

jh170028-NAJC

## 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改良版「TOUGH2-MP」の高度化 (OpenMP/MPI ハイブリッド並列化, 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, 時空間並列アルゴリズムなど) を実施した。本年度は、解析コード TOUGH2-MP の OpenACC による GPU 対応や、並列リアルタイム可視化手法の適用、時間並列アルゴリズムの基本コーディングを実施するとともに実アプリケーションとして、多大な計算量を要するメタヒューリスティクスによる CO<sub>2</sub> 圧入井の配置最適化を並列処理で高速で行う手法を開発して実用性を検証した。

### 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
- 超大規模データ処理系応用分野
- 超大容量ネットワーク技術分野
- 超大規模情報システム関連研究分野

#### (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、時空間並列アルゴリズム、メニイコアクラスタ向け検討、実アプリケーションの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

### 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 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いるなど、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 (並列メッシュ生成・領域分割手法, 並列反復法による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), 各計算プロセスのハイブリッド並列化 (OpenMP/MPI) 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り、多相流体・化学反応連成による大規模シミュレーションを実施する。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 (Parallel-in-Space/Time) 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。平成 29 年度は前年度成果を元に大規模シミュレーションへの適用、ppOpen-HPC の高度化の他、CO<sub>2</sub> を圧入する井戸配置の最適化問題等の実問題への適用も実施した。主たるターゲットシステムは東大 Oakleaf-FX(FX10)であるが、平成 29 年度は Intel Xeon Phi (Oakforest-PACS), GPU クラスタ (Reedbush-H) も含めた検討を実施した。

## 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の大規模シミュレーションを高速・円滑に実施可能となる。

## 2-3. 研究の実施項目

本共同研究は以下の項目について、2 年計画で実施してきた。

- 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

昨年度は上記のうち、①～④を重点的に実施した。今年度は④～⑥を中心に実施した。

## 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ものである。

#### 4. 前年度までに得られた研究成果の概要

前年度は、2-3.に示した研究項目のうち、①～④を重点的に実施した。得られた研究成果の概要を以下に説明する。

##### 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、OpenMP を加えることによるハイブリッド並列化を施した。すなわち、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 は Oakleaf-FX 上での改良版 TOUGH2-MP 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。

##### ②ppOpen-HPC による高度化

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するとともに、可視化におけるデータ圧縮処理の有効性を調べた。

図-3 は、CO<sub>2</sub> 挙動シミュレーションでの CO<sub>2</sub>

飽和率のコンター図であり、上から、元のデータ

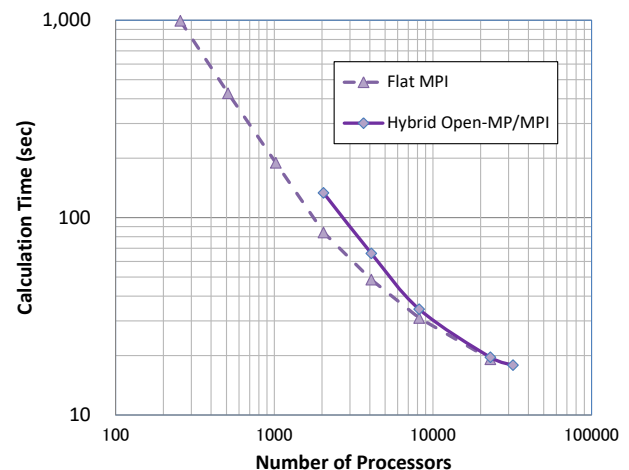


図-2 ハイブリッド並列化後の計算時間測定結果（ $3 \times 10^7$  自由度）（Oakleaf-FX）

および 95%、99%の格子を削減した可視化結果である。これによると、削減率 95%程度までであれば、元のデータに見られる CO<sub>2</sub> のフィンガリング挙動の特徴を残した画像が得られている。計算結果の 9 割以上のデータを削減しつつも元のデータの特徴を損なわないような可視化データを得ることを可能とした。これにより、大規模問題の可視化処理において、効率的なデータ可視化を行うことが可能になった。

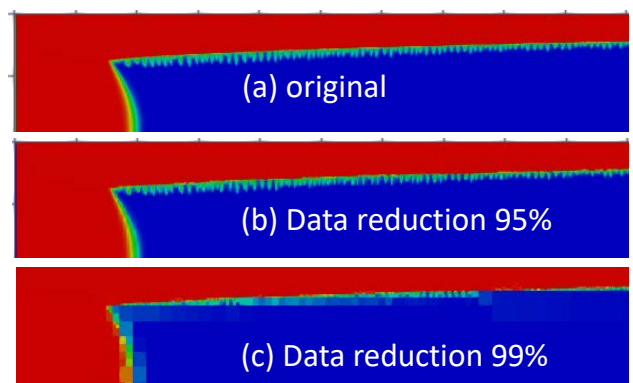


図-3 ppOpen-MATH/VIS による可視化結果（データ削減の効果）

##### 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した。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) 口頭 [1])。

図-4 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-5) 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-6 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-6 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。今後、最適パラメータ選択手法を検討し、ppOpen-AT に組み込んで行くことが考えられる。

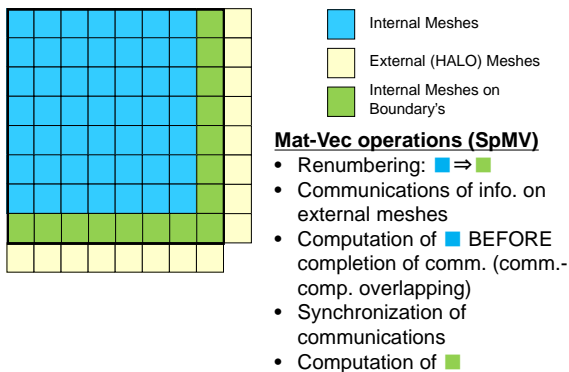


図-4 行列ベクトル積並列計算時の計算と通信のオーバーラップ

```

!$omp parallel private (neib,j,k,i,X1,X2,X3,WVAL1,WVAL2,WVAL3)
!$omp private (istart,inum,ii,ierr)
!$omp master
Communication is done by the master thread (#0)
!C- Send & Recv.
( )
call MPI_WAITALL (2*NEIBPDETOT, req1, stat1, ierr)
!$omp end master
!C- Pure Inner Nodes
The master thread can join computing of internal
nodes after the completion of communication
!$omp do schedule (dynamic,200) Chunk Size= 200
do j= 1, Ninn
( )
enddo
!C- Boundary Nodes
Computing for boundary nodes are by all threads
default: !$omp do schedule (static)
!$omp do
do j= Ninn+1, N
( )
enddo
!$omp end parallel
    
```

図-5 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

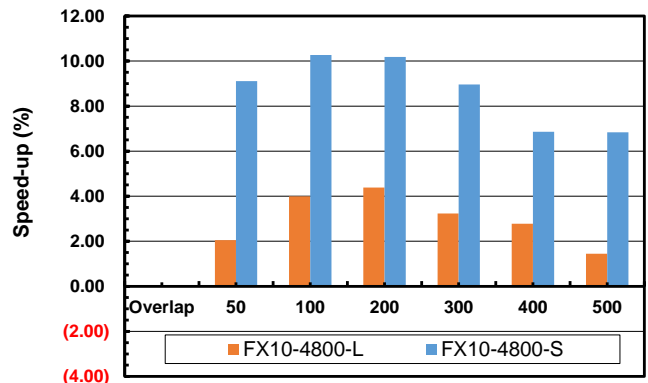


図-6 動的ループスケジューリングの効果 (三次元固体力学並列有限要素法, 対角ブロック前処理付き CG 法), オリジナル手法からの CG 法性能改善率, Overlap: 動的ループスケジューリング適用無し, 数字はチャンクサイズ, 東大情報基盤センター富士通 FX10 (Oakleaf-FX) の全 4,800 ノード (76,800 コア) を使用 (16 スレッド×4,800MPI プロセス), 1 ノード当りの問題サイズ:  $200^3$  節点 (L),  $100^3$  節点 (S)

#### 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した。図-7 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。ただし、時間方向並列化部分の最適化が不十分であり改良が必要である。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。

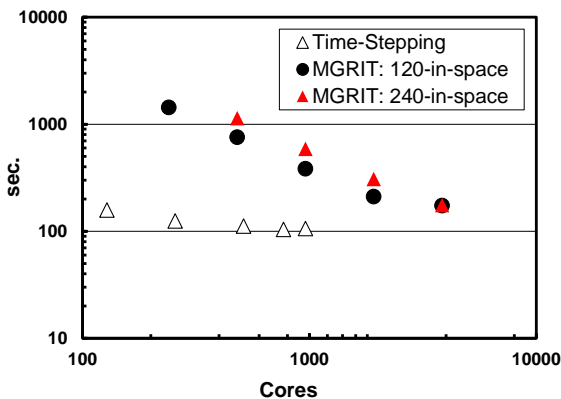


図-7 MGRIT 法による改良版 TOUGH2-MP 計算例 (総自由度数約 12 万), Oakleaf-FX 使用, タイムステップ数 1,025, 時間方向並列化レベル=9, 120/240-in-space : 空間方向分割数 120/240

## 5. 今年度の研究成果の詳細

今年度は、2-3.に示した研究項目のうち、④～⑦を中心に実施した。得られた研究成果を項目毎に説明する。

### ④時空間並列アルゴリズム

Parareal 法による時間方向並列アルゴリズムを TOUGH2 に実装した (Miyagi et al., 国際会議 [7])。空間領域分割の並列化は大規模な数値シミュレーションに広く応用されており、問題サイズが大きい場合には効果的である。更に、近年の計算機性能の向上から、時間方向も並列化することでより高い並列化効果が期待されている。本研究では大規模な CO<sub>2</sub> 地中貯留シミュレーションを時空間で並列計算することで、計算効率を向上させることを目的とする。

Parareal 法では、近似演算と厳密な積分演算を用いて、使用者が定めた時間範囲を繰り返し計算す

ることにより、一般に依存関係のある時系列を並列で計算することができる。しかし、この手法は近似演算子を適切に使用することが重要であり、取り扱う問題毎に適用性を調査する必要がある。

例題として、浸透率が  $1 \times 10^{-13}$  (m<sup>2</sup>) で均質な貯留層モデルを作成し、圧入井 1 本から CO<sub>2</sub> を 5 年間圧入する問題を考えた。貯留層モデルの格子数は水平方向 100 × 100、深さ方向 1 とした。

Parareal 法を用いた計算プロセスを図-7 に示す。近似計算では、流体計算の収束判定での許容相対誤差に大きい値を設定して時間ステップ長を長くするように調節した。今回は、許容相対誤差を厳密計算では  $1 \times 10^{-5}$  とし、近似計算では 0.1 とした。

圧入期間 5 年の近似計算の結果を求め、1 年ごと値を初期値として 5 プロセス (1 プロセス 1 CPU) で厳密計算を行い、収束判定条件を満たすまで繰り返す。

図-9 にサイクル 1、2、5 における CO<sub>2</sub> 圧入井内の圧力の経時変化を示す。厳密計算の結果を黒線、近似計算の結果を赤線で示した。その他の色のラインは、各プロセスでの厳密計算の結果を表している。また、各色のライン上の点は流体計算の収束時点を示している。この図からサイクル数が増加するに伴い、Parareal 法による時間方向の並列計算結果が厳密解 (黒線) に近づき、概ね 5 サイクルで収束することを確認した。

今後は、TOUGH2 の計算効率向上させるためにパイプライン法などと Parareal 法を合わせたアルゴリズムの検討が必要になる。

### ⑤メニョコアクラスタ向け検討

GPU は非常に多数のコアを搭載していることから、大規模なデータ並列計算に適している。また、共有メモリを前提とした並列化と対比して、GPU による並列計算は CPU 側のメモリとは別に GPU デバイス側のメモリに計算に必要なデータを用意する必要がある。本研究では、CPU と GPU 間のデータの転送および並列化部の指定が比較的容易に行える OpenACC ディレクティブを利用して TOUGH2-MP を GPU コンピューティングに対応さ

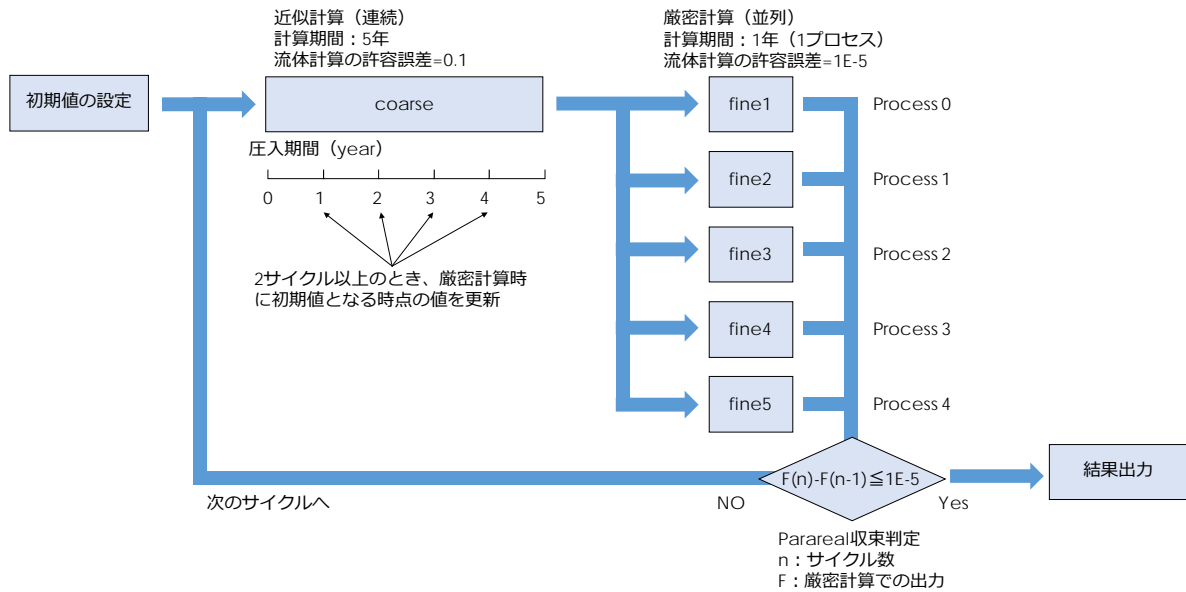


図-8 Parareal 法を用いた時間並列計算プロセス

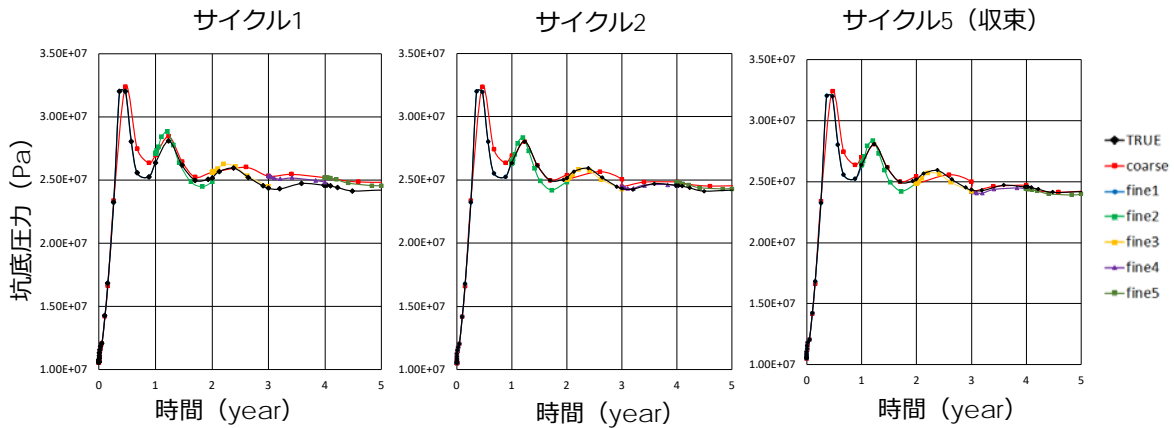


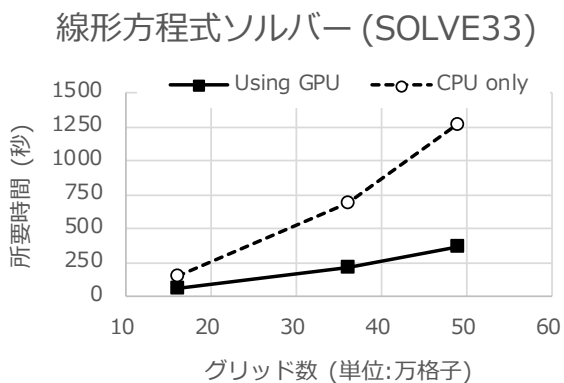
図-9 サイクル 1,2,5 における CO<sub>2</sub> 圧入圧の経時変化

せることを検討した。

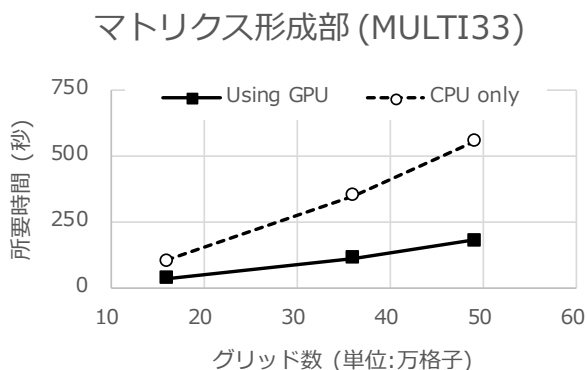
改良版 TOUGH2-MP はベクトル並列計算機である地球シミュレータでの利用のための改良に伴い、マトリクス形成部におけるネストループのデータ依存性が排除してあるため、並列化作業は比較的容易と考えられた。今回は GPU (NVIDIA Pascal SXM2 NVLink) を搭載したシステム Reedbush-H を計算環境として利用した。Reedbush-H では 1 ノード(2CPU×18 コア)に GPU が 2 基搭載されている。

TOUGH2-MP の計算時間の多くを占める、線形方程式ソルバー(SOLVE33)、マトリクス形成ルーチン(MULTI33)、状態方程式モジュール(EOS33)の 3 つを並列化の対象とし、前者 2 つに OpenACC デ

ィレクティブによる並列化を実施した。図-10 に CPU のみを用いた場合と GPU を利用した場合の各ルーチンの所要時間を示す。問題は 1km×1km の領域への CO<sub>2</sub> 圧入問題 (100,000 秒)で、分割グリッド数を 3 ケース用意した。1CPU, 2 プロセス, 1GPU(1 基)の条件下で計算を行い、GPU を利用することで 1/3 程度に計算時間を短縮できた。



(a) 線形方程式ソルバー



(b) マトリクス形成部

図-10 計算時間の比較 (1CPU, 2 プロセス, 1GPU)

ただし、ここで示した計算時間には MPI によるデータ通信の時間が含まれる。このため、計算時間の短縮率から GPU の性能が十分に発揮されているかを判断しづらくなっている。今後は、1 プロセスでの計算による性能評価を合わせて行う必要がある。

⑥実アプリケーションへの適用

二酸化炭素地中貯留の実問題へ改良版 TOUGH2-MP の適用を進めている(宮城ほか 論文 [2]、口頭 [2])。CCS を商業規模で実施する場合、年間 100 万 t を超える大量の CO<sub>2</sub> を圧入するため、複数の圧入井が必要となる。また、貯留層内の圧力上昇により圧入可能な CO<sub>2</sub> 量が制約されることが指摘されており、その解決策として、地層水の揚水により圧力上昇を緩和する坑井(圧力緩和井)設置が提案されている(例えば、藤田ほか, 2017)。CO<sub>2</sub> の圧入可能量や圧力緩和の効率は坑井の設置

位置や圧入/揚水スケジュールによって左右され、プロジェクトコストに大きな影響を与える。そこで本研究では、坑井配置設計を効率的に行うことを目的として、メタヒューリスティクス(遺伝的アルゴリズム、PSO、CMA-ES など)による最適化手法と改良版 TOUGH2-MP を組み合わせた最適化ツールを開発した(宮城ほか, 2017)。具体的には、複数の坑井配置に関わる設計変数(位置、圧入/揚水流量等)を変えながら CO<sub>2</sub> の地中貯留シミュレーションを繰り返し、圧入可能量などの目的関数を最大化あるいは最小化するような設計変数の最適値を探索するものである。このトライアンドエラー的な探索を行うには、通常 1000 ケース以上のシミュレーションを繰り返す必要があり、モデルの大幅な簡略化が求められる。

以下に一例を示す(宮城ほか, 2017)。図-11(a)は貯留層の浸透率分布である(水平範囲 20km × 20km、層厚 100m)。CO<sub>2</sub> の圧入井や圧力緩和井は浸透性の良い場所に配置するのが良いが、このような不均質な地層中での最適配置を直感だけで決定するのは必ずしも合理的でない。ここでは CO<sub>2</sub> 圧入井の位置を固定し、以下の目的関数と制約条件のもとで圧力緩和井の最適な設置位置を本手法によって探索した。

- ・目的関数:  $J = Q_{\text{prod}}/Q_{\text{inj}} \rightarrow$  最小化 (1)
- ・制約条件:

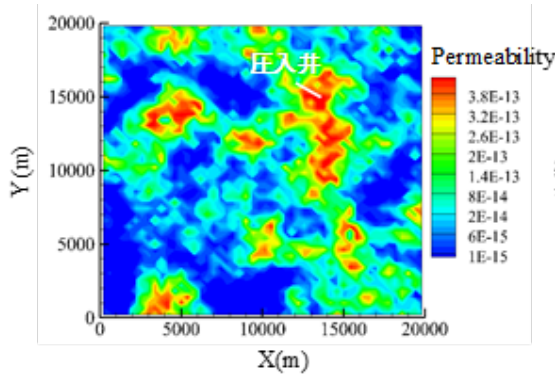
① 圧力緩和井に圧入した CO<sub>2</sub> が到達しない

$$V_{\text{ext\_CO}_2} = 0 \tag{2}$$

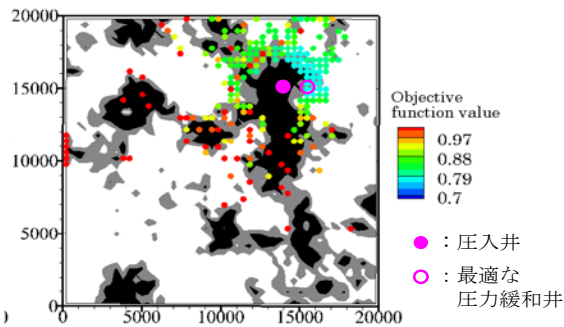
② 貯留層内圧力が上限値を超えない

$$\Delta P \leq \Delta P_{\text{crit}} \tag{3}$$

ここに、 $V_{\text{ext\_CO}_2}$  は、圧力緩和井における CO<sub>2</sub> の累積揚水量、 $\Delta P$  は初期からの圧力の上昇量、 $P_{\text{crit}}$  は許容圧力上昇量である。制約条件①は、圧力緩和井に CO<sub>2</sub> が到達すると、圧入した CO<sub>2</sub> が地表にリークすることになるため設定したものである。



(a) 貯留層モデルの浸透率分布 (平面図)



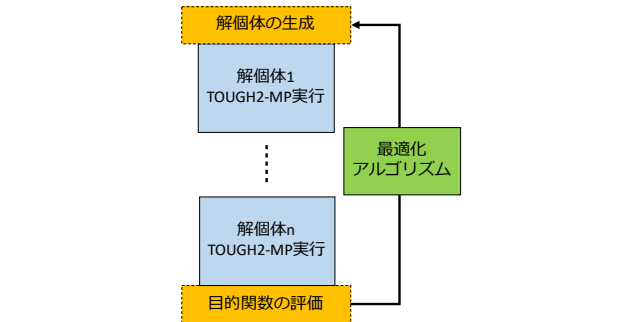
(b)最適な坑井位置の探索結果

図-11 坑井配置の最適化

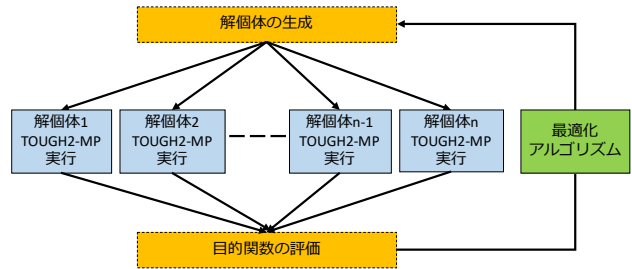
図-10 は、最適化計算の並列化の概念である。同図(a)は通常の逐次処理であり、1 世代の解個体の目的関数を全て計算した後に最適化アルゴリズムにより、次世代の解個体を生成するため、計算時間は、1 個体の計算時間×1 世代の解個体数×世代数となる。一方、(b)の並列化した場合には、1 個体の計算時間×世代数となり、1 世代の解個体数が 100 であれば 100 倍の計算時間短縮となる。探索により得られた最適な坑井位置を図-11(b)に示す。図中の小さな点は探索した地点であり、点の色は目的関数の値である。CO<sub>2</sub> が到達しない圧入井から離れており、かつ目的関数（揚水量）が小さい地点の中から最適な坑井位置が選ばれているのが分かる。なお、このような探索には通常は数千回のシミュレーションが必要となるため、特にモデルが大きい場合には実施が困難となる。

以上の通り、最適化アルゴリズム CMA-ES と改良版 TOUGH2 を組み合わせた最適化ツールを Oakforest-PACS に実装を完了し、10 万節点規模の

実規模モデルでのケーススタディーを実施した。その結果、流体計算の並列計算に加え、解個体並列化の効果により、従来は極めて困難であった多数の設計変数を比較的解像度の高いモデルで最適化することが実用的な時間で可能なことが分かった。



(a) 逐次処理



(b) 解個体並列化

図-12 最適化計算の並列化

## 6. 今年度の進捗状況と今後の展望

今年度の進捗状況（実施項目④～⑥）と今後の展望を述べる。

### ④ 時空間並列アルゴリズム

昨年度の結果をふまえて時間方向並列アルゴリズムを MGRID から Parareal に変更し、TOUGH2 へ実装した。現在までに正しい計算結果が得られることがある程度確認できた。パイプライン法などと組み合わせて計算効率を向上させるとともに、空間方向並列化との統合が今後の課題となる。

### ⑤ メニコアクラスタ向け検討

GPU クラスタ (Reedbush-H) へ TOUGH2-MP を実装した。GPU 性能が十分に発揮するには、改良版 TOUGH2-MP のループ中に含まれる MPI 通信を組み替えるなど、さらなるチューニングが必要と考えている。Oakforest-PACS 上でのハイブリッド



並列化の効果については今後、コア数を増加させた検討が必要である。

#### ⑥実アプリケーションへの適用

Oakforest-PACS 上への最適化ツールの実装とケーススタディーを実施した結果、流体解析の並列計算に加えて解個体並列化の効果により、通常の計算機では不可能な高解像度モデルでの最適化が実用的に可能な見通しが得られた。超並列計算機の有用な新たなアプリケーションを提示できたと考える。今後は、より実際のフィールドモデルに適用しながら実用ツールとしての完成を目指したい。

## 7. 研究成果リスト

### (1) 学術論文

- [1] 藤田クラウディア, 平塚裕介, 山本 肇, 中島崇裕, 薛 自求 (2017) : 二酸化炭素地中貯留時の貯留層内圧力上昇の抑制に関する数値解析検討, 地下水学会誌、第 59 巻、3 号.
- [2] 宮城充宏, 山本 肇, 薛自求 (2017) : 二酸化炭素地中貯留における坑井配置の最適化ツール開発, 大成建設技術センター報 第 50 号.

### (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] Nakajima, K. (2016): Parallel Iterative Solvers for Ill-conditioned Problems with Heterogeneous Material Properties, Procedia Computer Science 80, 1635-1645

[4] 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)

[5] Nakajima, K., Hanawa, T., (2017): Communication-Computation Overlapping with Dynamic Loop Scheduling for Preconditioned Parallel Iterative Solvers on Multicore/Manycore Clusters, IEEE Proceedings of 10th International Workshop on Parallel Programming Models & Systems Software for High-End Computing (P2S2 2017) in conjunction with the 46th International Conference on Parallel Processing (ICPP 2017), Bristol, UK

[6] Kawai, M., Ida, A., Nakajima, K. (2017): Hierarchical Parallelization of Multicoloring Algorithms for Block IC Preconditioners, IEEE Proceedings of the 19th International Conference on High Performance Computing and Communications (HPCC 2017), Bangkok, Thailand (in press)

[7] Miyagi, A., H. Yamamoto, T. Takami, M. Iiduka, K. Ono, K. Nakajima (2017) : Preliminary application of parareal for two phase fluid flow simulation in geological media with TOUGH2 code, 18<sup>th</sup> SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing (submitted).

### (3) 会議発表(口頭, ポスター等)

- [1] 埴敏博, 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), 情報処理学会第 157 回 HPC 研究会
- [2] 宮城充宏, 山本 肇, 薛自求 (2017) : 坑井配置の自動最適化手法の二酸化炭素地中貯留への適用、日本地球惑星科学連合大会
- [3] Hoshino, T., Ohshima, S., Hanawa, T., Nakajima, K., Ida, A. (2017): Pascal vs KNL: Performance

Evaluation with ICCG Solver, HPC in Asia  
Workshop Poster Session, ISC High Performance  
2017, Frankfurt, Germany

(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
- [2] 山本 肇(2017) : CCS に関わる超臨界 CO<sub>2</sub> の地中挙動解析、土木工学会誌、第 102 巻, 9 号、pp.34-35.