ボクセル情報を用いた直交座標系における 2 次元非圧縮粘性流れの数値計算

Computation of two-dimensional incompressible viscous flow in a Cartesian coordinates system based on voxel information

○　松永 奈美, 理化学研究所, 〒 351-0198 埼玉県和光市広沢 2-1, Email: matunaga@postman.riken.go.jp
劉 浩, 理化学研究所, 〒 351-0198 埼玉県和光市広沢 2-1, Email: hliu@postman.riken.go.jp
姫野 龍太郎, 理化学研究所, 〒 351-0198 埼玉県和光市広沢 2-1, Email: himeno@postman.riken.go.jp
Nami MATSUNAGA, The Institute of Physical and Chemical Research (RIKEN), Wako, Saitama, 351-0198, JAPAN
Hao LIU, The Institute of Physical and Chemical Research (RIKEN), Wako, Saitama, 351-0198, JAPAN
Ryutaro HIMENO, The Institute of Physical and Chemical Research (RIKEN), Wako, Saitama, 351-0198, JAPAN

Voxel information on medical images of MRI etc. is generally regarded as a fractional volume of fluid (VOF). We have developed a method to determine boundaries of a specific domain in a manner of VOF data and performed computation of two-dimensional incompressible viscous flow in a Cartesian coordinates system based on the voxel information.

1.　緒言

MRI 等から得たボクセルデータを直接用いて, 対象とする領域内の流れを解析することを考える. ここでは, 0 から 1 の実数値で与えられるボクセル情報を用いて, 対象領域内の 2 次元非圧縮粘性流体の基礎方程式

$$\frac{\partial}{\partial t}\boldsymbol{u} + (\boldsymbol{u}\cdot\nabla)\,\boldsymbol{u} = -\nabla p + \frac{1}{\mathrm{Re}}\nabla^2\boldsymbol{u} \tag{1.1}$$

$$\mathrm{div}\,\boldsymbol{u} = \boldsymbol{0} \tag{1.2}$$

(ただし, $\boldsymbol{u}$: 流速, p: 圧力, Re: レイノルズ数)

を直交座標系において解析を行う方法を提案したい. 一般には, 直交座標系においては境界付近のスキームの取り扱いおよび境界条件の取り込みが難しく, 不等分割点を含むとき境界付近の点での左右または上下の幅の割合に大きく差が出る場合は, 直交座標系を使ってそのままで計算をすると振動を起こしたり計算自体が破綻しやすいという問題がある. そのため, これまでにも境界の近くでの離散化および境界条件の取り込み方に対していろいろな手法が提案されているが, ここでは, 直交座標系におけるスキーム等の困難さを取り除きつつ, ボクセル情報からそのままダイレクトに直交座標系へ変換して計算する方法を提案し, その妥当性について検証する.

2.　ボクセル情報からの領域の認識

通常, MRI 画像を取り込んだ場合, そのデータは 1 つのボクセルに対して 0 から 1 の実数値として与えられる. また, その値は, 1 ならば流体, 0 ならば固体, それ以外の値 t $(0 < t < 1)$ であるときはそのボクセル内に境界が存在する というように, 1 つのボクセルに占める流体占有率として解釈されることが多い.

一般に, このボクセル上の関数は, F 関数または VOF(Volume Of Fluid) 関数と呼ばれることが多い. この VOF 関数を基にしてその境界面やその勾配を決める方法の 1 つには, Hirt ら[1]の考え方がある. また, 境界の近傍のボクセル 12 個を用いて境界の位置を計算している方法もある[2]. しかしここでは, ボクセル 5 つから左右上下の境界面およびその勾配を計算することとする.

まず, 領域全体を一様なメッシュで分割されているものとする. このとき, Fig. 2.1 で示されるように各ボクセルでのデータから境界を含むボクセルが明確に定まるが, 正確な境界の情報を与えているわけではないことに注意する. 従って, ボクセル情報から境界を決めるという操作が必要になるので, まず初めにこのボクセル上のそれぞれの値から直交座標系への変換を考えることにする.

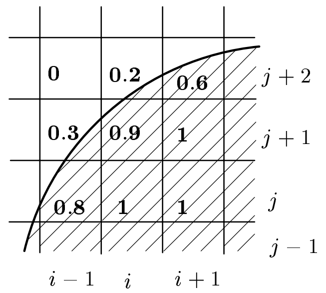

Fig. 2.1 Surface in a manner of VOF

ここで, 記号および言葉を定義する. まず, 各ボクセルの中心に点を置き, 領域全体に格子点を張り巡らすこととする. また, その格子点の x 軸方向, y 軸方向の幅をそれぞれ h, k で表すとき, 格子点 $\mathrm{P}(x_i, y_j) = (ih, jk)$（ただし, i, j は整数）における F 関数が $F(x_i, y_j) = 1$ を満たすならば, 点 P は**内点**であると定義する. さらに, その内点 P の中でも特に次の条件を満たすとき, **境界に隣接した内点**と呼ぶこととする.

$$F(x_{i-1}, y_j)F(x_{i+1}, y_j)F(x_i, y_{j-1})F(x_i, y_{j+1}) \neq 1$$

次に, 内点 P に隣接した 4 点と点 P から各点までの距離をそれぞれ P_E, P_W, P_S, P_N および h_E, h_W, k_S, k_N で表すこととする. （Fig. 2.2 を参照. ）ここで, 隣り合う内点どうしの距離と境界付近の F 関数の有限体積的な解釈を考慮して, 点 P からのそれぞれの長さを次のように定義する.

$$h_E = \begin{cases} h & (F(P_E) = 1) \\ (0.5 + F(P_E))h & (0 \leq F(P_E) < 1) \end{cases} \tag{2.1}$$

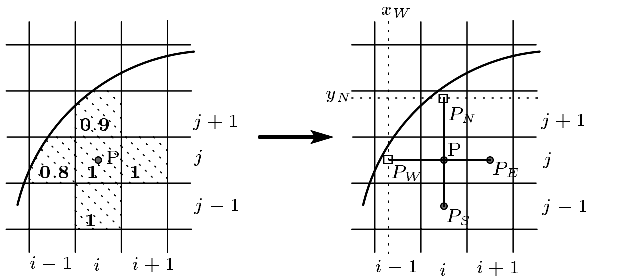

Fig. 2.2 Transformation

このとき, $0.5h \le h_E < 1.5h$ であることに注意する．また, h_W, k_S, k_N に対しても同様に定義する．

点 P が境界に隣接する内点であるならば, その周りの 4 点において F 関数の値が 1 でないボクセル内に境界が存在するが, その境界点の x 座標およびは y 座標は次のように計算するものとする．

$$
\begin{array}{lll}
x_E = ih + h_E, & y_E = jk & (F(P_E) \neq 1) \\
x_W = ih - h_W, & y_W = jk & (F(P_W) \neq 1) \\
x_S = ih, & y_S = jk - k_S & (F(P_S) \neq 1) \\
x_N = ih, & y_N = jk + k_N & (F(P_N) \neq 1)
\end{array}
$$

従って, 点 P が内点ならばボクセルの中心に格子点が配置され, そうでない場合は上記の方法により境界点として定められていることに注意する．

3．境界条件

直交座標系で方程式を解く場合, 一番問題になるのが境界条件をいかにして取り込むかという点である．ここでは, 特にノイマン条件に対しては, あまり幾何学的な形状に左右されないと思われる NPLC(近傍点局所選点法: Neighbouring Point Local Collocation Method)[3]の概念を用いて境界での値を求めることにする．ただし, 速度および圧力は, 先ほど定めた格子点上に配置されるものとする．

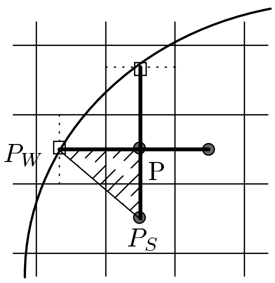

Fig. 3.1 Surface treatment

さて, Fig. 3.1 において点 P_W における境界条件の取り込みを考える．まず, Fig. 3.1 で示すように, 境界点 P_W と内点 2 点を選び, その領域内における物理量 f を 1 次関数にて近似する．

$$f(x, y) = c_1 + c_2 x + c_3 y \tag{3.1}$$

ただし, c_1, c_2, c_3 は未知の定数であり, x, y は境界点からの相対座標を表す．ここで, 境界における単位法線ベクトルを $\boldsymbol{n} = (n_1, n_2)$ で表すとき,

$$\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{n}} = \frac{\partial f}{\partial x} n_1 + \frac{\partial f}{\partial y} n_2$$

であることに注意すれば, 境界点と内点 2 点から得られる関係式を用いて未知定数を計算することができる．その結果として, ノイマン条件を取り込むことができる．

4．法線ベクトル

ここでは, 単位法線ベクトル $\boldsymbol{n}$ の求め方について述べる．

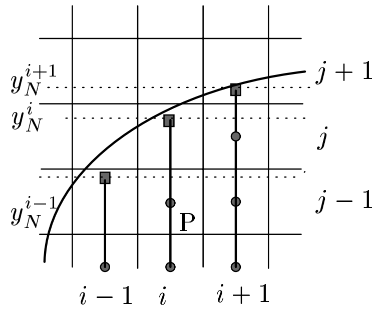

Fig. 4.1 Location of surface grid points

Fig. 4.1 のように第 i 列のボクセルの左右のエッジライン $i - \frac{1}{2}$, $i + \frac{1}{2}$ における境界の勾配 $\partial y / \partial x$ は, それぞれ

$$\frac{y_N^i - y_N^{i-1}}{h}, \quad \frac{y_N^{i+1} - y_N^i}{h}$$

により計算できる．ただし, 上付き添え字は x 軸方向のボクセルの番号を表す．このとき, 第 i 列の境界点における勾配は, この左右の勾配を内分して得るものとする．

$$
\begin{aligned}
\left.\frac{\partial y}{\partial x}\right|_i &= \frac{1}{2}\left(\frac{y_N^i - y_N^{i-1}}{h} + \frac{y_N^{i+1} - y_N^i}{h}\right) \\
&= \frac{y_N^{i+1} - y_N^{i-1}}{2h}
\end{aligned}
$$

また, Fig. 4.2 のように y_N^{i-1} が存在しない場合は,

$$m_L := \frac{y_{j+1} - y_j}{x_W^{j+1} - x_W^j}, \quad m_R := \frac{y_N^{i+1} - y_N^i}{x_{i+1} - x_i}$$

を計算し, その平均の値を取ることとする．

$$\left.\frac{\partial y}{\partial x}\right|_i = \frac{1}{2}(m_L + m_R)$$

y_{i+1} が存在しない場合も, 同様の方法で求めることする．さらに, $\partial x / \partial y$ も上記の方法で計算するものとする．

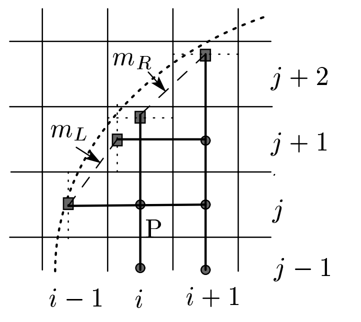

Fig. 4.2 Gradients

従って, 境界の接線方向の傾きが分かることから, 前節で使用する単位法線ベクトルのそれぞれの成分を求めることができる．

5．数値計算法

式 (1.1), (1.2) は, 2 次元においては以下のように書き表される．

$$\frac{\partial u}{\partial t} = F_u - \frac{\partial p}{\partial x} \tag{5.1}$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} = F_v - \frac{\partial p}{\partial y} \tag{5.2}$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0 \tag{5.3}$$

ただし, u, v はそれぞれ $\boldsymbol{u}$ の第 1 成分, 第 2 成分であり,

$$F_u = -u\frac{\partial u}{\partial x} - v\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{1}{\mathrm{Re}}\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}\right) \tag{5.4}$$

$$F_v = -u\frac{\partial v}{\partial x} - v\frac{\partial v}{\partial y} + \frac{1}{\mathrm{Re}}\left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2}\right) \tag{5.5}$$

とする.

ここでは, SMAC 法を使用する. まず最初に SMAC 法の予測段階において, 運動方程式である式 (5.1), (5.2) を対流項および粘性項に対して 2 次精度のアダムス-バッシュフォース法を用いて時間積分すると,

$$u^* = u^n + \Delta t\left\{\frac{1}{2}\left(3F_u^n - F_u^{n-1}\right) - \frac{\partial p^n}{\partial x}\right\} \tag{5.6}$$

$$v^* = v^n + \Delta t\left\{\frac{1}{2}\left(3F_v^n - F_v^{n-1}\right) - \frac{\partial p^n}{\partial y}\right\} \tag{5.7}$$

となる. ただし, u^*, v^* は仮の速度場を表し, 上付き添字 n は時間ステップ数, Δt は時間刻み幅を表す.

次に, $n+1$ 時間ステップ目において連続の式を厳密に満たす速度場を u^{n+1}, v^{n+1}, その速度場を求めるための $n+1$ 時間ステップ目の圧力を p^{n+1} とするとき, 次式によって $n+1$ 時間ステップ目の速度を求める.

$$u^{n+1} - u^* = \Delta t\left(-\frac{\partial p^{n+1}}{\partial x} + \frac{\partial p^n}{\partial x}\right) \tag{5.8}$$

$$v^{n+1} - v^* = \Delta t\left(-\frac{\partial p^{n+1}}{\partial y} + \frac{\partial p^n}{\partial y}\right) \tag{5.9}$$

ここで, 式 (5.8), (5.9) において p^{n+1} の値が必要となるが, 以下の手順で求めることとする.

まず, $n+1$ 時間ステップ目において速度が連続の式を満たすことから, 次のように離散化された連続の式

$$\begin{aligned} D_{i,j}^{n+1} = &\frac{1}{\widetilde{\Delta x}_{i,j}}\left(u_{i+\frac{1}{2},j}^{n+1} - u_{i-\frac{1}{2},j}^{n+1}\right) \\ &+ \frac{1}{\widetilde{\Delta y}_{i,j}}\left(v_{i,j+\frac{1}{2}}^{n+1} - v_{i,j-\frac{1}{2}}^{n+1}\right) = 0 \end{aligned} \tag{5.10}$$

に式 (5.8), (5.9) を代入すると, 次式を得る.

$$\begin{aligned} &\frac{1}{\widetilde{\Delta x}_{i,j}}\left(\left.\frac{\partial p^{n+1}}{\partial x}\right|_{i+\frac{1}{2},j} - \left.\frac{\partial p^{n+1}}{\partial x}\right|_{i-\frac{1}{2},j}\right) \\ &+ \frac{1}{\widetilde{\Delta y}_{i,j}}\left(\left.\frac{\partial p^{n+1}}{\partial y}\right|_{i,j+\frac{1}{2}} - \left.\frac{\partial p^{n+1}}{\partial y}\right|_{i,j-\frac{1}{2}}\right) \\ &= \frac{1}{\Delta t}D_{i,j}^* + \frac{1}{\widetilde{\Delta x}_{i,j}}\left(\left.\frac{\partial p^n}{\partial x}\right|_{i+\frac{1}{2},j} - \left.\frac{\partial p^n}{\partial x}\right|_{i-\frac{1}{2},j}\right) \\ &+ \frac{1}{\widetilde{\Delta y}_{i,j}}\left(\left.\frac{\partial p^n}{\partial y}\right|_{i,j+\frac{1}{2}} - \left.\frac{\partial p^n}{\partial y}\right|_{i,j-\frac{1}{2}}\right) \end{aligned} \tag{5.11}$$

ただし, h_E, h_W, k_S, k_N は内点 $\mathrm{P}(x_i, y_j)$ に依存し,

$$\widetilde{\Delta x}_{i,j} := \frac{1}{2}(h_E + h_W), \quad \widetilde{\Delta y}_{i,j} := \frac{1}{2}(k_S + k_N)$$

とする. またここでは, 各 (i,j) ごとに点 P に隣接した 4 点（内点および境界点）を $(i \pm 1, j)$, $(i, j \pm 1)$ の添字を使って表し, $(i \pm \frac{1}{2}, j)$, $(i, j \pm \frac{1}{2})$ により点 P と隣接している 4 点との中点での値を表すものとする.

さて, これらの式を具体的に離散化する. 特に, ボクセルの各辺の中点での値を使って離散化を行う[4]ので注意が必要である. まず, ボクセルの辺の中点の速度成分は, 隣り合うボクセル接点の平均を用いて定義することとする.

$$u_{i\pm\frac{1}{2},j} = \frac{u_{i,j} + u_{i\pm1,j}}{2}, \quad v_{i\pm\frac{1}{2},j} = \frac{v_{i,j} + v_{i\pm1,j}}{2}$$

その他の辺の中点の速度も同様に計算をする.

次に, ボクセルの中心および辺中点における微分を以下のように定義する.

$$\left.\frac{\partial u}{\partial x}\right|_{i,j} = \frac{u_{i+\frac{1}{2},j} - u_{i-\frac{1}{2},j}}{\widetilde{\Delta x}_{i,j}}$$

$$\left.\frac{\partial u}{\partial x}\right|_{i+\frac{1}{2},j} = \frac{u_{i+1,j} - u_{i,j}}{h_E}$$

$$\left.\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right|_{i+\frac{1}{2},j} = \frac{1}{\widetilde{\Delta x}_{i,j} + \widetilde{\Delta x}_{i+1,j}}\left(\left.\frac{\partial u}{\partial x}\right|_{i+\frac{3}{2},j} - \left.\frac{\partial u}{\partial x}\right|_{i-\frac{1}{2},j}\right)$$

その他の微分も同様に計算する. ただし, このままでは, i によっては定義点でない点での値が必要となるので, そのような場合においては, 仮想点を置く代わりに Neumann 条件を取りこんだ方法と同じように NPLC 法を使って, 2 階微分及びそれ以外の計算に必要な微分項の値すべてを計算することとする.

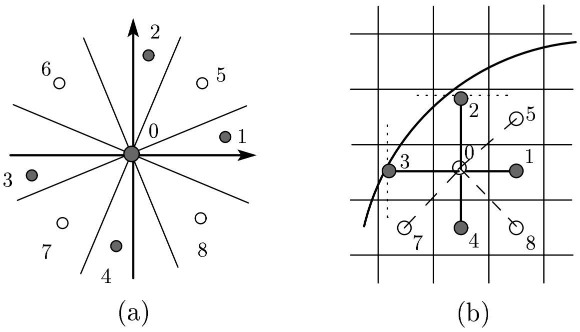

Fig. 5.1 (a) Layout of spatial points relation for NPLC
(b) Treatment of grid point near boundary

まず, Fig. 5.1 のように点 0 を中心として各々の方向に番号をつける. 離散化に必要な物理量を f とするとき, 境界に隣接した内点の周りの f の分布を, 位置に関する 2 次関数に近似する.

$$f(x,y) = f_0 + a_1x + a_2y + a_3x^2 + a_4y^2 + a_5xy \tag{5.12}$$

ただし, f_0 は Fig. 5.1(b) で示される点 0 における物理量, $a_1, \ldots, a_5$ は未知係数, x 及び y は点 0 からの相対座標を表す. このとき 式 (5.12) を微分すると, 離散化に必要な微分項は, 以下のようにして求めることができる.

$$\frac{\partial f}{\partial x} = a_1 + 2a_3x + a_5y,$$

$$\frac{\partial f}{\partial y} = a_2 + 2a_4 y + a_5 x$$

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} = 2a_3, \quad \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} = 2a_4$$

なお, 未知係数は, x 軸および y 軸方向の内点または境界点の 4 点と対角方向の内点 1 点 $(i = 5, \ldots, 8)$ に関する以下の行列から得られる値を平均化して求める.

$$\begin{pmatrix} x_1 & y_1 & x_1^2 & y_1^2 & x_1 y_1 \\ x_2 & y_2 & x_2^2 & y_2^2 & x_2 y_2 \\ x_3 & y_3 & x_3^2 & y_3^2 & x_3 y_3 \\ x_4 & y_4 & x_4^2 & y_4^2 & x_4 y_4 \\ x_i & y_i & x_i^2 & y_i^2 & x_i y_i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ a_4 \\ a_5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_1 - f_0 \\ f_2 - f_0 \\ f_3 - f_0 \\ f_4 - f_0 \\ f_i - f_0 \end{pmatrix}$$

$$(i = 5, \ldots, 8)$$

ただし, 定義点でない対角方向（例えば, Fig. 5.2 においては点 6 方向）に関する関係式は計算しないものとする.

6. 数値例

ここでは, キャビティー問題を用いて本論文で提案した方法の検証を行う.

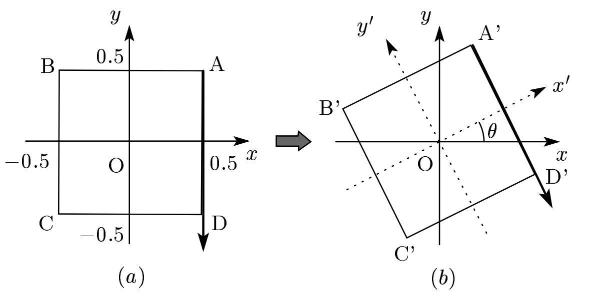

Fig. 6.1 A model of cavity

まず初めに, 1 辺の長さが 1 である正方形 ABCD を Fig. 6.1 (a) のように置き, 境界条件は, 線分 AD 上では $(u, v) = (0, -1)$ および $\partial p/\partial \boldsymbol{n}$=0, それ以外の線分上では no-slip 条件を与えるものとする.

さらに, その図形を Fig. 6.1 (b) のように θ だけ回転させ, Fig 6.2 のようなボクセル情報が与えられていると仮定する.

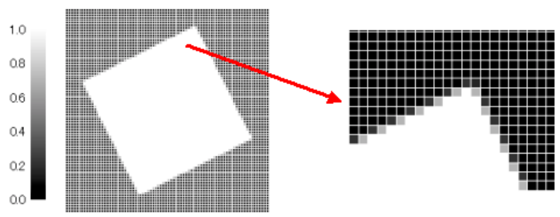

Fig. 6.2 Boundary in terms of Voxel infomation

このとき, Re = 100 と Re = 400 の場合に対して, 以下のような条件の下で計算を行った.

Case1. Re $= 100, h = k = 0.02, \Delta t = 0.005$

(a) $m = 0.5$, (b) $m = 1$

Case2. Re $= 400, m = 0.5$

(a) $h = k = 0.02, \Delta t = 0.005$

(b) $h = k = 0.01, \Delta t = 0.0025$

ただし, ここでの時間ステップ数は Case1 では 10000, Case2 では 20000 とし, 総ボクセル数は $h = k = 0.02$ では 80×80, $h = k = 0.01$ では 160×160 とした. また, 圧力に関しては式 (5.11) を解くとき反復法を用い, その加速パラメータ ω の値を 1.0, 各時間ステップにおける最大反復回数を 30 として計算した. さらに, p^* を各反復における圧力の値とするとき, $m = 0, 1, \ldots, 30$ に対して

$$\frac{\|p^{*(m+1)} - p^{*(m)}\|}{\|p^{*(m)}\|} < 10^{-3}$$

を満たすならば, 圧力 p は十分収束したとみなして反復を打ち切り, $p_{i,j}^{n+1} := p_{i,j}^{*(m+1)}$ とする. ただし,

$$p^{*(0)} := p^n$$

$$\|p^{*(m+1)} - p^{*(m)}\| = \sum_{i,j} \sqrt{\left|p_{i,j}^{*(m+1)} - p_{i,j}^{*(m)}\right|^2}$$

$$\|p^{*(m)}\| = \sum_{i,j} \sqrt{\left|p_{i,j}^{*(m)}\right|^2}$$

とする.

このとき, Fig. 6.1(b) での x'-y' 座標系での速度ベクトルを (u', v') とするとき, Ghia ら[5]のデータと比較した結果は Fig.6.2–6.5 で表される. （ただし, グラフ内では x', y', u', v' ではなく, 改めて x, y, u, v と書き表した. ）

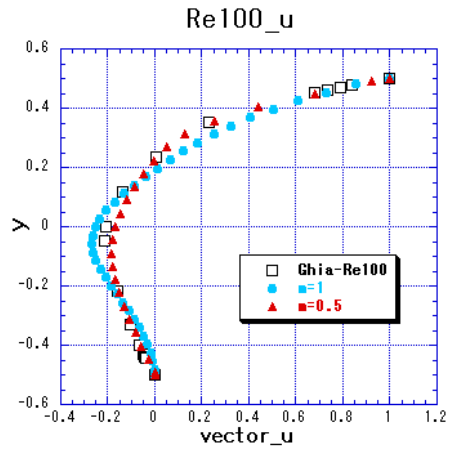

Fig. 6.2 u-velocity in Case1

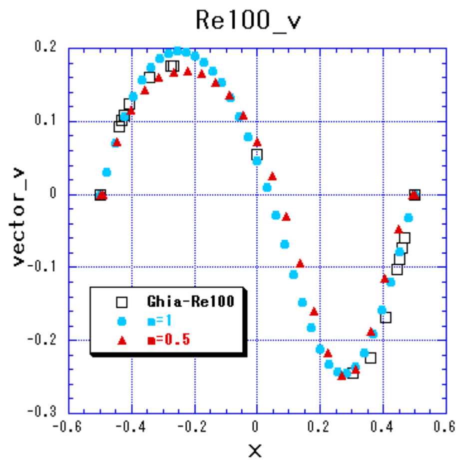

Fig. 6.3 v-velocity in Case1

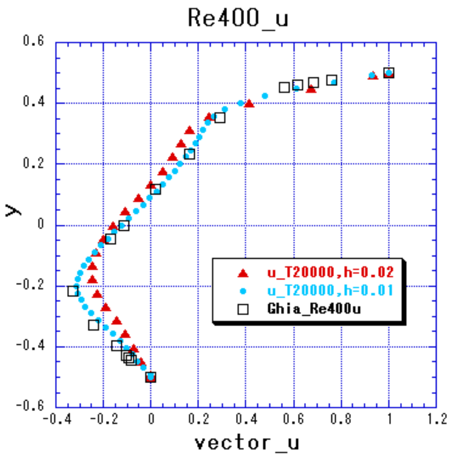

Fig. 6.4 u-velocity in Case2

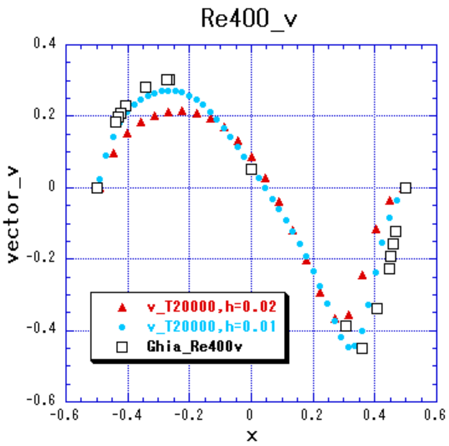

Fig. 6.5 v-velocity in Case2

これらの結果から, $m = 0.5$ に対しては, $\mathrm{Re} = 100$, $\mathrm{Re} = 400$ のいずれの場合も格子幅を適切に取ると安定に計算できることが分かった. また, 傾きの値を変えたとき（すなわち不等分割点の幾何学的配置が変わったとき）は若干のずれが生じているが, レイノルズ数が低い場合は有効な結果を得ていることが確認できた.

7. 結言

本研究では, ボクセル情報の数値データを直接用いて VOF 関数の解釈から領域を認識させ, 直交座標系の特徴を生かして対象領域内の 2 次元非圧縮流れの解析を行った結果, 本論文で提案した方法の有効性を検証できた. 手法としては, 近傍点局所選点法 (NPLC) を用い, 速度, 圧力の未知数を同じ定義点上に配置しながらも, 計算を行う際にはスタガード法的な解釈をし計算を行ったが, 低レイノルズ数に対しては安定して求めることができることを確認できた.

今後は, 高レイノルズ数流れに対しても同様の安定性が得られるかどうかを検討しながら, MRI 画像から得られた血管のボクセルデータを用いて血流解析を試みる予定である.

参考文献

1. C.W.Hirt and B.D.Nichols, “Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries”, J. Comp. Phys., **39**(1981), pp. 201-225.

2. 白川英観・高田保之・黒木虎人・伊藤猛宏, “VOF 法の改良 (第 2 報, 表面張力項および輸送性質計算法の改良)”, 日本機会学会論文集 (B 編), 66 巻 647 号 (2000), pp. 1667-1674.

3. 中野明・下村信雄・里深信行, “デカルト格子系による任意形状物体周りの圧縮性粘性流計算”, 日本機会学会論文集 (B 編), 61 巻 592 号 (1995), pp. 4319-4326.

4. 西田秀利, “非スタガード差分法による非圧縮性ナビェ・ストークス方程式の数値解”, 日本機会学会論文集 (B 編), 62 巻 599 号 (1996), pp. 2646-2651.

5. Ghia, U., Ghia, K.N. and Shin C.T., “High-Re solutions for incompressible flow using the Navier-Stokes equations and a multigrid method”, J. Comput. Phys., **48**(1982), pp. 387-411.