

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



1 研究目的

化石燃料を使用する火力発電所などからの大気中へのCO₂排出を大規模に削減する地球温暖化対策として、排ガスからCO₂を分離・回収し、地下深部の地層中に圧入する「二酸化炭素の地中貯留」の技術開発が世界的に進められている。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。これまで、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」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3千万自由度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による並列化であり、領域分割にはMETISを採用しているため、問題規模、計算機資源の規模に制約があった。

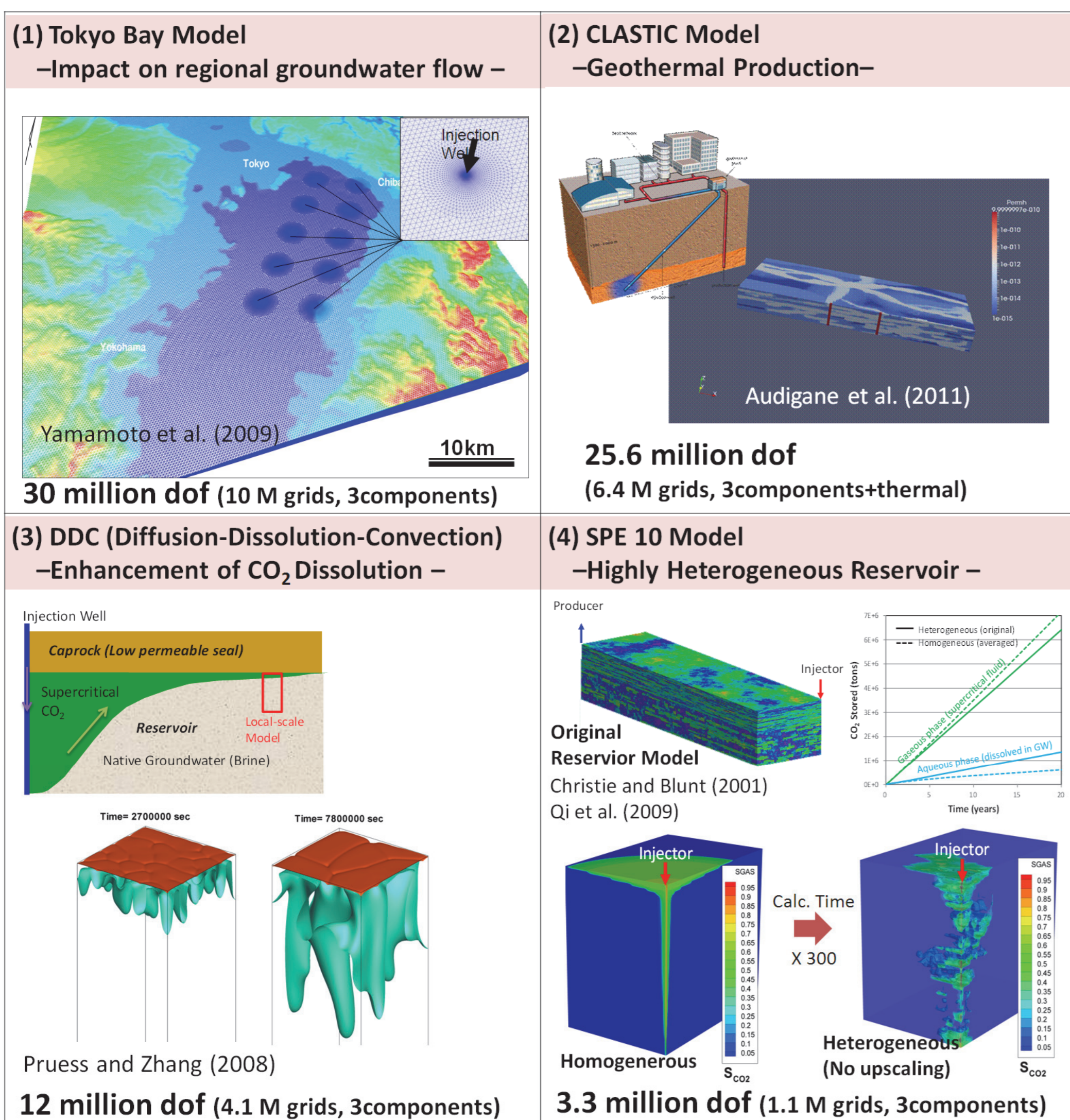
本研究では、ポストペタスケール、エクサスケールシステム上でより詳細な大規模シミュレーションを実施するために改良版「TOUGH2-MP」の高度化(OpenMP/MPIハイブリッド並列化、並列メッシュ生成・領域分割手法、最適化された並列反復法による疎行列ソルバー、並列リアルタイム可視化手法)を実施し、大規模二酸化炭素地中貯留シミュレーション技術の確立を図ると共に、多相流体と化学反応を連成した大規模シミュレーションを実施するものである。ターゲットとする計算機はFujitsu PRIMEHPC FX10(東大)である。

2 研究計画

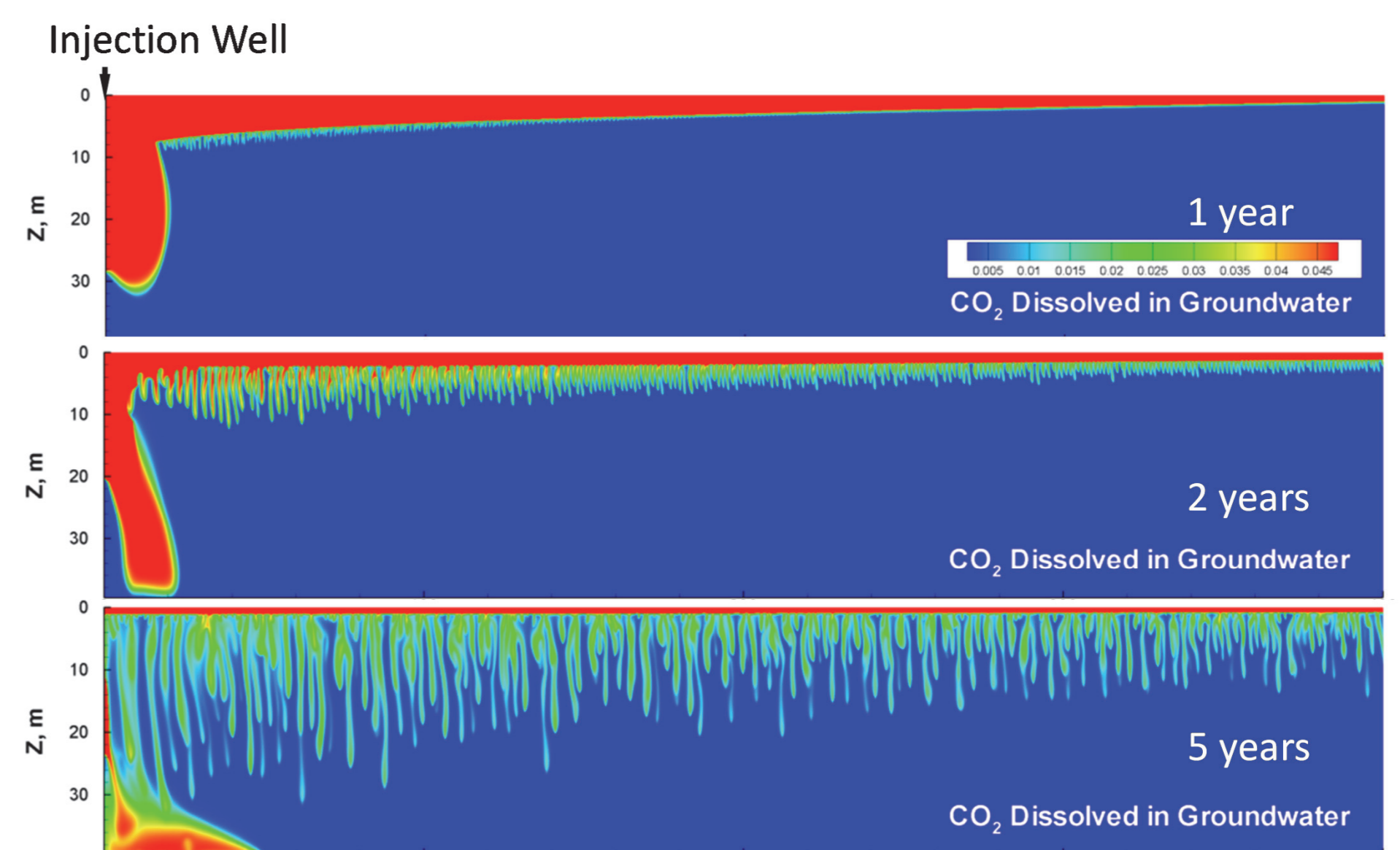
本研究は次の4項目について、2年計画で実施する: ①OpenMP/MPIハイブリッド並列化、②並列メッシュ生成・領域分割手法、③最適化された並列前処理付き反復法による疎行列ソルバー、④並列リアルタイム可視化手法

2013年度は、②を除く各項目について研究開発を実施する。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OpenMPI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。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。

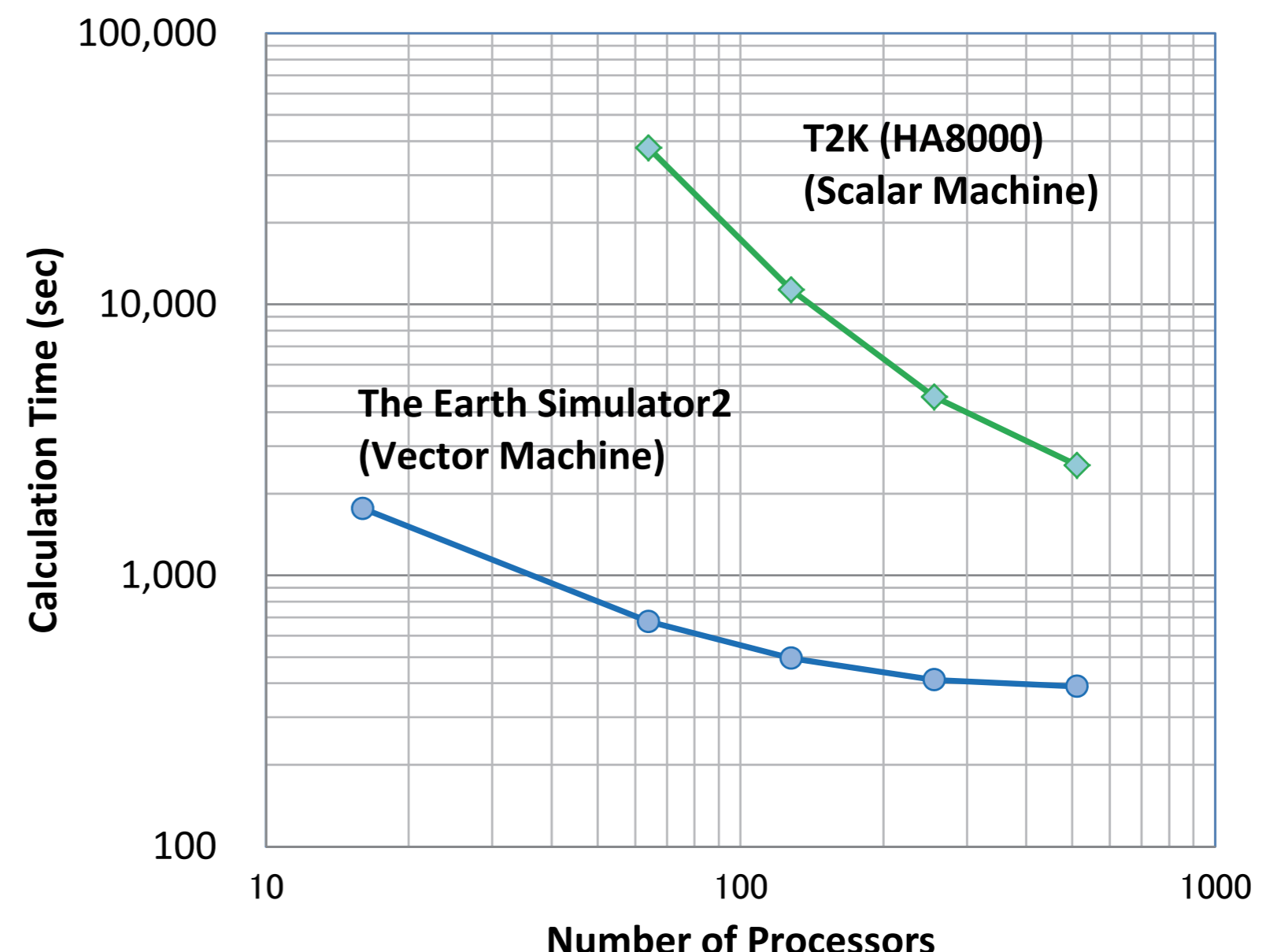
2014年度は②を開発、実装することによって更なる大規模問題へ適用を図る。並列メッシュ生成にあたっては分散メッシュを細分化する機能を開発し、これにParMETIS、PT-SCOTCH等の既存の並列グラフ分割ライブラリを組み合わせることで領域分割機能を開発、実装する。併せて2013年度に開発した諸機能の最適化を継続して実施する。東大情報基盤センターで実施している公募型研究「大規模HPCチャレンジ」に応募し、Fujitsu FX10 4,000ノード以上を使用して諸機能の検証を実施する。多相流体に加えて100程度の化学種による化学反応を連成させ、従来の数十倍以上の自由度を有する規模の問題を対象とする予定である。



二酸化炭素地中貯留のモデル例(1), 2), 3)



界面不安定性を考慮した長期CO₂挙動解析の例⁴⁾



地球シミュレータとT2Kでの計算時間の比較(30 million dof)⁴⁾

1) Yamamoto, H. et al., *International Journal of Greenhouse Gas Control*, Vol. 3, pp.586-599, 2009.
2) Audigane, P.D et al., CO₂ injection modeling in large scale heterogeneous aquifers, *Eos Trans. AGU*, 92(51), Fall Meet. Suppl., Abstract H51H-1302, 2011.
3) Pruess, K. and K. Zhang, *LBNL Technical Report LBNL-1243E*, Lawrence Berkeley Nat'l Lab., California, 2008.
4) Yamamoto, H. et al., *Proc. 11th Int. Conf. Greenhouse Gas Control Technologies (GHGT-11)*, Kyoto, Japan, Nov. 18-22, 2012.
5) Yamamoto, H. et al., *Lecture Notes in Computer Science* Vol. 7851, pp. 80-92, 2013.