

TSUBAME 共同利用 平成 25 年度 学術利用 成果報告書

利用課題名 多相流 LBM シミュレーションの大規模間隙モデルへの適用
英文: Multiphase LBM simulation for large-scale porous media辻 健
Takeshi TSUJI九州大学 カーボンニュートラル・エネルギー国際研究所 (I²CNER)
International Institute for Carbon-Neutral Energy Research (I²CNER),
Kyushu University
<http://i2cner.kyushu-u.ac.jp/~tsuji/>

格子ボルツマン法の計算コードを、Graphics Processing Unit (GPU) に実装し、岩石の間隙内部の CO₂ の挙動を計算した。GPU を用いることにより、マイクロ X-CT によって取得された巨大なデジタルロック (グリッドサイズ: 1000³) に対して、多相流 LBM シミュレーションを行うことが可能となった。計算領域のサイズアップを行うことで、これまで一般的であったポアスケール (μm スケール) から、コアスケール (mm スケール) へ計算領域を拡張することができた。それにより、LBM シミュレーション結果を、実験結果 (コアスケール) と比較することが可能となった。

We investigated fluid flow characteristics inside 3D porous media by a highly efficient multi-phase lattice Boltzmann method (LBM). By using a graphics processing unit (GPU), we can conduct two-phase LBM simulation for the largest digital rocks (grid size) in the world (1000³). Multi-phase flows were simulated for the digital rock model at extremely high resolution (~2 μm) reconstructed from micro-CT scanned image. These efforts enable us to enlarge the size of digital rock from pore-scale (μm scale) to core-scale (mm scale). Therefore, we can validate the LBM simulation results with laboratory experiments (i.e., core-scale measurements).

Keywords: 多相流 LBM, GPGPU, 世界最高サイズのデジタルロック, 二酸化炭素の地中貯留(CCS)

背景と目的

二酸化炭素の地中貯留 (CCS) は、岩石の間隙に CO₂ を注入することで永久的に地下に閉じ込める技術で、大気中の CO₂ の削減に貢献できる技術として注目されている。CCS では、岩石の間隙内部の CO₂ の挙動を調べることが重要であり、多くの実験が実施されている。さらに流体シミュレーションを用いることで、CO₂ を圧入する貯留層の条件 (例えば界面張力や粘性) を変えて、圧入 CO₂ の挙動を推定することが試みられている。また CCS だけでなく、Enhanced Oil Recovery (EOR) といった幅広い分野で、間隙内の流体挙動の定量化に向けた研究が行われている。

格子ボルツマン法 (Lattice Boltzmann Method; LBM) は、速度の分布関数の時間発展方程式を解くことで、流体運動を記述する手法である (Chen and Doolen, 1998)。LBM は圧力ポアソン方程式を解かず、また局所的な計算がメインであるため、複雑な

多孔質形状内の流れの計算に適している。一方で、計算機やイメージング技術などの制限から、従来は Finney pack モデルといった単純な間隙モデルに対して、LBM シミュレーションが適用される場合が多かった (例えば Tsuji et al. 2012)。

近年、Micro-CT などのイメージング技術が発達により、実際の岩石の間隙形状 (デジタルロック) を抽出することができるようになった。さらに計算機が発達によって、デジタルロックに対して、LBM 流体シミュレーションを実施できるようになってきた。しかし多くの LBM シミュレーションでは、計算の制限から、低解像度かつ小さいスケールで実施されることが多かった。例えば、Ahrenholz et al. (2008) は、11μm の解像度で 200³ グリッドの砂岩モデルに対して、Capillary pressure を計算している。また近年の論文 (例えば Ramstad et al. 2012) でも、6μm の解像度で 256³ グリッドのペレア砂岩などのデジタルロックに対して、LBM を実施している。

本研究では、Graphics Processing Unit (GPU) を用いた並列計算を行うことによって、実際の岩石の間隙モデルに対して、高解像度 (2 μm) かつ大規模 (グリッドサイズ: 1000^3) に LBM シミュレーションを行うことを可能とした。このような巨大な間隙モデルに対して、2 相の LBM シミュレーションを実施した例は、(現時点では) 世界でも初めてであると考えられる。このように計算領域のサイズアップを行うことで、ポアスケール (μm スケール) からコアスケール (mm スケール) の数値シミュレーションを可能となり、実験室で得られた結果と比較した議論を行うことができるようになった。最終的には、貯留層の条件を変えた LBM シミュレーションを実施し、CO₂ 圧入に適した貯留層の条件などを明らかにすることを旨とする。

概要

GPU は、従来は PC やワークステーションにおいて画像処理を担当する主要な部品の一つとして使われてきた。しかし画像処理を行うだけでなく、GPU に内蔵している大量のコア数を生かし、汎用的な並列計算に応用する GPGPU (General Purpose Computation on Graphics Processing Unit)、あるいは「GPU コンピューティング」と呼ばれる技術が、注目を集めてきた。この GPU を用いた計算技術によって、低価格かつ高演算能力のシミュレータが実現できるようになってきた。

我々は LBM の計算コードを GPU に実装し、高効率シミュレータの開発を行ってきた。LBM では、局所的な計算がメインとなるため、大規模 GPU 並列計算に適していると考えられる。特に、今回採用する RK color 2 相流 LBM モデル (Tölke et al., 2006) は、界面の追跡にフェーズフィールド法概念を取り込み、並列化が容易で、且つメモリ使用量は従来の方法よりも節約できる。そのため、この LBM モデルは、GPU 実装に適していると考えられる。

マルチ GPU 実装は、2 段階に分けて行う。シングル GPU チップ内部の並列計算アルゴリズムは、マルチスレッド処理と呼ばれる。CUDA はソフトウェア上で、大量のコアをスレッド、ブロックの構造

で管理する。並列演算可能な最少単位をスレッド、スレッドの集合をブロックと呼ばれる。CUDA 関数 (カーネル) とは GPU で動くプログラムを指し、どれくらいのスレッド数で「カーネル関数」を実行させるか指定することができる。SPMD (Single Program Multiple Data) と呼ばれるプログラミングモデルが採用されているため、実行するプログラムは全てのスレッドで同じである。ここで、各スレッドがどの格子の計算を担当するのを指定する必要がある。すなわち、スレッド ID と更新される格子の空間座標を示さなければならない。我々は、図 1 に示すように z 方向の一行の格子点の更新を 1 スレッドで行うことにした。1 ブロックが担当する計算領域は、 blockDim_x , blockDim_y のパラメータによって決められる。図 1 のようにブロックを x 、 y 平面にマッピングさせる。つまり、 N_x , N_y を計算領域 x 、 y 方向のメッシュ数とすると、 x 、 y 方向のブロック数は、それぞれ $N_x/\text{blockDim}_x$, $N_y/\text{blockDim}_y$ である。これによって、関数内の x 、 y ループが必要なくなり、GPU スケジューラが自動的に複数のコアを利用し、並列計算を行うことができる。スレッド、ブロック ID (threadID_x , threadID_y , blockID_x , blockID_y) と格子座標 (j_x , j_y) の関係は、次式の通りである。

$$j_x = \text{blockDim}_x \times \text{blockID}_x + \text{threadID}_x; \quad (1)$$

$$j_y = \text{blockDim}_y \times \text{blockID}_y + \text{threadID}_y. \quad (2)$$

GPU メモリ内確保されている配列のデータレイアウトも、計算を効率的に行う上で重要である。GPU のメモリバンド幅を無駄なく活用するため、コアレスシングというデータまとめて転送する方式を利用することが重要である。ここで LBM の分布関数は、以下のレイアウトで保存される。

$$i \times L_z \times L_y \times L_x + j_z \times L_y \times L_x + j_y \times L_x + j_x \quad (3)$$

またデータアクセス量を減らすため、衝突過程と移流過程を合併した。これにより、計算効率を 30% 向

上することができた。

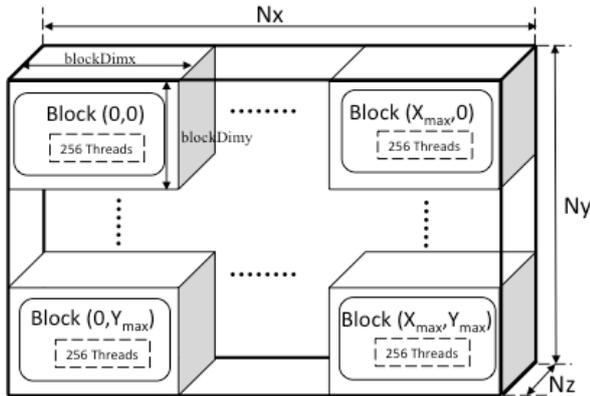


図 1. GPU 内部のマルチスレッド化 (Jiang et al., in review) .

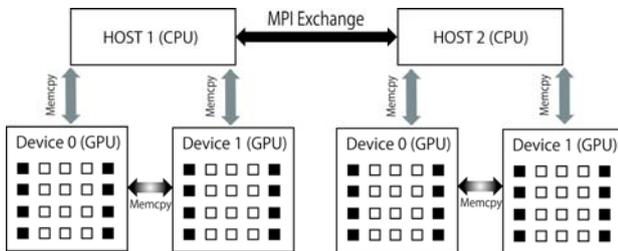


図 2. マルチ GPU 間のデータ転送モデル (Jiang et al., in review) .

大規模計算を行う際、一枚の GPU メモリが最大 6 GB の制限があるため、メモリ使用量を出来る限り減らす必要がある。我々は、メモリを節約するため、次の 2 つ方法を用いた。一つ目は計算する必要のない固体メッシュの情報を保存しない方法、二つ目はストリームパターンを工夫し、一つだけの配列に分布関数を保存する方法である。この二つの方法を用いることで、10 億 (1000*1000*1000) 格子の大規模シミュレーションを、20 枚の GPU (Tesla-K20) で計算することが可能となった。

マルチ GPU 計算では、はじめに領域を分割する必要がある。本研究では、流体格子数を均等に割り、z 方向に分割する方法を採用した。分割領域界面では、一層の ghost レイヤーが設けられ、これは領域間のデータ転送かつカラー勾配の計算に用いる。GPU 間のデータ転送は、二つのパターンがある (図 2)。同一のマザーボード (ノード) に装着している GPU ボード間のデータ転送は、CPU を介して行う。

一方で異なるノード間のデータのやり取りは MPI (Message Passing Interface) 規格を準じて、LAN ケーブルまたは Infiniband を経由して実施する。データ転送を効率するために、CPU ホスト側のメモリ保存は pinned メモリ方式で行う。このようなコードの最適化によって、二相流 LBM シミュレーションの計算効率を大幅に向上させることに成功した。

以上のように LBM の計算コードを効率化することで、1000³ グリッドという大きな領域で、CO₂ 圧入シミュレーションを実現した。この計算によって、これまでポアスケールで行ってきた LBM 計算を、コアスケールに拡張することができた。

結果および考察

GPU を用いることで、ペレア砂岩のマイクロ X-CT 画像から構築した解像度 2 μ m、格子サイズ 1000³ のデジタルロック (図 3) に対して、2 相 LBM シミュレーションを実施することに成功した。このデジタルロックの実際のサイズは、2 mm に相当し、実験データとの比較が可能となってきた。

図 4 は、Drainage 過程の CO₂ 圧入シミュレーションを行った例である。計算条件として、界面張力を 60mN/m、超臨界 CO₂ 密度は水と同じ値 1000kg/m³ に設定した。また粘性は水と同じ 1.0 \times 10⁻³Pa \cdot s に固定した。流れを駆動するため、体積力を与え、入口と出口は周期条件に設定した。今回の計算では、CO₂ は non-wetting な特徴を持ち、壁は wettable な特徴を持つと仮定した。

図 4 の計算では表面張力を低く設定しているため、CO₂ が小さい間隙に侵入していることが分かる。今回の計算から、Drainage 過程では、CO₂ 飽和度は圧入時間と共に 50% 程度まで増加することが分かった。この LBM シミュレーションで得られた CO₂ の飽和度は、実験室で得られる値と整合的である。

このような間隙内での CO₂ の挙動から、絶対浸透率や相対浸透率を計算することも可能になった。これらの水理特性は、貯留層シミュレーションによって、将来の圧 CO₂ の分布を予測する上で、重要なパラメータである。

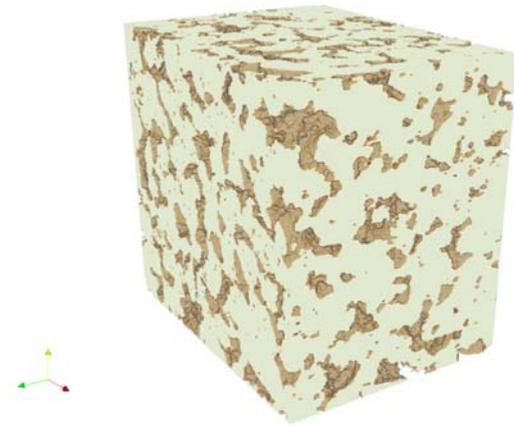


図3. マイクロ X-CT 画像から構築されたベレア砂岩のデジタルロック。

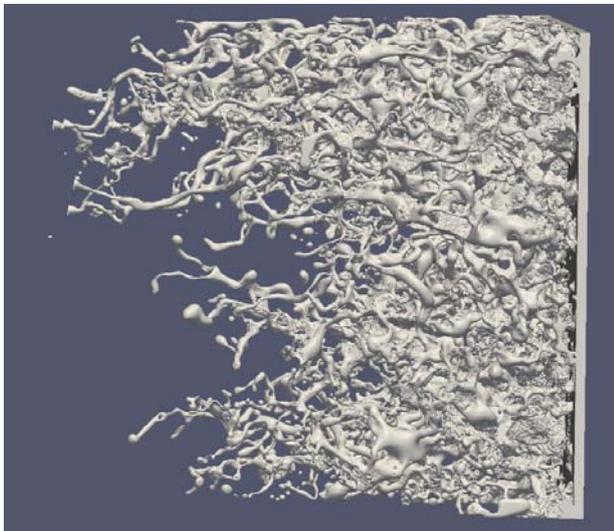


図4. Drainage 過程のシミュレーション結果（グリッドサイズ： 1000^3 ）。白い部分が間隙内に圧入した CO₂ (Non-wettable phase) である。右側から左側に向かって CO₂ を圧入している。

まとめ、今後の課題

GPU を用いることにより、マイクロ X-CT によって取得された巨大なデジタルロック（グリッドサイズ： 1000^3 ）に対して、LBM シミュレーションを実施することが可能となった。それにより、これまでポアスケールで行うことの多かった LBM シミュレーションを、コアスケールで実施することが可能となった。スケールの違いを考慮するためには、異なった手法を用いることが多く、それらの現象を統一的に理解することは難しいと考えられている。しか

し本研究で行ったように、GPU を駆使することで、ポアスケールとコアスケールの壁を取り除くことができた。

今後は、本研究で開発した手法（巨大間隙モデルへの LBM シミュレーション）を用いて、様々な貯留層の条件（例えば界面張力や粘性）で、CO₂ の挙動を推定する。それにより、間隙内での CO₂ 挙動の定量化を行い、貯留層シミュレーションに組み込むことを目指す。

本研究は、地球環境産業時術研究機構（RITE）との共同研究で実施したものである。

引用文献

- Ahrenholz, B, J. Tölke, P. Lehmann, A. Peters, A. Kaestner, M. Krafczyk, W. Durner, "Prediction of capillary hysteresis in a porous material using lattice-Boltzmann methods and comparison to experimental data and a morphological pore network model", *Advances in Water Resources*, 31 (9), 1151–1173, 2008.
- Chen, S., and G.D. Doolen, "Lattice Boltzmann Method for Fluid Flows", *Annual Review of Fluid Mechanics*, 30, 329-364, 1998.
- Jiang, F., T. Tsuji, and C. Hu, "Elucidating the role of interfacial tension for hydrological properties of two-phase flow in natural sandstone by an improved lattice Boltzmann method". in revision.
- Ramstad, T, N. Idowu, C. Nardi, P.E. Øren, "Relative permeability calculations from two-phase flow simulations directly on digital images of porous rocks", *Transport in Porous Media*, 94 (2), 487-504, 2012.
- Tölke, J., et al., "An adaptive scheme using hierarchical grids for lattice Boltzmann multi-phase flow simulations", *Computers & Fluids*, 35, 820-830, 2006.
- Tsuji, T., H. Yamabe, and T. Matsuoka, "LBM simulation for CO₂ saturation monitoring from elastic velocity and resistivity: Migration of supercritical CO₂ in porous media under several PT conditions", *AGU fall meeting*, GC51A-1176, San Francisco, December 3-7, 2012.