

VCADデータに基づく 流体シミュレーション技術の開発

沖田 浩平, 俵 丈展, 小野 謙二

理化学研究所 知的財産戦略センター
VCADシステム研究プログラム
機能情報シミュレーションチーム



VCAD

設計におけるシミュレーション

- 新幹線N700系電車
 - 5000回以上のシミュレーション
- BOEING787
 - 80万時間のスーパーコンピュータ(クレイ社)による設計

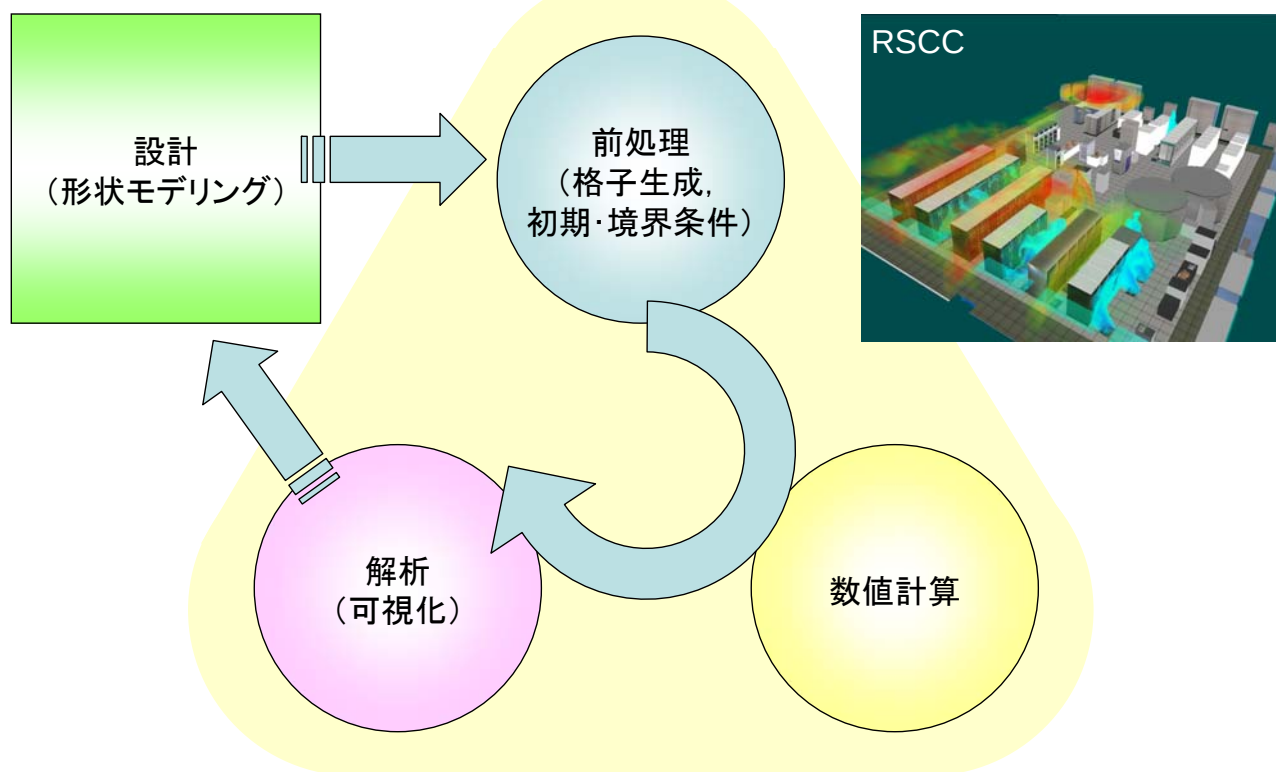


http://www.designnewsjapan.com/content/L_news/2007/08/u3eqp30000018qux-img/u3eqp30000018qwo.jpg



VCAD

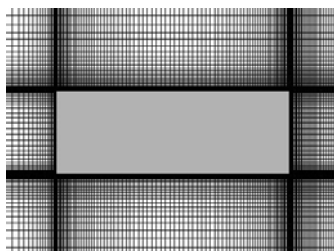
設計・解析サイクル



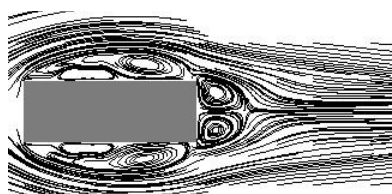
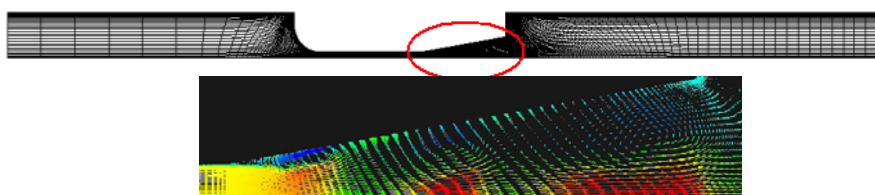
VCAD

解析対象の形状複雑化と計算格子

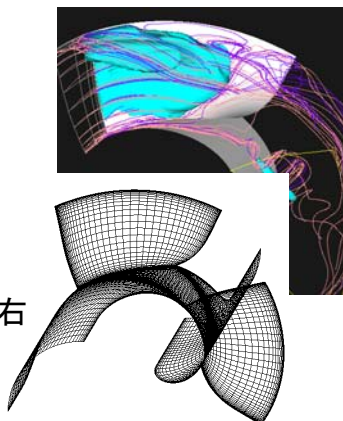
1. 直交格子



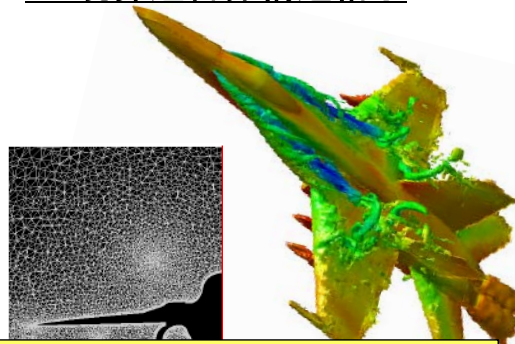
2. 境界適合構造格子



- 解析対象の形状複雑化
- 格子の良し悪しが結果を左右
- 格子生成の労力大
- 計算の大規模化



3. 境界適合非構造格子



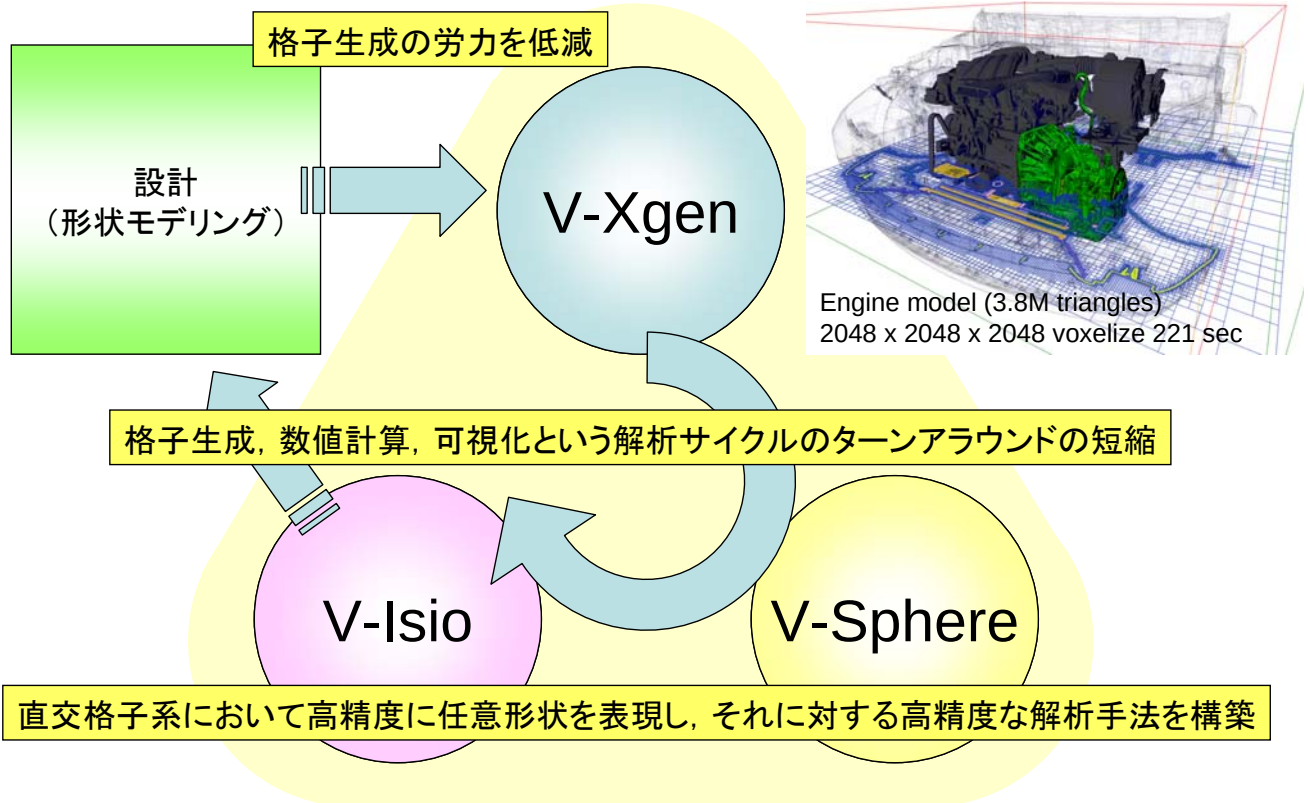
形状複雑化および計算の大規模化に伴って、入力データとなる計算格子の生成が問題



Morton, S. A. et al. 2003

VCAD

VCAD (ボリュームベースのモデリング)

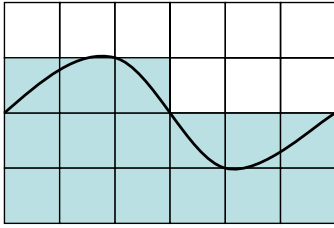


Topics

- 陰関数で表現された形状を用いた流れ解析
 - 符号付き距離関数を利用した高精度な形状表現と流れの計算手法
 - 精度検証結果 (管内流れ)
 - 応用例 (Asian Dragon周りの流れ)
- CTやMRIで自然造形物等から取得したボリュームデータを利用した解析
 - 高密度焦点式超音波療法の支援を目的として開発されている生体内超音波伝播シミュレータ
(次世代計算科学研究開発プログラム臓器全身スケール研究開発チーム)
 - 近い将来に想定される計算規模

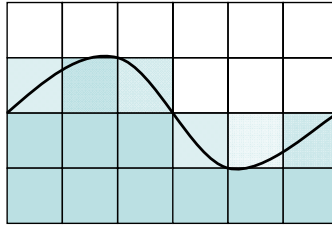
直交格子系での形状表現

ボクセル (近似レベル0)



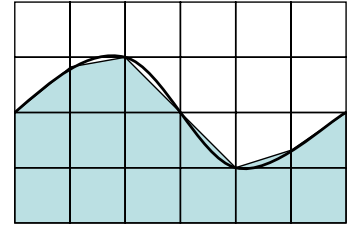
セルを流体か固体で区別

VOF (近似レベル1)



セル内の流体体積率

VOF+AOF (近似レベル2)



フラックス面の流体面積率

符号付き距離関数 (Signed Distance Function)

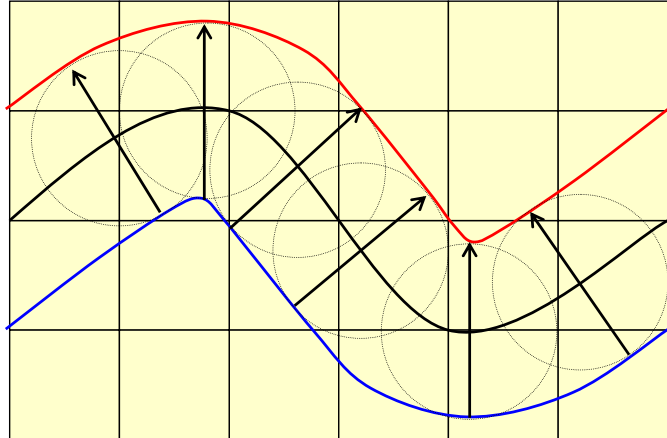
- 距離関数
(最も近くに存在する界面との距離)

$$|\phi(\mathbf{x})| = \min(|\mathbf{x} - \mathbf{x}_I|)$$

- 界面の内外に対して符号を付ける

- 界面からの距離 (ゼロ等値面が界面)

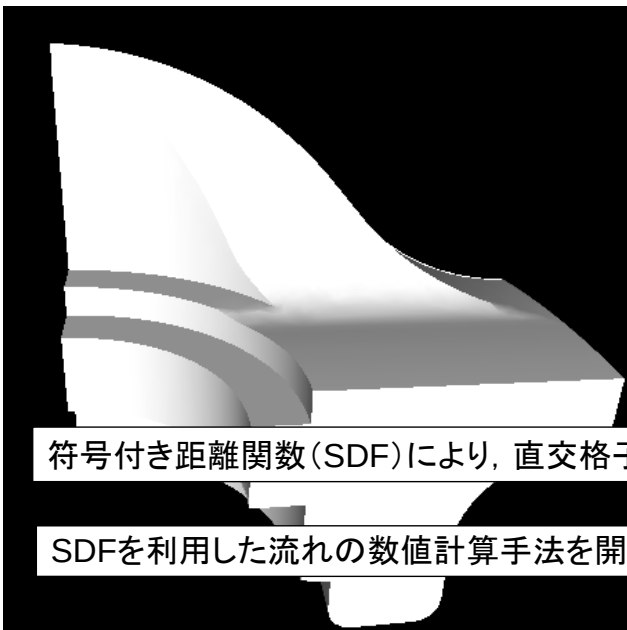
- 法線ベクトルが勾配 $\mathbf{n} = \nabla \phi$



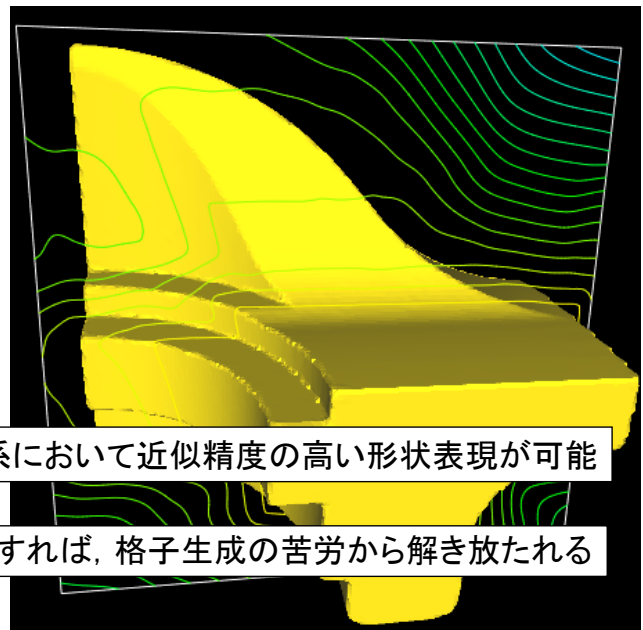
VCAD

符号付き距離関数による任意形状表現

Objデータ



SDFのゼロ等値面 (V-Isioによる)



符号付き距離関数 (SDF) により, 直交格子系において近似精度の高い形状表現が可能

SDFを利用した流れの数値計算手法を開発すれば, 格子生成の苦勞から解放される

1060points, 2116faces

128x128x128, 18.1sec

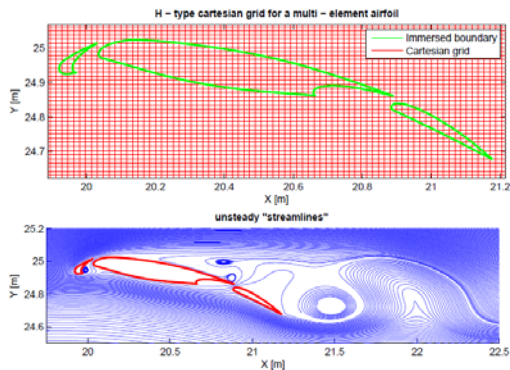


VCAD

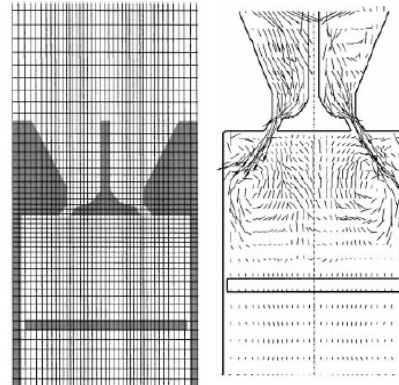
直交格子系で任意形状を過ぎる流れの数値計算法

Immersed Boundary Method

- Peskin(1972), cardiac mechanics and blood flow
 - “Immersed boundary methods simulate viscous flows with immersed (or embedded) boundaries on **grids that do not conform to the shape of these boundaries**” (R. Mittal & G. Iaccarino, Annu. Rev. Fluid Mech. 2005)
- Simplification of the task of grid generation
- Flows with moving boundaries



vander Meulen, R.J.R. (2006)



Fadlun et al. (2000)



Immersed Boundary Method

In fluid domain Ω_f

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$$

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} + \frac{1}{\rho} \nabla p - \frac{\mu}{\rho} \nabla^2 \mathbf{u} = 0$$

On boundary Γ_b

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}_\Gamma$$

A source term (or forcing function) in the governing equations that reproduces the effect of boundary

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = f_{bp}$$

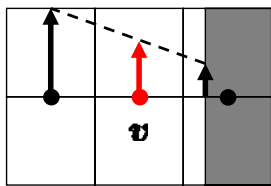
$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} + \frac{1}{\rho} \nabla p - \frac{\mu}{\rho} \nabla^2 \mathbf{u} = f_{bm}$$

Continuous or Discrete forcing approach

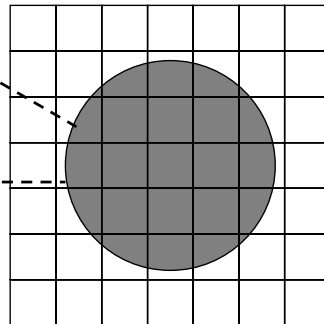


Discrete forcing approach

Mohd-Yosuf (1997)
$$\frac{\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^n}{\Delta t} = -(\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u} - \nabla P + \frac{1}{Re} \nabla^2 \mathbf{u} + \mathbf{f}_{bmi}$$



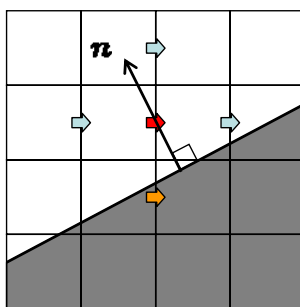
➤ 界面から最隣接の速度に界面と近傍の流体速度から予想される値を与える.



$$\mathbf{u}^{n+1} = \mathbf{v}$$

となるようにForcingされる

➤ 物体内に含まれる速度は、物体の速度になるようにforcingされる.



SDFを利用して界面再隣接点の速度を算出

➤ 法線に沿って、一次近似を仮定する.

$$U_{i+\frac{1}{2},j} = U_B + \left[\frac{\partial u}{\partial n} \right]_{i+\frac{1}{2},j} \phi_{i+\frac{1}{2},j}$$

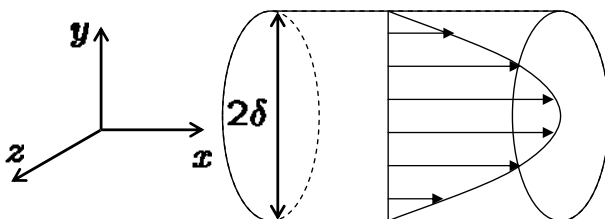
法線方向と距離を用いた補間

VCAD

数値計算法の精度検証

- 形状に曲面を含んでいる
- 解析解が存在する流れ場
- 形状の近似精度が流れの精度を決定する問題

円管内流れ



Laminar flow

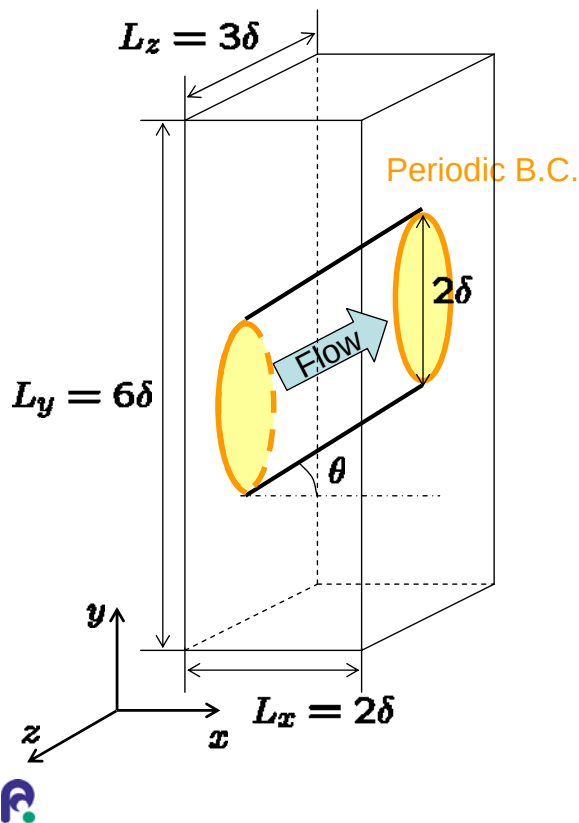
Reynolds number $Re_\tau = \frac{u_\tau \delta}{\nu}$

Theoretical solution of velocity profile

$$u = \frac{Re_\tau}{2} (1 - r^2)$$

VCAD

計算の概要



- Shape representation **SDF** or **Binary**
- Immersed Boundary Method
- Finite difference method
- Spatial derivative terms approximated by 2nd order central differential method
- Fractional step method

➤ Reynolds number : $Re_\tau = 5$

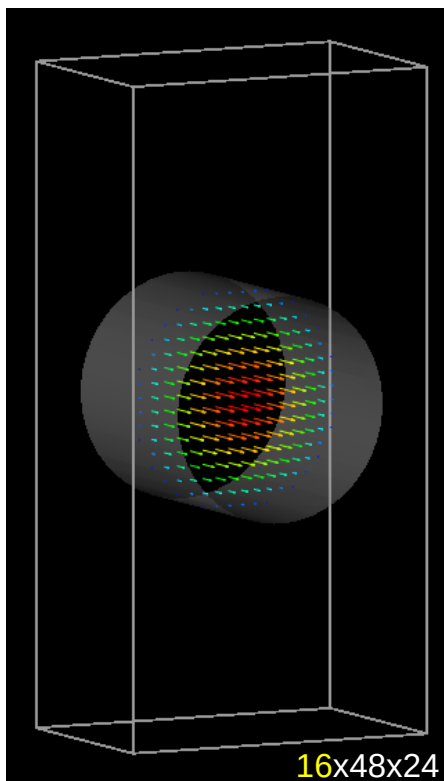
➤ Orthogonal mesh

➤ Grid resolutions

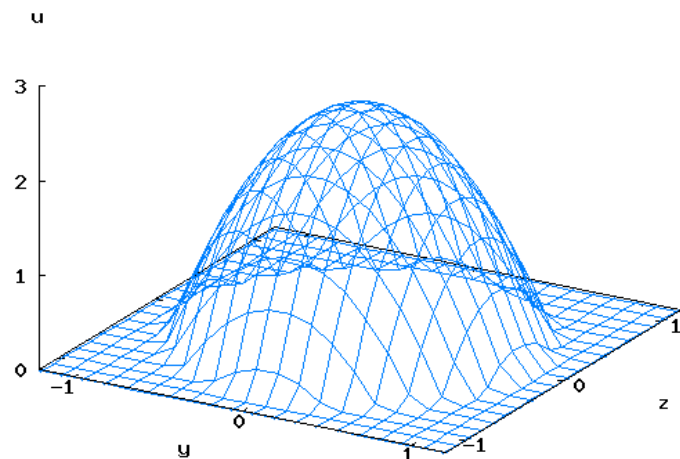
n_x	4	8	16	32	64
n_y	12	24	48	96	192
n_z	6	12	24	48	96

VCAD

Velocity field ($Re_\tau = 5$, $\theta = 0deg$)

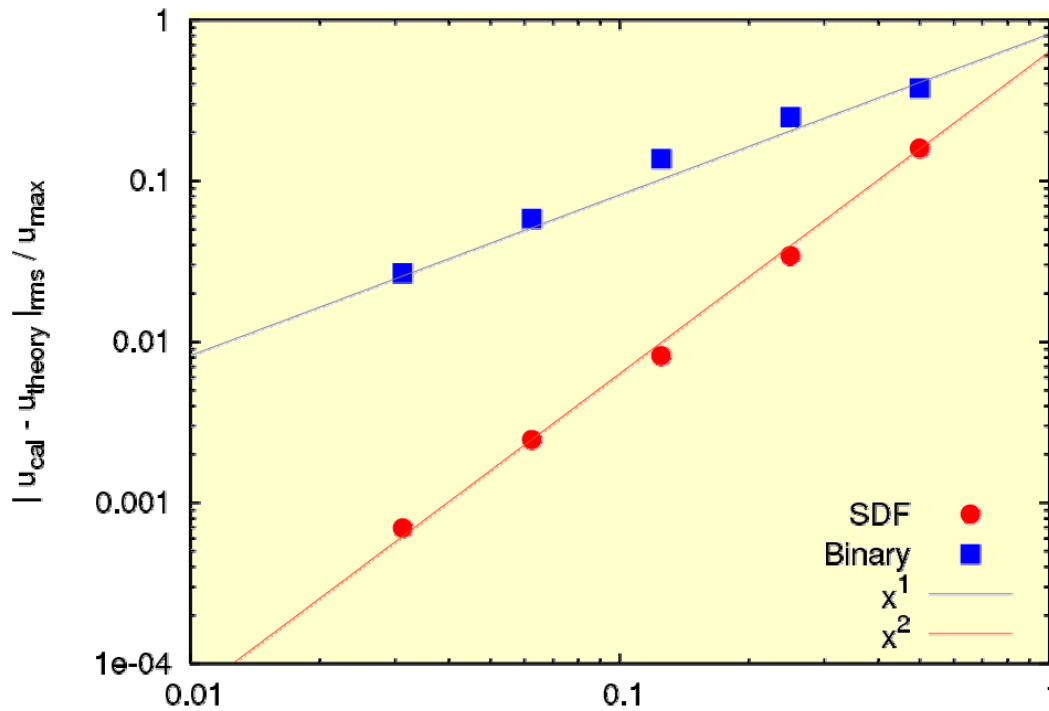


Velocity profile on a cross section



VCAD

Validation of accuracy ($Re_\tau = 5$, $\theta = 0\text{deg}$)

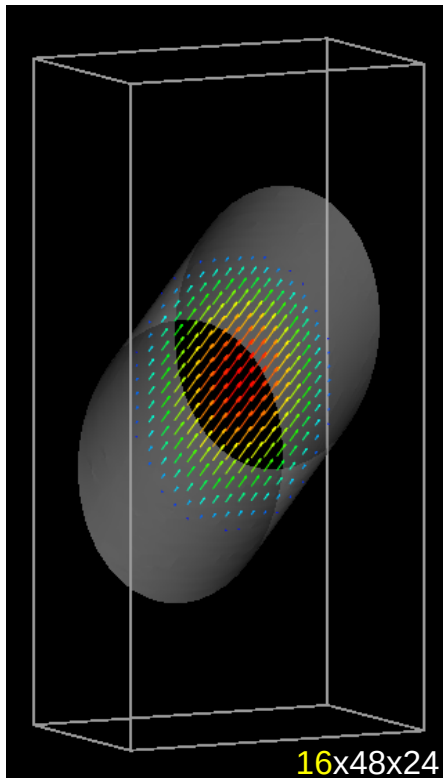


SDFによる高精度な形状表現を利用することで、2次精度が得られている

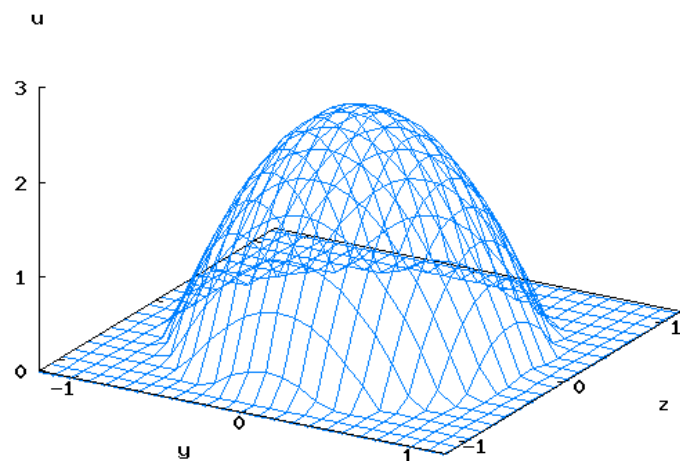


VCAD

Velocity field ($Re_\tau = 5$, $\theta = 36.9\text{deg}$)

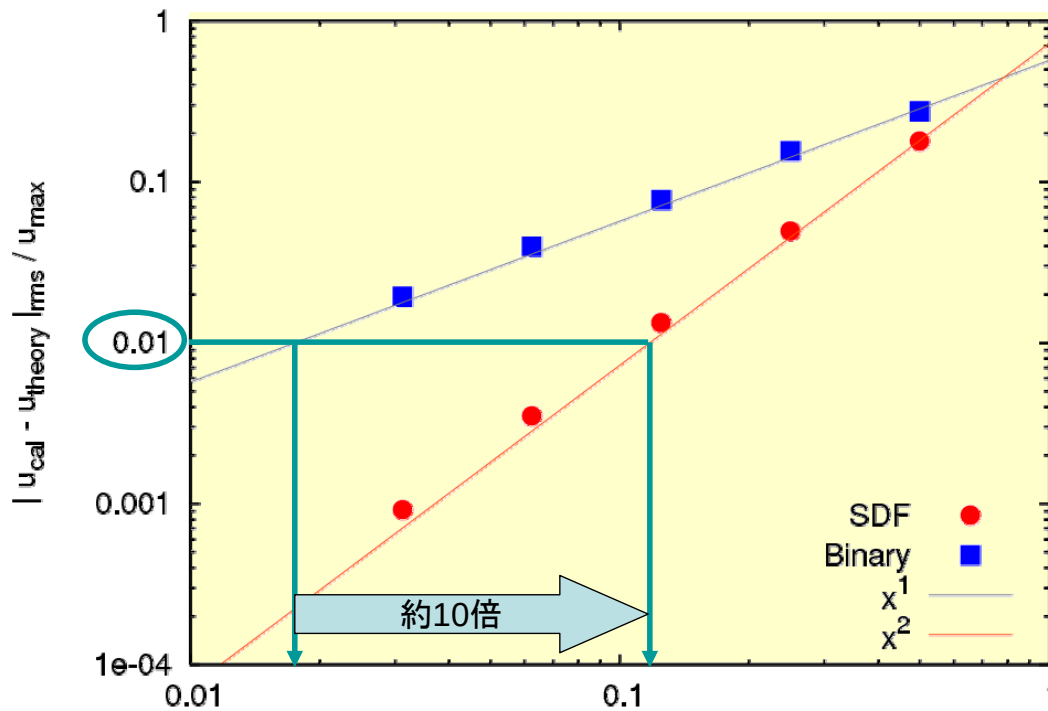


Velocity profile on a cross section



VCAD

Validation of accuracy ($Re_\tau = 5$, $\theta = 36.9\text{deg}$)



3次元計算において、1000分の1の総格子点数でBinary表現と同等の精度を有する結果



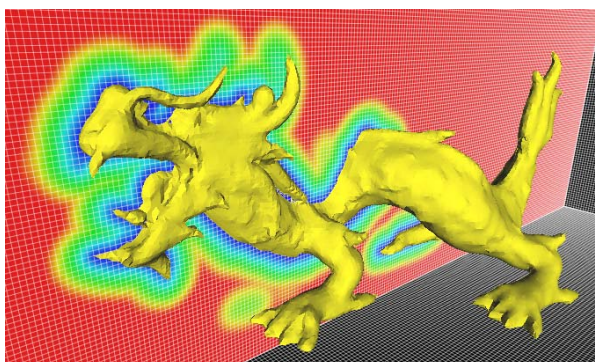
VCAD

応用例 (Asian dragon周りの流れ)



Asian dragon (XYZ RGB Inc.) 7,219,045 faces

SDF of Asian dragon



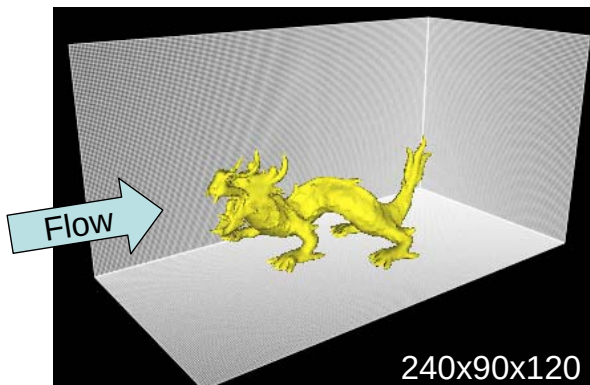
Intel Pentium D CPU 3.2GHz
with 4GB memory

SDF generation time : **53 sec**
(240x120x120)



VCAD

計算の概要

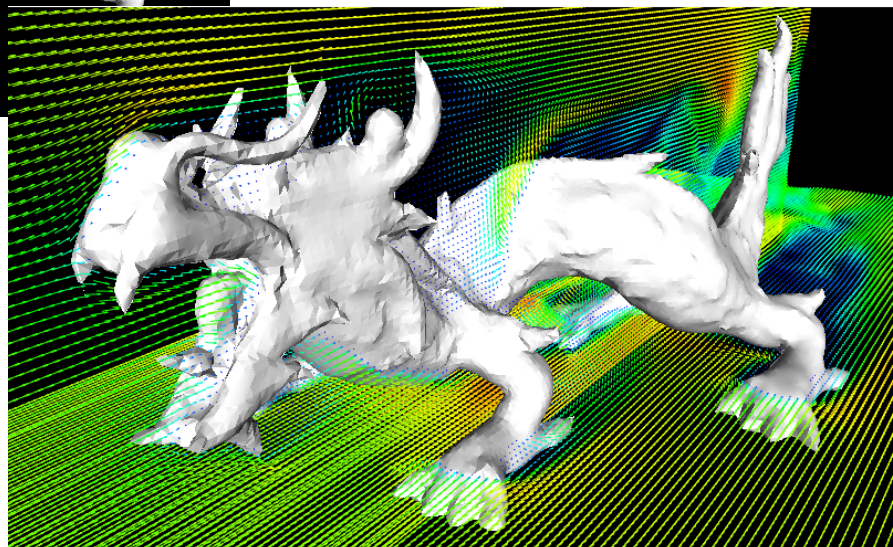
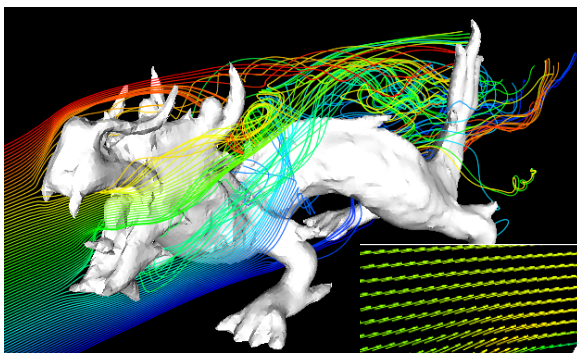


- Immersed Boundary Method with SDF
- Spatial derivative terms approximated by 4th order central differential method
- The approximated advection term including 6th derivative artificial viscosity
- DES (hybrid turbulence model RANS+LES)
- Fractional step method
- 2nd order Adams-Bash force method for the advection and viscosity term
- Reynolds number : $Re = 10,000$
- Orthogonal mesh
 - Numerical Domain $6L \times 2.25L \times 3L$
 - Grid resolution $240 \times 90 \times 120$
- Parallel computing (MPI + OMP)
 - Domain decomposition
 - Intel Xeon 5160@3GHz dual core 2CPU x 8nodes



VCAD

Flow around the Asian dragon



VCAD

Time evolution of turbulence viscosity (volume rendering with local shading model)



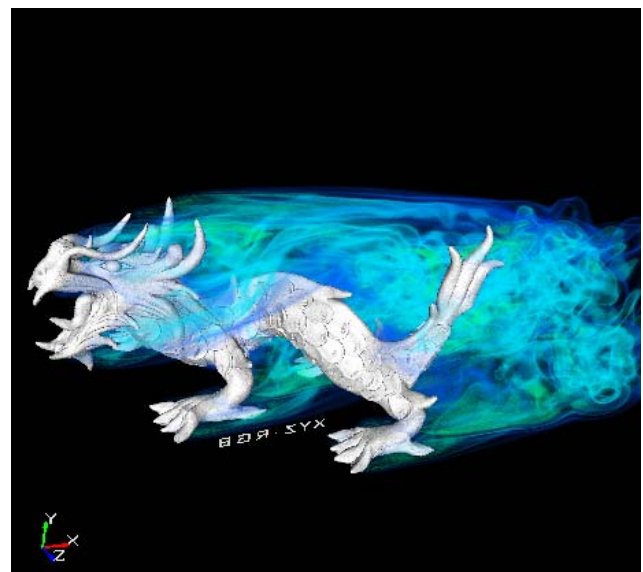
VCAD

Volume rendering

Local shading model



Emission model



複雑な流れ場に対する結果を解析するためには、より理解し易い可視化手法の開発が必要



VCAD

CTやMRIで自然造形物等から取得したボリュームデータを利用した解析例

生体内超音波伝播シミュレータ

¹沖田 浩平, ¹小野 謙二, ^{2,3}高木 周, ³松本 洋一郎

¹理化学研究所 VCADシステム研究プログラム 機能情報シミュレーションチーム

²理化学研究所 次世代計算科学研究開発プログラム 臓器全身スケール研究開発チーム

³東京大学 大学院工学系研究科 機械工学専攻

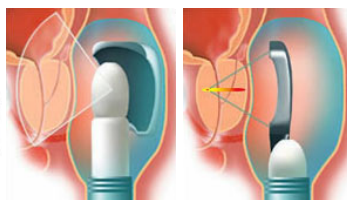


VCAD

高密度焦点式超音波療法

High Intensity Focused Ultrasound therapy

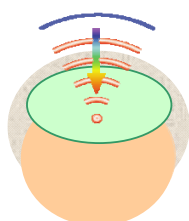
- 前立腺癌
- 乳癌



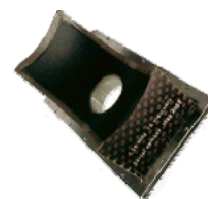
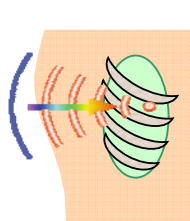
<http://www.prostatecancercentre.co.uk/treatments/hifu.html>

<http://www.fel.t.u-tokyo.ac.jp/~yukio-k/study/8thUS/HIFU.mpeg>

脳腫瘍



肝腫瘍



<http://www.imasonic.com/>

問題点

媒質界面での超音波の反射や屈折

➤ 焦点位置のずれ

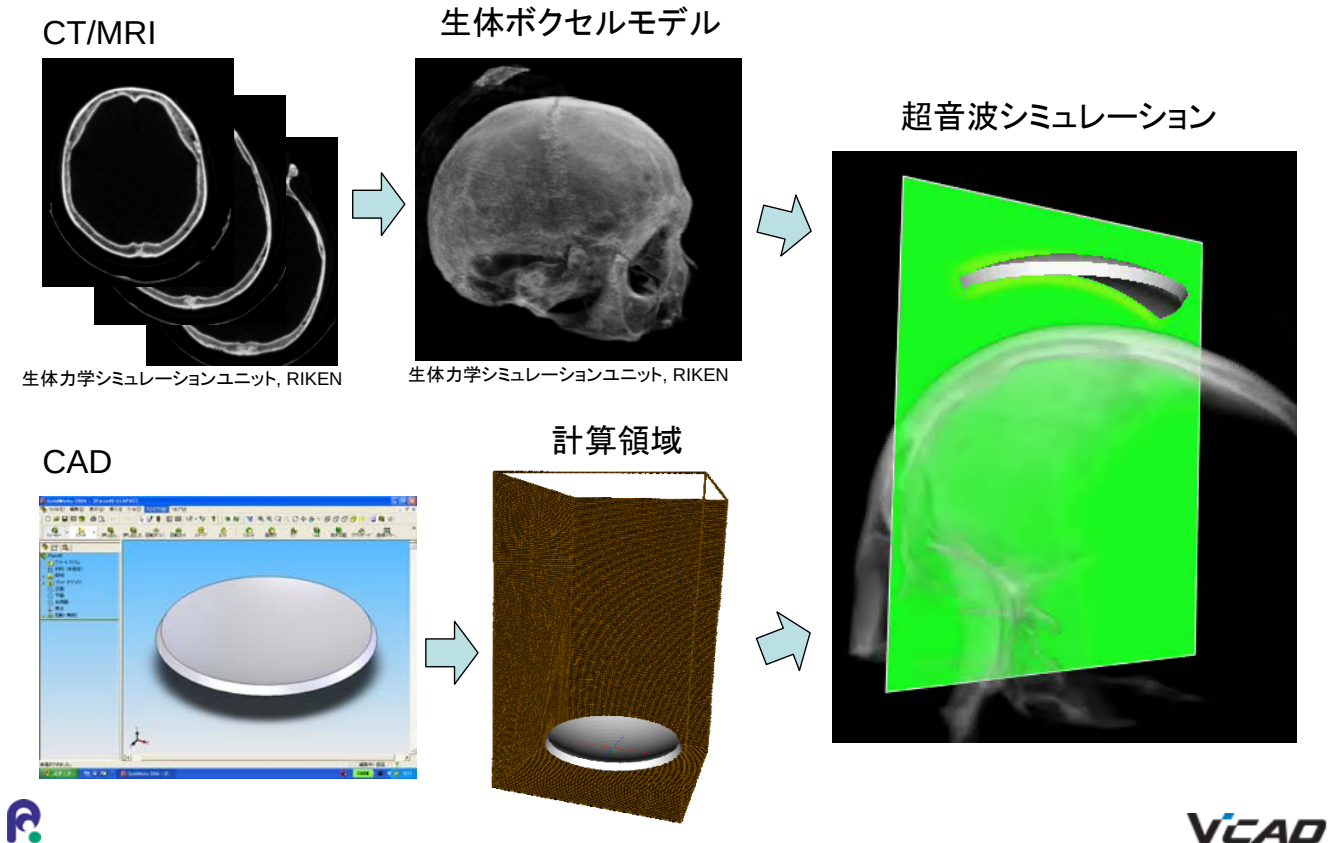
アレイトランスデューサを用いたHIFU

➤ CT/MRI等の医療データに基づく
超音波シミュレーション



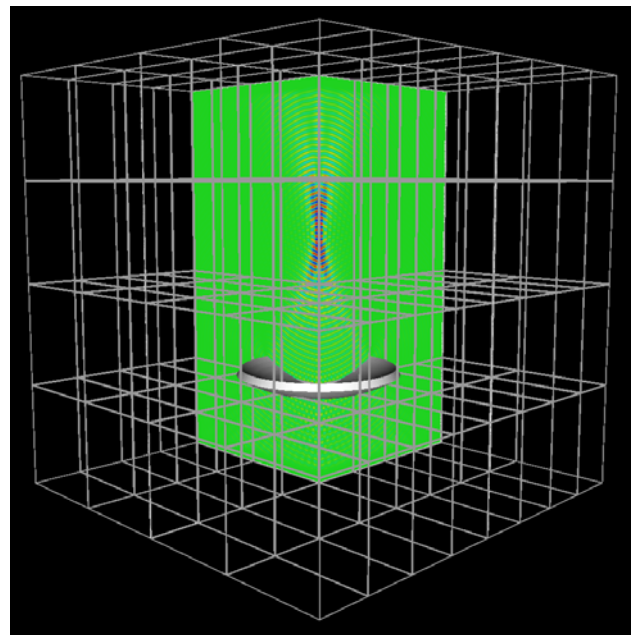
VCAD

生体内超音波伝播シミュレータ



現状の計算規模

- Parameter of Transducer
 - Size 40mm
 - Focus distance 40mm
- Frequency 1MHz ($\lambda \sim 1.5\text{mm}$ in water)
- Grid resolution 0.1mm
- Numerical domain $102.4(\text{mm})^3$
- Grid number $1024^3=1\text{Gpoint}$
- Input/Output data size
 - Scalar data 4GB
 - Restart data 60GB
- Memory size 104GB
- Parallel computing (MPI)
 - Domain decomposition
 - BlueGene (8x4x4=128node)

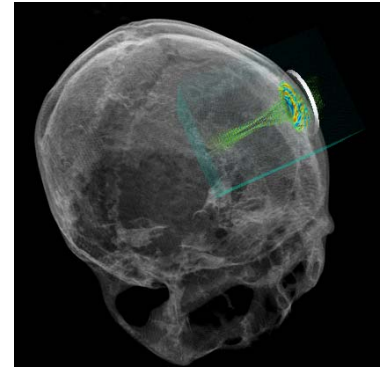


ボリユーベースのモデリングと領域分割によって、PCで4GBの入力データが作成可能

現状、既に計算結果を間引かずに可視化することができない！

近い将来に想定される計算規模

- 1MHzの超音波の波長 ~ 1.5mm
- グリッドスケール ~ 0.1mm
- 計算領域 一辺300mmのボックス
- 総格子点数
 - $3,000^3=27\text{Gpoint}$ (270億点)
- 入出力データ
 - $27\text{Gpoint} \times \text{単精度}(4\text{Byte}) = \underline{108\text{ GB}}$
 - ベクトルデータ ~ 324 GB
 - 計算のリスタート用データ ~ 1.08 TB
 - 動画作成用の時系列データ ~ $108\text{ GB} \times 100 = 10.8\text{ TB}$
- 計算に要するメモリサイズ
 - $27\text{Gpoint} \times 8\text{Byte} \times 15\sim 20\text{ word} = \underline{3.24 \sim 4.32\text{ TB}}$



大規模データのハンドリングや計算の前処理および後処理に対する効率的な手法の開発



Acknowledgement

- 本研究を遂行するに際して, RIKEN Super Combined Clusterを利用させていただきました.
- 計算コードの並列実行に際して, 情報基盤センターSEの方々にご協力いただきました.



独立行政法人 理化学研究所
知的財産戦略センター
VCADシステム研究プログラム
機能情報シミュレーションチーム

<http://vcad-hpsv.riken.jp/>

公開ソフトウェア：V-Sphere, V-Isio
近日公開予定：V-Xgen



VCAD

fin



VCAD