マルチブロック構造格子における NURBS Volume を利用した

自動細分化ツールの開発

松村洋祐¹, 堤誠司², 高木亮治², 山本一臣², 伊藤浩之³, 竹川国之³

1. みずほ情報総研株式会社, 2. 宇宙航空研究開発機構, 3. 株式会社菱友システムズ

Development of an Automatic Refinement Tool for Multiblock Structured Grids Based on NURBS Volume

by

Yosuke Matsumura, Seiji Tsutsumi, Ryoji Takaki, Kazuomi Yamamoto, Hiroyuki Ito and Kuniyuki Takekawa

ABSTRACT

In the era of petascale supercomputing, numerical simulations generally require large grids with more than one giga (1×10^9) nodes. Conventional techniques are not practical for generating such large grids, and new techniques are required. As one of such new techniques, we have been developing a tool that automatically refines multiblock structured grids based on NURBS Volume and transfinite interpolation. The current status of the tool is described in this paper.

1. はじめに

「京」等の登場により、スーパーコンピュータは、浮動 小数点演算性能が 10 PFLOPS を超えて、ペタスケールの時 代に突入した。JAXA においても次期スーパーコンピュー タはペタスケールになることは確実であり、数値シミュレ ーションに使用する格子も必然的に 10 億格子点、100 億格 子点を超えるような大規模なものとなる。

このような大規模の格子は、そのデータ量の大きさから、 従来の GUI 機能を有するメッシュジェネレータで作成する ことが非常に困難となる。たとえメッシュジェネレータを 並列化すること等により、メモリ上に全てのデータを格納 することができたとしても、手作業で格子点を配置したり 調整したりするには、膨大な作業量が必要となる。また、 格子を作成することができたとしても、その格子を目視等 で確認することは不可能となる。つまり、このような大規 模の格子を作成するためには、従来の手法によらない、新 しい格子生成手法が必要となってくる。

大規模格子の生成手法は、CADデータを読み込めばすべ て自動的に格子を生成する自動格子生成手法、規模の小さ い基本格子を従来の方法で予め生成し細分化のみ自動的に 行う半自動格子生成手法の 2 種類の方法に大きく分けられ る。自動格子生成手法において最大の問題点は物体壁面の 取扱いをどうするかに帰着する。JAXAにて開発を行って いるLS-Grid¹⁾やHexaGrid²⁾では、空間は等間隔直交格子、物 体壁面は物体適合格子を生成する自動格子生成が可能であ り、Re数が高い航空宇宙流体において壁面境界層を精度よ く計算が可能である。しかしながら、複雑な形状すべてに 対して自動的に格子を生成することは非常に難しく、物体 の特徴線をマニュアルで指定する作業が入ってしまう、も しくは特徴線を捉えきれず形状を正確に再現しないといっ た問題がある。一方、近年は領域全体に直交格子を生成し、 任意形状の取り扱いはカットセル法やImmersed Boundary法 を利用する手法が着目されており34,非常に大規模な格子 に対しても格子生成が可能である。非粘性流れ解析や比較 的Re数の低い流れ場に関しては適用事例が多いが、高Re数 流れの壁面境界層のモデル化に関しては依然として研究課 題が多いことも事実である。

半自動格子生成は従来のメッシュジェネレータで生成可 能な規模の格子を予め作成し、細分化のみバッチ処理で行 うようにする手法である。現在のアプリケーションで行わ れている実装の多くは、非構造格子において基本格子の要 素の辺を 1/2 に単純に細分化していくものであり、クラス タリング等の細かな制御を行うことは困難である。そのため、基本格子の作成時に、最終的に生成される大規模格子の格子幅やその変化率等を想像しながら作業する必要があり、格子の作成者に新たな労力をかけさせることとなっている。

一方、NASAで開発されているin-houseの構造格子作成ツ ールであるOVERGRID⁵⁾では物体壁面や突起物周り1つ1 つに対して重合格子を生成するスクリプトファイルを作成 する。膨大な時間を要するが、一旦スクリプトファイルが 作成できれば、格子密度の変更等が自動で実施可能である。 これらの手法では格子を細分化した際に形状の再現をする ために精細なCADデータを予め持っておく必要がある。

著者らもマルチブロック構造格子を対象とした半自動格 子生成手法の開発に取り組んできた。これまでは細分化の ための線形補間を用いるツールを開発して用いていたが、 物体境界の細分化に応じた形状を再現することができない ことから、再度、CAD 形状への貼り付けと境界付近の格子 点分布の修正作業を必要としていたために自動化に難があ った。これを解決して境界上の格子点を精度良く再配置す るために、従来の手法を発展させて、CAD で曲面を表現す るために利用されている非一様有理 B スプライン(NURBS; Non-Uniform Rational B-Spline)を補間に用いることにした。 これと TFI(Transfinite Interpolation)を組み合せる事により、 柔軟で自動化が可能なマルチブロック構造格子向けの細分 化ツールの開発が可能になった。

本稿では、このツールのコアになる NURBS Volume と TFI、マルチブロック構造格子への適用のための手法につ いて説明し、ツールの構成や入力パラメータ、適用事例に ついて紹介する。

2. NURBS VolumeとTFIを組み合わせた格子自動細分化 手法

2. 1. NURBS Volumeの作成

NURBSとは、非一様有理Bスプライン(Non-Uniform Rational B-Spline)の略で、自由曲線,曲面の数学的表現法 の一つであり、多くのCADで曲面を扱うために利用されて いる。NURBS Volumeとは、NURBSを利用した3次元空間 の表現手法であり、数学的には3次元実数ベクトル空間³³ から射影空間³³への3変数のNURBSによる連続写像となる。 NURBS Volumeは、以下の式で表される⁶⁰。

$$\vec{V}(u,v,w) = \sum_{l=0}^{L} \sum_{m=0}^{M} \sum_{n=0}^{N} \vec{P}_{l,m,n} N_{l,p}(u) N_{m,q}(v) N_{n,r}(w)$$
(1)

 $N_{l,p}(u)$ は、ノットベクトル $\tau_u = \{u_l\}_{l=0}^{N+p}$ を持つ p 階の B

スプライン基底関数、 { $\vec{P}_{l,m,n}$ } = { $(x_{l,m,n}, y_{l,m,n}, z_{l,m,n}, l)$ } はコントロールポイントである。

ここで、基本格子の全ての格子点を通過するNURBS Volumeを作成する。このとき、NURBS Volumeが格子点を 通過する際のパラメータ $(\overline{u}_i, \overline{v}_j, \overline{w}_k)$ はコード長の比として与 える。ノットベクトルは、averaging methodで与える⁷⁾。

これによって作成されたNURBS Volumeは図 1に示すような以下の性質を持つ。

・格子ブロック内部の任意の座標値を、(u,v,w)の3パラ メータの関数であらわすことができる。また、その関数 は、例えば*i*方向に C^{p} 級連続である。

・パラメータ $u = \overline{u}_i$ を与えた場合に作成される曲面は、

基本格子の*i*=*i*₁の格子面と一致する。*v*、*w*のみを変更 することで、基本格子の格子面上の任意の位置に格子点 を生成することができる。

・パラメータu = l/Lを与えた場合に作成される曲面は、 基本格子に対し、コード長の比がl/Lの位置に作成される。



コード長の比が*l/L*の位置に作成される。



これらの性質により、作成された NURBS Volume に新し い格子点数分の新しいパラメータを与えることで、基本格 子の持つ性質を生かしながら、任意の位置に格子点を生成 しつつ、任意に格子点数を変化させることが可能となる。 そのため、複数方向からのクラスタリングの制御等の複雑 な自動細分化にも対応が可能となる。

また、格子ブロック内部が NURBS Volume であらわされ ているため、曲面や曲線の表現に NURBS を使用している CAD との相性が良く、細分化によって新たに生成された格 子点の境界形状への適合も容易となる。

図 2にNURBS Volumeによって生成される細分化格子の 例を示す。基本格子の品質を保ちながら、境界層へのクラ スタリングと格子密度の変更が行われており、境界形状の 曲面も復元されていることがわかる。



(A) 基本格子



(B) NURBS Volume による細分化格子

図 2 NURBS Volume による細分化格子の例

2. 2. TFIによるパラメータの算出

NURBS Volume を利用して格子の自動細分化を行う際、 新しく生成する格子点全てに対応するパラメータを与える ことは現実的ではない。そこで、各格子ブロックの境界に ある 12 個の辺に対して、両端の格子幅や辺上の格子点数、 分布方法等の直感的で最小限の入力を与えて、辺上に生成 する格子点のパラメータを算出することとし、格子ブロッ ク内部に生成する格子点のパラメータについては、 TFI(Transfinite Interpolation)によって算出することとした。

格子ブロック境界の辺に対しては、以下のいずれかの手 法により新しいパラメータ分布を算出する。

・コード長を基にした制御関数による分割 (current)

辺の格子点数を指定する。基本格子の格子点を通過す るパラメータから線形補間を行い、新しく生成する格子 点のパラメータの分布を求める⁸⁾。

・等比分割 (imax)

辺の第一格子幅と格子点数を指定する。これらから初 項、公比、分割数を算出して等比分割を行い、新しく生 成する格子点のパラメータを求める。

・Hyperbolic Tangent 分割 (tanh)

辺の両端の格子幅と格子点数を指定する。これらから Hyperbolic Tangentを利用した関数により、新しく生成す る格子点のパラメータを求める⁹。

これらの分割方法を組み合わせることにより、数値シミ ュレーションを行う際に時間刻みの制約となる最小格子幅 (ほとんどの場合壁面第一層に存在する)や細分化する意味 のない外部境界付近の格子幅を制御しながら、格子を細分 化することが可能となる。

格子ブロック境界の面については、面を構成する 4 辺上 の格子点パラメータよりBoundary-blended Control Function 格子ブロック内部については,格子ブロック境界の6面上の格子点のパラメータよりLinear TFIで補間することにより、全ての格子点のパラメータを算出する⁸。

また、格子ブロック境界の辺を全て指定させることも、 利用者の利便性の点からは好ましくない。そこで、計算境 界を指定することで、図 3に示すように計算境界から垂直 に出る全ての辺に対して入力が与えられるようにした。



2.3.マルチブロック構造格子への対応

開発したツールでは、並列化を容易にするために格子ブ ロックごとに自動細分化を行っている。そこで、以下のよ うにしてマルチブロック構造格子の格子ブロック間の接続 を保証する。

格子ブロック境界で共有される辺については、基本格子 の辺上の格子点よりNURBS曲線を作成する。このとき、複 数の格子ブロックで共有されている辺については、図4に 示すように必ず幾何学的に同じ向きでNURBS曲線が作成さ れるようにする。これにより、異なる格子ブロック間でも 同一のNURBS曲線が生成されることが保証される。この NURBS曲線に入力条件から新しく生成した格子点のパラメ ータを与える。NURBS曲線が同一でパラメータも同一であ れば、異なる格子ブロック間でも共有されている辺に関し ては同じ座標位置に格子点が生成される。

格子ブロック境界で共有される面についても同様の処置 を施す。



図4格子ブロック境界で共有される辺、面

また、多対多の格子ブロック間接続を許すマルチブロッ ク構造格子の場合、格子ブロックごとに格子自動細分化を 行うと、格子ブロック間の接続が保証されない場合がある。 このため、マルチブロック構造格子を図5に示すように サブブロックに分割する。具体的には格子ブロック間の接 続情報を元に、全てのサブブロックが1対1の接続関係に なるよう、格子ブロックを分割する。

図5サブブロック分割

3. ツールの構成と大規模格子作成プロセス

自動細分化ツールは、JAXA内製の圧縮性流体ソルバで あるupacs-LES¹⁰⁾のフレームワーク向けに開発されている。 図 6にツール全体の構成を示す。ツール全体は、サブブロ ック分割ツールcreateSubblock、入力データ作成援用ツール subwindowEdgeControl、自動細分化ツールmodifyGridから構 成されている。

図6ツール全体の構成

サブブロック分割ツールcreateSubblockは、マルチブロッ ク構造格子のサブブロック分割を行うツールである。境界 条件bc.txt、接続情報connect.txtを入力として、図7に示す subblock.txtを出力する。createSubblockはC++で書かれたツ ールであり、単一プロセスで動作する。

入力データ作成援用ツールsubwindowEdgeControlは、ユ ーザによって設定されたパラメータから自動細分化ツール の入力データを作成するツールである。図 8に示す gridDensityControl.txtと図 9に示すblockBoundaryControl.txtを 入力として、図 10に示すsubwindowEdgeControl.txtを出力す る。subwindowEdgeControlはC++で書かれたツールであり、 単一プロセスで動作する。

自動細分化ツール modifyGrid は、実際に自動細分化を行 うツールである。格子、subwindowEdgeControl.txt、 subblock.txt を入力として、細分化された格子を出力する。 bc.txtや connect.txt に関しても、細分化された格子に合わせ たものを自動的に生成して出力する。modifyGrid は Fortran 90 で書かれたツールであり、MPI によって並列化されてい る。

図 8 gridDensityControl.txt

rocket 境界で格子幅 0.1 から格子点数 7 点で # 等比分割 rocket imax 0.1 7 # farfield 境界で格子幅 0.1~0.6 で格子点数 15 点で # hyperbolic tangent 分割 farfield tanh 0.1 0.6 15

図 9 blockBoundaryControl.txt

#ブロック1の(1,1,1)から(28,1,1)の辺を
#格子幅0.01から格子点数14点で等比分割
1112811 imax 0.0114
1111125 tanh 1e-05 0.0253

図 10 subwindowEdgeControl.txt

この自動細分化ツールを使用した大規模格子作成プロセ スは以下の通りである。

まず、従来からある商用グリッドジェネレータ Gridgen (Pointwise 社)等を用いて、1 千万格子点規模の基本格子を 予め作成しておく。その後、数値シミュレーションを実行 する前に、スーパーコンピュータ上で基本格子を自動細分 化するジョブを実行して大規模格子を生成する。数値シミ ュレーションを行うスーパーコンピュータ上で基本格子を 細分化するため、大規模格子データの転送は不要である。

4. 適用事例

本自動細分化ツールを、45 度斜め平板に衝突する超音速 ジェット騒音解析用の格子に適用した。この格子では hybrid Large-Eddy Simulation (LES) / Reynolds Averaged Navier-Stokes (RANS)解析を実施しており、斜め平板の乱流 境界層を捉えるために格子をクラスタリングして、空間格 子を細分化する一方で、物体壁面第一層格子幅を保つこと が求められる。また、遠方境界付近のバッファ領域で格子 数を増やさないような制御も求められる。

図 11に 45 度斜め平板に衝突する超音速ジェット騒音解 析用格子の概要を示す。図 11(B)は解析領域全体であり、 超音速ジェットを排気するエンジンやその円形ノズル、ま た 45 度斜め平板といった物体を含んでおり、形状が複雑で ある。更に、排気ジェットのせん断層を精度よく解像する ためにせん断層に沿う方向に格子をクラスタリングしてお り、図 11(C)に示した対称面や衝突板から分かるように格 子トポロジも複雑になっている。図 11に示した基本格子の 総格子点数は 33M点で、628 ブロックから構成されている。

図 11 45 度斜め平板衝突ジェット解析の基本格子

(33M 点)

この基本格子に対して、図 12に示すように全方向に 7.0 倍の細分化を実施した。ノズル壁面、及び斜め平板表面は 壁面境界層を解像する目的で格子をクラスタリングしてい るため、図 13に示すようにそれぞれの壁面で第一層格子幅 については基本格子と同一とし、imax関数でストレッチさ せることとした。また、遠方境界(バッファ領域)で格子点 数を増やさないため、tanh関数で格子点数と最大格子幅を 指定することとした。

図 13 45 度斜め平板衝突ジェット解析格子における blockBoundaryControl.txt

imax

noz_wall

0.0001

44

細分化を実施するにあたり、JAXA JSS を用いた。530 プ ロセス(133 ノードの flat MPI)を利用し、使用した総メモリ 量は 600GB、約 1.5 時間を要して 92 億格子点の細分化格子 を作成した。出力された格子ファイルのサイズは約 210GB となった。

図 14に細分化前後のノズルリップ付近の格子分布の比較 を示す。基本格子 1 セル内に対して指定通り 7 セルが生成 されていることが分かる。また、NURBS Volumeの利用に より、基本格子の持つ性質を生かしながら滑らかな細分化 がなされていることが分かる。

図 14 45 度斜め平板衝突ジェット解析格子における ノズルリップ付近の格子分布赤:基本格子,青:細分化格子

図 15に細分化前後のノズル断面の格子分布の比較を示す。 NURBS Volumeの利用により、曲面形状に対してもスムー ズに格子点の補間がなされていることが分かる。

図 15 45 度斜め平板衝突ジェット解析格子における ノズル断面の格子分布赤:基本格子,青:細分化格子

図 16に細分化前後の壁面境界付近の格子分布の比較を示 す。細分化前後で第一層格子幅が保持されていることが分 かる。また、格子幅分布が直線であることより等比分割指 定通りにが行われていることが分かる。

図 17に細分化前後の遠方境界付近の格子分布の比較を示 す。細分化後の最大格子幅が指定した値に固定されている ことが分かる。また、格子幅が滑らかに変化していること からHyperbolic Tangent分割が指定通りに行われていること が分かる。

図 17 45 度斜め平板衝突ジェット解析格子における 遠方境界付近の格子分布赤:基本格子,青:細分化格子

以上より、複雑な形状やトポロジを持つ格子に対しても、 想定通りの格子生成が行われていることが確認でき、100 億格子点クラスの大規模格子の生成において本手法及び本 ツールが有効であることが実証された。

5. まとめ

NURBS Volume と TFI を組み合わせたマルチブロック構 造格子の自動細分化手法を用いたツールの開発とその現状 について紹介した。本手法及び本ツールの長所は以下の通 りである。

・基本格子の持つ性質を生かしながら、任意の位置に格 子点を生成しつつ、任意に格子点数を変化させることが 可能となる。そのため、複数方向からのクラスタリング の制御等の複雑な自動細分化にも対応が可能となる。 ・格子ブロック内部が NURBS Volume であらわされてい るため、曲面や曲線の表現に NURBS を使用している CAD との相性が良く、細分化によって新たに生成された 格子点の境界形状への適合も容易となる。

・TFI を利用しているため、格子ブロックの境界辺上での 両端の格子幅や辺上の格子点数、分布方法等の直感的で 最小限の入力を与えるだけで細分化が可能である。

・最小格子幅等、変更したくない格子幅を保つことができる。

・MPI で並列化されており、スーパーコンピュータ上で 数値シミュレーションのプリ処理として実行できる。そ のため、大規模な格子データを手元で作って転送する必 要がない。

・upacs-LES に必要となる境界条件、接続情報も生成で きるため、利用者への負担が少ない。

また、開発した自動細分化ツールを実際の格子の細分化 に適用した結果、100億格子点クラスの大規模格子の生成 において、本ツールが有効であることが実証された。

今後は、実際の格子に合わせた更なる利便性の向上や高 速化、「京」での性能調査とチューニング、更に大規模な 格子生成への適用等を行いたいと考えている。

謝辞

本研究の一部は文部科学省「HPCI 戦略プログラム分野 4 次世代ものづくり」の支援により行われた。

参考文献

- Fujimoto, K., and Fujii, K., "Study on the Automated CFD Analysis tools for Conceptual Desigh of Space Transportation Vehcles," Proc. 5th ASME/JSME Joint Fluid Engineering Conference, FEDSM 2007-37128, 2007.
- Lahur, P, Ishida, T., Hashimoto, A., and Murakami, K., "Automatic Grid Generation of Complete Aircraft Model in Wind Tunnel Test for Navier-Stokes Simulation," AIAA Paper 2013-0555, January 2013.
- 3) 小野謙二, "設計における直交格子法の利用," ながれ 21,2002, pp.16-25.
- Nakahashi, K., and Kim, L.S., "Building-Cube Method for Large-Scale, High Resolution Flow Computations," AIAA Paper 2004-0423, January 2004.
- 5) Chan, W.M., "Developments in Strategies and Software Tools for Overset Structured Grid Generation and Connectivity," AIAA Paper 2011-3051, June, 2011.
- 6) Martin, W., & Cohen, E., "Representation and Extraction of Volumetric Attributes Using Trivariate Splines: A Mathematical Framework," Proc. 6th ACM Symp. on Solid modeling and applications, (2001) pp. 234-240.
- Piegl, L. & Tiller, W., "The NURBS Book," (Springer, 1996) pp. 364-382.
- Thompson, J. F., Soni, B. K. & Weatherill, N. P., "HANDBOOK OF GRID GENERATION," (CRC PRESS 1999) pp. 3.1-3.15.
- Vinokur, M., "On One-Dimensional Stretching Functions for Finite-Difference Calculations," J. Comp. Phys., 50-2 (1983) pp. 215-234.
- 10) 榎本俊治,野崎理,今村太郎,山本一臣,"LESによる円 形ジェットの乱流混合騒音の数値予測,"第21回数値 流体力学シンポジウム,B1-1,2007.