平成24年度　全学教育

自然界の構造
生体内の流れ

最新の測定技術や、スーパーコンピュータによるシミュレーションにより、生体内の複雑な血液の流れを理解する。

第2回　数値シミュレーション

2012年4月25日

流体科学研究所
流体融合研究センター
早 瀬 敏 幸

自然界の構造　講義予定

１回目	４月１１日	早瀬敏幸教授　生体内の流れ(1) 概論
２回目	４月１８日	休講
３回目	４月２５日	早瀬敏幸教授　生体内の流れ(2)シミュレーション
４回目	５月　２日	伊藤高敏教授
５回目	５月　９日	伊藤高敏教授
６回目	５月１６日	伊藤高敏教授
７回目	５月２３日	西山秀哉教授
８回目	５月３０日	西山秀哉教授
９回目	６月　６日	西山秀哉教授
10回目	６月１３日	丸田　薫教授
11回目	６月２０日	丸田　薫教授
12回目	６月２７日	丸田　薫教授
13回目	７月　４日	久保田智広准教授
14回目	７月１１日	久保田智広准教授
15回目	７月１８日	久保田智広准教授

第2回　講義内容

1．はじめに

2．動的システムと微分方程式

3．偏微分方程式

4．常微分方程式の数値解法

5．偏微分方程式の数値解法

6．数値シミュレーションの例

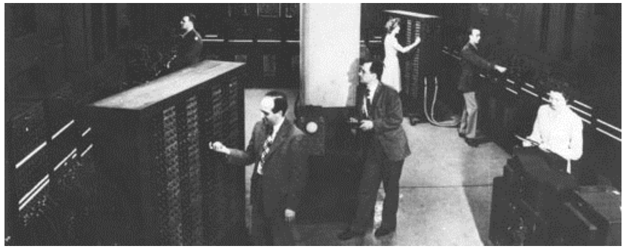
7．おわりに

1. はじめに

コンピュータの発展

1946年　世界初のデジタル計算機ENIACが完成

Electronic Numerical Integrator and Computer



ペンシルベニア大学HP

ペンシルベニア大学（米国）
１８０００本の真空管
毎秒５０００回の加算、１４回の１０桁乗算
（当時、最新の機械式リレーコンピュータでは、毎秒５０回の加算が可能）

2002年　世界最速の地球シミュレータが完成（５６年後）

地球シミュレータセンター（日本）
3000**億個のトランジスター**（CPU**のみ**）　**（１５００万倍）**
毎秒４０兆回の乗算　（3兆倍）

2011年　京速コンピュータ「京」が世界最速に（６５年後）

理化学研究所HP

理化学研究所（日本）
672**筐体**（CPU**数**68,544**個**）
毎秒８,１６２兆回の乗算　（583**兆倍**）

シミュレーション手法の発展

1666年　微積分学(ニュートン)

1845年　ナビエ･ストークス方程式 (流れの基礎方程式)

1900年頃　ルンゲ･クッタ法 (常微分方程式の数値解法)

1960年頃　有限要素法 (構造解析)

1965年　MAC法 (差分法による流体解析)

1972年　SIMPLE法 (有限体積法による流体解析)

人体のモデリング


【全面広告】　朝日新聞　2002年(平成14年)11月22日　金曜日　12版▲ 16

VOLVO
for life

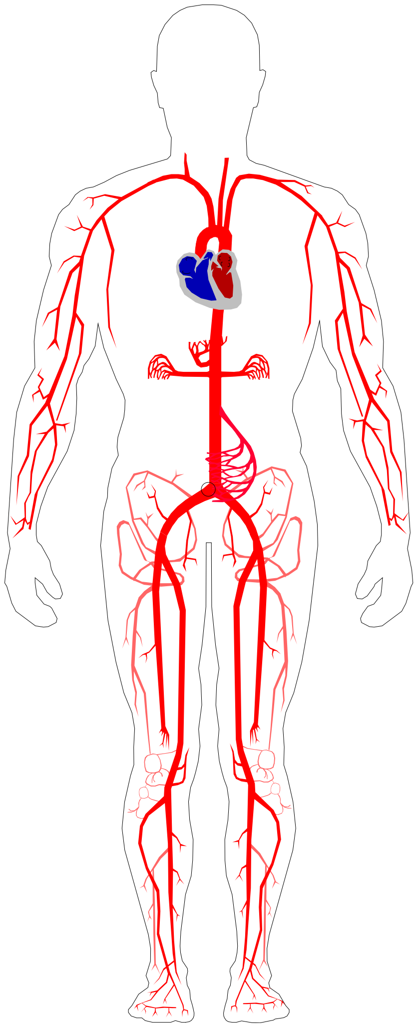
胎児をもったバーチャル衝突ダミー「GHⅢ50%」。
ボルボからまた、新たな安全対策が走り始めました。
The World's First Virtual Pregnant Crash Dummy is Born.

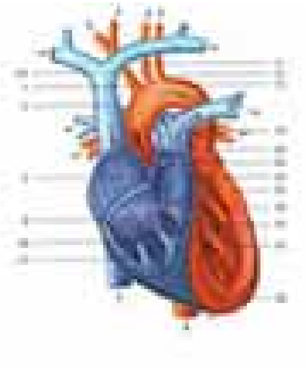
今日では車に乗るすべての乗員は高いレベルの安全システムで守られています。しかし、妊婦と胎児の安全に関しては驚くほど研究が遅れているのが実情です。この分野の安全対策を次の最優先課題と考えるボルボは、世界初のバーチャル妊婦ダミー「GHⅢ50%」*を開発。これは、事故の際に最も危険性が高いと考えられている妊娠後期の女性のコンピュータ・モデルで、人間と同様の組織を備えています。彼女と彼女の"赤ちゃん"は現在、画面上の事故シミュレーションを通して数多くの貴重なデータを私たちに提供しています。シートベルトやエアバッグは子宮や胎盤、胎児にどのような影響を与えるのか。母体内で胎児はどのような動きをするのか。また、安全装置の新しいデザインをテストする際にも彼女たちは活躍します。私たちのこれまでの研究では、正しくシートベルトを着用することが、妊婦と胎児を守るために有効であるという結果がでています。国によって法規制は異なりますが、スウェーデンではほとんどの妊婦がシートベルトを着用しています。75年にわたる安全開発の歴史の中で、後ろ向きチャイルド・シート(1972年)やビルトインタイプのチャイルド・シート(1990年)など、チャイルド・セーフティにおいても常に先駆者であり続けてきたボルボ。バーチャル妊婦ダミーによる胎児をプロテクトするための研究が、世界で初めて始まりました。

「Let's name GHⅢ50%」世界初のバーチャル妊婦ダミーに名前をつけてください。応募者の中から抽選で100名様にボルボの3点式シートベルトを装着した「エルク人形」を差しあげます。
「ボルボ・スペシャル セーフティ ストーリー ビデオ」を抽選で750名様に差しあげます。1927年の創業時から続くボルボの安全哲学を、ボルボ・セーフティセンターでの実車テスト、GHⅢ50%開発責任者の解説などの最新映像を交えてご紹介します。
■"Let's name GHⅢ50%"および"ボルボ・スペシャル セーフティ ストーリー ビデオ"へのご応募は、ボルボ・ホームページでお申し込みください。(応募期間:11月21日~12月31日まで)

ボルボ製品カタログのご請求およびボルボ・ショールームのご案内は、0120-55-8500またはwww.volvocars.co.jpまで。

循環系シミュレーションモデル

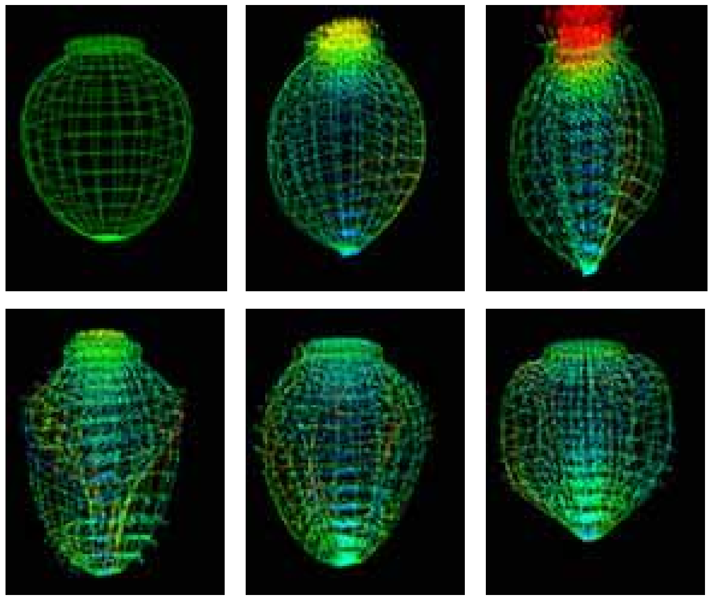




バーチャルハート

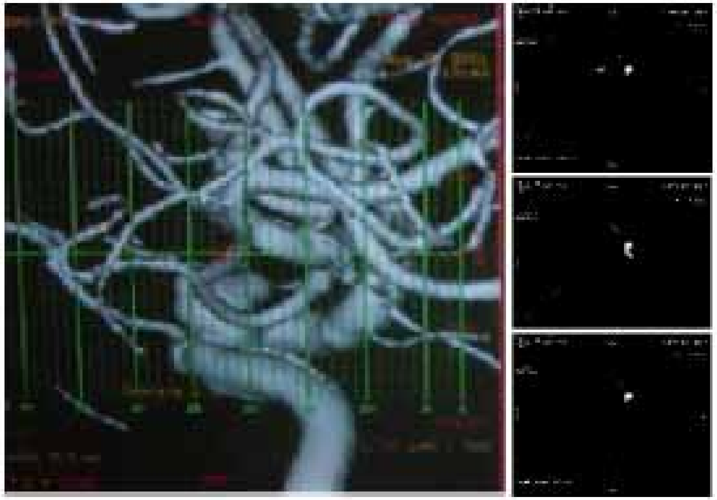
国立循環器病センター, 東京大学医学部

バーチャルハートを実現するためには、神経の興奮から始まる電位場解析、sarcomere (筋節) の収縮モデル、流体・構造連成解析、などを組み合わせた大きなシステムを構築する必要がある。今後、心臓全体、システム全体のモデル化を進める。各種心臓疾患の治療薬・治療法開発、手術計画、遺伝子治療へのブレークスルーを与えることを目指した計算科学の真価が問われる研究



脳動脈の血流シミュレーション

流体科学研究所と医学部との共同研究



Tamer HASSAN[*1], Tsutomu SAITO[*2], Eugene TIMOFEEV[*2], Akira TAKAHASHI[*1],
Kazuyoshi TAKAYAMA[*2], Takashi YOSHIMOTO [*3]

The Fifth JSME-KSME Fluids Engineering Conference
Nov. 17-21, 2002, Nagoya, Japan

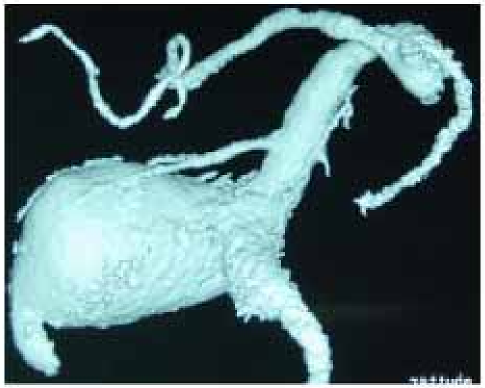


Fig. 6 The image of a giant vertebrobasilar aneurysm created with 3D DSA.

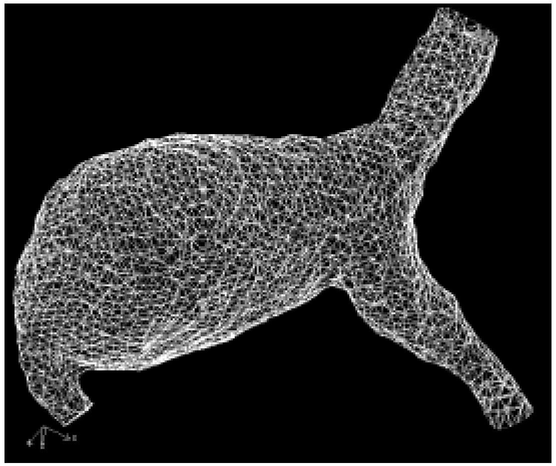


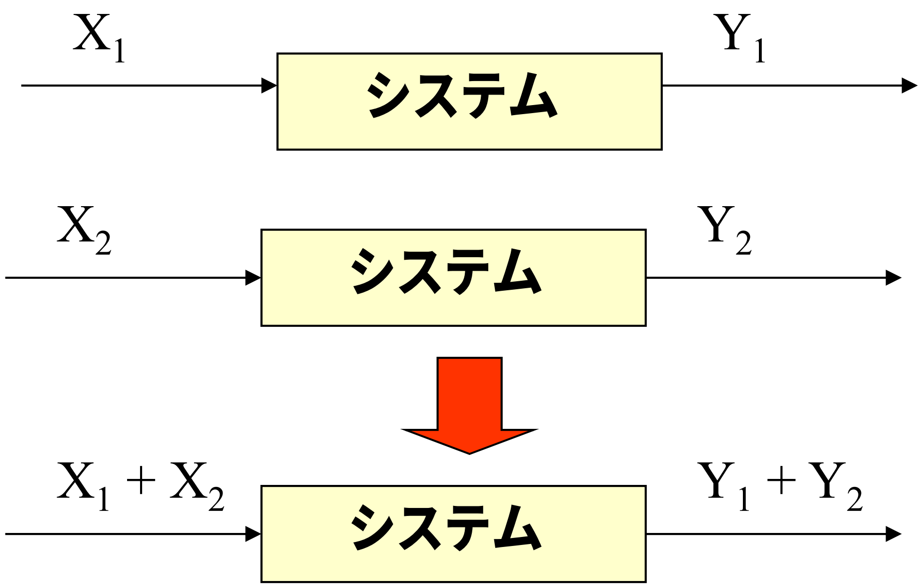
Fig. 7 Volume mesh modeling giant vertebrobasilar aneurysm, created from the DSA image in Fig. 6.

2. 動的システムと微分方程式

線形システムと非線形システム

システム (関数、写像、・・・)　$Y = F(X)$

線形システムは　$F(X_1+X_2) = F(X_1) + F(X_2)$　を満たすもの(特殊)

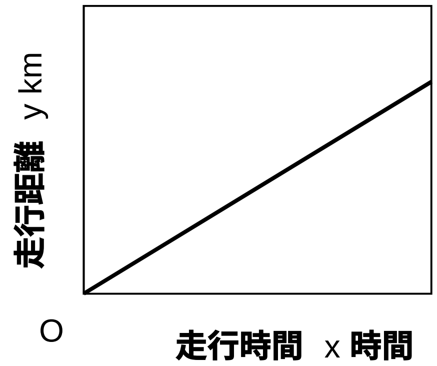


非線形システムは　$F(X_1+X_2) = F(X_1) + F(X_2)$　を満たさないもの

線形システムの例 (1)

a) 時速a kmで走る自動車の走行時間x (入力) と距離y (出力) の関係

$$y = a \cdot x$$ (**正比例**)



b) 横ベクトル $\mathbf{a} = \begin{bmatrix} a_1 & a_2 \end{bmatrix}$

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} \in \mathbf{R}^2$$ (2次元ベクトル、入力)　　$y \in \mathbf{R}$ (スカラー、出力)

$$y = a_1 x_1 + a_2 x_2 = \begin{bmatrix} a_1 & a_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \mathbf{ax}$$ (線形汎関数)

線形システムの例 (2)

c) 行列

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} \mathbf{a}_1^T \\ \mathbf{a}_2^T \\ \vdots \\ \mathbf{a}_n^T \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_m \end{bmatrix} \in \mathbf{R}^m$$ (m次元ベクトル、入力)

$$\mathbf{y} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} \in \mathbf{R}^n$$ (n次元ベクトル、出力)

横ベクトル

縦ベクトル

$$\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1m} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2m} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nm} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_m \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1m} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2m} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nm} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_m \end{bmatrix}$$

入力　出力

線形代数

行列は2通りの捉え方ができる

(1) 横ベクトルが縦に並んだもの

(2) 縦ベクトルが横に並んだもの

線形システムの例 (3)

d) 積分変換

行列で、n、mを無限大にする

$x(t)$ （関数、入力）　　$y(s)$ （関数、出力）

$$
\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ \vdots \end{bmatrix} = \overset{t \longrightarrow}{\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & \cdots \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{bmatrix}} \underbrace{\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ \vdots \end{bmatrix}}_{x(t)} \quad t \downarrow
$$

関数をベクトルと捉える (重要)

$$
\boxed{y(s) = \int_0^t a(s,t)x(t)dt \quad \text{（積分変換）}}
$$

例

$$
g(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-j\omega t} f(t)dt \quad \text{（フーリエ変換）}
$$

$$
F(s) = \int_0^{\infty} e^{-st} f(t)dt \quad \text{（ラプラス変換）}
$$

関数の内積

$$
(x \mid y) = \int_0^1 x(t)y(t)dt
$$

関数の直交性

$$
(x \mid y) = \int_0^{2\pi} \sin t \cos t dt = 0
$$

⇓

関数解析

非線形システム

線形システムでないものは全て非線形
（ほとんど全てのシステム）

動的システム (1)

システムの現在の状態が、システムの過去の状態と関連するシステム（（重要））

動的システムの例

1) 力の作用する物体の運動
2) 経済システム
3) 生態系

静的システムの例

1) サイコロの目の出方

数学的には「微分方程式」で記述できる

$$\frac{dx}{dt} = f(x)$$

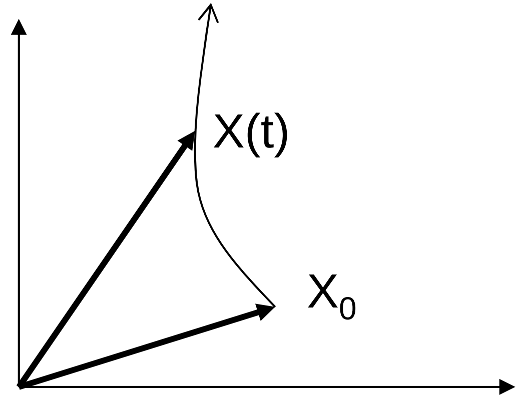
（システムの未来の状態が、現在の状態の関数で表される）

微分方程式は動的システムの数学的表現（（重要））

動的システム (2)

微分方程式(動的システム) の解は、システムの状態χが、時間と共にどのように変化するかを示す。

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{f}(\mathbf{x})$$



1) **fが線形の場合は、解析的に解ける**

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{A}\mathbf{x}$$

全て、$x = \chi_0 e^{\lambda t}$ **の形で表せる (複素数の場合は、**sin t、cos t)

2) **fが非線形の場合 (現実の世界) は、一般に解析的に解けない**

- **数値シミュレーション**
- **線形近似 (非線形システムは局所的に線形システムとみなせる)**

まとめ

- 線形システム
- 動的システム
- 微分方程式

3. 偏微分方程式

偏微分方程式

独立変数が２つ以上の場合

$$u(x_1, \cdots, x_n)$$

１階の線形偏微分方程式は連立常微分方程式と等価である

$$a_1 \frac{\partial u}{\partial x_1} + \cdots + a_n \frac{\partial u}{\partial x_n} = a$$

２階の偏微分方程式は以下の標準形に分類できる

楕円型 $$\frac{\partial^2 u}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial x_2^2} + ku = a$$ 圧力場、非圧縮定常粘性流、ポテンシャル場

双曲型 $$\frac{\partial^2 u}{\partial x_1^2} - \frac{\partial^2 u}{\partial x_2^2} + ku = a$$ 弾性波、音波、脈波の伝播

放物型 $$\frac{\partial^2 u}{\partial x_1^2} - \frac{\partial u}{\partial x_2} = a$$ 熱伝導、物質の拡散

偏微分方程式で記述される対象

血流速度、圧力分布
血管変形、応力分布
骨のひずみ、応力分布

一般化保存則(1)

非圧縮粘性流体の運動を記述する基礎方程式は，運動量の保存を表すナビエ･ストークス方程式と質量の保存を表す連続方程式である．
ナビエ･ストークス式は次の一般化保存則の特別な場合と考えられる．

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) = -\mathrm{div}(\rho\mathbf{u}\phi) + \mathrm{div}(\Gamma\,\mathrm{grad}\,\phi) + S \qquad (1)$$

表 2-3　種々の保存式

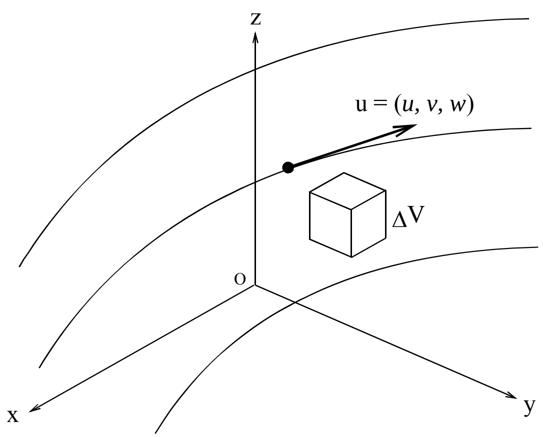
	未知数 ϕ	拡散係数 Γ	生成項 S
流れ場 (ナビエ・ストークス)	u (x 方向速度)	μ （粘度）	$-\partial p/\partial x$ (x 方向の圧力勾配)
	v (y 方向速度)		$-\partial p/\partial y$ (y 方向の圧力勾配)
	w (z 方向速度)		$-\partial p/\partial z$ (z 方向の圧力勾配)
温度場 （エネルギ方程式）	T （温度）	k （熱伝導率）	S_l (単位体積あたりの熱発生率)
化学種の保存式	m_l （質量分率）	Γ_l （拡散係数）	R_l （反応による発生率）

一般化保存則(2)

式(1)は，3次元の流れ場［速度ベクトルはu=(u, v, w)．下図参照］における任意の量φの保存則を表している．従属変数φとして，各速度成分u, v, wを考えた場合に得られる3つの式が，ナビエ･ストークス方程式である．

式中の各項のもつ物理的意味を以下に説明する．

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) = -\mathrm{div}(\rho\mathbf{u}\phi) + \mathrm{div}(\Gamma\,\mathrm{grad}\,\phi) + S$$

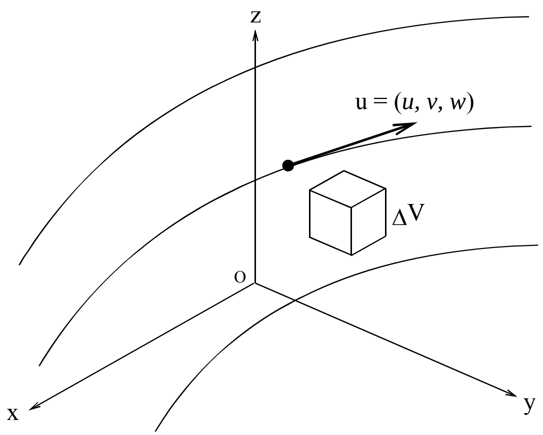


一般化保存則(3)

時間微分項

**式(1)の左辺の項(A)は，微小体積ΔVの中のφの時間変化を表している．
同式はこれが右辺の各項の和で与えられることを表している．**

$$\underbrace{\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi)}_{\mathrm{A}} = -\mathrm{div}(\rho\mathbf{u}\phi) + \mathrm{div}(\Gamma\,\mathrm{grad}\,\phi) + S$$



一般化保存則(4)

対流項

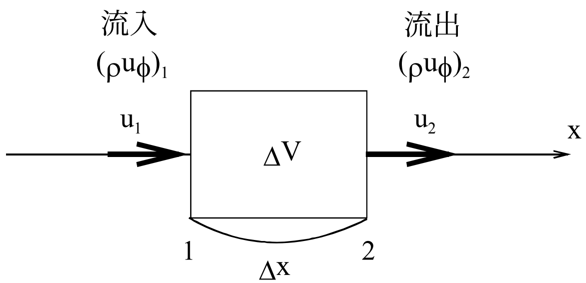
$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) = \underbrace{-\mathrm{div}(\rho\mathbf{u}\phi)}_{\mathbf{B}} + \mathrm{div}(\Gamma\,\mathrm{grad}\,\phi) + S$$

式(1)の右辺の(B)は，対流項と呼ばれる．座標を用いて書くと，次式となる．

$$(\mathrm{B}) = -\mathrm{div}(\rho\mathbf{u}\phi) = -\frac{\partial}{\partial x}(\rho u\phi) - \frac{\partial}{\partial y}(\rho v\phi) - \frac{\partial}{\partial z}(\rho w\phi) \qquad (2)$$

下図を参照すれば，(B)は，x軸方向の速度uによって，境界を通して運ばれるφの流入量と流出量の差を表し，これが微小体積中の(ρφ)の単位時間当たりの増加量を与える．y方向，z方向についても同様で，速度vとwによって運ばれる量の収支を考えればよい．

$$-\frac{\partial(\rho u\phi)}{\partial x} \approx -\frac{(\rho u\phi)_2 - (\rho u\phi)_1}{\Delta x}$$



一般化保存則(5)

対流項(補足)

なお，非圧縮性流体の場合，式(2)は次のようにも書かれる．

$$-\mathrm{div}(\rho\mathbf{u}\phi)=-\rho u\frac{\partial\phi}{\partial x}-\rho v\frac{\partial\phi}{\partial y}-\rho w\frac{\partial\phi}{\partial z}\underline{-\phi\frac{\partial(\rho u)}{\partial x}-\phi\frac{\partial(\rho v)}{\partial y}-\phi\frac{\partial(\rho w)}{\partial z}}$$

上式の下線部は連続式より0となる．

一般化保存則(6)

拡散項

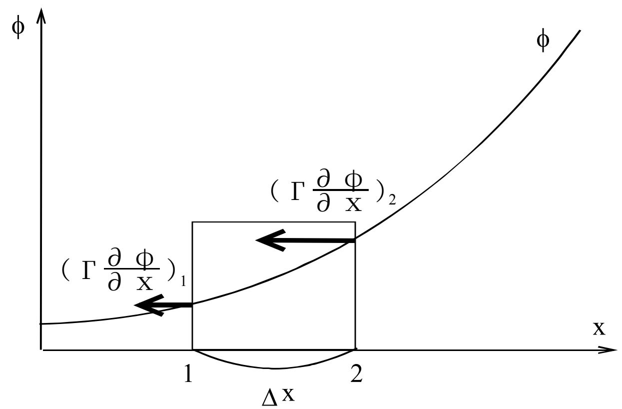
$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) = -\mathrm{div}(\rho\mathbf{u}\phi) + \underbrace{\mathrm{div}(\Gamma\,\mathrm{grad}\,\phi)}_{\mathrm{C}} + S$$

式(1)の右辺の(C)は，拡散項と呼ばれる．座標を用いて書くと，次式となる．

$$(\mathrm{C}) = \mathrm{div}(\Gamma\,\mathrm{grad}\,\phi) = \frac{\partial}{\partial x}\left(\Gamma\frac{\partial\phi}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(\Gamma\frac{\partial\phi}{\partial y}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(\Gamma\frac{\partial\phi}{\partial z}\right)$$

多くの物理量は，空間的に不均一があると，それを打ち消すような変化が生じる．下図を参照して，x方向についてのφ(=u)の勾配を考えると，運動量の不均一により，図の矢印の方向に運動量の移動 が生じる．微小体積の境界での収支を考えると， $\frac{\partial}{\partial x}\left(\Gamma\frac{\partial\phi}{\partial x}\right)$ **がx方向の拡散による(ρφ)の単位時間当たりの増加量を与える．**

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(\Gamma\frac{\partial\phi}{\partial x}\right) \approx \frac{\left(\Gamma\frac{\partial\phi}{\partial x}\right)_2 - \left(\Gamma\frac{\partial\phi}{\partial x}\right)_1}{\Delta x}$$



一般化保存則(7)

生成項

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) = -\mathrm{div}(\rho\mathbf{u}\phi) + \mathrm{div}(\Gamma\,\mathrm{grad}\,\phi) + \underline{S}$$

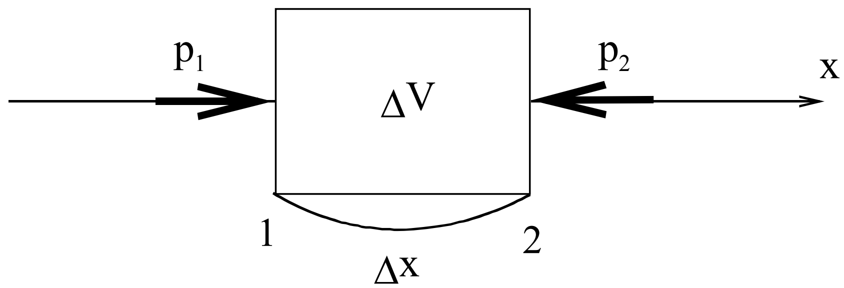
D

式(1)中の(D)は生成項と呼ばれ，上で述べた対流項，拡散項以外の効果を全てこの項で評価する．ナビエ･ストークス式の場合，この項に相当するのは圧力の効果に関するものである．これをx方向成分について書けば，下図を参照して次のようになる．

$$S = -\frac{\partial p}{\partial x}$$

y方向，z方向成分についても同様に，pの各方向への勾配を用いて表される．

$$-\frac{\partial p}{\partial x} \approx -\frac{p_2 - p_1}{\Delta x}$$



まとめ

偏微分方程式

- 楕円型
- 双曲型
- 放物型

一般化保存則

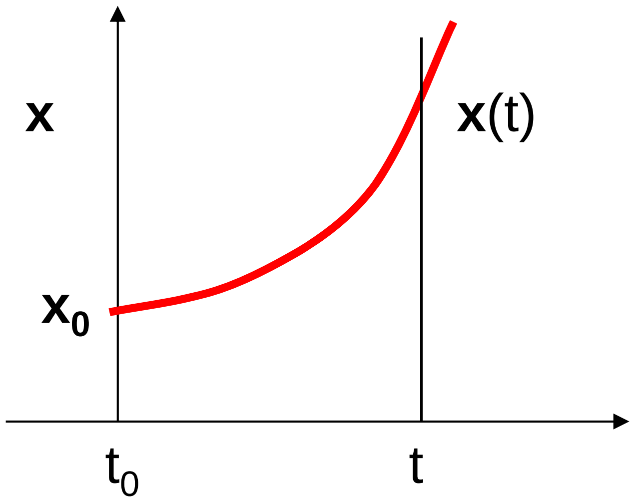
$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) = -\mathrm{div}(\rho\mathbf{u}\phi) + \mathrm{div}(\Gamma\,\mathrm{grad}\,\phi) + S$$

4．常微分方程式の数値解法

はじめに

常微分方程式

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{f}(\mathbf{x}, t)$$



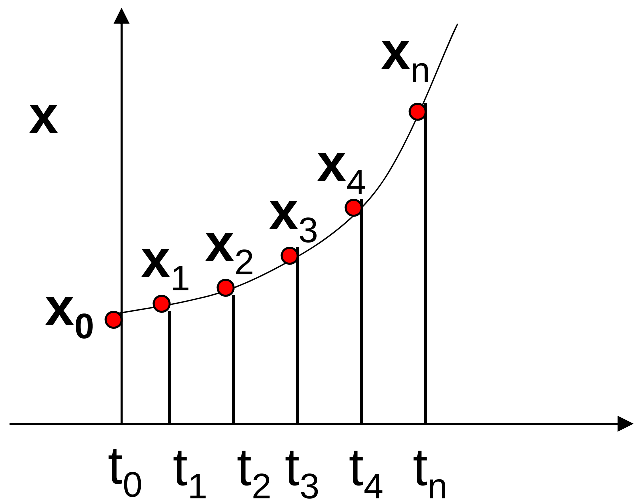
常微分方程式の解

時刻 $t = t_0$ のとき の状態 $\mathbf{x}_0$ (初期条件)
に対するその後の状態$\mathbf{x}(t)$

常微分方程式の数値解

時刻 $t = t_0$ のとき の状態 $\mathbf{x}_0$ (初期条件)
に対するその後の状態

$\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3, \mathbf{x}_4, \cdots\cdots$



オイラー法

$$\mathbf{x}_{i+1} = \mathbf{x}_i + \Delta t \times \mathbf{f}(\mathbf{x}_i, t_i)$$

誤差が累積して、精度のよい解が得られない

ルンゲクッタ法

常微分方程式の標準的な数値解法

微分方程式

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{f}(\mathbf{x}, t)$$

テーラー展開を応用して、時間刻み Δtの4次の項まで一致する解を得る。

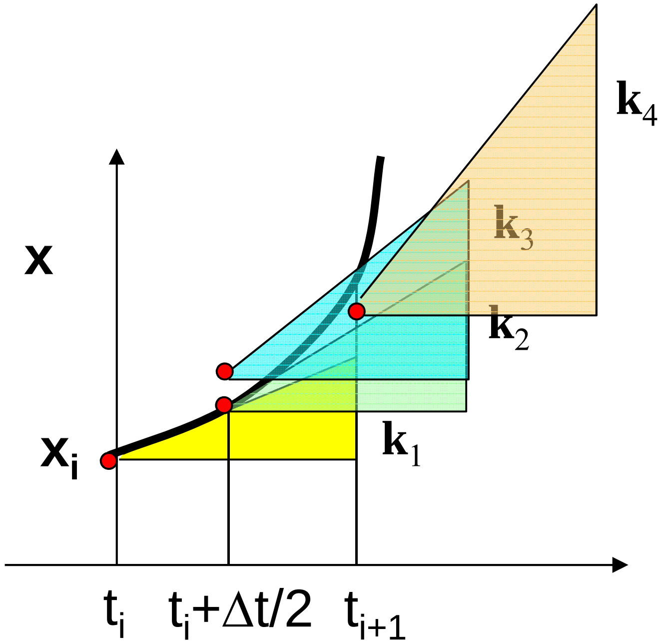
$$\mathbf{k}_1 = \Delta t \times \mathbf{f}(\mathbf{x}_i, t_i)$$

$$\mathbf{k}_2 = \Delta t \times \mathbf{f}(\mathbf{x}_i + \mathbf{k}_1/2, t_i + \Delta t/2)$$

$$\mathbf{k}_3 = \Delta t \times \mathbf{f}(\mathbf{x}_i + \mathbf{k}_2/2, t_i + \Delta t/2)$$

$$\mathbf{k}_4 = \Delta t \times \mathbf{f}(\mathbf{x}_i + \mathbf{k}_3, t_i + \Delta t)$$

$$\mathbf{x}_{i+1} = \mathbf{x}_i + (1/6)(\mathbf{k}_1 + 2\mathbf{k}_2 + 2\mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_4)$$



まとめ

- 常微分方程式の解
- 常微分方程式の数値解
- オイラー法
- ルンゲクッタ法

5. 偏微分方程式の数値解法

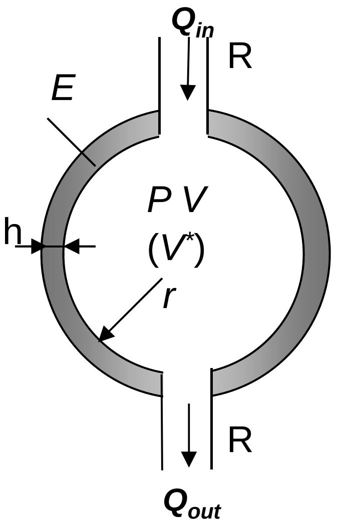
数値解法

有限差分法、有限体積法
有限要素法
境界要素法
粒子法
格子ボルツマン法
・・・・・

6．数値シミュレーションの例

循環器系のシミュレーション

ルンゲクッタ法によるシミュレーション



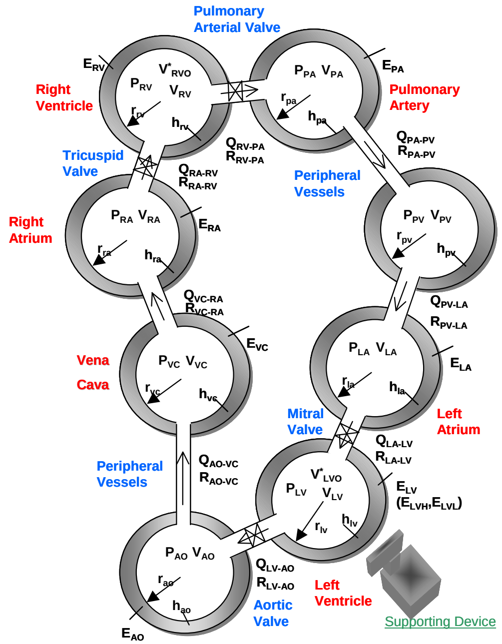
弾性球殻モデル

$$\frac{dP}{dt} = \frac{hE}{2\pi r^4}\left(Q_{in} - Q_{out} - \frac{dV^*}{dt}\right)$$

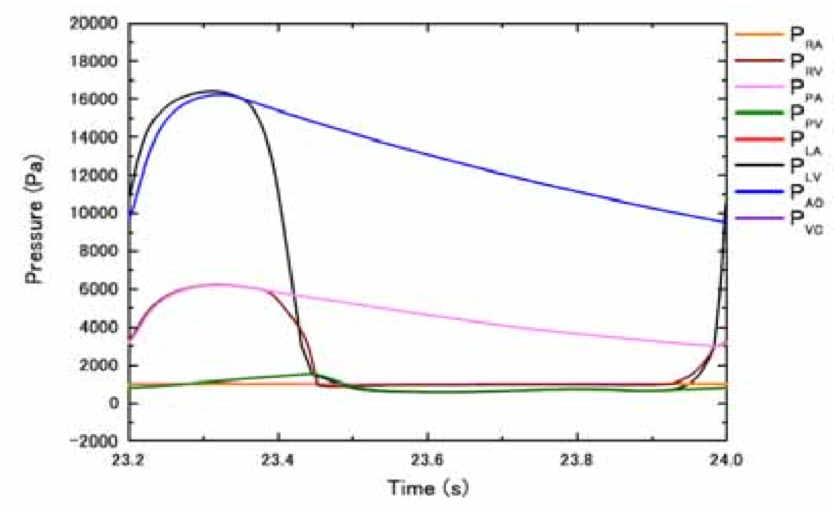
$$Q = C\left(\frac{P_1 - P_2}{R}\right)$$

$$V = V_O + \frac{2\pi r^4}{hE} P$$

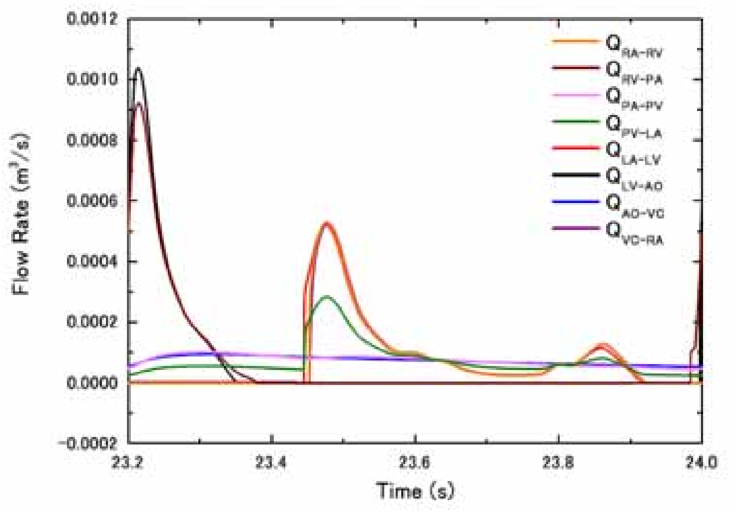
常微分方程式



循環系全体のモデル



血圧の変化



血流量の変化

脈波伝播のシミュレーション

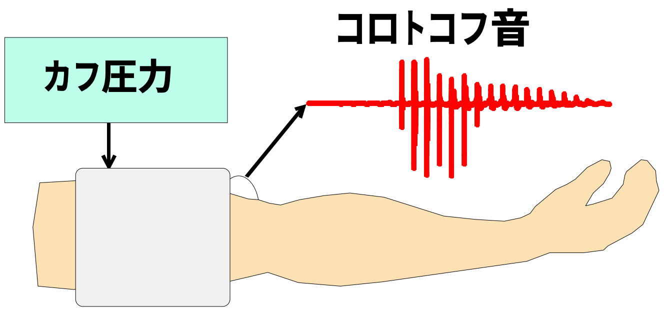
偏微分方程式をx方向に差分化した後、ルンゲクッタ法でシミュレーション

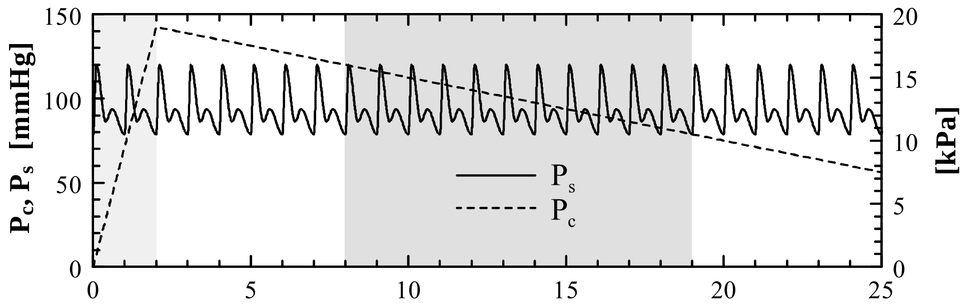
$$\rho\left(\frac{\partial u}{\partial t}+u\frac{\partial u}{\partial x}\right)=-\frac{\partial P}{\partial x}-\frac{1}{2}\rho f_t |u| u\left(\frac{S}{A}\right)$$

$$\frac{\partial A}{\partial t}+\frac{\partial Q}{\partial x}=0$$

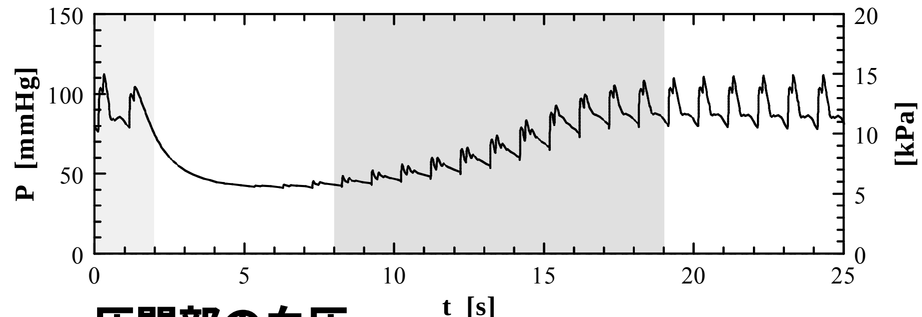
$$T\frac{\partial^2 y}{\partial x^2}=P_e-P+\phi\left(\frac{A}{A_0}\right)+\gamma\frac{\partial A}{\partial t}$$

血圧測定における
コロトコフ音の発生機構

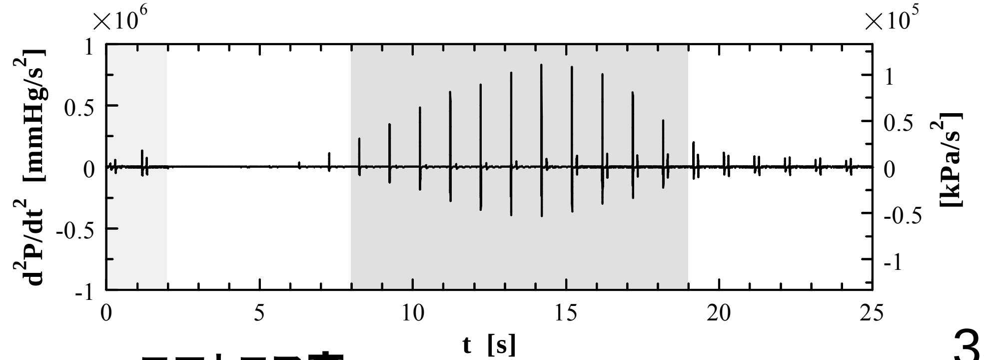




カフ圧と血圧

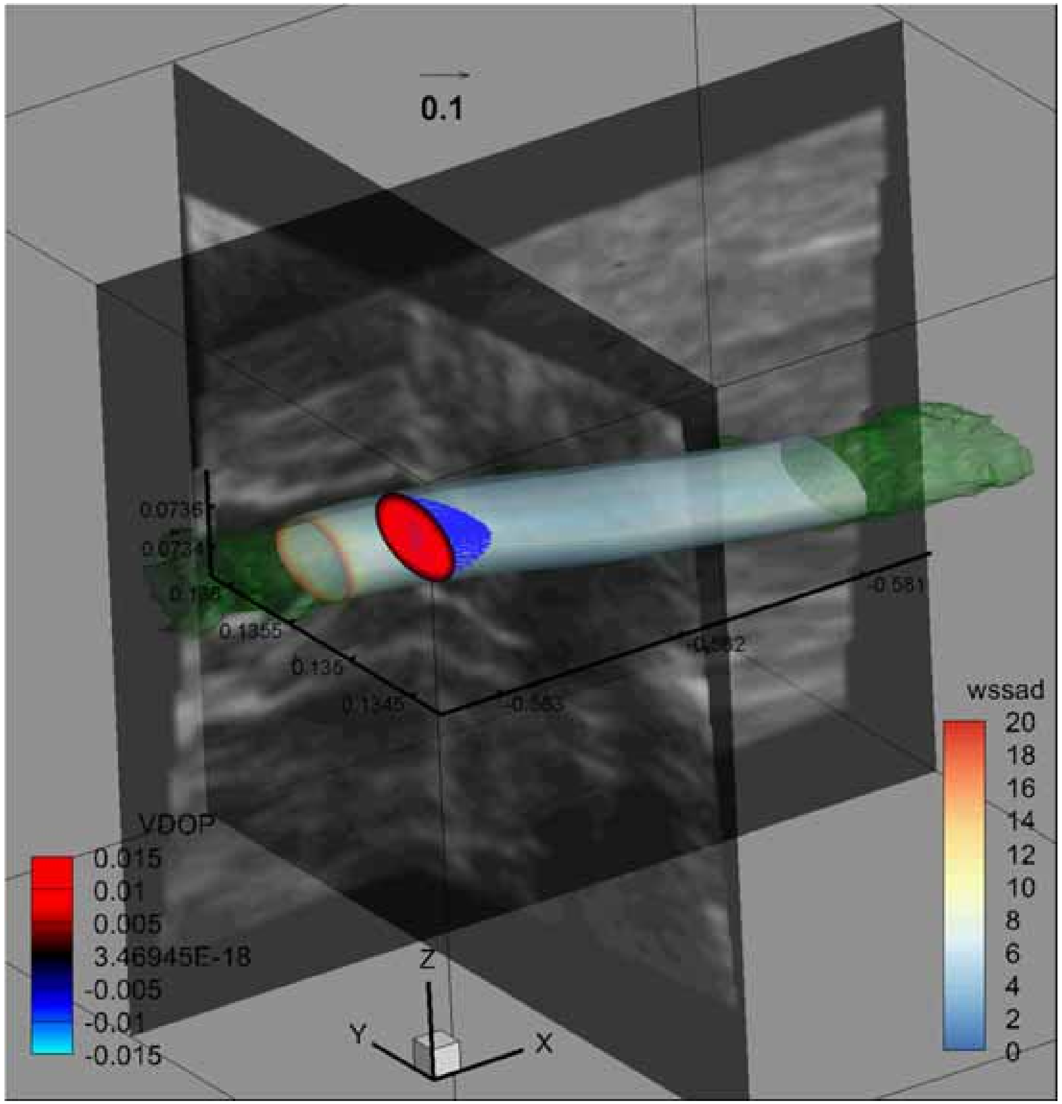


圧閉部の血圧



コロトコフ音

マウス頸動脈の超音波計測融合シミュレーション



７．おわりに

まとめ

シミュレーションの歴史

動的システムと微分方程式

常微分方程式の数値解法

偏微分方程式の数値解法

数値シミュレーションの例