\Delta} f_i^*(r_f, t) + \frac{(2\Delta - 1)}{2\Delta} f_{-i}^*(r_f, t) + \frac{1}{2\Delta} F_{-i} \quad \Delta \geq \frac{1}{2}$$

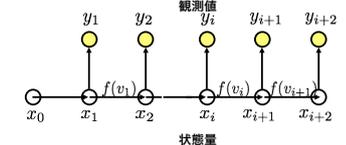
4.3. ベイズ推定を用いたデータ同化手法

ベイズ推定を用いたデータ同化手法を導入する事で、計算結果と観測結果を同化する。以上の手法を用いる事で、実データを利用した解析および解析モデルの高度化が可能となる。

観測モデルおよびシステムモデル

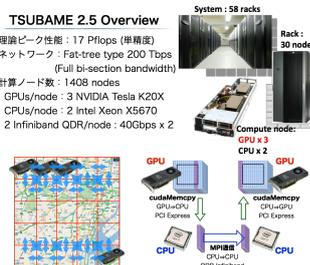
$$y_{i,j} = a_j x_i + b_j + e_j \quad e_j \sim Normal(0, \sigma_j^2)$$

$$x_i = f(x_{i-1}) + e_f \quad e_f \sim Normal(0, \sigma_f^2)$$

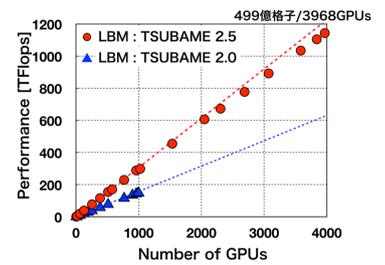


TSUBAME 2.5 Overview

- ・理論ピーク性能：17 Pflops (単精度)
- ・ネットワーク：Fat-tree type 200 Tbps (Full bi-section bandwidth)
- ・計算ノード数：140B nodes
- GPU/node：3 NVIDIA Tesla K20X
- CPU/node：2 Intel Xeon X5670
- 2 Infiniband QDR/node：40Gbps x 2



Flat MPIによる領域分割およびデータ転送



格子ボルツマン法によるLESの弱スケーリング実効性能