

jh130024-NA16

ポストペタスケールシステムを目指した 二酸化炭素地中貯留シミュレーション技術の研究開発

山本 肇 (大成建設株式会社)

概要 地球温暖化対策の二酸化炭素の地中貯留技術では、地中圧入後の CO₂ の挙動を正確にシミュレートする技術が重要になる。本共同研究ではポストペタ・エクサスケールシステム上で大規模シミュレーションを実施するために改良版「TOUGH2-MP」の高度化 (OpenMP/MPI ハイブリッド並列化, 並列メッシュ生成・領域分割手法, 最適化された並列反復法による疎行列ソルバー, 並列リアルタイム可視化手法) を実施する。本年度は現在, 最適化された並列前処理付き反復法による疎行列ソルバーを構築中である。今後は解析コード TOUGH2MP の全体にわたって OpenMP/MPI ハイブリッド並列化を施すとともに、試解析を実施して並列リアルタイム可視化手法を適用する予定である。

1. 研究の目的と意義

1-1. 研究の目的

地球温暖化対策の一つとして、火力発電所などから排出される二酸化炭素ガスを、地下深部の地層中に圧入するという二酸化炭素の地中貯留が国内外で認知されつつある。その実用化にあたっては、社会的受容の観点からも、圧入後の二酸化炭素の地中挙動を正確にシミュレートする技術の確立が重要な課題となる。

著者等は米国ローレンスバークレイ国立研究所で開発された有限体積法に基づくオープンソース多相流体シミュレータ TOUGH2-MP (Zhang et al. 2008) を元に物理モデルの追加, 疎行列ソルバーの改良を実施し、地球シミュレータ, T2K オープンスパコン (東大) を使用して最大 1 千万メッシュ規模の大規模非定常シミュレーションを実施してきた (例えば, Yamamoto et al. 2013)。改良版「TOUGH2-MP」は Flat MPI による並列化を採用しており、領域分割には METIS を使用しているため、問題規模、計算機資源の規模に制約があった。本共同研究ではポストペタスケール、エクサスケールシステム上でより詳細な大規模シミュレーションを実施するために改良版「TOUGH2-MP」の高度化 (OpenMP/MPI ハイブリッド並列化, 並列メッシュ生成・領域分割手法, 最適化された並列反復法による疎行列ソルバー, 並列リアルタイム可視化手法) を実施し、大規模二酸化炭素地中貯留シミュレーション技術の確立を図るものである。ターゲ

ットとする計算機は Fujitsu PRIMEHPC FX10 (東大) である。

1-2. 研究の意義

二酸化炭素地中貯留は地球温暖化対策の一つとして有効な手段であるが、その実施にあたっては、その 100 年～1000 年以上における長期的な安定性や副作用として生じる環境影響についても十分に吟味されなければならない。

二酸化炭素の地中貯留シミュレーションでは、CO₂ が地中にトラップされるメカニズムを考慮するために、温度や圧力条件で変化する超臨界 CO₂ の流体物性 (密度, 粘性, 地下水への溶解度) や、地下水と CO₂ の相互作用 (水相-CO₂ 相間の成分移動や二相流特性: 相対浸透率, 毛細管圧力の効果等) に伴う強い非線形性を考慮する必要がある。加えて、地中での長期的な鉱物変質や水質変化を予測するための地球化学計算との連成解析や、大量の流体圧入に伴う地盤中の応力や変形, 破壊を評価する地盤力学との連成解析が必要になっている。このようなシミュレーションは計算負荷が高いため、工学的利用はもとより、科学研究においても相当のモデルの単純化が求められるのが現状である。

本共同研究を通じて大規模二酸化炭素地中貯留シミュレーション技術を確立することによって、ポストペタスケール、エクサスケールシステム上でより詳細な大規模シミュレーションを実施する

ことが可能となり、二酸化炭素地中貯留の有効性や安全性を詳細に検討するための強力な高速計算ツールが提供できる。例えば、地層の高度な不均質性や重力不安定性によるフィンガリングや対流現象が CO₂ の長期安定性に大きな影響を与えることが指摘されているが(例えば、Ennis-King and Paterson, 2005), 非常に微細な格子解像度を要求されるため、必要とされる計算時間の問題から十分な検討がなされていない。また、二酸化炭素の地中貯留では大量の流体を地下に圧入すると、広域の地下水圧を上昇させる可能性が指摘されており、そのような周辺環境影響の解析を行う上でも大規模なシミュレーションモデルを解く必要がある。このように、高解像度・大規模モデルでの CO₂ の地中挙動解析は、これまでの計算技術では未解明な要因の科学的理解の促進や広域の環境影響評価上で重要であり、二酸化炭素回収・貯留で生じる地中での現象の科学的理解や社会的受容性の確保の面など、二酸化炭素地中貯留の実現に向けた大きなインパクトがある。

本共同研究で開発する高度化技術のうち、OpenMP/MPI ハイブリッド並列化、並列メッシュ生成・領域分割手法、最適化された並列反復法による疎行列ソルバーによってよりポストペタスケール、エクサスケールシステム上での大規模シミュレーションを高速に実施することが可能となる。また並列リアルタイム可視化手法によって、大規模シミュレーション結果をディスク上に保存することなく効率的なポスト処理が可能となる。これらの機能はオープンソースのライブラリとして公開することによって、二酸化炭素地中貯留の他にも様々な大規模シミュレーションに適用することが可能であり、ポストペタスケール、エクサスケールシステム上での大規模シミュレーションの普及に貢献するものである。

2. 当拠点公募型共同研究として実施した意義

(1) 共同研究を実施した拠点名および役割分担

本研究は、大成建設株式会社技術センターと東

京大学情報基盤センターの共同研究として実施している。役割分担は以下の通り。

- ・山本肇（大成建設）：課題代表者、TOUGH2-MP Hybrid 並列化, CO₂ 地中挙動シミュレーション実施
- ・中島研吾（東京大学）：課題副代表者、並列反復法による疎行列ソルバー最適化、並列メッシュ生成・領域分割手法、並列リアルタイム可視化手法
- ・片桐 孝洋（東京大学）：並列反復法による疎行列ソルバー最適化
- ・七井 慎一（大成建設）：OpenMP/MPI ハイブリッド並列化
- ・増岡 健太郎（大成建設）：CO₂ 地中挙動シミュレーション、OpenMP/MPI ハイブリッド並列化
- ・平塚 裕介（大成建設）：CO₂ 地中挙動シミュレーション、並列リアルタイム可視化手法

(2) 共同研究分野

超大規模数値計算系応用分野

(3) 当公募型共同研究ならではの事項など

本研究は CO₂ の地中貯留のシミュレーションを行う地下水工学の技術者と計算機科学者の共同研究である。地下水工学分野での超並列スパコンの潜在ニーズは、CO₂ 地中貯留だけでなく放射性廃棄物の地層処分などで見いだされる。これまで国内で上記分野での超並列スパコンの利用事例が少ない理由として、モデリングを担う地下水技術者と計算機科学者との技術交流が十分でない点が指摘される。本共同研究は、第一線の計算機科学者が民間の地下水技術者と直接連携する事例形成にもなっており、超並列スパコンの産業利用拡大にも貢献するものと期待できる。この点が当公募型共同研究ならではの特徴である。

3. 研究成果の詳細と当初計画の達成状況

3-1. 研究成果の詳細について

(1) 解析コード

本研究では、地中での超臨界 CO₂ の挙動を数値解析するため、多成分・多相系の地下流体シミュレータ TOUGH2 (Pruess et al., 1999) の並列化バージョンである TOUGH2-MP (Zhang et al., 2008) を用いている。二酸化炭素は地下深部約 1km に圧入するのが安全面、効率面において最適と考えられているが、その温度・圧力条件下において二酸化炭素は超臨界状態となる。超臨界状態の二酸化炭素の密度や粘性は、温度・圧力に対して敏感に変化する。また、水と二酸化炭素の相互作用（溶解、混相流特性）も考慮する必要がある。今回の計算では、ECO2N という EOS モジュールを用い、非等温系での 3 成分 (H₂O, NaCl, CO₂) 2 相 (水相、CO₂ 相) 系流体を取り扱う。

閉境界 Γ_n に囲まれた体積 V_n に対して積分されたエネルギー・質量保存則は次式で表される。

$$\frac{d}{dt} \int_{V_n} M^{\kappa} dV_n = \int_{\Gamma_n} \mathbf{F}^{\kappa} \cdot \mathbf{n} d\Gamma_n + \int_{V_n} q^{\kappa} dV_n \quad (1)$$

ここに、 M^{κ} : 成分 κ の単位体積当たりの質量 (kg/m³) またはエネルギー (J/m³)、 \mathbf{F}^{κ} : 成分 κ のフラックス (kg/m²s または J/m²s)、 q^{κ} : 成分 κ のシンク/ソース項 (kg/m³s または J/m³s)、 \mathbf{n} は部分面要素 $d\Gamma_n$ の法線ベクトルである。左辺の M^{κ} は次のように書ける。

$$\text{質量: } M^{\kappa} = \phi \sum_{\beta} S_{\beta} \rho_{\beta} X_{\beta}^{\kappa} \quad (2)$$

$$\text{熱: } M^h = (1 - \phi) \rho_R C_R T + \phi \sum_{\beta} S_{\beta} \rho_{\beta} U_{\beta} \quad (3)$$

ここに、 ϕ : 空隙率、 S_{β} : β 相の飽和度、 ρ_{β} : β 相の密度 (kg/m³)、 X_{β}^{κ} : β 相における成分 κ の質量分率、 ρ_R : 岩石粒子の密度 (kg/m³)、 T : 温度 (°C)、 C_R : 岩石の比熱 (J/kg°C)、 U_{β} : β 相の内部エネルギー (J/kg)、上付き添字の h は熱を表す。

移流による質量フラックスは、全ての相のフラックスを合計して求められる。

$$\mathbf{F}^{\kappa} \Big|_{\text{adv}} = \sum_{\beta} X_{\beta}^{\kappa} \mathbf{F}_{\beta} \quad (4)$$

β 相の質量フラックスは、次式の多成分に拡張したダルシー則により計算する。

$$\mathbf{F}_{\beta} = \rho_{\beta} \mathbf{u}_{\beta} = -k \frac{k_{r\beta} \rho_{\beta}}{\mu_{\beta}} (\nabla P_{\beta} - \rho_{\beta} \mathbf{g}) \quad (5)$$

ここに、 μ_{β} : β 相の粘性係数 (kg/ms)、 \mathbf{u}_{β} : 流速、 k : 絶対浸透率 (m²)、 $k_{r\beta}$: β 相の相対浸透率、 P_{β} : β 相の圧力 (MPa) である。熱フラックスは、熱伝導と熱対流を考慮して、

$$\mathbf{F}^h = -\lambda \nabla T + \sum_{\beta} h_{\beta} \mathbf{F}_{\beta} \quad (6)$$

ここに、 λ : 熱伝導率 (W/m°C)、 T : 温度 (°C)、 h_{β} : β 相の比エンタルピー (J/kg) である。

(1) 式を、積分差分法により時間と空間について離散化すると、次のような残差形式の非線形代数方程式が得られる。

$$R_n^{\kappa}(\mathbf{x}^{t+1}) = M_n^{\kappa}(\mathbf{x}^{t+1}) - M_n^{\kappa}(\mathbf{x}^t) - \frac{\Delta t}{V_n} \left\{ \sum_m A_{nm} F_{nm}^{\kappa}(\mathbf{x}^{t+1}) + V_n q_n^{\kappa,t+1} \right\} = 0 \quad (7)$$

ここに、ベクトル \mathbf{x}^t : 時間 t における解 (温度、圧力、飽和度など)、 R_n^{κ} : グリッドブロック n における成分 κ に関する残差、 V_n : ブロック n の体積、 q_n^{κ} : 質量またはエネルギーのシンク/ソース、 Δt : 時間ステップ、 A_{nm} : ブロック n と m が接する面積、 F_{nm} : ブロック n と m 間の平均フラックス、である。そして、(7) 式をニュートン・ラプソン法により解く。

$$-\sum_i \frac{\partial R_n^{\kappa,t+1}}{\partial x_i} \Big|_p (x_{i,p+1} - x_{i,p}) = R_n^{\kappa,t+1}(x_{i,p}) \quad (8)$$

ここに、 $x_{i,p+1}$ は i 番目の変数の p 回目の反復計算ステップでの値である。

(2) 計算性能測定

現時点までに得られた FX10 上での TOUGH2-MP の計算性能を示す。Yamamoto et al. (2013) は、図-1 に示すような節点数や自由度の異なる 4 つのモデルについて計算性能を測定している。そのうち、(1) のモデルについて、ES2 と FX10 (最適化前) での計算時間を比較した結果を図-2 に示す。これを

見ると、FX10 では 2048 コアまで良好なスケールビリティが得られている。しかし、現状では ES2 の 16 コアは FX10 の 512 コアよりも高速である。ES2 と FX10 では 1 コア当たりのピーク性能が ES2 は FX10 の約 7 倍高速 (ES2:102.4GFlops、FX10 : 14.78GFlops) である点に加え、1 コア当たりの実効メモリバンク幅も ES: 約 200GB/s/コアに対して、FX10 : 約 5GB/s/コアと約 40 倍違う点に注意が必要である。

今後は、OpenMP/MPI ハイブリッド並列化など現在実施中の最適化を施した後、再度の計算性能測定を行う予定である。

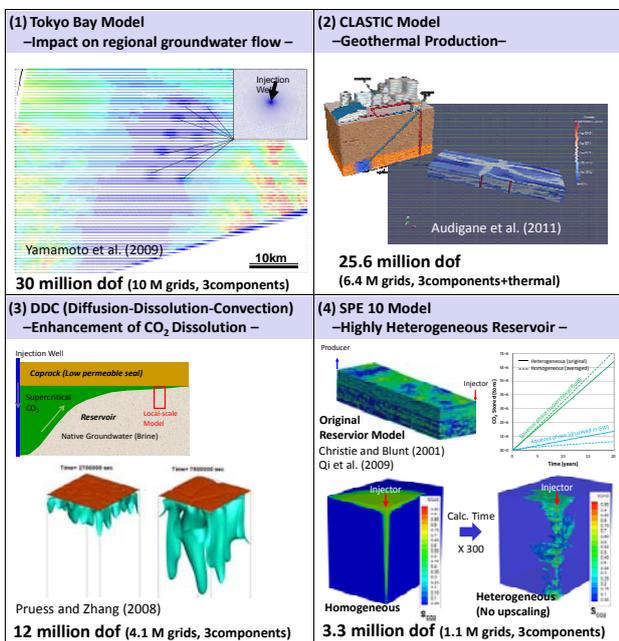


図-1 計算性能の測定に用いたモデル一覧 (Yamamoto et al. 2013)

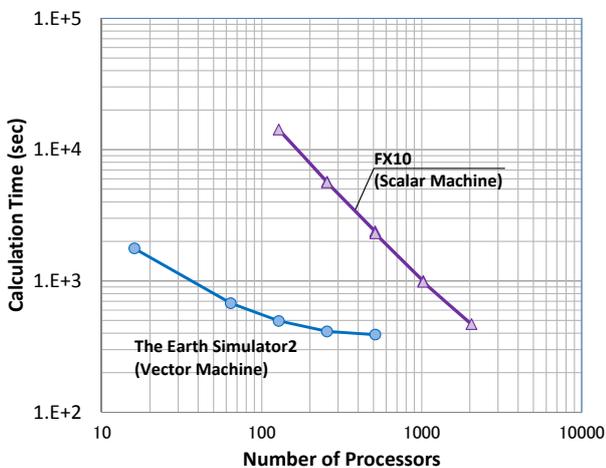


図-2 計算性能の測定結果

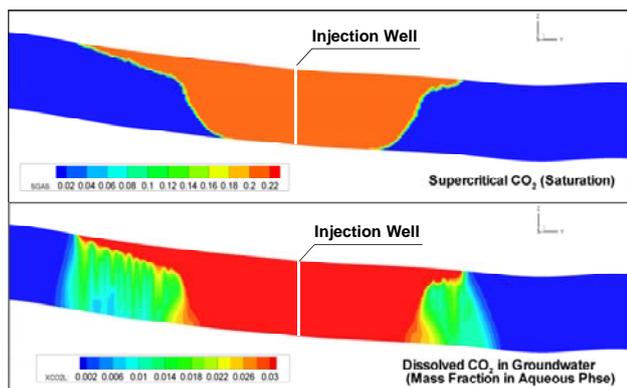
(3) 重力対流を考慮した CO₂ 長期的安定性のシミュレーション

地下に圧入された超臨界状態の CO₂ は、密度が水よりもやや小さい (比重 0.5~0.8) ため、浮力によって地表へ上昇するポテンシャルを有している。そこで、CCS では、貯留層を覆うキャップロックと呼ばれる低浸透性の地層により、CO₂ の上昇を抑え込むことが必要である。一方、CO₂ は周辺の地下水に溶け込むが、CO₂ が溶け込んだ水の比重は若干増加するため (地下水の塩分濃度によるが、0.1%~1%程度)、負の浮力を有する安定性の高い貯留状態になると考えられている。この点に関し、上側の流体が下側の流体より重いときに生じる重力不安定性 (レイリー・テラー不安定性、Rayleigh-Taylor instability) が CO₂ の地下水への溶解を促進することが指摘されている (Ennis-King and Paterson, 2005)。

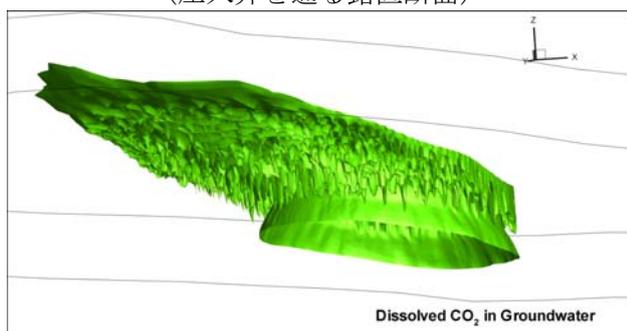
重力不安定性を正確に数値計算するには高解像度の格子を用いる必要があることが知られている。例えば、線形安定性解析の理論によれば、比較的浸透率の高い貯留層 (絶対浸透率 1darcy) では 1cm オーダー以上の格子間隔が必要とされる Pruess and Zhang (2008) は、数m程度の局所モデルで密度対流による CO₂ 長期安定性への効果を検討している。しかし、超並列計算機を用いることで、局所モデルをスケールアップし、重力対流が CO₂ の長期安定性に及ぼす効果を貯留層全体のスケールで計算できる可能性がある。そこで、実際の CO₂ 貯留層をモデル化した 3次元のフィールドモデルを用いて、CO₂ を溶解した地下水の重力対流をシミュレートすることを試みた (山本ほか, 2013)。モデル化範囲は CO₂ 圧入井から半径約 1.2km 範囲の厚さ約 80m の CO₂ 貯留層であり、CO₂ が到達する圧入井近傍の領域の格子サイズを約 50cm に詳細化した。CO₂ の圧入量 10 万 t/年、圧入期間 1 年とし、貯留層の有効孔隙率と絶対浸透率は各々 20%、100mD (鉛直、水平方向とも) とし、相対浸透率曲線には Corey の式を用い、毛管力の効果は無視し

た。

計算結果の一例として、図-3(a)に、圧入から 200 年後における CO₂ 貯留層内での CO₂ 飽和度ならびに地下水中の CO₂ 濃度を示す。同図中 (b) に、地下水中の CO₂ 濃度の等値面を示す。貯留層上部に超臨界状態の CO₂ が滞留した状態から、地下水中に CO₂ が拡散しながら溶解範囲を広げ、拡散域がある厚さに達すると重力不安定性による地下水対流が発生しフィンガリングが成長する様子がシミュレートされ、貯留層上部に貯留された超臨界 CO₂ の地下水への溶解が促進される様子が確認された。今後は、さらに格子を詳細するとともに、実データに基づく地層モデルのキャリブレーションを行う予定である。



(a) CO₂ 貯留層内での CO₂ 飽和度 (上図) ならびに地下水中の溶存 CO₂ の質量分率 (下図) (圧入井を通る鉛直断面)



(b) 地下水中の CO₂ 質量分率の等値面 (緑色: 0.02)
図-3 貯留層スケールの重力対流のシミュレーション結果 (約 200 年後)

3-2. 当初計画の達成状況について

本共同研究の実施項目は以下の 4 項目である。

- ① OpenMP/MPI ハイブリッド並列化
- ② 並列メッシュ生成・領域分割手法

③ 最適化された並列前処理付き反復法による疎行列ソルバー

④ 並列リアルタイム可視化手法

改良版「TOUGH2-MP」は既に MPI によって並列化されているため、その並列データ構造を元に、①では疎行列ソルバー以外の要素積分、係数行列生成、保存量計算、非線形処理などの諸機能を OpenMP によって並列化するとともに Fujitsu FX10 向け最適化を実施する。②では、並列メッシュ生成にあたっては分散メッシュを細分化する機能を開発し、これに ParMETIS, PT-SCOTCH 等の既存の並列グラフ分割ライブラリを組み合わせて領域分割機能を開発、実装する。③では OpenMP/MPI ハイブリッド並列化が施された ILU 前処理付き反復法による疎行列ソルバーを開発する。TOUGH2-MP は有限体積法によって離散化されており、疎行列を係数とする大規模連立一次方程式の求解が計算コストを要するプロセスである。TOUGH2-MP は多相流体シミュレータであるため、疎行列ソルバーに対しては多自由度であることの特性を生かしてブロック化を適用し Fujitsu FX10 向け最適化を実施する。④についてはボクセル格子型背景格子を利用し、ハイブリッド並列化が施された並列可視化手法を実装する。

2013 年度は、②を除く各項目について研究開発を実施する計画であった。これまでに、③最適化された並列前処理付き反復法による疎行列ソルバーの構築を進めているところであるが、当初計画より時間を要している。最適化前の計算性能の測定結果からは、計算速度向上の余地が大きいと考えられ、引き続き作業を継続する予定である。

4. 今後の展望

今後は、現在作成中の③最適化された並列前処理付き反復法による疎行列ソルバーと並行して、解析コード TOUGH2MP の全体にわたって① OpenMP/MPI ハイブリッド並列化を施し、試解析を実施して並列リアルタイム可視化手法を適用する予定である。また、②を開発、実装することによ

って更なる大規模問題へ適用を図る。

東大情報基盤センターで実施している公募型研究「大規模 HPC チャレンジ」に応募し、Fujitsu FX10 4,000 ノード以上を使用して諸機能の検証を実施する。

参考文献

- 1) Ennis-King JP, Paterson L. Role of convective mixing in the long-term storage of carbon dioxide in deep saline formations. SPE J, 10(3):349–56. SPE-84344-PA, 2005.
- 2) Pruess, K., C. Oldenburg, and G. Moridis, TOUGH2 User's Guide, Version 2.0, Rep. LBNL-43134, Lawrence Berkeley National Laboratory, Berkeley, CA, 1999.
- 3) Pruess, K., K. Zhang, Numerical modeling studies of the dissolution–diffusion–convection process during CO₂ storage in saline aquifers. Technical Report LBNL-1243E, Lawrence Berkeley National Laboratory, California, 2008.
- 4) Yamamoto, H., Zhang, K., Karasaki, K., Marui, A., Uehara, H., Nishikawa, N., Numerical investigation for the impact of CO₂ geologic sequestration on regional groundwater flow, International Journal of Greenhouse Gas Control, Vol.3, pp.586-599, 2009.
- 5) Yamamoto, H., S. Nanai, K. Zhang, P. Audigane, C. Chiaberge, R. Ogata, N. Nishikawa, Y. Hirokawa, S. Shingu, and K. Nakajima, High-performance supercomputing as a risk evaluation tool for geologic carbon dioxide storages, Energy Procedia 37, pp. 3997-4005, 2013.
- 6) Zhang, K., Y.S. Wu, and K. Pruess, User's Guide for TOUGH2-MP -. A Massively Parallel Version of the TOUGH2 Code, LBNL-315E, Lawrence Berkeley National Laboratory Report, 2008.
- 7) 山本 肇, 七井慎一, Keni Zhang, 西川憲明,

廣川雄一, 緒方隆盛, 中島研吾, 二酸化炭素地中貯留に関する大規模シミュレーション技術の開発, 平成 24 年度地球シミュレータ産業戦略利用プログラム成果報告書, 2013

5. 研究成果リスト

(1) 学術論文

Yamamoto, H., S. Nanai, K. Zhang, P. Audigane, C. Chiaberge, R. Ogata, N. Nishikawa, Y. Hirokawa, S. Shingu, and K. Nakajima, 2013, Numerical Simulation of Long-term Fate of CO₂ Stored in Deep Reservoir Rocks on Massively Parallel Vector Supercomputer, Lecture Notes in Computer Science Vol. 7851, pp.80-92, 2013.

Mukhopadhyay, S., C. Doughty, D. Bacon, J. Li, L. Wei, H. Yamamoto, S. Gasda, S.A. Hosseini, JP Nicot, J.T. Birkholzer, Comparison of Selected Flow Models of the S-3 Site in the Sim-SEQ Project, Transport in Porous Media (submitted)

Yamamoto, H., S. Nanai, K. Zhang, P. Audigane, C. Chiaberge, R. Ogata, N. Nishikawa, Y. Hirokawa, S. Shingu, and K. Nakajima, High-performance supercomputing as a risk evaluation tool for geologic carbon dioxide storages, Energy Procedia 37, pp. 3997-4005, 2013.

Mukhopadhyay, S., Z. Hou, L. Gosink, D. Bacon, C. Doughty, J.J. Li, L. Wei, S. Gasda, G. Bacci, R. Govindan, J.-Q. Shi, H. Yamamoto, R. Ramanathan, JP Nicot, S.A. Hosseini J.T. Birkholzer, A. Bonneville, Model Comparison and Uncertainty Quantification for Geologic Carbon Storage: The Sim-SEQ Initiative, Energy Procedia 37, pp. 3867-3874, 2013.

(2) 国際会議プロシーディングス

Yamamoto, H., K. Nakajima, S. Nanai, K. Masuoka, Y. Hiratsuka, T. Katagiri, K. Zhang, Post-peta scale high performance computing for coupled multi-physics modeling of CO₂ geologic sequestration, 12th International Conference on Greenhouse Gas Control

Technologies (accepted)

(3) 国際会議発表

山本 肇, CCS (carbon dioxide capture & storage) -A viable option for mitigating the contribution of fossil fuel emissions to global warming -, 上海同済大学 機械・エネルギー工学科、ME (Mechanical Engineering) Seminar, 2013 年 6 月 17 日

山本 肇, High-performance computing for predicting the long-term safety and permanence of CO₂ stored in deep reservoir rocks, 北京師範大学 水科学学院 セミナー, 2013 年 6 月 21 日

(4) 国内会議発表

山本 肇, Mukhopadhyay, S., 二酸化炭素地中貯留モデリングの国際比較研究 Sim-SEQ—事前予測シミュレーション—, 第 68 回土木学会年次学術講演会, 土木学会, 2013.

山本 肇, 中島研吾, 超並列コンピュータ上における地質媒体中の多成分・多相流体解析の計算性能—二酸化炭素地中貯留を対象とした事例—, 第 69 回土木学会年次学術講演会, 土木学会, (投稿中).

(5) その他 (特許, プレス発表, 著書等)

山本 肇, 七井慎一, Keni Zhang, 西川憲明, 廣川雄一, 緒方隆盛, 中島研吾, 二酸化炭素地中貯留に関する大規模シミュレーション技術の開発, 平成 24 年度地球シミュレータ産業戦略利用プログラム成果報告書, 2013.