

jh160022-NAHC

## 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 CO<sub>2</sub> 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「TOUGH2-MP」の改良と最適化 (OpenMP/MPI ハイブリッド並列化, ppOpen-HPC による高度化、自動チューニング、時空間並列アルゴリズム、メニョコクラスタ対応など) を実施中である。本年度は、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組み込むとともに、TOUGH2MP の全体にわたって OpenMP/MPI ハイブリッド並列化を行い、約 3 万コアまでの計算性能を確認した。時空間並列アルゴリズムに関しては、MGRIT 法を TOUGH2-MP を適用した結果、コア数の増加とともに時空間並列の効果が高まることが認められた。自動チューニングやメニョコクラスタ対応についても予備的検討を行った。来年度は実アプリケーションへの適用を通じた有用性の検証を行う予定である。

### 1. 共同研究に関する情報

#### (1) 共同研究を実施した拠点名

東京大学情報基盤センター

#### (2) 共同研究分野

超大規模数値計算系応用分野

#### (3) 参加研究者の役割分担

- 大成建設 (株) 技術センター：全体統括、TOUGH2-MP ハイブリッド並列化、シミュレーション実施
- 東京大学情報基盤センター：並列疎行列ソルバー、並列メッシュ生成・領域分割機能、並列可視化、時空間並列アルゴリズム

### 2. 研究の目的と意義

#### 2-1 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 (CO<sub>2</sub>) 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。提案者等は米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」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 東大、東大 FX10 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。改良版「TOUGH2-MP」は Flat MPI による並列化、METIS (1CPU 版) による領域分割を使用しており、大規模システムを活用したシミュレーションには制約があった。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より詳細な大規模シミュレーションを実施するために東京大学情報基盤センターを中心に開発された「ppOpen-HPC (自動チューニング機構を有するアプリケーション開発・実行環境, 2011~2015 年)」を活用した改良版 TOUGH2-MP の高度化を実施し、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。更にエクサスケールシステムへ向けて、時空間並列化手法の適用を検討する。本研究の成果を ppOpen-HPC へ実装することによって更なる高度化を図る。主たるターゲットシステムは東大 Oakleaf-FX (FX10) であるが、Intel Xeon Phi, GPU クラスタも含めた検討を実施する。

#### 2-2. 研究の意義

CO<sub>2</sub> 地中貯留は地球温暖化対策の一つとして有効であるが、その実施にあたっては、100 年~1000

年以上の長期的安定性や副作用として生じる環境影響について十分に検討する必要がある。CO<sub>2</sub> の地中貯留シミュレーションでは、CO<sub>2</sub> 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 CO<sub>2</sub> の流体物性（密度、粘性、地下水への溶解度）や、地下水と CO<sub>2</sub> の相互作用（水相-CO<sub>2</sub> 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、地中での長期的鉱物変質や水質変化予測のための地球化学計算との連成解析、大量の流体圧入に伴う地盤の変形、破壊現象との連成解析が必要になっている。

例えば、これまでのシミュレーションでは、高度な不均質性を有する地層中の CO<sub>2</sub> 挙動や非線形現象（重力不安定性による地下水対流、フィンガリング現象など）の計算には非常に微細な格子解像度が必要であり、膨大な計算時間の問題から十分な検討がなされていない。CO<sub>2</sub> 貯留が及ぼす副作用の一つとして、大量の CO<sub>2</sub> の地下圧入に伴う広域的な地盤隆起があるが、これには上述の流体解析に加え、地盤変形問題を連成した解析が必要になる。また、化学的な反応性が高い CO<sub>2</sub> は、周辺の岩石や地下水と反応して水質を大きく変化させるとともに、地層中の岩石鉱物を変質・劣化させる可能性がある。このような化学反応の予測には、多数の化学種を考慮した大規模な流体挙動と化学反応の連成解析が必要になる。

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。本共同研究を通じて大規模 CO<sub>2</sub> 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/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可能となり、CO<sub>2</sub> 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。

以上述べたように、高解像度・大規模モデルでの CO<sub>2</sub> 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や、CO<sub>2</sub> 貯留の副次的な環境影響評価の精度向上を通じた社会的受容性の確保の面など、CO<sub>2</sub> 地中貯留の実現に向けた大きなインパクトがある。ppOpen-HPC の有する並列メッシュ生成・領域分割手法、前処理付き疎行列ソルバー、並列リアルタイム可視化手法、自動チューニングの適用、時空間並列アルゴリズム開発・適用、各計算プロセスのハイブリッド並列化によってよりポストペタ/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高速・円滑に実施可能となる。研究成果を ppOpen-HPC に実装、公開し、大規模シミュレーション普及に貢献する。

### 3. 当拠点公募型共同研究として実施した意義

本共同研究によって得られると期待される成果は技術的にも社会的にも重要な意義を持つ。ポストペタ/エクサスケールシステムを目指した大規模シミュレーション技術の確立、その普及には二酸化炭素地中貯留シミュレーション、並列アルゴリズム、自動チューニングを含む最適化、並列可視化など様々な分野の専門家と計算機センターの緊密な協力が不可欠であり、学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点における共同研究として取り組む必要がある。本共同研究の成果を ppOpen-HPC に実装、公開することによって大型計算機センター利用者を中心に、幅広い層の研究者、技術者への大規模シミュレーションの普及に貢献する。

### 4. 前年度までに得られた研究成果の概要

### 5. 今年度の研究成果の詳細

本共同研究は以下の項目について、2 年計画で実施中である。

①OpenMP/MPI ハイブリッド並列化

②ppOpen-HPC による高度化

a)並列前処理付き反復法による疎行列ソルバー

b)並列リアルタイム可視化手法

c)並列メッシュ生成・領域分割手法

- ③自動チューニング
- ④時空間並列アルゴリズム
- ⑤メニコアクラスタ向け検討
- ⑥実アプリケーションへの適用
- ⑦ppOpen-HPC 改良, 最適化

今年度は上記のうち、①～⑤を重点的に実施した。来年度は⑥と⑦を中心に実施する。

現在までの進捗状況を以下に説明する。

①OpenMP/MPI ハイブリッド並列化

H28 年度は、改良版 TOUGH2-MP のハイブリッド並列化を実施した。改良版「TOUGH2-MP」は既に MPI によって並列化されており、ハイブリッド並列化にも一部着手済みである。本共同研究では、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 によって並列化を実施した。

図-1 に示す CO2 地中貯留シミュレーションモデルについて、ハイブリッド並列化後の計算速度を測定した。このモデルは、1000 万節点の有限体積法格子であり、各節点は 3 自由度（流体の 3 成分）を有している。

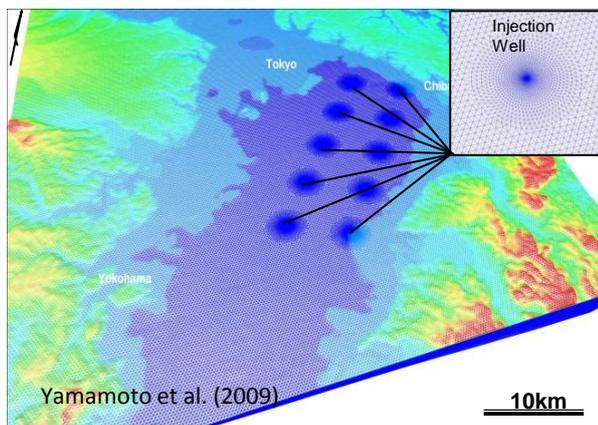


図-1 計算速度測定に用いたシミュレーションモデル ( $3 \times 10^7$  自由度)

図-2 は 上記のシミュレーションの Oakleaf-FX 上での計算時間の例で、コア数を増加させた場合の Flat MPI とハイブリッド（各ノード 4 スレッド  $\times 4$  プロセス）の比較である（strong scaling）。ハイブリッドはノード数が少ない場合は、Flat MPI よ

りやや遅いが、ノード数が増えて各プロセス当りの問題規模が小さくなると性能が近づき、1,440 ノード（23,040 コア）ではほぼ同等かややハイブリッドが速い。

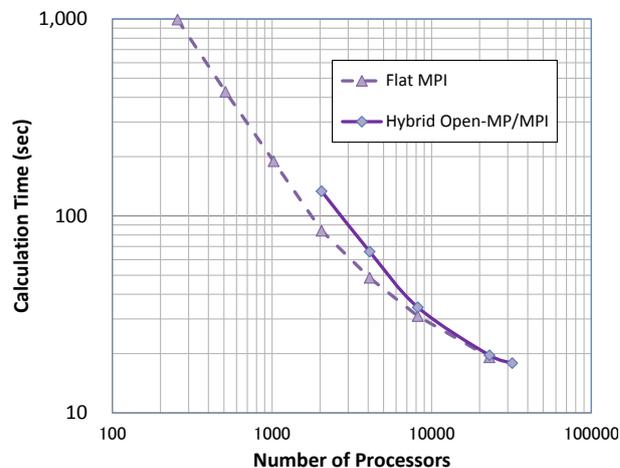


図-2 ハイブリッド並列化後の計算時間測定結果 ( $3 \times 10^7$  自由度) (Oakleaf-FX)

②ppOpen-HPC による高度化

現在は、TOUGH2-MP 固有のブロック対角前処理を適用しているが、ppOpen-HPC の提供する ILU 系前処理（埜ほか, 2016）も実装しており現在評価中である。可視化については、ppOpen-HPC の並列リアルタイム可視化ライブラリ（ppOpen-MATH/VIS）を改良版 TOUGH2-MP 向けにインタフェースを改良し、適用した。並列メッシュ生成・領域分割手法は、H28 年度は基礎的検討を実施するに留まったため、H29 年度も継続して実施する。

③自動チューニング

OpenMP の動的ループスケジューリング機能を使用した最適化手法を実装し、最適パラメータの自動選択手法を検討中である。OpenMP/MPI ハイブリッド並列プログラミングモデルを使用した有限要素法による三次元固体力学アプリケーション（TOUGH2-MP と同様のブロック構造を有する）向け前処理付き CG 法（対角ブロック前処理）に適用した（埜ほか, 2016）。

図-3 に示す計算-通信のオーバーラップを適用

した並列行列-ベクトル積計算（図-4）において、通信をマスタースレッドが受け持ち、他のスレッドは「`!$omp do schedule (dynamic,CHSIZ)`」（`CHSIZ`：チャンクサイズ）として実施した計算結果を図-5 に示す。`Overlap` は通常の「計算-通信オーバーラップ（動的ループスケジューリング適用無し）」であり、50,100,...,500 などの数字はチャンクサイズである。東大情報基盤センター富士通 FX10（Oakleaf-FX）の全 4,800 ノード（76,800 コア）を使用している。1 ノード 16 スレッド、4,800MPI プロセスの OpenMP/MPI ハイブリッド並列による計算である。問題サイズは 1 ノードあたり  $200^3$  節点（L）、 $100^3$  節点（S）の 2 ケース実施した。図-5 の結果は、Oakleaf-FX 全ノード（4,800 ノード）使用時のオリジナル実装からの性能改善率であり、特に問題サイズが小さい場合に、10% 以上の性能向上が得られている。一方、動的ループスケジューリングを適用しない通常の計算-通信のオーバーラップはほとんど性能向上がない。最適なチャンクサイズは、問題サイズ、ノード数、機種によって異なると考えられるため、自動チューニングの適用が効果的である。H29 年度は最適パラメータ選択手法を検討し、ppOpen-AT に組み込んで行く。

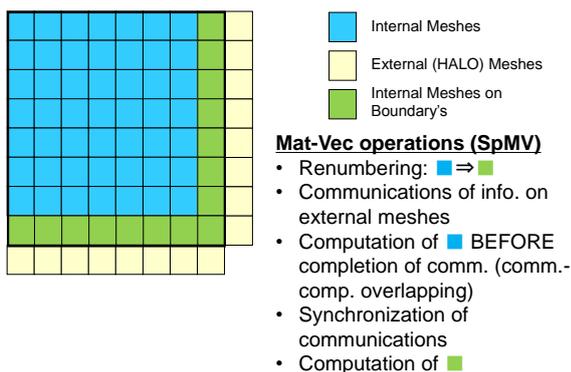


図-3 行列ベクトル積並列計算時の計算と通信のオーバーラップ

```

!$omp parallel private (neib,j,k,i,X1,X2,X3,WVAL1,WVAL2,WVAL3)
!$omp&
!$omp master
!C Communication is done by the master thread (#0)
!C Send & Recv.
!C call MPI_WAITALL (2*NEIBPETOT, req1, stal, ierr)
!$omp end master
!C Pure Inner Nodes The master thread can join computing of internal
!C-- nodes after the completion of communication
!$omp do schedule (dynamic,200) Chunk Size= 200
do j= 1, Ninn
enddo
!C Boundary Nodes Computing for boundary nodes are by all threads
!$omp do
do j= Ninn+1, N
enddo
!$omp end parallel
    
```

図-4 行列ベクトル積並列計算時の動的ループスケジューリング機能の適用

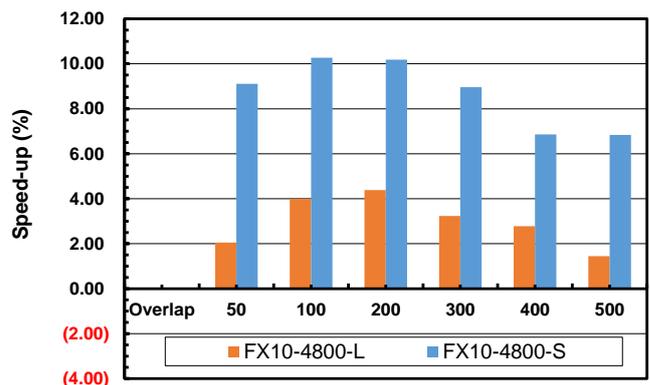


図-5 動的ループスケジューリングの効果（三次元固体力学並列有限要素法，対角ブロック前処理付き CG 法），オリジナル手法からの CG 法性能改善率，Overlap：動的ループスケジューリング適用無し，数字はチャンクサイズ，東大情報基盤センター富士通 FX10（Oakleaf-FX）の全 4,800 ノード（76,800 コア）を使用（16 スレッド×4,800MPI プロセス），1 ノード当りの問題サイズ： $200^3$  節点（L）， $100^3$  節点（S）

#### ④時空間並列アルゴリズム

従来，有限要素法，有限体積法によるシミュレーションは空間方向への並列化が実施されてきたが，ポストペタ/エクサスケールシステムを有効に活用するためには，時間方向の並列化の検討も必要である。

MGRIT 法（Multigrid Reduction in Time）に基づく時間方向並列化を非線形問題向けに拡張し，時空間並列アルゴリズムによる非定常多相流問題向けアプリケーションを開発中である。図 3 はメッシュ数約 3 万（自由度数約 12 万）のテスト例

題を、MGRIT 法に基づく改良版 TOUGH2-MP によって Oakleaf-FX 上で解いた事例である。従来型の逐次手法 (Time-Stepping) と比較すると、MGRIT 法はコア数が増加するとより有利となっていくことがわかる。現状では時間方向並列化部分の最適化が不十分であり H29 年度も継続して実施する。本事例は MGRIT 法を実用的な非線形問題に適用した最初の事例の一つである。

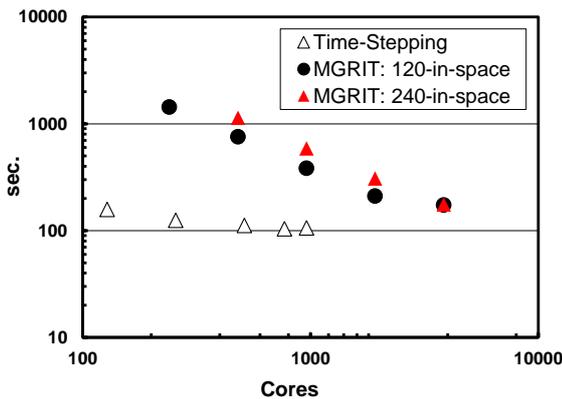


図-6 MGRIT 法による改良版 TOUGH2-MP 計算例(総自由度数約 12 万), Oakleaf-FX 使用, タイムステップ数 1,025, 時間方向並列化レベル=9, 120/240-in-space : 空間方向分割数 120/240

#### ⑤メニコクラスタ向け検討

三次元ポアソン方程式を有限体積法で離散化して得られる連立一次方程式を ICCG 法の Intel Xeon Phi (Oakforest-PACS) 向け最適化の検討を実施した (中島ほか, 2016)。Oakforest-PACS で使用されている Xeon Phi (Knights Landing) は、DDR4 (低速, 大容量), MCDRAM (高速, 小容量) の 2 種類のメモリがあり、アプリケーションレベルでの実効性能は 3:1 程度になる。このようなメモリの特性を考慮に入れた最適化が必要である。

### 6. 今年度の進捗状況と今後の展望

②の ppOpen-HPC による高度化に関して、並列メッシュ生成、領域分割、並列前処理については

検討が不十分であった。来年度は、ppOpen-HPC の適応格子機能 (ppOpen-APPL/FVM) ParMETIS, PT-Scotch による領域分割法を組み合わせた機能を整備する。疎行列ソルバーについては、今年度に引き続き並列 ILU 前処理実装、多重格子法適用検討を① (ハイブリッド並列化) と併せて実施する。

③の自動チューニングについては、今年度成果に基づき、H29 年度は動的ループスケジューリング向けパラメータ自動設定機能を開発し、ppOpen-HPC に反映する予定である。

④の時空間並列アルゴリズムについては、今年度開発した MGRIT 法に基づく改良版 TOUGH2-MP のプロトタイプ最適化を進める。また、時空間並列アルゴリズムは比較的小規模、中規模の問題の長時間シミュレーションに適していることから、H29 年度は、CO<sub>2</sub> を圧入する井戸配置の最適化問題など中規模問題を含むパラメータスタディへの適用を検討していく。

⑤のメニコクラスタ向け検討では、今年度の ICCG 法向け最適化検討の成果を踏まえ、H29 年度は、TOUGH2-MP の Intel Xeon Phi (Oakforest-PACS), GPU (Reedbush-H) 向けの移植、最適化、動作検証を実施する。

以上の成果に基づき、⑥実アプリケーションによる機能検証、⑦ppOpen-HPC 改良、最適化を実施する。特に、⑥に関しては、前述の通り、CO<sub>2</sub> を圧入する井戸配置の最適化問題への適用を行ない、開発した技術のアプリケーションとしての有用性の検証を行う予定である。

## 7. 研究成果リスト

### (1) 学術論文

### (2) 国際会議プロシーディングス

- [1] Yamamoto, H., Nanai, S., Zhang, K., Audigane, P., Chiaberge, C., Ogata, R., Nishikawa, N., Hirokawa, Y., Shingu, S. and Nakajima, K., Numerical Simulation

of Long-term Fate of CO<sub>2</sub> Stored in Deep Reservoir Rocks on Massively Parallel Vector Supercomputer, Lecture Notes in Computer Science, Vol. 7851, pp.80-92

- [2] Yamamoto, H., Nakajima, K., Zhang, K., Nanai, S., Performance of Parallel Simulators on Peta-scale Platforms for Coupled Multi-physics Modelling of CO<sub>2</sub> Geologic Sequestration, Energy Procedia, Vol.63, pp. 3795–3804
- [3] Yamamoto, H., Nakajima, T., Xue, Z., Quantitative interpretation of trapping mechanisms of CO<sub>2</sub> at Nagaoka pilot project—A history matching study for 10-year post-injection, Energy Procedia (in press)

(3) 会議発表(口頭, ポスター等)

- [1] 埜 敏博, 中島研吾, 大島聡史, 星野哲也, 伊田明弘 (2016): パイプライン型共役勾配法の性能評価、情報処理学会研究報告 (2016-HPC-157-6)
- [2] 中島研吾, 大島聡史, 埜 敏博, 星野哲也, 伊田明弘 (2016) : ICCG 法ソルバーの Intel Xeon Phi 向け最適化、情報処理学会研究報告 (2016-HPC-157-16)

(4) その他(特許, プレス発表, 著書等)

- [1] 山本 肇, 中島研吾 (2017) : 二酸化炭素地中貯留シミュレーションにおける超並列コンピュータの利用、化学工学会誌、第 31 巻, 5 号 (印刷中)