

# 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

二酸化炭素地中貯留は、火力発電所などから排出されるCO<sub>2</sub>を地下深部の地層中に圧入する地球温暖化対策の切り札である。その実用化にあたっては、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。本共同研究で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多相流体シミュレータ「TOUGH2-MP」を元に、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）」を活用したTOUGH2-MPの高度化を実施し、大規模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。主たるターゲットシステムは東大Oakleaf-FXであるが、平成29年度はIntel Xeon Phi (Oakforest-PACS), GPUクラスタ (Reedbush-H) 等のメニコア環境も含めた検討を実施する。

## 2 研究計画

実施項目は次の通りである。①OpenMP/MPIハイブリッド並列化, ②ppOpen-HPCによる高度化 (疎行列ソルバー, 並列可視化, 並列メッシュ生成・領域分割), 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, ⑦ ppOpen-HPC改良, 最適化。H29年度は③~⑦を重点的に実施する。③については、H28年度成果に基づき、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。④については、H28年度に開発したプロトタイプの実装を進める。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となる本課題に適している。⑤ではIntel Xeon Phi (Oakforest-PACS), GPU (Reedbush-H) 向けの移植、最適化を実施する。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。

## 3 昨年度の研究

### 実施項目① TOUGH2-MPのハイブリッド並列化

図1は CO<sub>2</sub>地中貯留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×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。

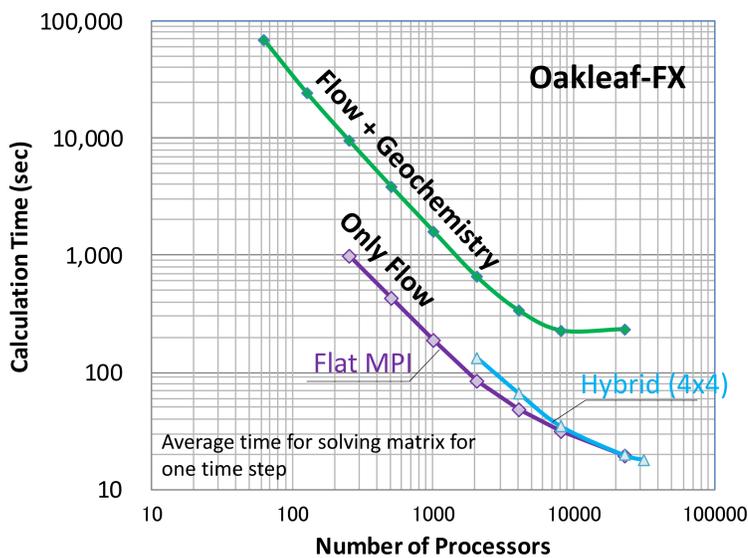


図-1 Oakleaf-FX上での計算時間 (30 million dof) <sup>4)</sup>

### 実施項目④ 時空間並列アルゴリズム

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2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。

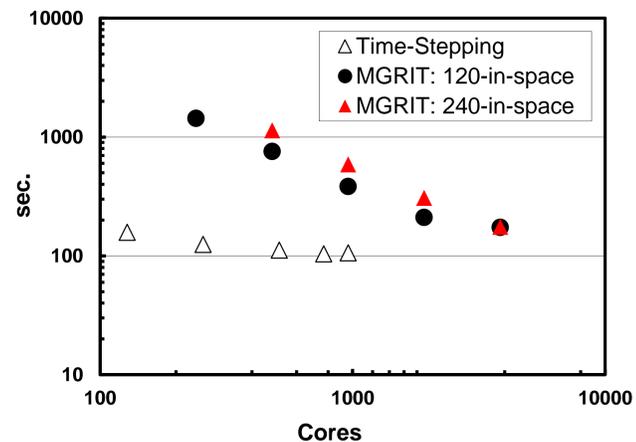
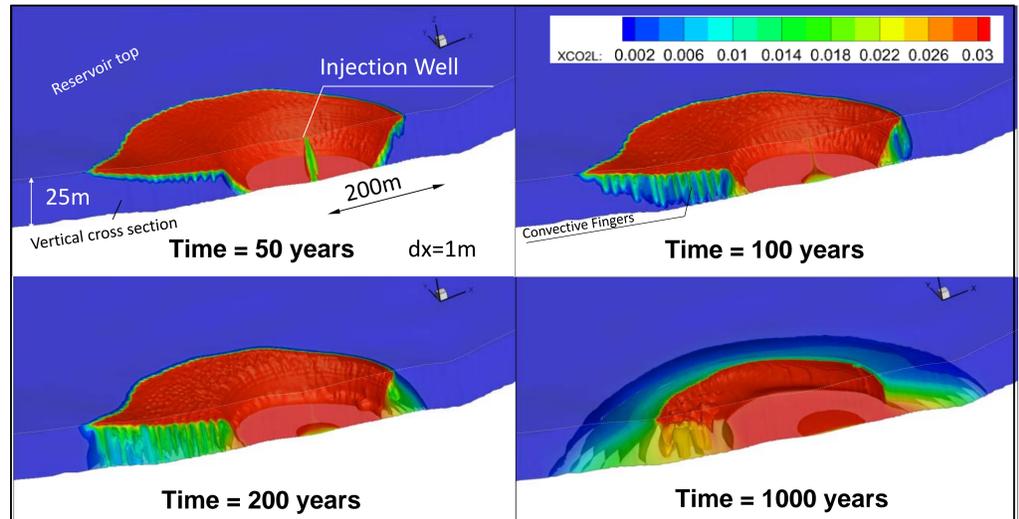
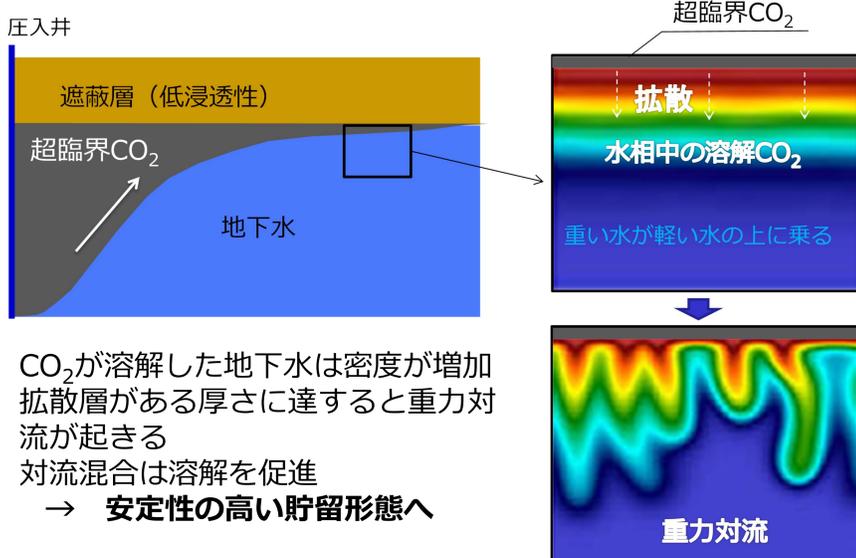


図-2 MGRIT法による改良版TOUGH2-MP計算例 (総自由度数約12万), Oakleaf-FX使用, タイムステップ数1,025, 時間方向並列化レベル=9, 120/240-in-space: 空間方向分割数120/240

## シミュレーション事例 界面不安定性を考慮した長期CO<sub>2</sub>挙動解析の例 (地下水中のCO<sub>2</sub>溶解量) <sup>4)</sup>



通常の粗い格子のフィールドスケールシミュレーションでは、対流混合による溶解速度の増加を表現できない。

- 1) Yamamoto, H. et al., *International Journal of Greenhouse Gas Control*, Vol. 3, pp.586-599, 2009.
- 2) Audigane, P.D et al., CO<sub>2</sub> 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. 12th Int. Conf. Greenhouse Gas Control Technologies (GHGT-12)*, 2014
- 5) Yamamoto, H. et al., *Lecture Notes in Computer Science* Vol. 7851, pp. 80-92, 2013.