CCSEワークショップ@東海 2020年2月21日(金)

GPU向けLESを用いた 実時間汚染物質拡散解析



システム計算科学センター

高度計算機技術開発室



実時間の汚染物質拡散解析の実現

JAEAでの研究2017~(現在)

*1: N.Onodera, Y.Idomura, Y.Ali, and T.Shimokawabe, 9th Workshop on Latest Advances in Scalable Algorithms for Large-Scale Systems (ScalA) held in conjunction with SC18, (Nov. 2018)

実時間2m解像度4km四方の汚染物質拡散解析

適合細分化格子(AMR)法, 16GPUs@DGX-2



Scalar 5e-5 2.0e-05 0.0001 Time = 139.5 min

CityLBMの概要

- マルチスケール解析の実現のために適合細分化格子(AMR)法の採用
 - → 一様格子で必要な計算機資源を1/10以下に削減可能
- GPUを用いたAMR法での省通信アルゴリズムの開発
 - →高解像度の実時間解析の実現
- Weather Research and Forecasting モデルとの連携
 - → 現実的な気象条件を反映した解析の実現







MOTIVATION

背景と必要性①:緊急時対応システムの構築

背景

- レベルを予測するシステムが必要
- 課題
- 詳細な観測データを利用するためのアンサンブル・データ同化手法の開発
- 更なる観測精度の向上に向けた無人飛翔体(観測機)の最適経路作成
- 即時の詳細な汚染物質分布予測
- 実現されること
- 事象ごとのシナリオの不確実性を考慮したシビアアクシデント解析
- 核テロ時のソースターム推定



原子力施設の事故や核テロによって放射性核種が環境中に放出された場合、避難計画やその後の対応策定のために、迅速にその広がりや汚染







MOTIVATION

背景と必要性②:原子力施設近傍・都市街区の風況解析

- 背景
- や植生等を考慮した風況解析手法が必要
- 課題
- 都市街区内の建物や植生データ、および発生・吸収する熱データの取得
- PMなどのソースタームデータ、および発生源の推定手法の構築
- 実現されること
- 数値風洞による環境アセスメントの代替
- クリーンなスマートシティ設計??



Scalar 5e-5

2.0e-05

0.0001

スマートシティ設計や環境アセスメント評価において、汚染物質(PM等)に対するホットスポットを予測・制御?するには、複雑な建物郡





CITYLBMの詳細

- 格子ボルツマン法

- ラージエディ・シミュレーションモデル

- 温度・植生キャノピーモデル

- ナッジングデータ同化手法





格子ボルツマン法による弱圧縮性流体解析 有限個の方向を持つ速度分布関数の時間発展式を解き、流体現象を再現 $f_{ijk}(x + c_{ijk}, t + \Delta t) = f_{ijk}(x, t) + \Omega_{ijk}(x, t)$

- Improved roofline modelを用いた性能評価
 - LBM(SRT)の計算強度はNSと比較して2倍
 - Cumulantの計算強度は3.5

→物理モデルの高度化による計算精度と速度が両立

条件分岐が少ないシンプルな計算アルゴリズムかつ局所的 なメモリアクセスと高い計算強度より、GPU等のメニーコ ア演算器に適している。



D3Q27 model



Improved Roofline model

ラージエディ・シミュレーション

Lattice Boltzmann equation $f_{iik}(x + c_{iik}\Delta t, t + \Delta t) = f_{iik}(x, t) + \Omega_{iik}(x, t)$

Relaxation time

$$\frac{\tau}{c^2 \Delta t} = \frac{3\nu_*}{c^2 \Delta t} + \frac{1}{2}$$
$$\nu_* = \nu_0 + \nu_{SGS}$$

(total visc. = visc. + eddy visc.)

Coherent-structure Smagorinsky model (CSM)

$$\nu_{SGS} = C\Delta^{2} |S|$$

$$C = C_{1} |F_{CS}|^{3/2} \quad F_{CS} = \frac{Q}{E}$$

H. Kobayashi. Large eddy simulation of magneto hydrodynamic turbulent channel flows with local subgrid-scale model based on coherent structures. Physics of Fluids, 2006

サブグリッド・スケールモデル





Kolmogorov's theory



物理モデルの導入

温度の時間発展モデル (LBM/FDMのハイブリッド)

- **●**利点
- 温度の時間発展に対してLBMを用いた離散化手法と比較して、使用メモリが少ない
- 差分法を用いた解析手法の知見が利用可能

FDM

$$\frac{\partial T}{\partial t} + u_j \frac{\partial T}{\partial x_i} = C_T \frac{\partial^2}{\partial x_i}$$

J

LBM momentum forces $F_{ijk} = -g\alpha\Delta T$

N.Onodera, Y.Idomura, et al, "Fuel debris' air cooling analysis using a lattice Boltzmann method", Proceedings of the 27th International Conference on Nuclear Engineering, (May 2019)

▶ ブジネスク近似に基づく浮力をLBMの外力項に付加することで、LBM/FDMのハイブリッド解析を実現

buoyancy $f_{ijk}(x + c_{ijk}\Delta t, t + \Delta t) = f_{ijk}(x, t) + \Omega_{ijk}(x, t) + F_{ijk}(x, t)$







物理モデルの導入

植生キャノピーモデル

- ▶ 数m解像度の解析では、公園等の樹木の評価が重要 ▶ 植生の影響を外力項として評価
- ▶ モデル係数が局所的に求められるため、GPUに適している

$$F_{d,i} = -\rho c_d a_f u_i \sqrt{u_j^2}$$

Drag coefficient (=0.1)

One-sided plant-area density (PAD=0.1), m² m⁻³

ref: Large-Eddy Simulation Comparison of Neutral Flow Over a Canopy: Sensitivities to Physical and Numerical Conditions, and Similarity to Other Representations, Boundary-Layer Meteorol, (2017)







NUMERICAL FORMULATION

ナッジング法によるデータ同化

Weather Research and Forecasting (WRF) モデルとの連携

- 時間的に連続な観測データを同化するための経験的な方法
- ナッジング法を用いたデータ同化 $T(x,t) = (1 - \alpha) T(x,t) + \alpha \hat{T}$ $f_{iik}(x,t) = (1 - \alpha) f_{iik}(x,t) + \alpha \hat{f}_{iik}(x,t)$ f_{iik} 観測データから求められた速度分布関数 経験的なパラメータ:WRFのデータが1分間 α 隔より、1分間の総和が1となるように設定







Forest-of-octrees

- Leafを再帰的に分割することで粗密を表現
- Tree(Forest)構造に基づき接続情報を管理
- Block-structured AMR
 - 一つのLeafが N_{Leaf}³ 格子を含みメモリアクセ

スの連続性が確保

- メニーコアのGPU計算には必須
- Multi-time-step
 - 格子解像度に応じて時間ステップの幅を変更
 - AMR-LBM計算では必須



PERFORMANCE

弱スケーリング性能: ABCI vs TSUBAME3.0 ABCI (NVIDIA V100) vs TSUBAME3.0 (NVIDIA P100)

Weak scalability (4 ~ 256 GPUs) : **ABCI vs TSUBAME3**





of GPUs : 256
Resolution : 1m³ ~ 4m³
Region : 5,120 x 5,120 x 896 m³
Performance : 173,905 MLUPS
1.57x faster than T3@196GPUs

AMR lv.	# of cells / proc	cells / procs (>
0	80 x 80 x 128	0.82
1	160 x 160 x 128	3.28
2	320 x 320 x 128	13.11













GPUシステムでの都市街路を捉えた実時間風況解析の実現範囲 8000 x 6.27 _attice cond) 6000 Se **MLUPS:Mega** per 4000 Jpdate x 1.73 2000



計算速度

DGX2 4GPUs

DGX2 16GPUs

2m格子,1.5km四方の 2m格子,2km四方の 2m格子,4km四方の 実時間解析 実時間解析







CITYLBM CODE : VALIDATION

- オクラホマシティでのトレーサー拡散実験
 - 可視化結果
 - 風況分布
 - 汚染物質分布 _





Oklahoma City Reference. Final report for the joint urban 2003 atmospheric dispersion study in Oklahoma city: Lawrence Livermore national laboratory participation. Oct 2005.



Experimental conditions:
Tracer is released July 16th, 2003 at 09:00 CDT, 11:00 CDT, 13:00CDT.
Calculation conditions:
Wind simulation is performed by the locally mesh-refined CityLBM code.

Boundary conditions are given by Weather Research and Forecasting Model.

地図データ ©2019 Google



Tracer Dispersion Simulation using Locally Mesh-Refined Lattice Boltzmann Method

AMR Lv.1 (Coarse)





VALIDATIONS

<u>鉛直方向の風速・風向分布(汚染物質発生源の上流にて計測)</u> 0900CDT(no model)

▶ 観測値と比較して…

- 植生モデル有り無しに関わらず、アンサンブル計算による標準偏差内にて全体的な風況を再現。
- 植生キャノピーモデルを適用すること
 で、地表面近傍の風速を大きく改善。
- 地表面近傍の風向が大きく変化するのは
 再現できていない。再現のためには都市
 街区内でのデータ同化の実施が必須??





0900CDT (with plant canopy model)

VALIDATIONS

地上5m断面での汚染物質濃度および速度ベクトル with plant canopy model no model



(定性的にだが)植生モデルの有無で汚染物質の広がり方がかなり違う。

VALIDATIONS

平均濃度分布の比較 (0900 - 0930 CDT)

▶ 都市街区内に設置された8個の観測点(地表面近傍)の比較

- アンサンブル計算での個々の時間平均値(open symbol)と全体の平均値 (solid symbol) を比較
- 植生キャノピーモデル無し(上)は、観測値と比較して濃度を過大評価
- 植生キャノピーモデルを適用することで、観測値のFactor2内(1/2以上、2倍 以下)に収まる



No model



Plant canopy model



VALIDATION

FactorN:平均・最大濃度の植生キャノピーモデルおよび格子解像度に対する依存性

Input data	Mean concentration			Max concentration		
	FAC2	FAC5	FAC10	FAC2	FAC5	FAC10
Plant 2m	71%	92%	96%	71%	96%	100%
Plant 4m	71%	88%	88%	67%	83%	88%
No model 2m	17%	75%	88%	54%	83%	88%
No model 4m	8%	38%	88%	54%	79%	88%





CONCLUSION

まとめと今後の計画

- > まとめ
 - 2m解像度の4km四方の実時間風況解析を実現した。
 - 傍)の風況の予測精度を向上した。
 - 析が可能となり、都市街区内の汚染物質濃度の予測精度・信頼性の向上が実現された。
- 今後の計画
 - 実時間詳細解析と様々なIoTデバイスから得られる情報を組み合わせた解析の実現
 - 時の即時汚染物質拡散予測手法の実現

格子ボルツマン法に基づく風況解析手法の開発および適合細分化格子(AMR)法の導入により、

都市街区内の詳細解析に必要な植生キャノピーモデルを導入することで、人の生活圏(地表面近)

GPUおよびAMR法の適用により省資源での計算が実現された。これにより乱流のアンサンブル解

機械学習等を用いた風況予測の高速化およびAMR法による計算資源の削減を組み合わせた、緊急





