

# 全球水循環シミュレーションモデルの構築

## プロジェクト責任者

多田 和広 株式会社地圏環境テクノロジー

## 著者

荒金 匠<sup>\*1</sup>、多田 和広<sup>\*1</sup>、廣川 雄一<sup>\*2</sup>、西川 憲明<sup>\*2</sup>、岩沢 美佐子<sup>\*2</sup>、浅野 俊幸<sup>\*2</sup>

\*1 株式会社地圏環境テクノロジー

\*2 国立研究開発法人海洋研究開発機構

利用施設：国立研究開発法人海洋研究開発機構 地球シミュレータ

利用期間：平成 26 年 8 月 7 日～平成 27 年 8 月 6 日

## アブストラクト

地球温暖化や人口増加による多量の地下水揚水に伴い、地下を含めた水循環は確実に変化している。この変化を定量的にとらえることは、将来におけるこれらの問題の解決の為に重要である。本プロジェクトでは地圏流体シミュレータ GETFLOWS を用いて、世界の主要大陸における水循環を定量的に評価することを目的とする。

本年度の目的は、UV2000 上での GETFLOWS の性能評価である。性能評価の結果、以下の知見を得た。

1. GETFLOWS の UV2000 上での計算速度は、弊社 PC クラスタと同等である。
2. 性能評価ツール Perfsuite を用いた解析により、弊社 PC クラスタ環境に最適化されたマトリックスソルバーは、UV2000 上でも同様に機能している。したがって GETFLOWS の UV2000 への最適化の必要性は低い。
3. 大規模モデルを超高並列で実行した際に生じたファイル読み込み時間の増大は、work 領域、RAM disk 等を有効に使うことにより解消された。

キーワード：地下水解析、水循環、大規模シミュレーション

## 1. 本プロジェクトの概要

### 1.1. 目的

図 1 に示される世界の主要大陸を対象として、地表水、地下水を統合した水循環解析モデルの構築を行う。この構築した解析モデルを用いて、地球温暖化や人口増加に伴う渇水、洪水等の水問題の定量的評価を行い、問題解決に資する情報を得ることを目的とする。

地下水を含めた全球規模の水循環問題の定量的評価は、世界的に見て例がない。そのため本プロジェクトは、これら諸問題に対する対策のための、基礎的な資料となると考えられる。

今年度は最初の試みとして、UV2000 を利用した場合の全球水循環モデルの実現可能性を評価する。

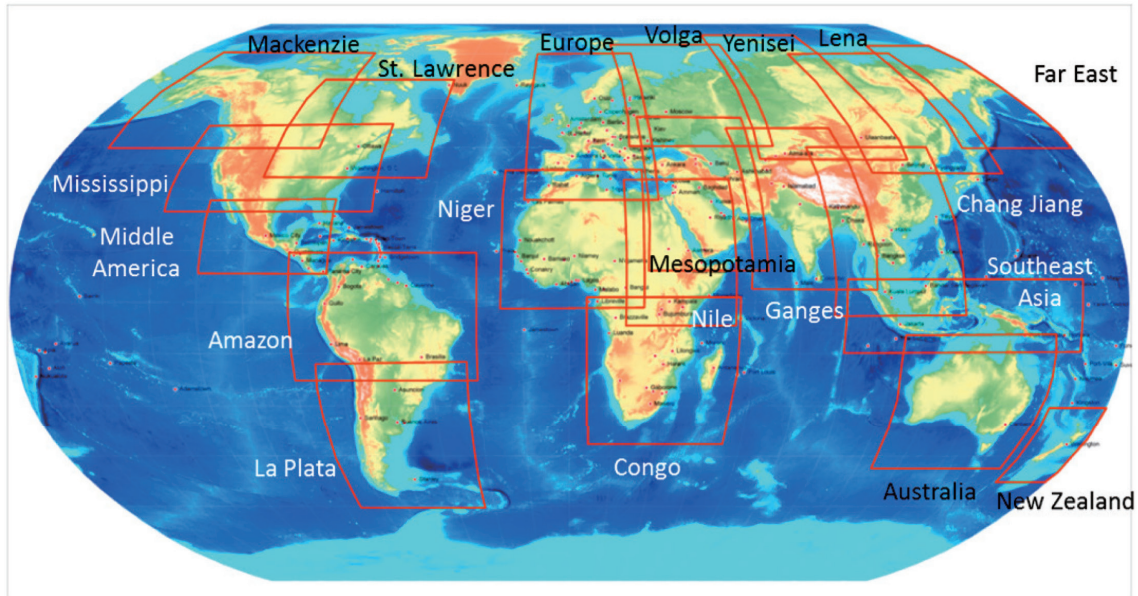


図1 全球シミュレーションの対象領域

## 1.2. GETFLOWS 概要

本解析には、多相多成分流体を対象とした汎用地圏流体シミュレータ GETFLOWS (General-purpose Terrestrial FLuid-fLOW Simulator) (H. Tosaka, et al., 2010<sup>1)</sup>) を用いた。本シミュレータが対象とする地圏水循環系の概念を図2に示す。

本シミュレータは地下空間におけるダルシー則に従う多孔質媒体中の水・空気2相流れに加え、地

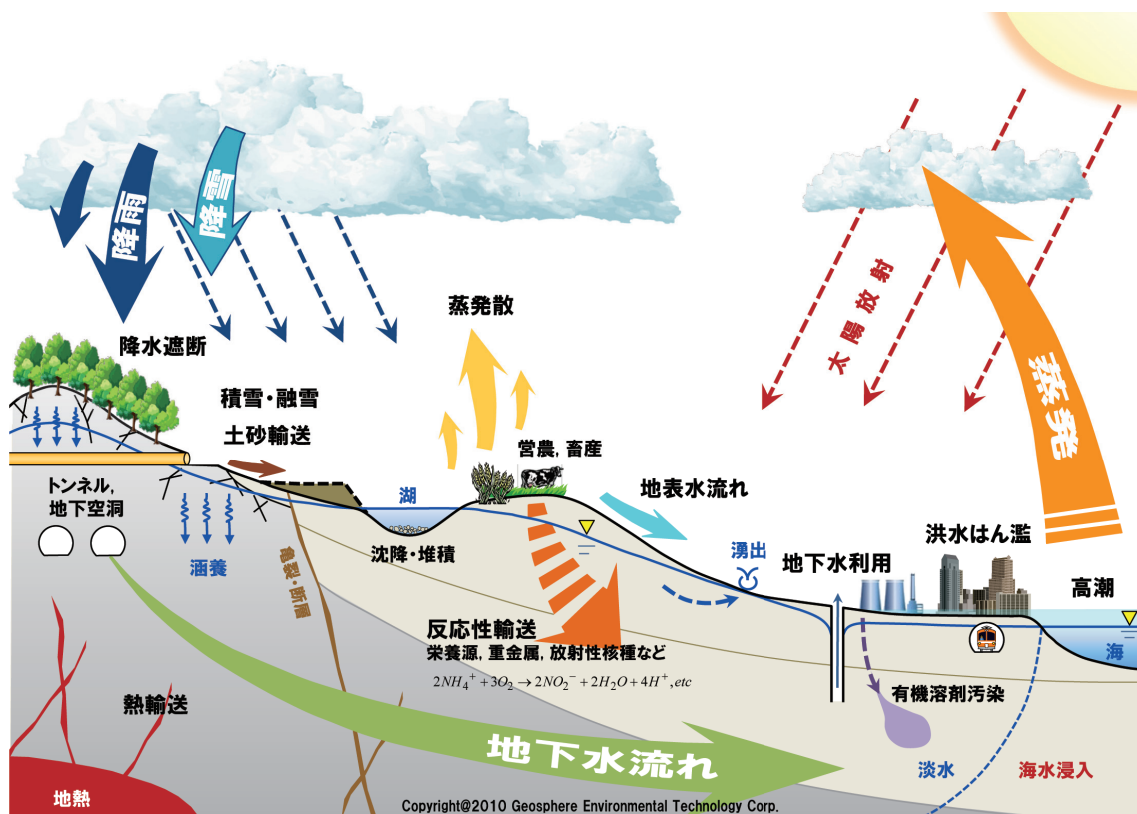


図2 汎用地圏流体シミュレータ GETFLOWS が対象とする地圏水循環系の概念

上空間におけるマニング則に従う地表流れを完全に連成して解析することが可能である。さらに、土砂輸送や化学物質、熱輸送を同時に取扱うことができる。以下では、基本となる等温状態の水・空気 2 相流れに関する支配方程式や数値解法について示す。

等温状態における流れの支配方程式は以下に示す水相、空気相の質量収支式によって記述される。

$$\nabla \cdot (\rho_{ws} v_w) - M_{ws} = \frac{\partial}{\partial t} \left( \rho_{ws} \phi \frac{S_w}{B_w} \right) \quad (1)$$

$$\nabla \cdot (\rho_{as} v_a) - M_{as} = \frac{\partial}{\partial t} \left( \rho_{as} \phi \frac{S_a}{B_a} \right) \quad (2)$$

式中の記号の説明は以下のとおりである。

$\rho_{ps}$  ; 標準状態における流体相  $p(= w, a)$  の密度 ( $\text{kg/m}^3$ )

$v_p$  ; 流体相  $p(= w, a)$  の流速 ( $\text{m/s}$ )

$M_{ps}$  ; 標準状態における流体相  $p(= w, a)$  の生産・消滅量 ( $\text{kg/m}^3/\text{s}$ )

$\phi$  ; 間隙率 ( - )

$S_p$  ; 流体相  $p(= w, a)$  の飽和率 ( - )

$B_p$  ; 流体相  $p(= w, a)$  の容積係数 ( $\text{m}^3/\text{m}^3$ )

$t$  ; 時間 (s)

$w, a$  ; 相を識別するための記号 (それぞれ水相、空気相) を示す

流体相  $p$  の流速  $v_p$  は以下の式で評価する。後述する地表層格子における水平方向の水の流速に対しのみマニング則を仮定した開水路流れの浅水波近似式に拡散波近似を適用した (3) 式を用い、その他にはダルシー則を仮定した (5) 式を用いる。

$$v_{wx} = -\frac{R_x^{\frac{2}{3}}}{n} \sqrt{\left| \frac{\partial \xi}{\partial x} - \frac{\partial h}{\partial x} \cos^2 \theta_x \right|} \operatorname{sgn} \left( \frac{\partial \xi}{\partial x} - \frac{\partial h}{\partial x} \cos^2 \theta_x \right) \quad (3)$$

$$v_{wy} = -\frac{R_y^{\frac{2}{3}}}{n} \sqrt{\left| \frac{\partial \xi}{\partial y} - \frac{\partial h}{\partial y} \cos^2 \theta_y \right|} \operatorname{sgn} \left( \frac{\partial \xi}{\partial y} - \frac{\partial h}{\partial y} \cos^2 \theta_y \right) \quad (4)$$

$$v_p = -\frac{K_p k_{rp}}{\mu_p B_p} \nabla \Psi_p \quad (5)$$

式中の記号の説明は以下のとおりである。

$v_w$  ; 水深で平均化した流動方向毎の流速 ( $\text{m/s}$ )

$R_x, R_y$  ; 流動方向  $x, y$  成分の径深 (m)

$n$  ; マニングの粗度係数 ( $\text{m}^{-1/3}\text{s}$ )

$\xi$  ; 河床高 (m)

$h$  ; 水深 (m)

$\theta_x, \theta_y$  ; 流動方向  $x, y$  成分の斜面勾配 ( - )

$x, y$  ; 流動方向  $x, y$  成分の距離 (m)

$K_p$  ; 流体相  $p(= w, a)$  の絶対浸透率 ( $\text{m}^2$ )

$k_{rp}$  ; 流体相  $p(= w, a)$  の相対浸透率 ( - )

$\mu_p$  ; 流体相  $p(= w, a)$  の粘性係数 (Pa · s)

$\Psi_p$  ; 流体相  $p(= w, a)$  の流体ポテンシャル (Pa)

水相、空気相の流体ポテンシャルは、それぞれ次式で表される。

$$\Psi_w = P_w - \rho_w g Z \quad (6)$$

$$\Psi_a = P_a - \rho_a g Z \quad (7)$$

ここに、 $Z$  は下方に測った距離 (深度)  $P_w$ 、 $P_a$  はそれぞれ水相、ガス相の圧力、 $\rho_w$ 、 $\rho_a$ 、 $g$  はそれぞれ水相、空気相の密度、重力加速度である。基礎方程式中の未知量には  $P_a$ 、 $S_w$  をとり、他のパラメータは以下のような関数として扱う。

$$P_c = P_c[S_w] = P_a - P_w \quad (8)$$

$$\phi = \phi[P_a] = \phi_0(1 + C_r(P_a - P_0)) \quad (9)$$

$$k_{rp} = k_{rp}[S_w] \quad (10)$$

$$B_p = B_p[P_p, T_p] \quad (11)$$

$$\rho_p = \rho_p[P_p, T_p] = \rho_{ps}/B_p[P_p, T_p] \quad (12)$$

$$\mu_p = \mu_p[P_p, T_p] \quad (13)$$

ここに、 $P_c$  は水 - 空気系の毛細管圧力 (Pa) であり、式中の  $k_{rp}[S_w]$  などは  $k_{rp}$  が  $S_w$  の関数であることを意味している。また、 $C_r$  は固相の圧縮率 (1/Pa) を示す。

空間離散化は、複雑な地形起伏や地盤物性分布を完全三次元格子を用いて表現可能な積分型有限差分法 (Integral Finite Difference Method: IFDM) による。格子形状にはコーナーポイント型差分格子と呼ばれる多面体形状を用いることができ、それぞれの格子体積および隣接格子間の絶対浸透率を正確に評価する。本手法は格子毎の厳密な質量収支を保存することができるため、油層工学などの多相流れを取り扱う分野に多くの適用実績をもつ。離散化手法に関してはライナー・ヘルミック (2004)<sup>2)</sup> が詳しい。

強い非線形性を有する三次元流体問題を解く必要性から、時間離散化には方程式系の完全陰的有限差分展開を行ったものにニュートン・ラブソン法を適用し、各流体成分の方程式を反復的に解く手法を採用している。基本方程式を上記 IFDM によって空間離散化すると 7 重対角行列を係数行列とした連立方程式を得る。行列の各成分は解くべき変数である空気相圧力、水相飽和率、温度を未知数とした  $3 \times 3$  小行列となり、システム全体の自由度は格子数  $\times$  未知数となる。これを Nested Factorization (J. R. Appleyard, et al., 1981<sup>3)</sup>) と呼ばれる三次元構造格子の入れ子構造に着目した前処理を行い共役残差法で解く。上述した流体圧縮性や 2 相流パラメータの非線形性はニュートン・ラブソン法により繰り返し収斂させる。また、大容量計算を高速処理するため、非線形反復過程の中で収斂した格子をソルバーから自動的に除外する逐次陽化処理 (Successive Locking Process) (H. Tosaka, et al., 1987<sup>4)</sup>) や領域分割法 (Domain Decomposition Method) による高速並列計算を採用し、実用規模の大規模三次元問題をより効率的に解く。

### 1.3. 実施項目

本年度の実施項目を以下に示す。

- GETFLOWS の計算速度、並列化効率を評価
- 計算開始前のファイル読み込み時間を調査
- 性能評価ツールを用いたプログラムのホットスポットの特定

## 2. 実施内容

### 2.1. GETFLOWS の計算速度、並列化効率のための解析モデル

GETFLOWS のマトリックスソルバーのアルゴリズムは、ベクトルマシン環境には適していない。そのため今回の調査では UV2000 上での性能評価を行った。

使用したモデルは格子数 658,752 の Model1、格子数 6,834,000 の Model2、格子数 27,336,000 の Model3 である (表 1)。

まず比較的小規模な Model1 を用いて、弊社が保有する PC クラスタ環境での計算時間、並列化効率と、UV2000 における計算時間、並列化効率を調査する。PC クラスタ環境について表 2 にまとめる。その後、比較的中規模、大規模な Model2、Model3 を用いて、高並列化時における計算時間、並列化効率を調べた。

次に高並列化時に顕著になった計算開始前のファイル読み込み時間の増大を軽減するための調査を行った。さらに UV2000 における GETFLOWS アルゴリズムのホットスポットを、性能評価ツールを用いて調査した。

表 1 性能調査に使用したモデル設定

	Nx	Ny	Nz	総格子数
Model1	146	141	32	658,752
Model2	340	670	30	6,834,000
Model3	680	1340	30	27,336,000

表 2 自社 PC クラスタ環境

ハードウェア/ソフトウェア	数量	仕様・概要
計算機サーバ	CPU	170 Intel Core i7 3960X Extreme (6 Cores, 3.3GHz)
	メモリ	170 16GB (4GB × 4)
	内蔵 HDD	170 1TB 7200rpm S-ATA HD
	ネットワーク	170 Gigabit LAN オンボード
	OS	170 Linux CentOS V6.2 (64bit)
	ストレージ	30 バックアップ用含む, 3TB
	ネットワークハブ	15 Gigabit 対応スイッチングハブ
開発環境	Fortran	— Intel Fortran
	MPI	— MPICH2

### 2.2. パフォーマンス調査 (Model1)

Model1 (総格子数 658,752) を対象とした場合の、コア数に対する計算時間を弊社所有の PC クラスタ環境と UV2000 で比較したものを表 3 に示す。また、コア数に対する計算時間と並列化効率の関係をグラフ化したものを図 3 に示す。コア数の増加とともに計算時間の減少、並列化効率の増加が示されている。計算時間は弊社所有の PC クラスタ環境の方が短くなる傾向があるが、これは CPU のクロックの相違 (PC クラスタ: 3.3GHz、UV2000: 2.6GHz) に起因するものである。並列化効率は

16コア程度までは、コア数にほぼ線形で増加していくが、それ以降はやや効率が落ちる傾向が見られた。これは、プロセス間の通信の肥大化に起因すると考えられる。

表3 コア数に対する計算時間の比較 (Model1)

コア数	計算時間 (sec.) (PC クラスタ)	計算時間 (sec.) (UV2000)	格子数 (1 コアあたり)
1	2,063	2,850	658,752
2	1,123	1,352	329,376
4	506	644	164,688
8	245	367	82,344
16	134	202	41,172
32	84	125	20,586
64	62	83	10,293

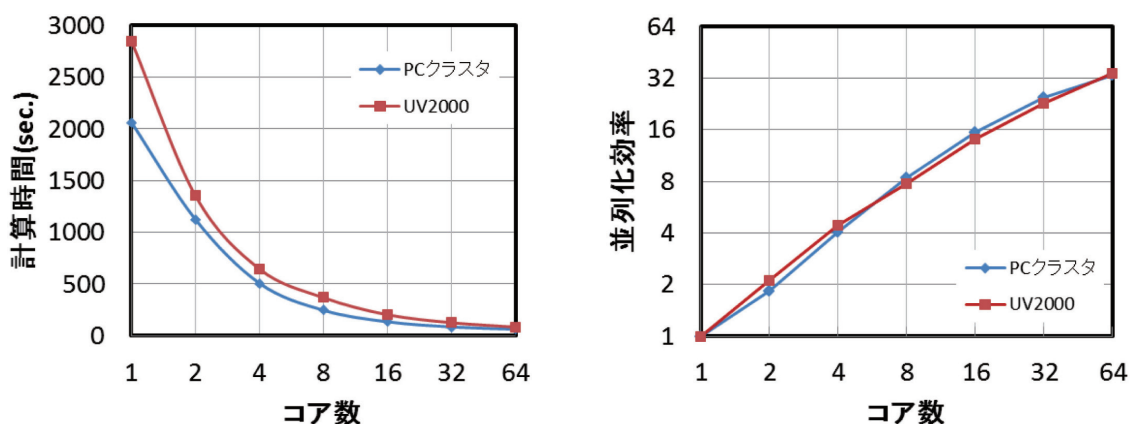


図3 コア数と計算時間、並列化効率の関係 (Model1)

### 2.3. パフォーマンス調査 (Model2)

Model2 (総格子数 6,834,000) を対象とした場合の、コア数に対する計算時間および並列化効率の算定結果を図4に示す。また、この関係をグラフ化したものを図4に示す。256コアまではコア数の増加とともに計算時間の減少、並列化効率の増加が示されているが、これを超えると逆の傾向に転じている。これは、1コアあたりの格子数が小さいこと、プロセス間の通信の肥大化に起因すると考えられる。

表4 コア数に対する計算時間、並列化効率の算定結果 (Model2)

コア数	計算時間 (sec.) (UV2000)	並列化効率	格子数 (1 コアあたり)
64	293	1	106,781
128	163	1.798	53,391
256	124	2.363	26,695
512	132	2.220	13,348
1024	324	0.904	6,674

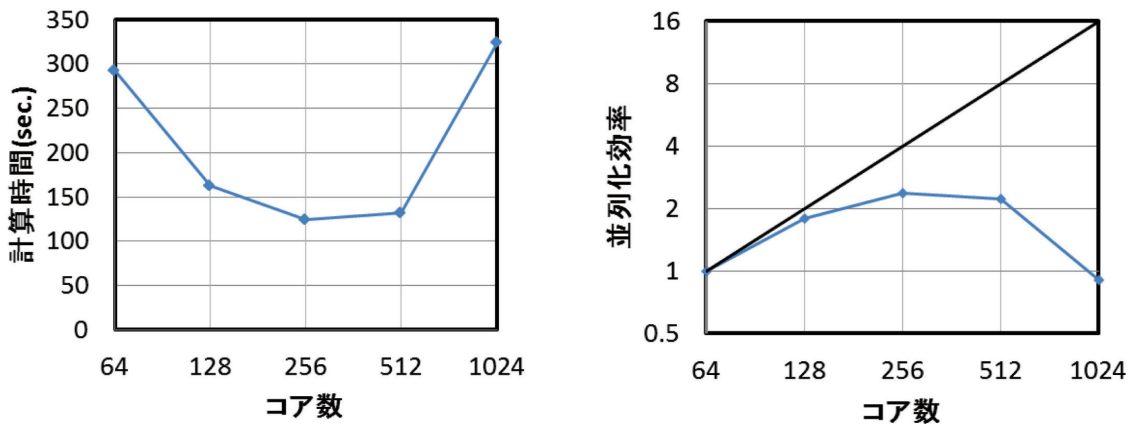


図4 コア数と計算時間、並列化効率の関係 (Model2)

## 2.4. パフォーマンス調査 (Model3)

Model3 (総格子数 27,336,000) を対象とした場合の、コア数に対する計算時間および並列化効率の算定結果を表5に示す。また、この関係をグラフ化したものを図5に示す。Model3においても、Model2と同様に、512コアまではコア数の増加とともに計算時間の減少、並列化効率の増加が示されているが、これを超えると逆の傾向に転じている。これは、1コアあたりの格子数が小さいこと、プロセス間の通信の肥大化に起因すると考えられる。Model2の結果と併せると、1コアあたり100,000以上の格子数を割り当てると、並列化効率が良くなる解釈できる。

さらに高並列で計算実行する際、ファイル読み込み時間が非常に長くなる問題が見られた。これについて調査した結果を、次項で示す。

表5 コア数に対する計算時間、並列化効率の算定結果 (Model3)

コア数	計算時間 (sec.) (UV2000)	並列化効率	格子数 (1コアあたり)
64	1786	1	427,125
128	876	2.004	213,563
256	508	3.516	106,781
512	346	5.162	53,391
1024	444	4.023	26,695

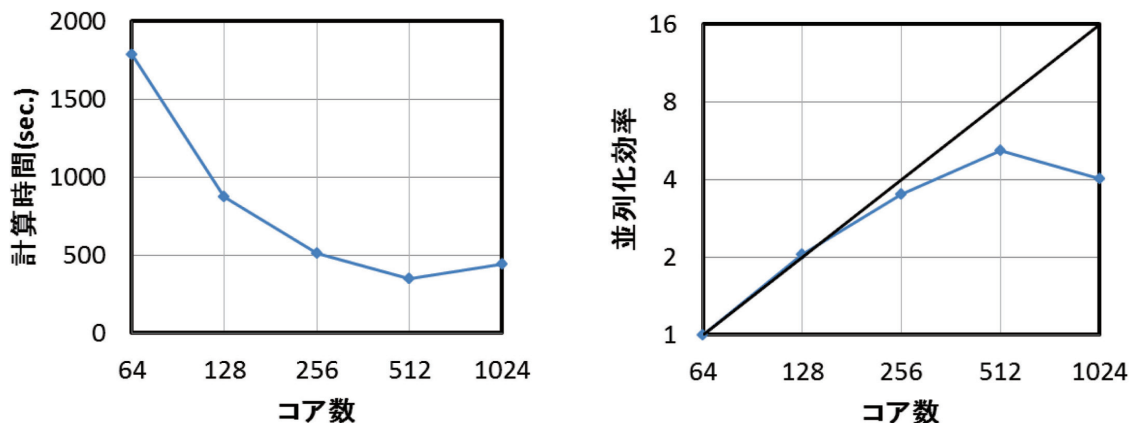


図5 コア数と計算時間、並列化効率の関係 (Model3)

## 2.5. ファイル読み込み時間の調査

大規模なモデル (Model3) を高並列で実行した際、計算開始前のファイル読み込み時間が増大する。これは大量のテキストデータをすべてのプロセスが読み込むためである。読み込み時間の軽減のため、work 領域、RAM disk 上にデータを置き、どのようにファイル読み込み時間が変化するか調査した。

図 6 に結果を示す。work 領域、RAM disk 上にデータを読み込ませると、読み込み時間は 10 ~ 80 倍ほど高速化した。また超並列化時には work 領域にデータを置く方が適していることも示された。なお、ファイル形式によってはこの限りでない場合があるため、ファイル形式の異なる大量のデータを読み込む際には別途同様の調査をする必要がある。

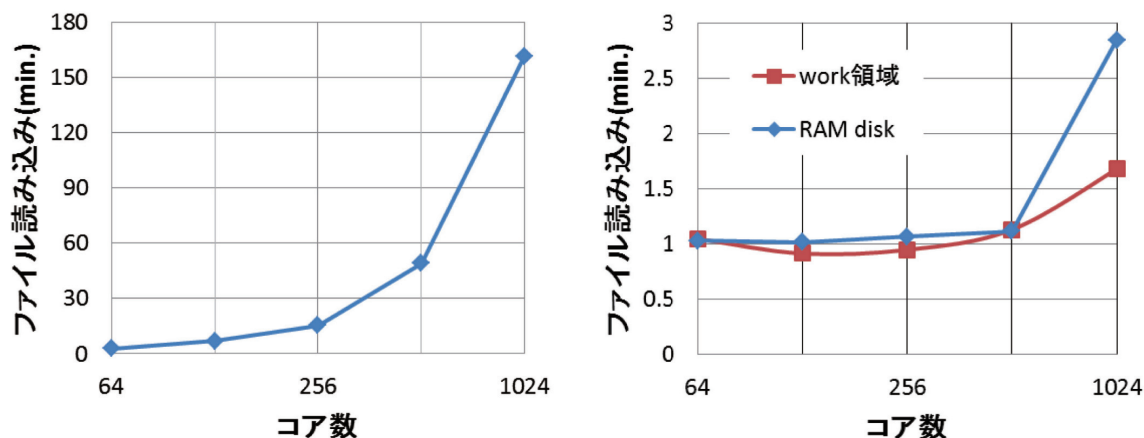


図 6 (左) Model3、data 領域にファイルを置いて実行した場合のファイル読み込み時間。  
(右) Model3、work 領域と RAM disk 上にファイルを置いた場合のファイル読み込み時間。

## 2.6. 性能評価ツール Perfsuite を用いたホットスポット調査

GETFLOWS は弊社 PC クラスタ環境に最適化されている。UV2000 において動作させる際に最適化の必要性を確かめるため、性能評価ツール Perfsuite を用いてホットスポットを特定し、評価した。

GETFLOWS の演算フローチャートを図 7 に、結果を表 6 に示す。サブルーチン毎の演算割合は両者で若干異なるが、ソルバー部が総演算時間の約 80% を占める点是不変である。このことから PC クラスタに最適化された現状のソルバーは UV2000 においても機能していると考えられ、UV2000 に特化した最適化の必要性は小さいと結論付けた。

UV2000 のパフォーマンスをより十分に発揮させるためには、openMP と MPI を組み合わせたハイブリッド並列が考えられる。また、FlatMPI による高速化事例も存在している。しかしながら、これらの並列化手法を組み込むためには、ソースコードやアルゴリズムの大幅な書き換えが必要となるため、今回のパフォーマンス調査においては、現状以外の並列化手法による性能評価は実施していない。

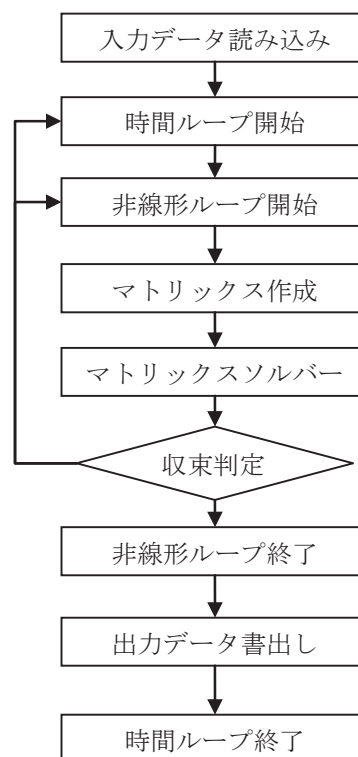


図 7 GETFLOWS の演算フローチャート



表6 性能評価ツールを用いた GETFLOWS の演算プロファイル (左: 自社環境、右: UV2000)

演算割合	累積	サブルーチン名	役割	演算割合	累積	サブルーチン名	役割
23.24%	23.24%	nest1	ソルバー(前処理部)	34.06%	34.06%	nest1	ソルバー(前処理部)
18.35%	41.59%	orthom	ソルバー	18.83%	52.89%	nest2	ソルバー(前処理部)
18.32%	59.91%	nest2	ソルバー(前処理部)	13.13%	66.02%	orthom	ソルバー
14.32%	74.23%	nest3	ソルバー(前処理部)	12.34%	78.36%	nest3	ソルバー(前処理部)
7.22%	81.45%	flowex	係数行列作成部	5.53%	83.89%	flowex	係数行列作成部
2.61%	84.05%	dfckrp	係数行列作成部	2.40%	86.29%	dfckrp	係数行列作成部
1.76%	85.82%	inters	係数行列作成部	2.19%	88.48%	inters	係数行列作成部
1.74%	87.56%	nest2t	ソルバー(前処理部)	1.74%	90.22%	nest2t	ソルバー(前処理部)
1.52%	89.07%	dfcpcp	係数行列作成部	1.40%	91.62%	__intel_new_memset	
1.40%	90.47%	tritri	係数行列作成部	1.36%	92.98%	dfcpcp	係数行列作成部
1.23%	91.70%	floweq	係数行列作成部	0.98%	93.96%	tritri	係数行列作成部
1.10%	92.80%	solint	ソルバー	0.57%	94.53%	linin	係数行列作成部
0.94%	93.73%	colum3	ソルバー(前処理部)	0.57%	95.10%	solutn	ソルバー
0.88%	94.61%	solutn	ソルバー	0.54%	95.64%	solint	ソルバー
0.84%	95.45%	colum2	ソルバー(前処理部)	0.47%	96.11%	colum3	ソルバー(前処理部)
0.71%	96.16%	mateqn	ソルバー	0.46%	96.57%	colum2	ソルバー(前処理部)
0.66%	96.82%	accuml	係数行列作成部	0.45%	97.02%	dfcvis	係数行列作成部
0.58%	97.40%	__intel_memset		0.43%	97.45%	accuml	係数行列作成部
0.52%	97.92%	dfcvis	係数行列作成部	0.41%	97.86%	dfcfvf	係数行列作成部
0.50%	98.42%	dfcfvf	係数行列作成部	0.35%	98.21%	__intel_fast_memset.J	
0.37%	98.79%	linin	係数行列作成部	0.32%	98.53%	floweq	係数行列作成部

### 3. まとめ

本プロジェクトでは、UV2000 上で世界の主要大陸を対象として、地表水、地下水を統合した水循環解析モデルの構築を行う。この構築した解析モデルを用いて、地球温暖化や人口増加に伴う渇水、洪水等の水問題の定量的評価を行い、問題解決に資する情報を得ることを目的とする。

地下水を含めた全球規模の水循環問題の定量的評価は、世界的に見て例がない。そのため本プロジェクトは、これら諸問題に対する対策のための、基礎的な資料となると考えられる。

本年度は、本プロジェクト1年目であることから、UV2000 上での GETFLOWS のパフォーマンスを確認することを目標とした。その結果、以下の知見を得た。

- CPU 性能を考慮すると、UV2000 を用いた計算でも自社 PC 環境と同等の計算性能である。
- 1 コアあたりの計算格子数を考慮すると、1 億格子以下のモデルの実行において、UV2000 のパフォーマンスが非常に大きい。
- 性能解析ツールを用いた評価により、自社 PC クラスタ、UV2000 両環境において、共通してソルバー部で全体の 80% の時間がかかっている。すなわち PC クラスタに最適化されたソルバーは、UV2000 でも機能している。
- 大規模モデルで見られたファイル読み込み時間の増大は、UV2000 の work 領域、RAM disk 等を有効に使うことにより解消される。

### 参考文献

- 1) Hiroyuki TOSAKA, Koji MORI, Kazuhiro TADA, Yasuhiro TAWARA and Koji YAMASHITA, 2010. A General-purpose Terrestrial Fluids/Heat Flow Simulator for Watershed System Management, IAHR International Groundwater Symposium 2010.
- 2) ライナー・ヘルミック著, 平田健正, 檜山和男監訳, 小林健一郎訳, 2004. 地下環境での多相流

と輸送現象 現象理解の基礎から数値解析まで, シュプリンガー・フェアラー東京株式会社, pp.99-218.

- 3) J. R. Appleyard, I. M. Cheshire and R. K. Pollard, 1981. Special Techniques for Fully-Implicit Simulators, Enhanced oil recovery, pp.395-408.
- 4) Hiroyuki TOSAKA and Yukihiro MATSUMOTO, 1987. An Efficient Reservoir Simulation by The Successive Explicitization Process, Journal of the Japanese Association for Petroleum Technology Vol.52, No.4.