

[共同研究成果]

数値タービンシステム（NTS）の大規模並列計算

山本悟¹、三宅哲¹、岡崎健志¹、笛尾泰洋²

¹ 東北大学大学院情報科学研究科

² 帝京大学理工学部航空宇宙工学科

ガスタービンならびに蒸気タービンの多段翼列を通る熱流動をまるごと大規模並列計算するために開発した数値タービンシステム（NTS）についてその概略を紹介し、東北大学サイバーサイエンスセンターSX-9上でMPIに基づく並列計算における並列処理効率を算出したので報告する。特に、タービンまるごとを想定した大規模計算では、64プロセスの場合には1プロセスに対して計算時間が約45分の1になるという結果を得た。

1. 緒言

最新型のガスタービンならびに蒸気タービンの設計には熱流動のみならず、様々な未知の解決すべき問題が表面化しており、それらを数値計算するためにはそれぞれの物理を模擬する数理モデルも合わせて熱流動を数値解析しなければならない。すなわち、熱流動のみならず付加的な物理も同時に計算するマルチフィジックスCFDが要求される。特に、最新の蒸気タービンでは高出力、高効率ならびにコンパクト化を同時に実現するため最終段の長翼化が進んでいる。蒸気タービンを通る水蒸気は最終段付近で急激な圧力降下に伴い非平衡凝縮して液滴に相変化する。液滴は下流に行くにつれて成長して粗大液滴になり最終段長翼に衝突して翼の壊食にもつながる。このようにタービンの効率のみならず安全性にもかかわる複雑熱流動現象は、マルチフィジックスCFDにより解明しなければならないのと同時に、タービン全体をまるごと計算しなければ正確な現象を解明することができない。

我々の研究室では、タービン内部の非平衡凝縮を伴う非定常湿り蒸気流れをまるごと大規模数値計算するためのマルチフィジックスCFDソフトウェア「数値タービンシステム(Numerical Turbine System、略して以下NTS)」を開発している。

2. 数値タービンシステム（NTS）

NTSの構成を図1に示す。まず、前処理(Pre-process)として、Mesh Generator（以下、MechG）とMesh Transformer(MeshT)を独自に開発した。MechGはGUI環境で翼形状データを入力することにより、三次元多段静動翼列の計算格子を生成することができる格子生成ソフトである。これにより、たとえば図2(a)のような蒸気タービン最終多段長翼列に対して図2(b)のような計算格子が生成される。計算格子は翼列流路ブロックと翼列間をつなぐ緩衝流路ブロックから構成される。MeshTは生成された計算格子を変形することにより、翼にねじり、スタッキング、フィレットなどを付加することができる翼変形ソフトである。新たに計算格子を作成し直すことなく、すでに生成された計算格子の格子点を移動させることにより、翼変形を施した多段翼列の計算格子を作成できる。たとえば、図3(a)のような翼形状に対して、スタッキングとフィレットを施した図3(b)のような翼列ならびにその計算格子を生成することができる。

次にメイン処理(Main Process)は、非平衡凝縮を伴う熱流動を計算するためのプログラムからなる。NTSでは、非平衡凝縮を伴う圧縮性粘性流れの支配方程式として、蒸気の相変化を考慮した蒸気の質量保存式、運動量保存式、エネルギー保存式、液滴の質量保存式、液滴の数密度保存式、乱流運動エネルギーおよびその比散逸率の式を解く。NTSで取り扱う気液二相流は液滴の質量分率が十分に小さい均質流を仮定する。湿り蒸気の状態方程式および音速の式は石坂らにより定式化された式より算出する^[1]。凝縮による液滴の質量生成率は古典凝縮論に基づき、凝縮核生成と液滴の成長による質量増加の和で表される。この場合の凝縮核生成率はFrenkel^[2]の式より、液滴の成長率はGyarmathy^[3]のモデルより算出する。数値解法として、空間差分にはRoeの流束差分離法^[4]および4次精度コンパクトMUSCL TVDスキーム^[5]を用いる。粘性項には2次精度中心差分を用い、乱流モデルにはSSTモデル^[6]を用いる。時間積分にはLU-SGS法^[7]を用いる。計算プログラムは一部を除きMPIにより並列化が施された。本報告では以下にその詳細を示す。

追加処理(Additional Process)には、水蒸気の凝縮により生成された液滴の追跡アルゴリズムや翼列隙間からの蒸気流入出を模擬する数理モデルなどが随時追加されていく予定である（現在開発中）。後処理については、いまのところ既存の市販ソフトを使用している。

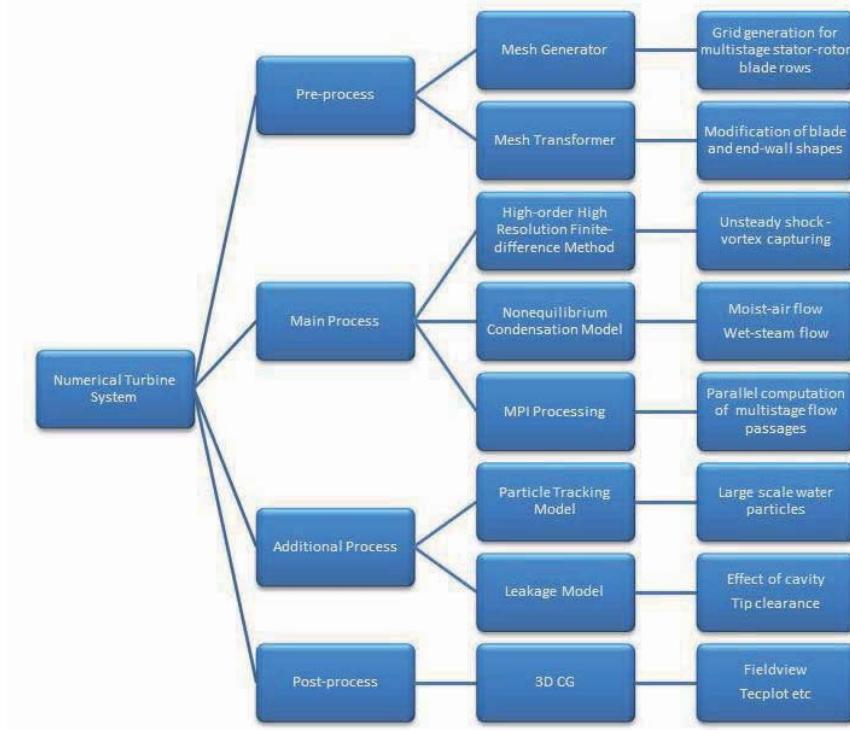
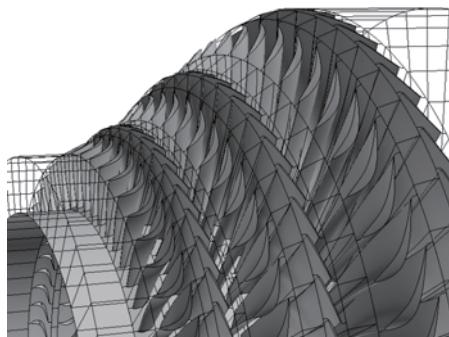
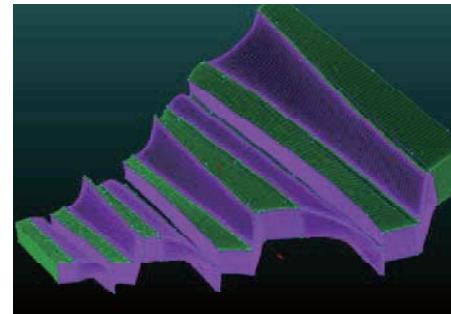


図 1 数値タービンシステム(NTS)の構成

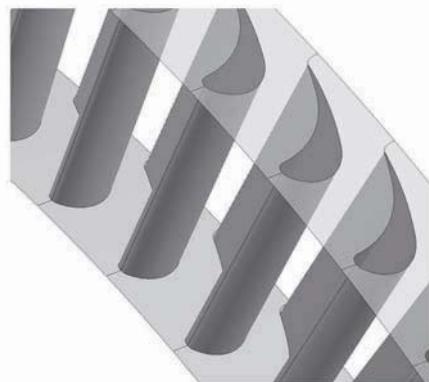


(a) 蒸気タービン最終多段長翼列

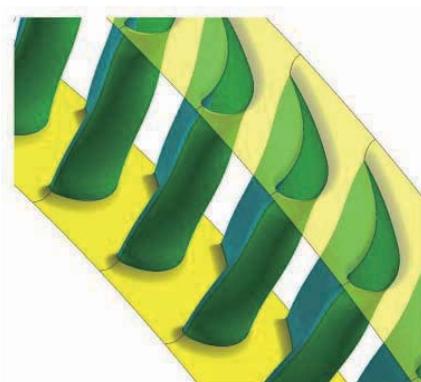


(b) 生成された各流路の計算格子

図 2 MeshG により生成された計算格子



(a) 初期翼列形状



(b) 修正翼列形状

図 3 MeshT により変形された翼列形状

3. NTS の MPI による並列処理

図 2(a)に示したように、タービン内部には多くの翼からなる翼列があり、静翼列と動翼列から一段が構成される多段静動翼列を熱流動が通過してお互いに干渉する。静翼列と動翼列の枚数は基本的に異なるため、実際の熱流動を数値計算により捕獲するためには、すべての翼列流路、すなわちタービンをまるごと計算する必要がある。しなしながら、総翼枚数は千枚を軽く超えることから、このすべての流路を同時に計算することは、現存するスーパーコンピュータでも計算時間の点から現実的ではない。現状では、各翼列の翼枚数を近似してタービン周方向の熱流動は類似であると仮定した、いわゆる周期境界条件を課して計算している。一方、静翼は固定され、動翼は回転していることから、静翼列と動翼列間の熱流動計算にはそれぞれの計算格子が接した面の境界における物理量の交換が必要になる。交換の方法には、定常流れを仮定して境界における物理量を空間平均して受け渡す方法、そして非定常流れを仮定して回転する動翼列の計算格子と静翼列の計算格子との間で物理量を交換する方法がある。このような境界条件を、前者は Mixing Boundary (以下 MB)、後者は Sliding Boundary(以下 SB)と呼ぶ。前者は物理量の交換相手が常に同一であることからこの境界条件は一般的な境界条件と同様に処理することができるのに対して、後者は物理量を交換する対象が常に変化するため、データ通信を並列処理する際に工夫が必要になる。NTS はタービンまるごと計算を目指し完全非定常計算を前提にしているため、SB を採用しなければならない。前報^[8]には、SB を MPI により並列処理するために開発した計算アルゴリズムについて報告している。さらに翼列周方向の周期境界条件を課したタービン三段静動翼列を通る熱流動の計算に対して、東北大大学サイバーサイエンスセンター SX-9 上で実行した場合の並列化処理効率を算出した。これらの詳細については前報^[8]に記載されている。

3.1 周方向流路数増加に伴う並列処理効率

我々が NTS に施した MPI による並列化手法には、SB の処理時に MPI_Bcast および MPI_Allreduce による集団通信を用いた。そのため、流路数が増加して SB で接する流路ブロックの数が増えた際には、計算時間に対して通信時間が占める割合が増加することが想定される。そこで図 4(a)-(d) に示すような流路数を変えた計算格子についてそれぞれ計算を行い、MPI 化された NTS の通信時間を評価する。計算の反復回数は 10000 回のみとし、最終的な非定常解を得るまでは計算していない。計算時間は ftrace の値を元に測定した。それぞれの格子のブロック数を Table 1 に示す。ただし、計算時間の都合上、翼列流路ブロックは $31 \times 31 \times 31$ 格子点、緩衝流路ブロックは $16 \times 31 \times 31$ 格子点とした。まず、全周の 1/100 周、1/50 周、1/30 周の 3 つの計算格子について計算した。これらの計算においては全流路ブロック数が SX-9 の最大並列数である 64 以下であるから、計算実行時の並列数は全流路ブロック数と同一とする。1 プロセスが 1 流路ブロックを計算するため、流路数や並列数の違いはあっても計算時間は同程度のものになると考えられる。むしろ、計算の初期化や境界処理における通信などによる影響が大きいと予想される。

Table 2 には流路数の異なる計算における計算全体と主要なサブルーチン (explicit, implicit) の計算時間および通信サブルーチン (mpisub_comm_bundslid、mpisub_comm_bundslid_theta、mpisub_comm_bundperi) の通信、待機時間を示す。以下、mpisub_comm を MSC と略す。計算時間は原則として全てのプロセスにおける値のうち最も大きな値を代表として用いているが、通信サブルーチンの値に限り、ftrace から読み取れる MSC_bundslid_theta の計算時間のばらつきが非常に大きいことから、不適切だと思われる値を除外した上で平均をとった数値を用いた。いずれの流路数の場合においても 1 プロセスが 1 流路ブロックを計算するため、全体の流路数が約 2 倍、3 倍と増加しても計算時間は 3%、7% 程度しか変化しない。これらのケースにおいては、explicit や implicit といった計算の大部分を占める空間差分および時間積分の計算時間は、流路数を問わずほぼ等しい。一方、SB における通信時間については、MPI_Allreduce を用いて SB を挟んだ格子間の回転方向ずれ角度を計算する MSC_bundslid_theta と、MPI_Bcast を用いて SB 面における配列データを送受信する MSC_bundslid の間で通信時間に大きな違いが見られた。MSC_bundslid は予想通り、流路数の増加に伴い計算時間も急速に増加した。ただし、その値は計算全体に対して相対的に小さい。これに対して、MPI_Allreduce を用いる MSC_bundslid_theta は通信時間が MSC_bundslid の 10 倍近く長い。MSC_bundslid_theta の待機時間が大きい理由としては、MSC_bundslid_theta が MSC_bundslid の直前に CALL されることから、空間差分や時間積分などの演算にかかる時間の差に対応する待ち合せ時間が MSC_bundslid_theta において生じるためである。周期境界処理のために MPI_Sendrecv を行う MSC_bundperi については、流路数の増加に対応して通信、待機時間が共に増加する結果が得られた。1/100 周の計算においては計算対象が単流路の格子であり、周期境界を適用する際の情報は同一流路ブロック内から得られることから、通信

は発生しない。1/50 周の格子は翼列部分の拡張 H 型格子は周方向に複数流路あるが、緩衝区間の H 型格子は周方向に 1 つである。これに対して、1/30 周の格子は全ての流路ブロックが周方向に別の流路ブロックと接しており必要な通信の量は多く、このような背景から通信時間が増加したと予想される。以上、流路ブロック間に計算量のインバランスが生じない計算については、通信および待機時間の合計が計算全体に占める割合は、最も流路数の多い 1/30 周のケースにおいて 3%程度であった。

次に、インバランスが発生した 1/10 周の計算について説明する。1/10 周の計算においては 111 流路ブロックの計算領域に対して 64 プロセスで計算を行うことから、2 流路ブロックの演算を行う 47 のプロセスと 1 流路ブロックの演算を行う 17 のプロセスが混在する。Table 2 に示した 1 流路ブロックの計算を行う場合の計算、通信、待機時間から、1 ブロックの計算のみを行うプロセスにおいては、1/100 周、1/50 周、1/30 周と同様の空間差分および時間積分の計算時間がかかる。しかし、残りのプロセスにおいては 2 流路ブロックの計算を行なっていることから、計算に 2 倍程度の時間がかかる。その結果、`MSC_bundperi` に見られるように、それらの計算を待ち合せるための長い待機時間が生じた。

Table 1 各計算格子において仮定した各翼列における翼枚数

	1S	1R	2S	2R	3S	3R	流路ブロック数
実機	160	116	112	98	106	90	-
1/100 周	100	100	100	100	100	100	13
1/50 周	150	100	100	100	100	100	20
1/30 周	150	120	120	90	120	90	37
1/10 周	160	120	110	100	110	90	111
1/2 周	160	116	112	98	106	90	551

Table 2 流路数の異なる計算における計算、通信、待機時間

		1/100 周	1/50 周	1/30 周	1/10 周
		13 プロセス	20 プロセス	37 プロセス	64 プロセス
計算全体		1065	1092	1134	2118
explicit		656	654	652	671
implicit		198	202	202	199
<code>MSC_bundslid</code>	通信	0.7	1.1	2.5	3.6
	待機	0.1	0.3	0.7	0.8
<code>MSC_bundslid_theta</code>	通信	24.2	17.1	18.7	66.3
	待機	7.2	8.6	10.0	20.6
<code>MSC_bundperi</code>	通信	—	0.3	0.5	0.5
	待機	—	1.7	3.1	728.6

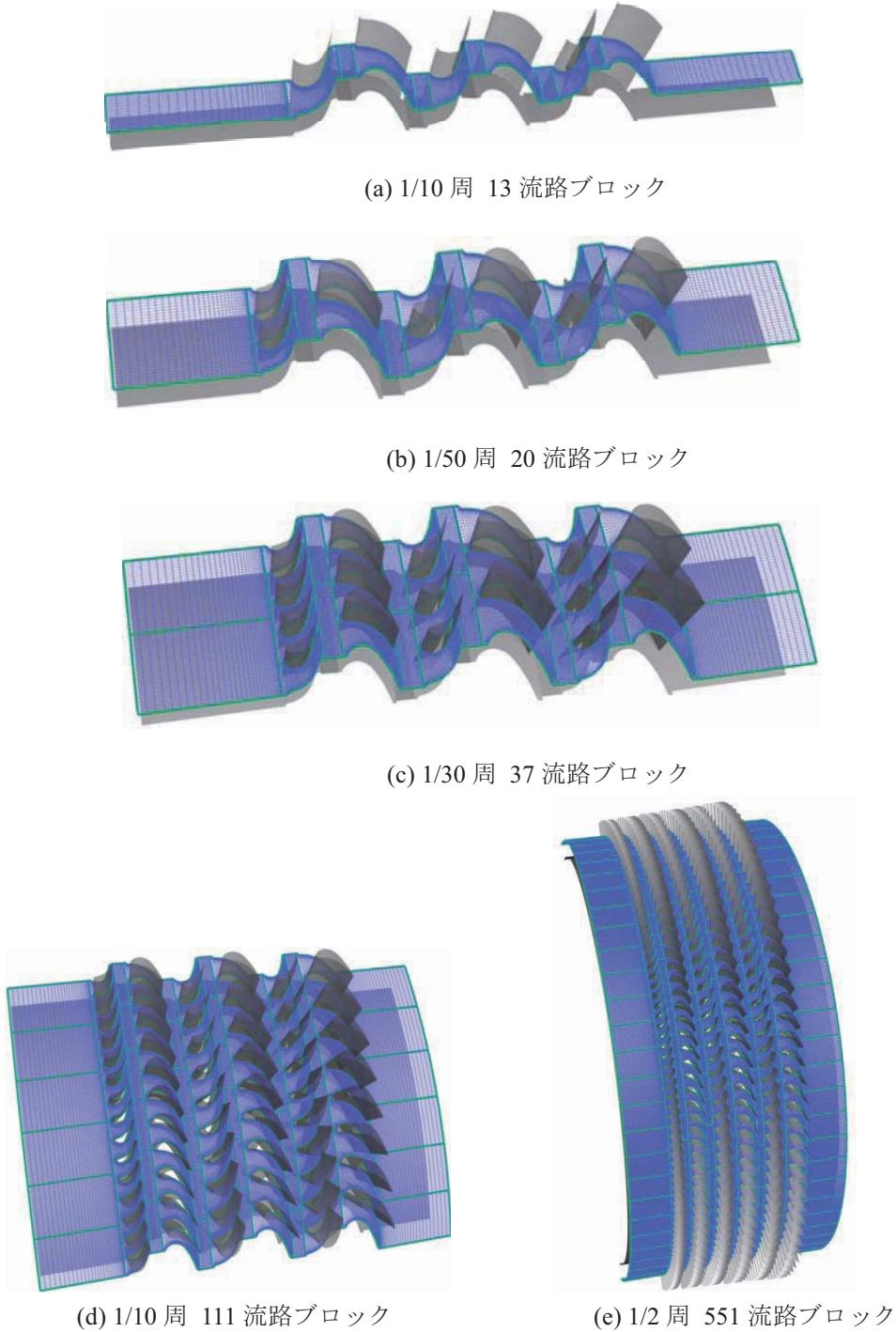


図4 流路数を変更した計算格子

3.2 1/2周計算格子による計算の並列処理効率

実機の翼枚数を完全に反映した図4(e)に示した 1/2 周計算格子を用いて並列効率を算出した。ただし、計算の反復回数は 10000 回のみとし、最終的な非定常解を得るまでは計算していない。また、翼列流路ブロックは $31 \times 31 \times 31$ 格子点、緩衝流路ブロックは $16 \times 31 \times 31$ 格子点とした。計算時間は ftrace の値を元に測定した。Table 3 に異なる並列プロセス数における計算時間を示す。いずれの並列プロセス数においてもインバランスが生じることが想定される。例えば、64 並列での計算を行う場合には、8 流路ブロックずつ計算を行う 25 のプロセスと、9 流路ブロックずつ計算を行う 39 のプロセスが考えられる。図5に Table 3 から算出した計算全体の加速率を示す。並列プロセス数が増加しても並列処理効

率が顕著に低下することなく、加速率は上昇している。しかしながら、理論値 64 倍に対して、並列プロセス数が 64 の場合に得られた加速率は、44.8 倍となった。図 6 に異なる並列プロセス数における通信ならびに待機時間の計算時間に占める割合を示す。1/2 周の計算においては計算領域が 551 流路ブロックあるため、64 並列プロセス数でも、プロセス間における計算量のインバランスに起因する通信および待機時間が起こり得る。一方で、1 プロセス当たりが計算する流路ブロック数が多いことからインバランスによる計算全体への影響は結果として小さくなり、通信および待機時間は最大でも計算全体の 15%以下に収まっている。1/2 周の計算時に加速率がスケールしない原因の 1 つとして、通信回数の増加に加えて、メインプログラム main 内における演算部分が並列化されていないことが挙げられる。main 内には計算領域全体を通した計算が含まれており、それが現在並列化されておらず逐次処理されている。main は 64 並列プロセス時において計算時間全体の 12%を占めており、通信および待機時間の 15%と同程度の計算負荷となっている。今後、通信の効率化に併せて main の並列化を進めることにより、全周解析などの大規模並列計算においても更に高い並列処理効率が期待される。

Table 3 異なる並列数における蒸気タービン多段静動翼列半周計算に要した計算時間

並列プロセス数	1	4	8	16	32	64
計算時間(sec)	386429	104127	52947	28493	15202	8627

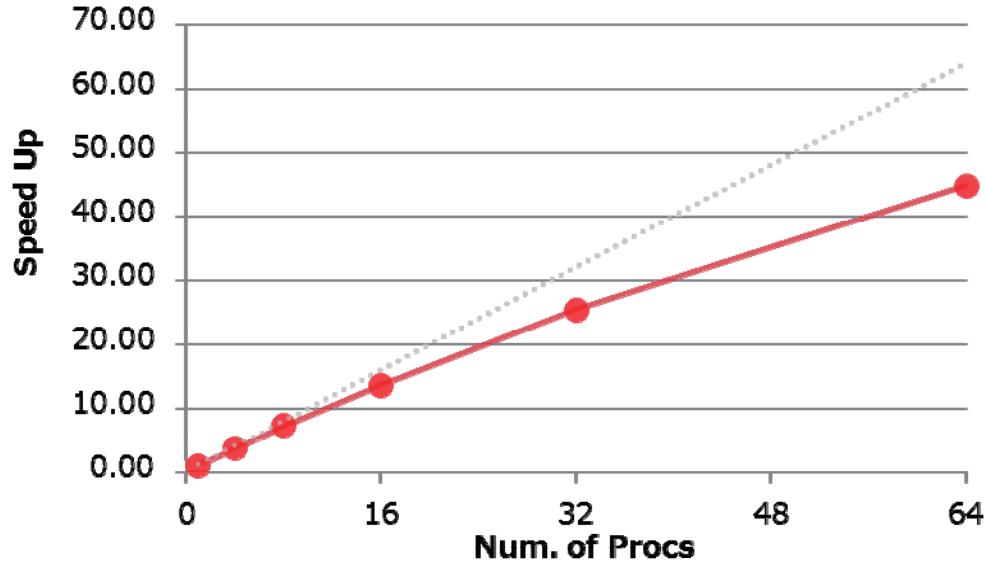


図 5 1/2 周計算時における並列プロセス数の増加に対する計算全体の加速率

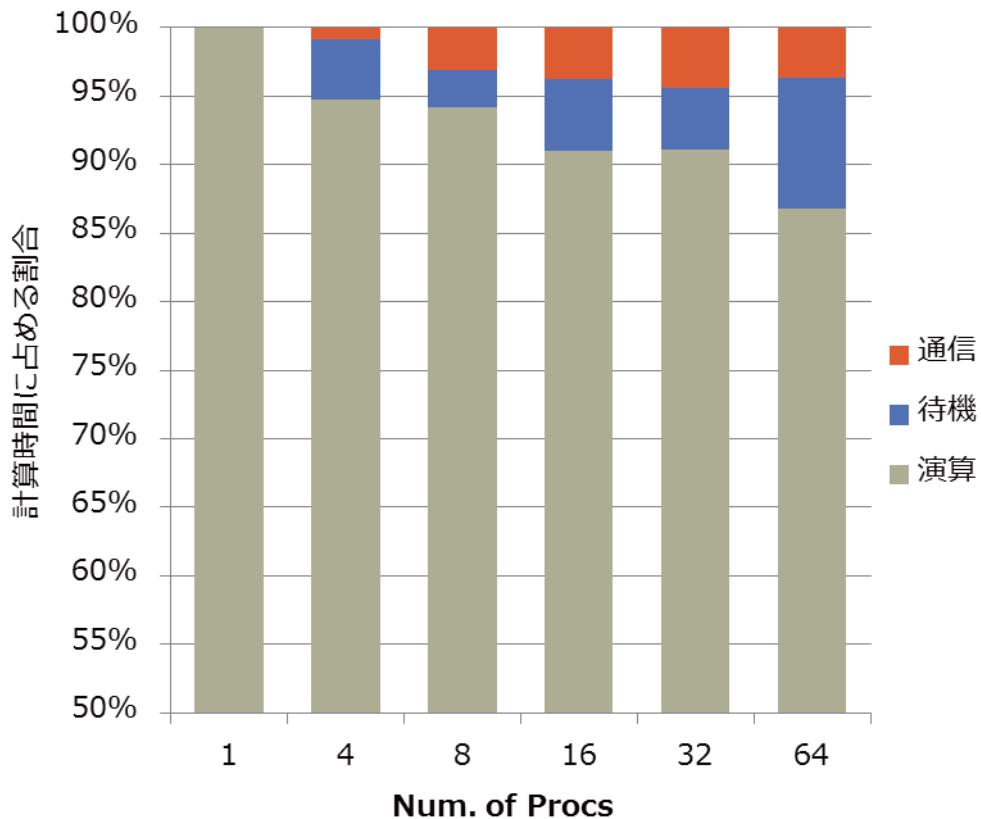


図6 異なる並列プロセス数における通信ならびに待機時間の計算時間に占める割合

4. NTSによる計算例

2013年6月にSan Antonioで開催されたASME Turbo Expoで発表した最新の研究成果^[9]から典型的な計算結果を紹介する。

三菱重工が設計した蒸気タービン低圧三段の静動翼列を通る非定常三次元湿り蒸気流れをNTSにより数値解析した。入口境界条件として、入口全圧0.3296MPa、入口全温384.3Kを与えた。これは25Kの過冷却状態に当たる条件である。入口では乾燥した蒸気が流入しているため、タービン三段流路の適当な位置で非平衡凝縮が起こる。図4(a)に相当する13流路ブロックからなる計算格子を用いた。ただし、計算格子はより細かく、翼列流路ブロックを91×91×91格子点、緩衝流路ブロックを46×91×91格子点とした。

図7(a)、7(b)にそれぞれ、計算により得られた全流路ミッドスパンならびに三段動翼列流路断面における瞬間湿り度分布を示す。まず図7(a)より、一段目静翼列下流域で凝縮が開始していることがわかる。凝縮により生成された液滴は下流に行くに従って成長し、三段目動翼下流域では最大4.8%の湿り度が得られた。また、湿り度は各翼列の後流の影響を受けながら増加していることも示されている。図7(b)には、三段目動翼断面においては湿り度が極端に偏在化している様子が示されている。湿り度は断面中央域が全体的に高く、エンドウォールに行くにしたがって減少しているが、エンドウォール付近ではかなり非定常性が強い分布になっている。これは、前段に位置する、一段目静翼列、一段目動翼列、二段目静翼列、二段目動翼列、そして三段目静翼列から発生したコーナー渦や翼後流のすべてが干渉しながら三段目動翼列まで流れ込んでくるため、これらが湿り度の分布に影響した結果であると考えられる。実は、湿り度4.8%は翼端近傍で得られており、湿り度がコーナー渦や後流によりかなり偏在化していることを示唆している結果である。詳細については文献[9]をご覧いただきたい。

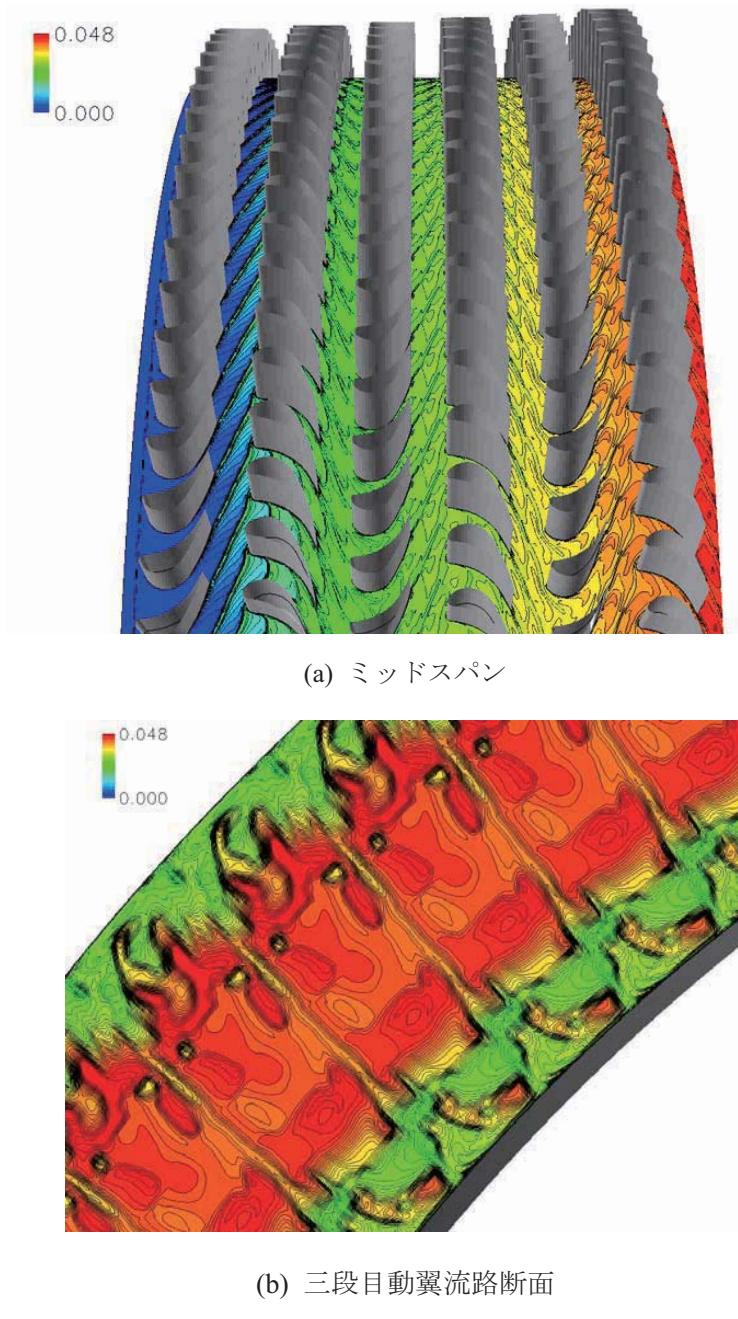


図 7 瞬間湿り度分布

5. 結言

我々が開発している数値タービンシステム(NTS)についてその概略を紹介し、特にタービンまるごと計算を意識して MPI を用いた並列処理効率を評価した。その結果、東北大学サイバーサイエンスセンター SX-9 による全周計算を仮定したケースでは、64 プロセスによる計算で 1 プロセスと比較して約 45 分の 1 に計算時間を短縮することができた。ただし、用いた計算格子は粗いものであり、かつ並列化がまだ完全に施されていない計算ルーチンなどもある。現状ではビックデータになる全周計算結果をいかに可視化するかという壁もあり、SX-9 による全周計算は必ずしも現実的ではないが、より高速なスーパーコンピュータを用いて、可視化手法なども工夫することができれば、2, 3 年後にはタービンまるごと計算も実用化できると期待している。

謝辞

本研究は、東北大学サイバーサイエンスセンターおよびNECの全面的な技術協力、ならびに三菱重工との共同研究に基づく支援のもとで実施されました。ご協力頂きました皆様に対し厚く御礼申し上げます。

参考文献

- [1] Ishizaka, K., Ikehagi, T. and Daiguji, H., A High-Resolution Numerical Method for Transonic Non-Equilibrium Condensation Flow through a Steam Turbine Cascade, Proc. of the 6th ISCFD, 1, 479-484, 1995.
- [2] Frenkel, J., Kinetic Theory of Liquids, Dover, 1955.
- [3] Gyarmathy, G., Zur Wachstumsgeschwindigkeit Kleiner Flüssigkeitstropfen in Einer Übersättigten Atmosphäre, Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Physik, 14-3, 280-293, 1963.
- [4] Roe, P.L., Approximate Riemann Solvers, Parameter Vectors, and Difference Schemes, Journal of Computational Physics, 43, 357-372, 1981.
- [5] Yamamoto, S. and Daiguji, H., Higher-Order-Accurate Upwind Schemes for Solving the Compressible Euler and Navier-Stokes Equations, Computers and Fluids, 22-2/3, 259-270, 1993.
- [6] Menter, F.R., Two-equation Eddy-viscosity Turbulence Models for Engineering Applications, AIAA Journal, 32-8, 1598-1605, 1994.
- [7] Yoon, S. and Jameson, A. Lower-upper Symmetric-Gauss-Seidel Method for the Euler and Navier-Stokes Equations, AIAA Journal, 26, 1025-1026, 1988.
- [8] 笹尾泰洋, 山本悟, 三宅哲, 岡崎健志, MPI による数値タービンの大規模並列計算手法の開発, SENAC, 45, 19-25, 2012.
- [9] Miyake, S., Yamamoto, S., Sasao, Y., Momma, K., Miyawaki, T. and Ooyama, H., Unsteady Flow Effect on Nonequilibrium Condensation in 3-D Low Pressure Steam Turbine Stages, Proc. ASME Turbo Expo 2013, San Antonio, GT2013-94832, 2013, CD-ROM.