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－

大成建設株式会社　　正会員　○　山本　肇
東京大学　　中島　研吾

１．はじめに

著者等は，地球シミュレータ，T2K オープンスパコン，FX10 など，数 1000～数万個の CPU（コア）を同時動作させた大規模並列計算が可能な超並列コンピュータ上において，積分差分法に基づくオープンソース多相流体シミュレータ TOUGH2-MP[1), 2)]を導入し，疎行列ソルバーの変更などの改良を施して最大３千万自由度規模の大規模シミュレーションを実施してきた [3)～5)]．ここでは，二酸化炭素地中貯留を例として，現在までに得られている計算性能と計算事例を報告する．

２．二酸化炭素地中貯留と大規模数値計算

二酸化炭素地中貯留は，火力発電所などの排出源から回収した CO_2 を地下 800m 以深の貯留層に貯留するものであり，地球温暖化対策の中でも最も大規模な排出削減が可能と期待されている．現在，我が国の苫小牧 CCS 大規模実証試験（経済産業省）など，世界 70 箇所以上で商業／実証プロジェクトが進められている．その実施にあたっては，CO_2 圧入の操業中のみならず，閉鎖後の 100 年～1000 年以上に渡る長期的な安定性，あるいは副作用として生じるローカルな環境影響についても十分に吟味されなければならない．貯留された CO_2 の地中挙動を把握あるいは長期予測するための最も有力な方法は数値シミュレーションである．数値モデルには，温度や圧力条件で変化する超臨界 CO_2 の流体物性（密度，粘性，地下水への溶解度）や，地下水と CO_2 の相互作用（水相－CO_2 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，相当のモデルの単純化が求められる．本研究では，CO_2 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の提供を目指している．

３．並列計算コード TOUGH2-MP

本研究では，超臨界 CO_2 の流体特性を考慮できる多成分･多相流体シミュレータ TOUGH2-ECO2N[1)]を並列化した TOUGH2-MP[2)]を用いている．計算領域を予め分割し，各領域を CPU ごとに処理する領域分割法を採用している．各 CPU は，分割領域毎に熱力学変数の更新，質量・エネルギー方程式の組み立てなどを行う．各領域の線形方程式は並列計算用の反復法ソルバーAztec により複数 CPU で並列に解かれる．領域分割には，グラフ分割ライブラリ METIS を使用し，非構造グリッドに対応可能である．CPU 間のメッセージ授受には MPI ライブラリを使用している．

４．計算性能測定

著者らは，(独) 海洋研究開発機構が保有する地球シミュレータ(ES2)や東京大学の T2K オープンスパコン，FX10（「京」コンピュータの商用版）などの超並列計算機上に TOUGH2-MP を実装し，CO_2

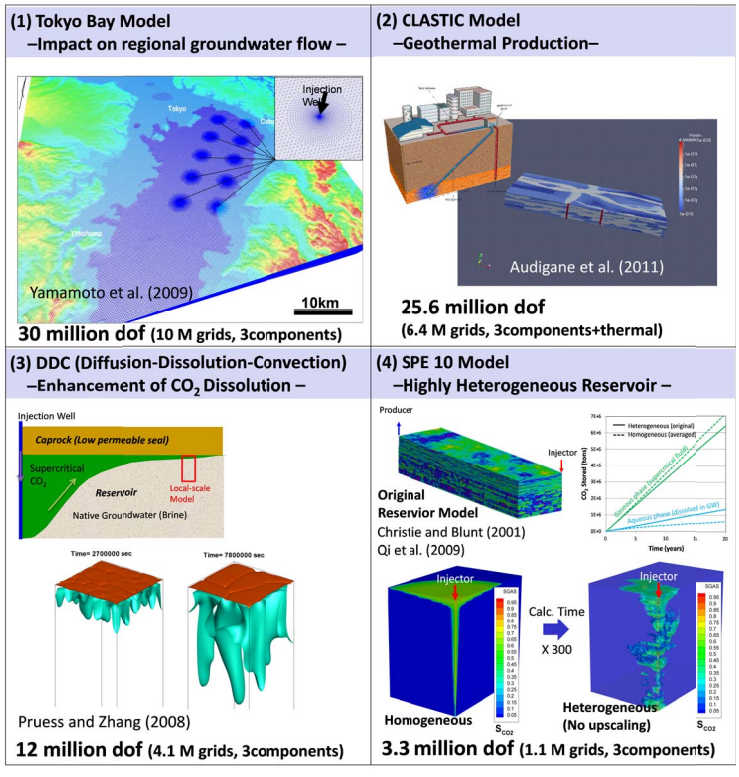


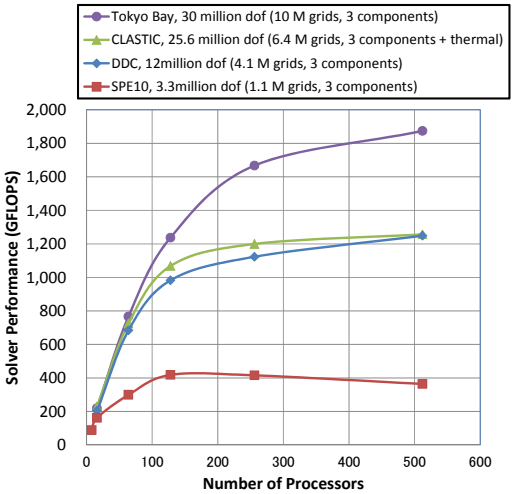
図-1 計算性能測定に用いたモデル [5)]

キーワード　大規模並列計算，多相流，二酸化炭素地中貯留，
連絡先　〒245-0051　神奈川県横浜市戸塚区名瀬町 344-1　大成建設(株)技術センター　TEL045-814-7237

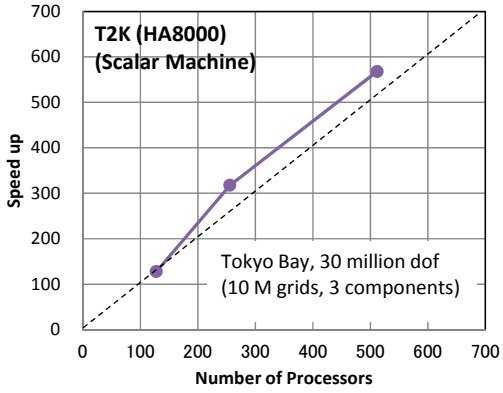
地中貯留に関連した数値シミュレーションを実施してきた[3)~5)]．地球シミュレータ(ES2)はベクトル型計算機であり，演算のベクトル化率（スカラ実行時の実行時間に占めるベクトル命令で実行可能な部分の実行時間の割合）の向上が必須である． しかし，TOUGH2-MP はスカラー型計算機を念頭に設計されているため，著者らは疎行列ソルバーの変更などの最適化を行なった結果，大幅な速度向上を得た[5)]．一方，T2K や FX10 などのスカラー型計算機においては，現時点では特筆すべき最適化作業は行っていない．

大規模並列計算で高速性能を得るためには，複数の CPU が同時に動作する割合を増やすことが重要である．例えば，一つの CPU に処理が集中し，他の CPU が動作待ちになる部分が多いプログラムでは性能を引出しにくい．アムダールの法則によれば，並列計算プログラムの性能向上率 S は $1/(1-\alpha+\alpha/N)$ で表される．ここに，α ：プログラム中で並列処理可能な部分の実行時間の割合，N：CPU の数である．α が大きいほど並列計算による性能向上が大きい．例えば，α が 90%の場合，いくら多くの CPU を使っても性能向上は 10 倍以上にはならない．1000 個以上の CPU を効果的に使用するには最低でも α ＝99.9%は必要である．

現在までに得られた計算性能の一例として，図-1 に示す節点数や自由度の異なる 4 つのモデルについて地球シミュレータ(ES2)上で計算性能を測定した結果を図-2a に示す．図から，計算モデルの規模（自由度;dof）が大きいほど，多くの CPU(コア)の並列計算による速度向上の効果が大きいことが分かる．上記の 4 モデルのうち，約 3000 万自由度（Tokyo Bay，約 1000 万節点）モデルの三成分二相流体の非定常解析について，T2K 上で得たコア数と速度向上の関係を図-2b に示す．コア数以上に速度向上する良好なスケーラビリティが得られている．同じモデルについて ES2 と T2K での計算時間を比較した結果を図-3 に示す．この計算をクアッドコア PC（4 コア）で行うとすれば数日以上を要するが，大規模並列計算を用いれば 10～30 分で解を得られる．ES2 と T2K を比較すると，ES2 の 16 コアは T2K の 512 コアよりも高速であり、ベクトル型計算機の実効性能の高さを示している．ただし，1 コア当りのピーク性能が ES2 は T2K の約 10 倍高速（ES2：102.4 GFlops，T2K：9.2GFlops）である点に加え、1 コアあたりの実効メモリバンド幅も ES2：約 200GB/s/コアに対して，T2K：約 1.25GB/sec/コアと 100 倍以上違う点に注意が必要である。



(a) 地球シミュレータ (ES2)



(b) T2K

図-2 スケーラビリティ

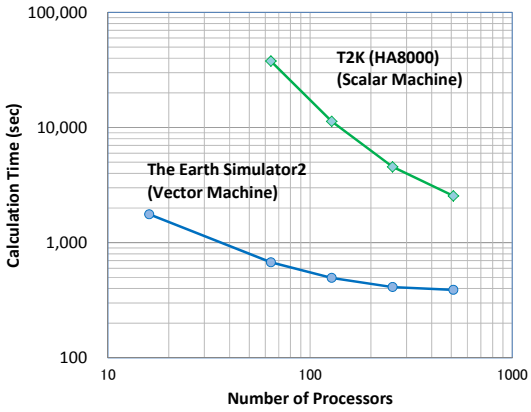


図-3 同一問題での計算時間の比較
（3000 万自由度モデル、50 時間ステップ）

５．おわりに

「京」などの近年のスカラー型スーパーコンピュータでは，並列処理の階層性 （CPU 間の通信を伴う MPI 並列，計算ノード内のコア間のスレッド並列）が大きな特徴となっている．現在の TOUGH2-MP は Flat MPI による並列化のみであり，今後は MPI と計算ノード内のコア間のスレッド並列を組み合わせた OpenMP/MPI ハイブリッド並列化などにも取り組み，大規模シミュレーションの性能向上を図っていきたい．

参考文献： 1) Pruess, K., Vadose Zone J., 3, 738-746, 2004. 2) Zhang, K. et al, LBNL-315E. LBNL, Berkeley, CA. 2008. 3) Yamamoto, H. et al., Int. J Greenhouse Gas Control, 3, 586-599, 2009. 4) Yamamoto, H. & C. Doughty, Int. J Greenhouse Gas Control, 5, 975-985, 2011. 5) Yamamoto, H. et al., Lecture Notes in Computer Science, 7851, 2013. 6) Audigane, P. D. et al., Eos Trans. AGU, 92(51), Abstract H51H-1302, 2011. 7) Pruess, K. & K. Zhang, LBNL-1243E, LBNL, Berkeley, CA, 2008. 8) Christie, M. A. & M. J. Blunt, SPE 66599, 2001.