

超並列コンピュータ上における多相流体と地球化学反応の連成解析

大成建設株式会社 正会員 ○ 山本 肇
 東京大学 中島 研吾
 北京師範大学 Keni Zhang

1. はじめに

二酸化炭素地中貯留や放射性廃棄物地層処分では、気液二相流れと地球化学反応の連成解析が必要になる場合がある。しかし、計算時間や計算容量の制約から、解析モデルの大幅な単純化が求められることが多い。そこで本研究では、大規模並列計算が可能な多成分・多相流体と地球化学反応の連成解析コードを新たに開発した。今回、この連成解析コードを数万コア (CPU) を有する超並列計算機に実装し、その計算性能を測定したのでその結果を報告する。

2. 並列計算コード TOUGHREACT-MP

TOUGH2¹⁾は、非等温・多成分・多相系流体シミュレーターとして多くの実績のある3次元積分差分法コードである。一般に、多相流体解析は非線形性が強く、大規模な問題に解くためには多くの計算時間を要するため、実務的には解析モデルの大幅な単純化が求められることが多い。そこで著者らは、TOUGH2を多数のCPU(コア)による並列計算機上で動作するように並列化したTOUGH2-MP²⁾を、地球シミュレータ(ES2, (独)海洋研究開発機構保有)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実装し、CO₂地中貯留に関連した数値シミュレーションを実施しながら、ソルバー改良などによる性能向上に努めてきた^{4)~6)}。

今回、TOUGH2をベースに開発された地球化学反応との連成解析コードであるTOUGHREACT V1.2³⁾についても、並列計算(MPI並列)が可能な解析コードを新たに開発した⁶⁾。TOUGHREACTの連成スキームは、図-2に示すように、TOUGH2の多相流体解析と各相内の移流分散解析ならびに地球化学反応計算をシーケンシャルに行うものである。地球化学モデルには水溶性錯体、ガス溶解/脱ガス、イオン交換、収脱着などの平衡反応の他、鉱物溶解/沈殿などは反応速度も考慮できる。並列化スキームは、TOUGH-MPと同様である。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、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。

3. 超並列スーパーコンピュータ上での計算性能測定

今回は、東京大学が保有するOakleaf-FX(富士通FX-10, 図-2)にTOUGHREACT-MPを実装して計算性能を測定した結果を示す。

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

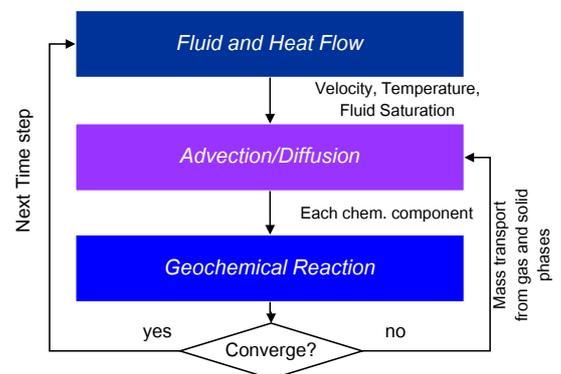


図-1 多相流体と化学反応の連成解析 (TOUGHREACT)

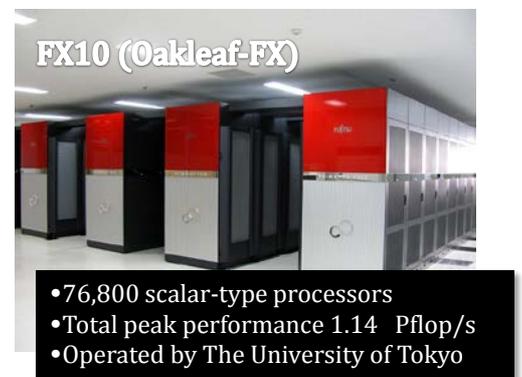


図-2 超並列スパコン Oakleaf-FX

キーワード 並列計算, 連成解析, 多相流, 地球化学計算, 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

性能を引出しにくい。

図-3 に示すような水理地質構造モデル (約 1000 万節点, 平面方向約 60km 四方, 深度方向約 3km) において年間 1 千万 t の CO_2 を 10 本の圧入井から連続圧入する CO_2 地中貯留シミュレーション⁵⁾ を対象とし, 多相流体モデル(TOUGH2-MP) ならびに地球化学反応との連成解析 (TOUGHREACT-MP) の各々について計算に要する時間を測定した。多相流体モデルでは塩水帯水層中での超臨界 CO_2 の挙動のみを対象とする。1 節点あたり 3 自由度 (H_2O , CO_2 , NaCl の 3 成分, 気液 2 相) を解くため, 全体で約 3000 万自由度の問題となる。地球化学反応との連成解析では, 地中に圧入された CO_2 が長期間 (例えば 100 年以上) の地球化学反応により, 炭酸塩鉱物として固定化される過程を解析する。1 節点あたり, 上記の 3 自由度に加え, 地下水中の基本化学種の濃度として 13 個が変数として加わるため, 全体として 1 億 6 千万個の主変数を解くことになる。ただし, 上述の通り, TOUGHREACT の多相流体と地球化学の連成解析はシーケンシャルな弱連成であるため, 解くべき行列の最大サイズは多相流体解析の約 3000 万自由度相当である。測定結果として FX10 上で得たコア数と計算時間 (1 計算ステップ当りの平均) の関係を図-4 に示す。TOUGH2-MP, TOUGHREACT-MP とともに, 約 1 万コアまで線形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。特に, TOUGH2-MP については, 行列格納方式ならびに行列ソルバーの変更により, 約 1 万コア以上でも速度向上が認められる⁶⁾。

図-5 には, TOUGHREACT-MP 内の各パート (多相流体解析, 物質移行解析, 地球化学計算) の計算時間を分けて示す。これを見ると, 地球化学計算は, 節点間の依存性が無く各コアでの計算の独立性が高いため, 並列計算への適合性が高く, コア数の増加に対して継続的な速度向上が得られた。一方, 多相流体解析と物質移行解析については, 約 1 万コアで速度向上がリミットされている。

4. おわりに

今後, TOUGHREACT-MP の多相流体解析パートについても TOUGH2-MP と同様にソルバー改良などのチューニングを行うことで 1 万コア以上でのスケーラビリティを向上できると考えている。近年のスカラ型スーパーコンピュータでは, 並列処理の階層性が大きな特徴となっている。現在は Flat MPI による並列化のみであり, 今後は CPU 間の通信を伴う MPI 並列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る。

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) Xu et al., LBNL-55460, LBNL, Berkeley, CA, 2004. 4) Yamamoto, H. et al., *Lecture Notes in Computer Science*, 7851, pp.80-92, 2013. 5) Yamamoto, H. et al., *Int. J Greenhouse Gas Control*, 3, 586-599, 2009. 6) Yamamoto, H. et al., *Energy Procedia*, 63, 3795-3804.

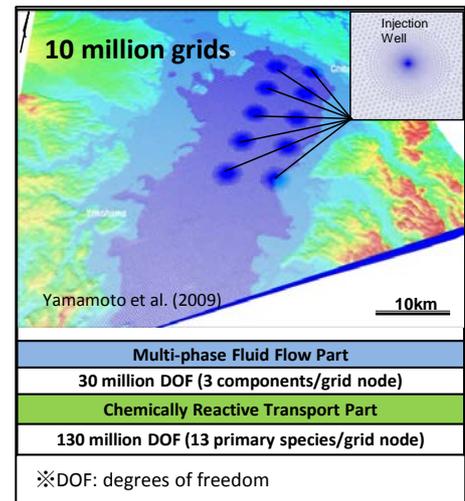
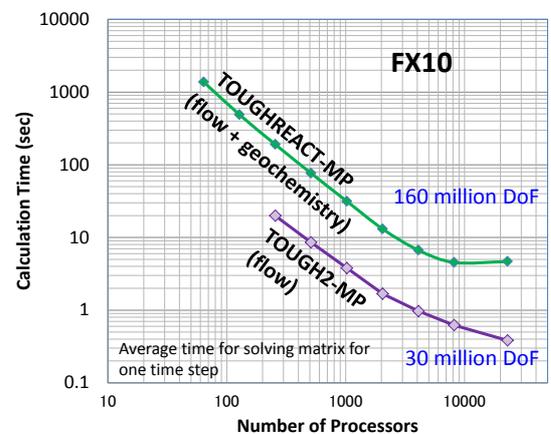
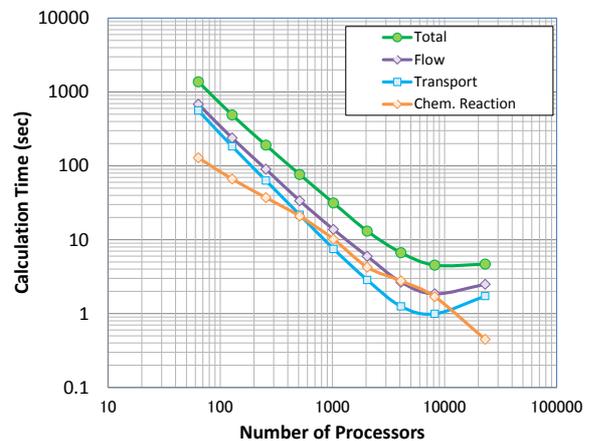


図-3 計算速度測定に用いた解析モデル



(a) TOUGH-MP と TOUGHREACT-MP



(b) TOUGHREACT-MP の計算パート別
図-4 コア数と計算時間の関係 (FX-10)