

建立心血管手術之前置模擬平台及三維非線性動力現象

主持人：許文翰教授（台灣大學工程科學及海洋工程研究所）

參與人員：林瑞國、邱柏雄、游景皓、高仕超

研究單位：科學計算及心血管模擬實驗室(Scientific Computing and Cardiovascular Simulation)

計算力學與科學視覺研究室(Computational Mechanics and Scientific Visualization)

一、研究動機：

以科學計算方法探討分歧及不穩定等與工程科學相關問題之發生機制；電磁波之波動行為；光波導的行為；開發與不同控制方程式之數值方法，從事平行化大量計算之研究與教學，開發流場資料分析之視覺化方法。本研究計畫主要建立在三維平行有限差分算則上，結合沉浸邊界法（Imersed Boundary Method, IBM），發展一套快速而有效率之計算流體程式，使其能應用在不規則網格且需大量平行計算之研究問題上。計算題目以橫向流與射流交互作用之現象為研究主題，並進一步利用向量場、拓撲與分岔理論解析流場之不穩定現象。

二、研究計畫之背景：

流體力學是力學的一個分支，它主要作為探討流體的運動狀態，以及流體和固體因相對運動所造成的互為因果的作用。流體力學的研究基礎是牛頓運動定律和質量守恆定律，常常還要用到熱力學知識，有時還用到宏觀電動力學的基本定律、本構方程和物理學、化學的基礎知識。

流體流動問題可藉由 Navier-Stokes 方程式敘述其速度和壓力的分佈，必要時更可經由與其他相關方程式的結合（例如，敘述溫度的能量守恆方程、敘述電磁流的 Maxwell 方程組等），構成一封閉的問題。Navier-Stokes 方程源自於十九世紀，此方程包含質量守恆與動量守恆定律（牛頓第二定律）。此外，流體間不同的組合成分亦會呈現更趨複雜的交互作用（例如，流動可能涉及電磁波電位差、化學反應與輻射現象等）。流體流動多處於亂流狀態，其複雜性使它很難獲得理論上的解析解。因此，科學家們需要藉由物理實驗與數值模擬來研究流體的流動問題 [1-4]。

由於流體運動本身具三維性、時變性與非線性等特質，因此其物理現象非常的複雜。早期的流體力學研究主要是借助於理論分析與實驗，然而傳統的理论分析方法由於有許多假設與簡化，所以能解決的問題通常有限。近年來，隨著電腦計算速度與記憶容量不斷地增進，計算流體力學所能解決問題的尺度與複雜度也逐漸加大，時至今日，計算流體力學已成為學界研究流體力學的主要利器之一，與理論流力和實驗流力構成現代研究流體力學之三大主流 [5-8]。此一分析工具除了適於探討參數變化的影響外，因其所建立的分析資料庫，更能有效地減少實驗所需的工時及縮短設計的時程。

利用數值分析方法配合實驗來求解流體力學問題（即計算流體力學）有下列優點：

- (1)可大量減少設計及求解問題的時間。
- (2)可以模擬一些在實驗方法中較不可能做到的情況。
- (3)計算流體力學可得到較細微及詳盡的資料。
- (4)計算流體力學的成本及資源的消耗較實驗方法少。

因此，在現今的研究中，如何經由數值的計算有效且快速的得到準確的分析的結果，將會是一個相當重要的課題。

本研究將著重於能夠有效的縮短整個數值計算所耗費的時間，且同時能夠分析更加龐大的題目，利用目前已被廣泛使用的多重網格法，結合具有理論內涵的 prolongation 運算子，以期克服使用傳統多重網格法所會遭遇到的不佳收斂問題。本研究計畫將以數值模擬的方式研究橫向流中與垂直地面之矩形噴管之射流之間的交互作用流動特性，並探討在三維空間下所形成的流場之結構與物理特性，藉由所得之解析結果透過拓撲理論了解其整個非線性現象，以深化對此類流動規律性的認識，並且能將其理論應用於工業與科技上。

三、研究方法及進行步驟

3.1 建立數值模型

有限差分方法 (finite difference method, 簡稱 FDM) 是電腦至今仍是被廣泛運用的數值方法。該方法將求解域劃分為差分網格，用有限個網格節點代替連續的求解域。有限差分法作泰勒級數展開，把控制方程中的導數用網格節點上值的差商，從而建立以網格節點上的值為未知數的代數方程組。基本的差分表達式有一階向前、向後、中心差分和二階中心差分等，其中前兩種格式為一階計算精度，後兩種格式為二階計算精度。透過對時間和空間不同差分格式的組合，可以組合成不同的差分計算格式。求解具有方向性的微分方程式時，為了維持數值解的正確性，本研究將引進方程式之通解，將數值解與實解作一精巧的搭配。此外，利用數值分析方法在求解流場問題時有兩個要求：(i)在高梯度的區域內希望能獲得非振盪的數值解，(ii)在非高梯度的區域內希望能獲得精確的數值解。求解數值問題時，經常會碰到所謂數值解呈振盪分佈的困擾，而數值振盪的原因很多，最主要的原因是在離散的方法中未考慮「方向性」，這將造成在求解具方向性的問題時產生振盪的數值解，故本研究將發展有效的上風法 (upwind) 以大幅的解決振盪的問題。

3.2 加速非線性迭代收斂

發展的牛頓線性化方法來加速不可壓縮黏性流 Navier-Stokes 在非錯離網格上的非線性求解之收斂。為了能獲得更高精確性的緣故，將利用所發展的多維 nodally exact 之有限差分數值模型求解非線性方程式。以期在相同的運算下，可大幅地減少矩陣大小外；同時，由於矩陣存取的關係也可以降低計算機浮點運算時間。透過一系列的計算與測試，證明該牛頓線性化方法的正確與可用性。

3.3 沉浸邊界法 (immerse boundary method, 簡稱 IBM) 方法求解複雜外形問題

雖然有限元素方法具有處理任意外形的優異能力，但是卻常因網格點數過多，使得求解過程十分耗時。本研究將以有限差分法建構于正交卡氏座標系統為基礎，利用外加人工動量於任意邊界外之流場與物體內之特定点，以強迫滿足任意複雜邊界之無移動條件 (no-slip)。一般卡式座標網格線與沉浸邊界無法重疊，因此不可或缺需開發可精確計算網格節點與沉浸邊界以滿足無移動速度條件之內插方法。本研究亦將提出之沉浸邊界法所計算之結果與文獻中的數值模擬測試題目及實驗結果相吻合，因此對於複雜邊界固體計算，利用此一沉浸邊界流場分析證明本方法之準確性及真實性。另外，網格點均為正交均勻格點，是以離散方程式之源項來處理，避免係數矩陣之複雜化。由於網格合併的系統化及係數矩陣之簡單化，本法可輕易推展至三維的問題。本文最後以一些具有解析解或大量成熟文獻的計算例驗證說明本法之正確性及有效性。

3.4 發展快速演算法

對於大型問題，傳統方法所需要的記憶體及計算量不是現今一般電腦設備所能負擔，因此只能解析不太複雜或者低頻波段的流體行為。本計畫將發展一套結合一維及二維的空間演進快速演算方法，以期在適合平行化的環境下使用較少的記憶體及 CPU 時間即可進行三維問題的運算。我們擬用代數多重網格法 (algebraic multi-grid method, 簡稱 AMG) 來處理這個問題。由於多重網格法與所計算對象的光滑性相關，在影像問題裡，邊緣區不應該用很粗的網格點計算。而代數多重網格法是利用矩陣係數的大小決定如何選擇粗網格點與粗網格方程，正好可適用本問題。

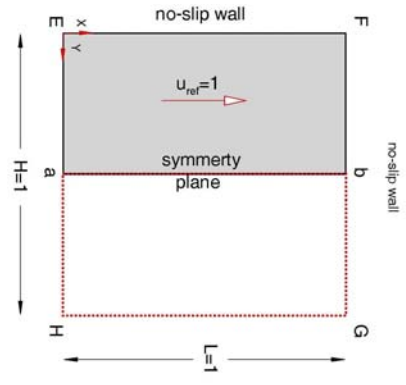
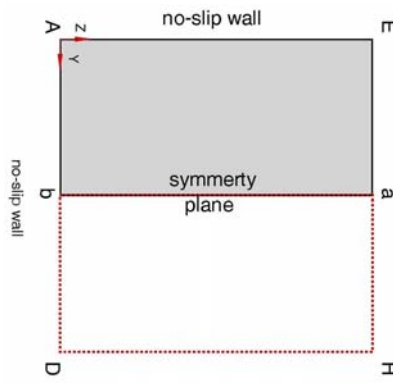
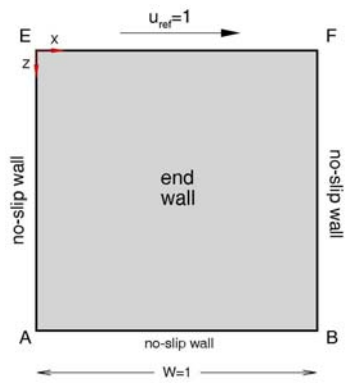
3.5 建立平行計算平台

在本研究計畫當中，我們將提出了一個系統負載分配機制，利用作業系統所提供多項的系統負載資訊以及中央處理器的計算能力來考量每部機器的實際計算能力，再以此作為工作分配的依據，以期在分散式異質性的環境下達到系統負載平衡，進而提昇整體計算效能。以 PC-cluster 和 OpenMP、MPI 之平行計算平台已成為學術研究單位甚至個人研究群所能供應得起的設備。有關 Euler/Navier-Stokes 方程的計算研究國內已有許多單位許多學者都有很好的成績。有關 Boltzmann 方程的具體研究較少，由於近來微機電系統技術，真空技術如國內開始有真空泵廠，因此相信培養訓練一些這領域的人才，仍是國內所欠缺需要的。最後，我們將此機制植入一個我們所發展的物件導向分散式異質性平行計算平台上，實驗結果顯示適當的系統負載分配確實能有效提高系統效能，縮短程式執行時間。

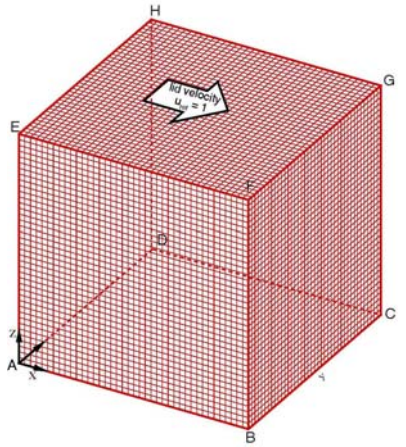
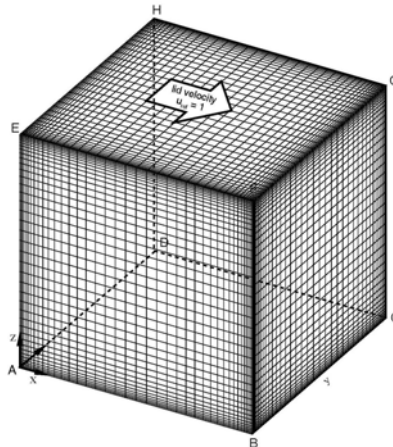
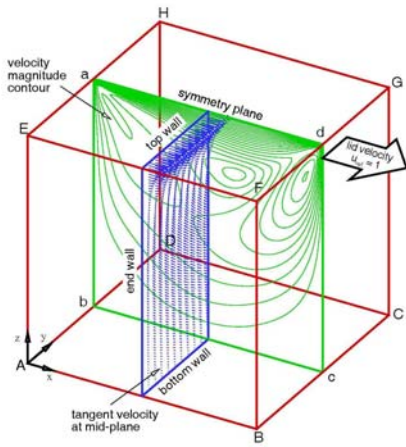
四、平行計算之數值驗證：

4.1 三維封閉拉穴流

在本節中將以長寬高比為 1:1:1 的矩型三維拉穴流作為數值模擬的對象(如圖 1 所示)。其中 Reynolds 數以拉穴速度、拉穴寬度與流體動黏滯係數作為定義基準。根據文獻可知在 Reynolds 數低於 10^3 範圍內三維矩型拉穴流場為層流且具有對稱性，吾人以 81^3 的均勻網格覆蓋於三維空間矩型拉穴半對稱域上(即為 ABCDEFGH 所包圍的區域)。配合較完整的對比文獻資料，吾人選取 Reynolds 數為 100、400 及 1000。在上述定義範圍內所得到的數值計算結果，將著重整體流場變化的探討，其中包括三維展開面上的流場變化(如圖 2 所示)，主剖面上速度、渦度及壓力分佈的比較，三維流場絲帶流結構(如圖 3 所示)與三維流場剖面軸向速度分量的變化(如圖 4)。為了解數值算則解析此問題的能力，將分別由網格密度的影響與準確性兩方面加做比較分析(如圖 5 及 6 所示)。



(a) 立體三視圖



(b) 三維立體圖及網格分佈

圖 1：三維空間矩型拉穴流（其長寬高比為 1：1：1）示意圖

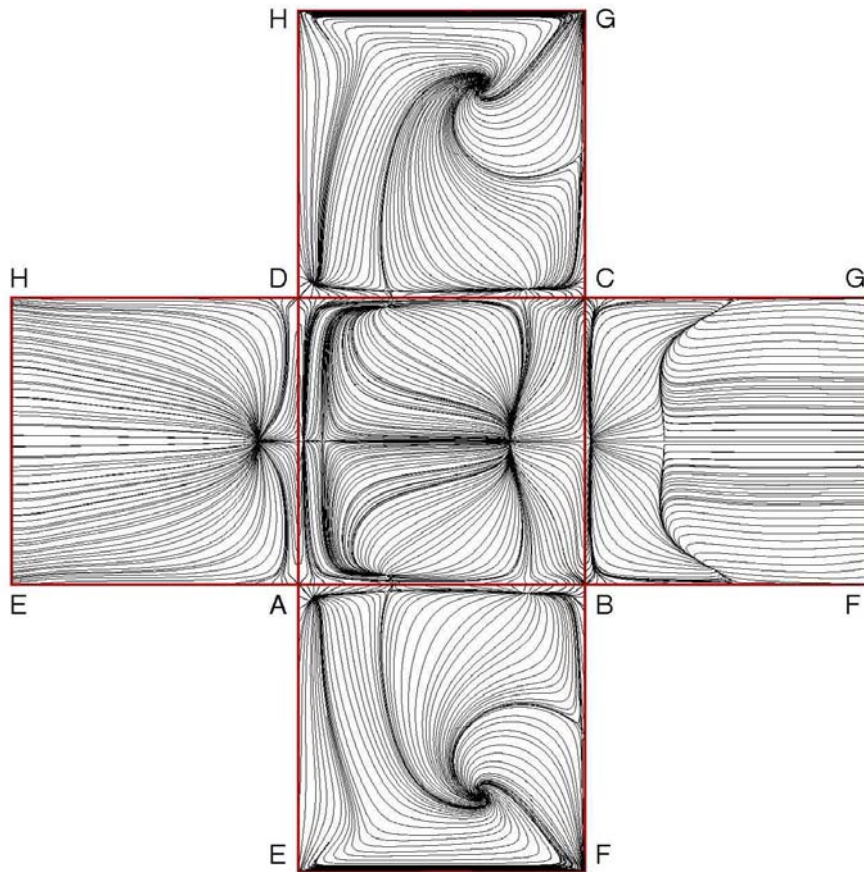
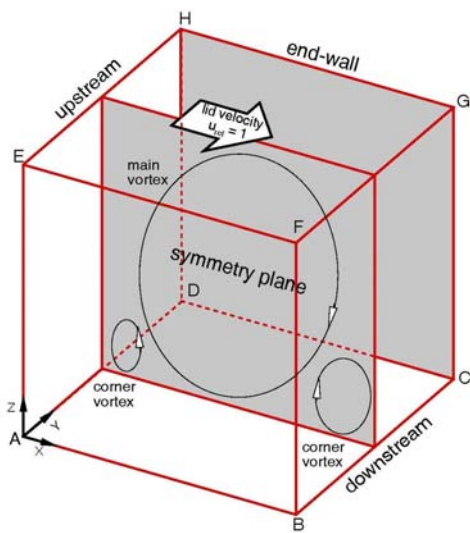
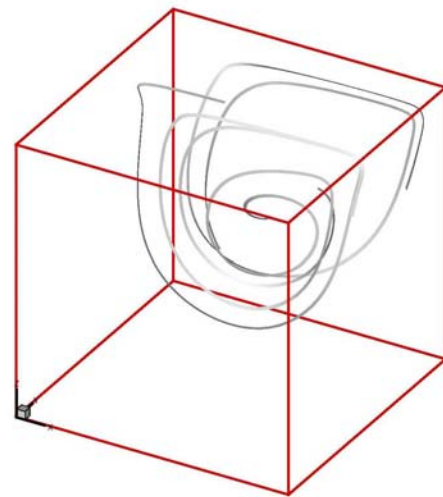


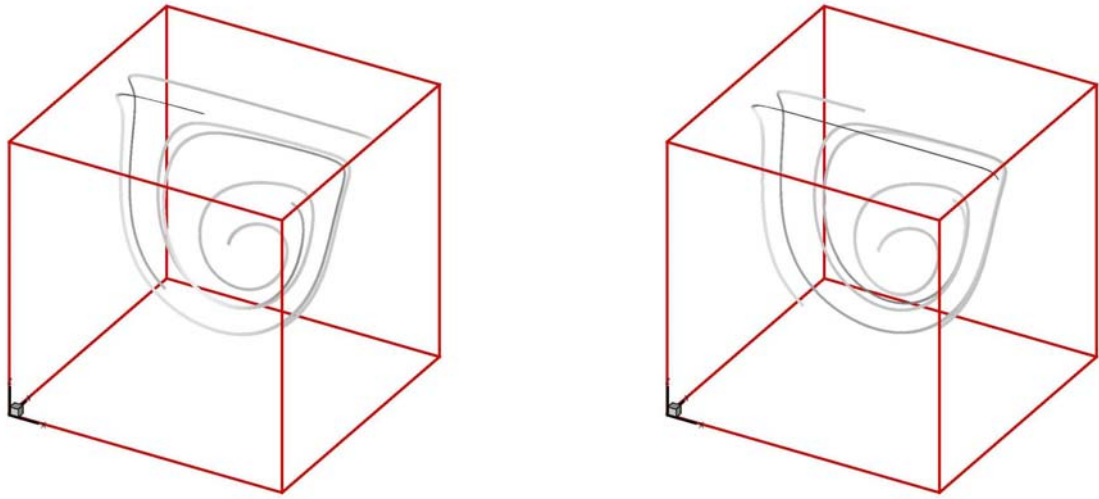
圖 2：在 $Re = 1000$ 時的臨近不滑動壁面上之流線分佈三維空間展開圖



(a) 幾何示意圖

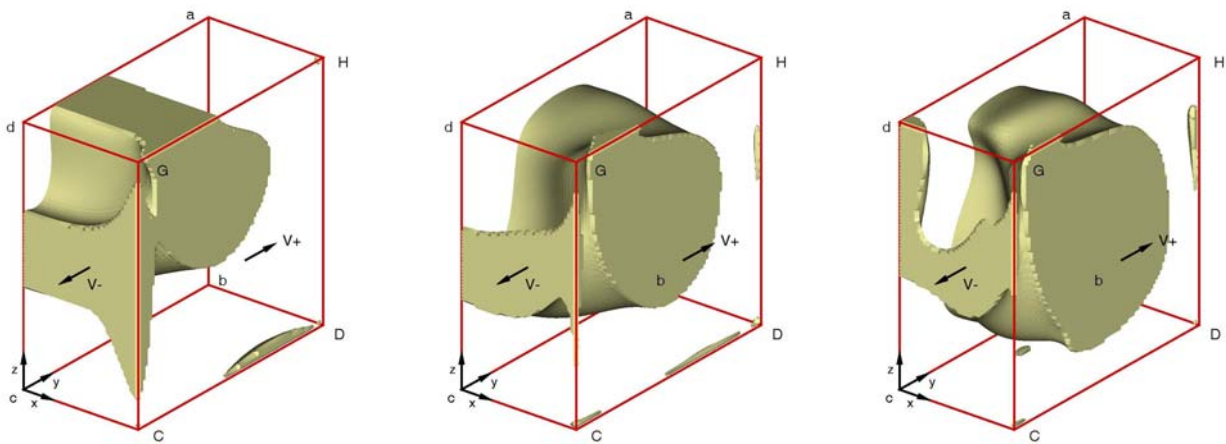


(b) 絲帶流顯示位於下游次渦旋流動係朝向末端壁運動



(c) 絲帶流顯示位於上游次渦旋流動係朝向末端壁運動 (d) 絲帶流顯示位於主螺旋渦旋流動係朝向對稱面運動

圖 3：三維空間在 $Re = 1000$ 時絲帶流之流場結構圖

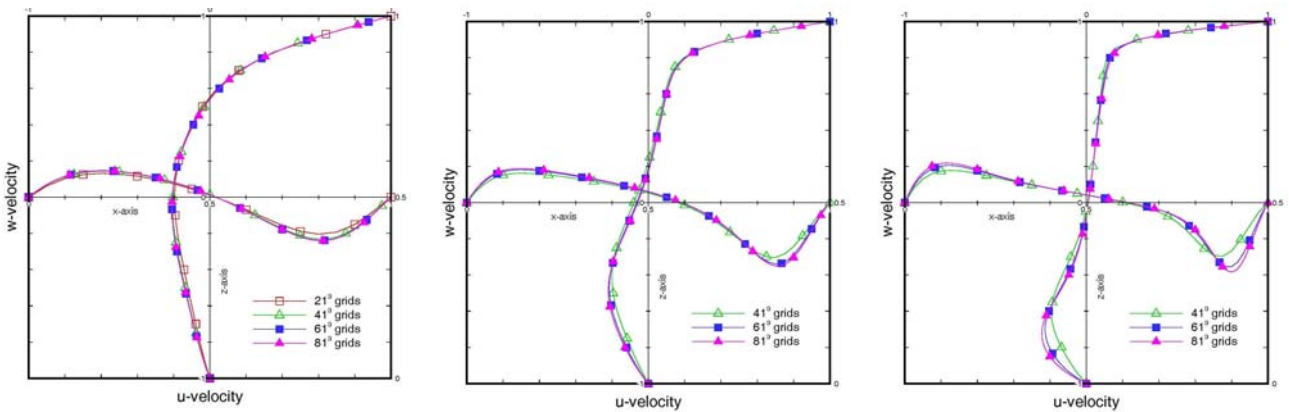


(a) $Re = 100$

(b) $Re = 400$

(c) $Re = 1000$

圖 4：三維空間流場中正速度 v 分量的範圍分佈圖



(a) $Re = 100$

(b) $Re = 400$

(c) $Re = 1000$

圖 5：以速度剖面顯示網格密度對數值解的影響

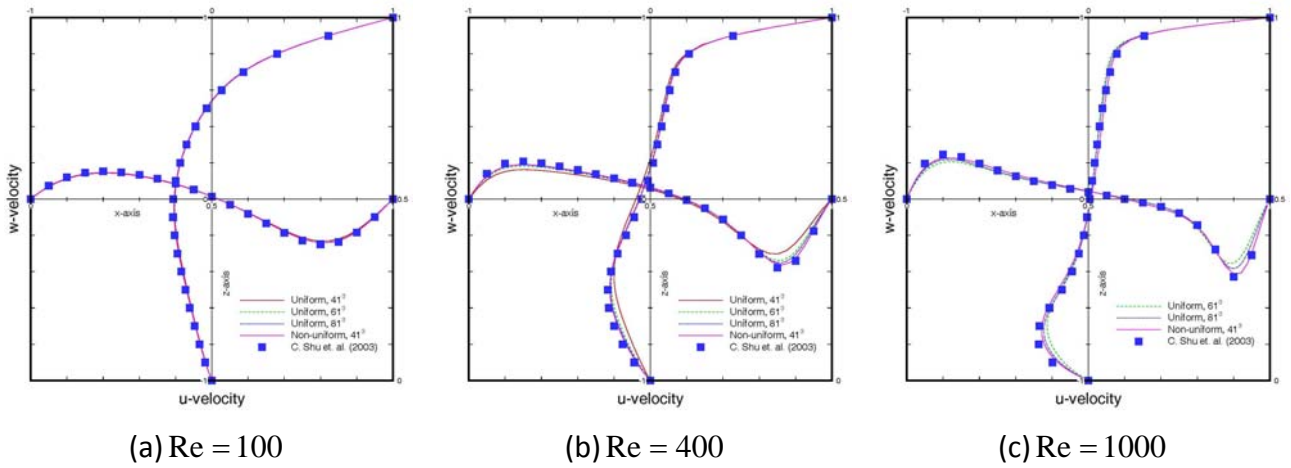


圖 6：數值計算結果與文獻之準確性比較

4.2 固定九十度彎管

管道流中之流況主要是被一流動方向與管軸重合的流場所支配。然而，垂直於主要流動方向平面上的流動速度分量（即指二次流的流動）亦伴隨而生。在彎管流中二次流複雜的本質，以致於理論解的研究受到相當程度的限制。研究學者在無黏滯性假設條件下，分析流經彎管流場，並計算出壓力的分佈。正如預期的，理論解的預測結果是不正確的，亦無法得到任何有關二次流與壓力損的訊息。理論解亦可根據入口截面渦度的傳輸量來計算通過彎道後的沿流線渦度，以及彎道出口處的二次流強度。此方法曾被運用在計算渦輪機葉片出口處二次流的影響問題上 [9]。

近年來利用數值方法求解方程式已達到實際應用的地步。研究學者 ([10,11]) 以數值方法分析流經彎道問題，並獲得相當程度成功的結果。由數值模擬長方形剖面彎管的結果顯示管道截面上需要足夠多的網格點方能得到準確的數值解。本研究以充分展開層流流經正方形 90 度彎道問題為模擬對象，在 Reynolds 數為 790（即 Dean 數 368）條件下，以數值方法模擬充分展開層流通過方形剖面 90 度彎管的流動狀況（如圖 7 所示）。在實驗中 [12] 以一長直管道銜接於彎道的入口處，使入口處的流場具有充分展開的流況。本研究以彎曲段上游 3 個水力直徑距離作為計算的起始點，其入流邊界為充分展開的流況，並以理論解計算入口的速度分佈

$$u(z, y) = u_{avg} \left[\frac{\pi^2}{4} \sum_{m,n=1,3,5,\dots}^{\infty} \frac{(-1)^{\frac{m+n}{2}-1} \cos(\frac{m\pi x}{D}) \cos(\frac{m\pi y}{D})}{mn(m^2 + n^2)} \right] \cdot \alpha \quad (3)$$

$$\alpha = \sum_{m,n=1,3,5,\dots}^{\infty} \frac{1}{m^2 n^2 (m^2 + n^2)}$$

出口邊界設定為彎曲段下游 7 個水力直徑距離。由於彎管沿 y 方向為對稱，且入口流場為對稱速度剖面，故本研究僅考慮對稱的管道為計算域。入口邊界速度分量採用 Dirichlet 條件（理論解），固體壁為不滑動邊界，出流邊界為沿流線方向三個速度分量的梯度為零。彎道處數值解與實驗量測結果的比較如圖 8-10 所示。

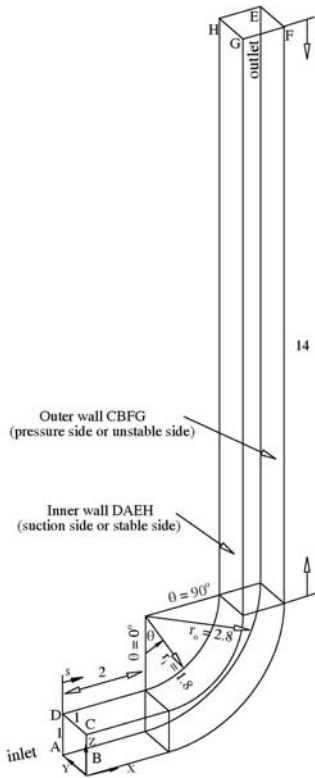
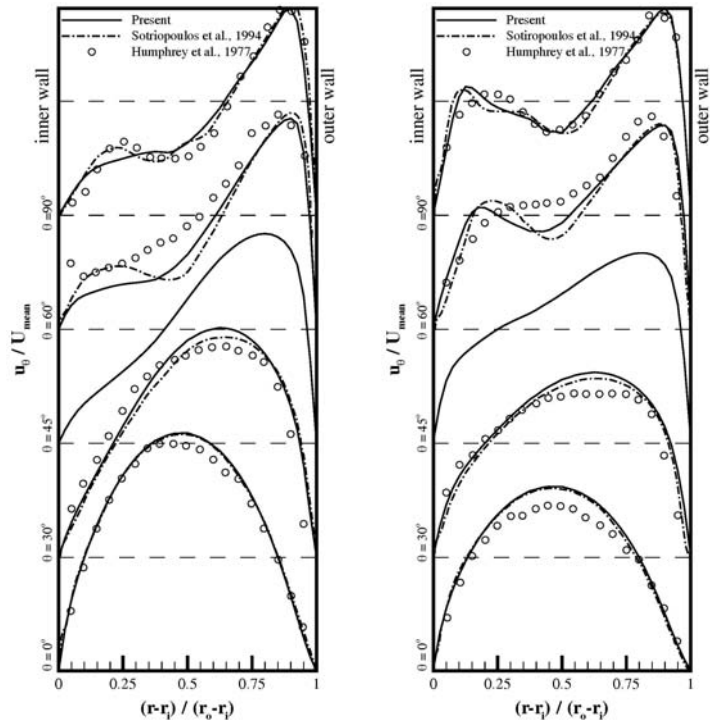


圖 7：固定 90 度彎管三維示意圖



(a) 在 $y = 0.25$ 處

(b) 在 $y = 0.5$ 處

圖 8：彎道處數值解與實驗量測結果的比較

4.3 心血管手術之前置模擬

近年來由於電腦科技、多尺度高容量計算方法及醫學影像處理的長足進步，以計算流體力學為工具探討人體大動脈內之血液動力學 (hemodynamics) 已日趨可行。借重醫學影像技術，我們已能非侵襲性地檢測血管結構與疾病。理論上，我們可以量測到血管內的流速，但是以目前的影像技術，要從影像資料取得血動力的動態參數需要週期性的重複多次掃描，非常耗時、分析資料量極大且技術繁瑣。計算模擬的優勢在已知的血管邊界條件下，可提供血管脈動狀態下整體流場的特性，可以建立虛擬的計算流場影像 (Computational Imaging)，預測醫學影像中的假像與誤差。此一前瞻性的技術，可以增進我們對心血管疾病的了解，協助其診斷與治療。本研究將以 TACE 手術前及術後如圖 11 所示，及心血管三維模型如圖 12 所示作為前置模擬之基礎，藉由叢集電腦的運算，大幅提升及預知手術前後的剪應力、壓力及局部管壁上之流線的分佈 (如圖 13-15 所示)。以提供外科醫生在術前可以預先地了解病患的各項資料，進而增加手術的成功率及避免不必要的醫療資源浪費。

4.4 台大 HP 刀鋒式叢集

本研究目前使用單一 CPU 於 HP 機器上做模擬，由於有限元素方法本身的特質，求解所需要的記憶體相當的大，其計算時間也相對的比其他方法高出許多 (如表 1 所示)，這也是在 HP 機器上會遇到的問題之一。另外在計算時間上，有限元素方法也需要較多的時間花在求解的程序，上列的兩問題希望平行化處理後能夠獲得一定程度的改善。

目前已將完成將原始網格點分散給各個格點之網格分割動作 (如圖 16-18 所示)，而平行計算的工作也已經在進行當中，下一階段之目標為將此程式完成平行化之工作，並運用於其他的心血管前置模擬。

而為了能夠了解 HP 刀鋒式叢集的效能，我們使用 SCCS 及 CMSV 實驗室所自行開發之有限差分程式，在 HP 刀鋒式叢集上測試三維不可壓縮之拉穴流問題。而由表格 2 可以看到，程式執行於 dual core 架構下的效能不但無法提升，反而有降低的現象。這可能導因於 I/O 的因素，也許是 HP 下一代機器可資著重的重點之一。此外，我們的程式也會繼續向減輕 I/O 的方向著手改進。

參考文獻

- [1] G. D. Smith (1885), Numerical solutions of partial differential equations (finite difference methods). 3rd ed. Oxford: Clarendon Press
- [2] R. D. Richtmyer, K. W. Morton (1967), Difference methods for initial problems. 2nd ed. New York: Interscience Publishers
- [3] D. A. Anderson, J. C. Tannehill, R. H. Pletcher (1997), Computational fluid mechanics and heat transfer. Washington: Hemisphere. 2nd ed.
- [4] Y. Jaluria, K. E. Torrance (1986), Computational heat transfer. Washington: Hemisphere Publishing Corporation
- [5] W. Shyy (1994) Computational modeling for fluid flow and interfacial transport. Amsterdam: Elsevier, 3-112
- [6] J. H. Ferziger, M. Peric (1996), Computational methods for fluid dynamics. Berlin: Springer, 21-66
- [7] P. J. Roach (1982), Computational fluid dynamics. 2nd ed. Albuquerque: Hermosa
- [8] A. J. Baker (1983), Finite element computational fluid mechanics. New York: McGraw-Hill
- [9] J. H. Horlock, B. Lakshminarayans (1973) Secondary flows: Theory, experiment, and application in turbomachinery aerodynamics. Ann. Rev. Fluid Mech. 5: 247
- [10] V. S. Pratap, D. B. Spaulding (1975) Numerical computations of the flow in curved ducts. Aero. Quart. 26: 219
- [11] L. S. Han (1960) Hydrodynamic entrance lengths for incompressible laminar flow in rectangular ducts. Journal of Applied Mechanics. 403-409
- [12] A. M. K. Talyor, J. A. C. Humphrey, J. H. Whitelaw (1977) Laminar flow in a square duct of strong curvature. Journal Fluid Mech. 83: 509-527

Total 101 iter for each cases	vessel (total 3000 elements) execution time / time per iter	90°Tube (total 27000 elements) execution time
Quanta Blade Server: Xeon 3.2G ¹	26513.4s / 262.5s	25970.5s / 257.1s
NTU HP Cluster ²	13859.1s / 137.2s	10186.3s / 100.8s
NTU IBM SMP ³	17939.6s / 177.6s	14587.4s / 144.4s

(註) 測試機器 1~3 的規格列表：

Specification.	CPU	RAM	network
----------------	-----	-----	---------

1	Quanta Blade Server	Xeon 3.2G	6G	Gigabit Ethernet / Infinity band
2	NTU HP Cluster	Xeon 3.0GHz	4G	Infinity band
3	NTU IBM SMP	Power5 1.9G	Total 256GB	—

表格 1：計算執行在不同的電腦（單一 CPU）之比較

HP Blade Server¹：

No. of CPU	CPU TIME	SPEED UP	Efficiency (%)
1	74064.51	1	1
2	39089.73	1.894731	0.947365331
4	22282.86	3.323833	0.830958302
8	10416.03	7.110628	0.888828445
20	4272.19	17.33643	0.866821349
40 (dual core)	2913.47	25.42141	0.635535204

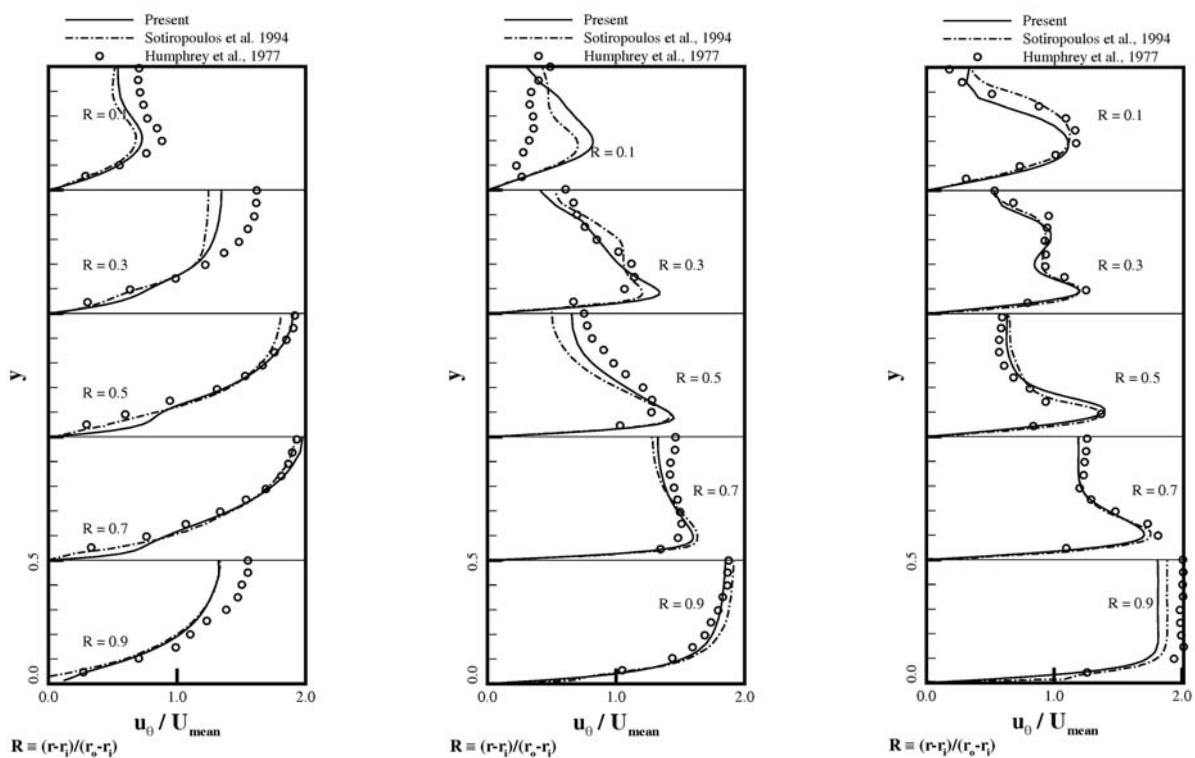
HP Blade Server (new)²：

No. of CPU	CPU TIME	SPEED UP	Efficiency (%)
1	58944.58	1	1
2	30995.85	1.901693	0.950846323
6	11258	5.235794	0.872632343
4	17002.24	3.466871	0.866717856
4 (dual-core)	28292.62	2.083391	0.520847663
4 (dual-core+HT)	60682.68	0.971358	0.24283939

（註）測試機器 1 及 2 的規格列表：

	Specification.	CPU	RAM	network
1	Quanta Blade Server	Xeon 3.2G	6GB	Gigabit Ethernet / Infinity band
2	Quanta Blade Server (new)	Xeon 3.4G	6GB	Gigabit Ethernet / Infinity band

表格 2：計算執行在不同的廣達刀鋒式叢集之比較



(a) 在 $\theta = 30^\circ$ 處

(b) 在 $\theta = 60^\circ$ 處

(c) 在 $\theta = 90^\circ$ 處

圖 9：彎管處數值解與實驗測量結果的比較

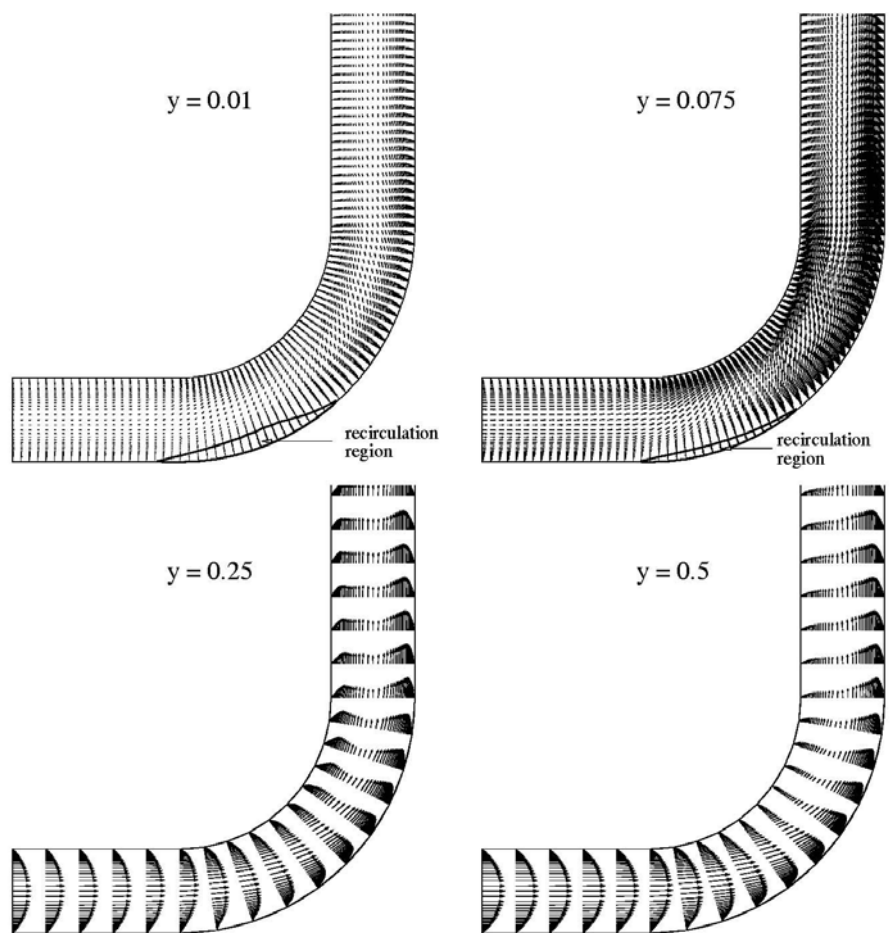


圖 10：等 y 平面上的切平面速度向量分佈圖

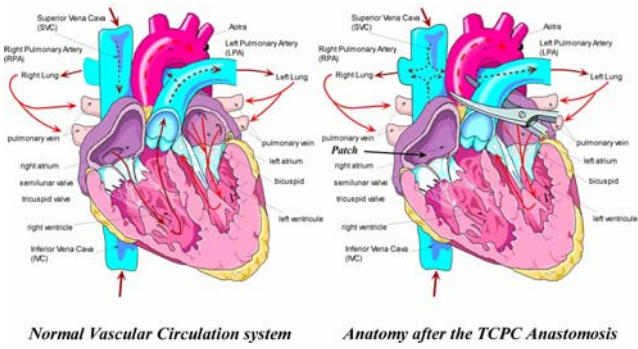


圖 11：TACE 手術前及術後示意圖

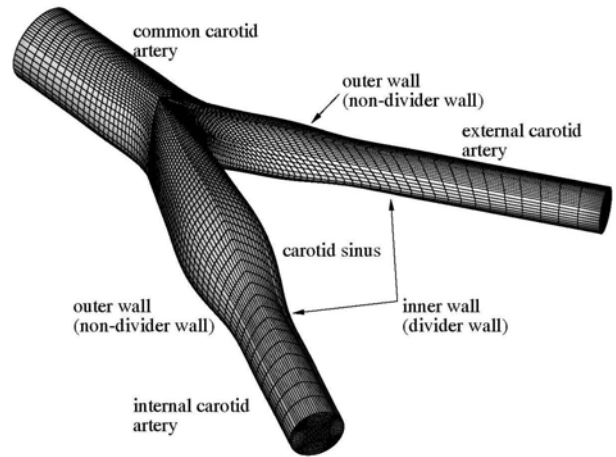


圖 12：心血管模擬三維示意圖

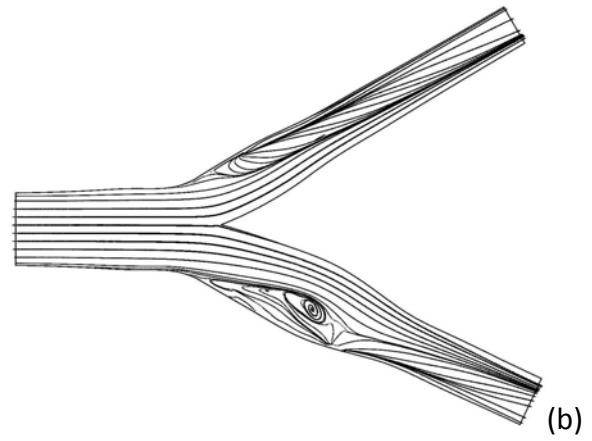
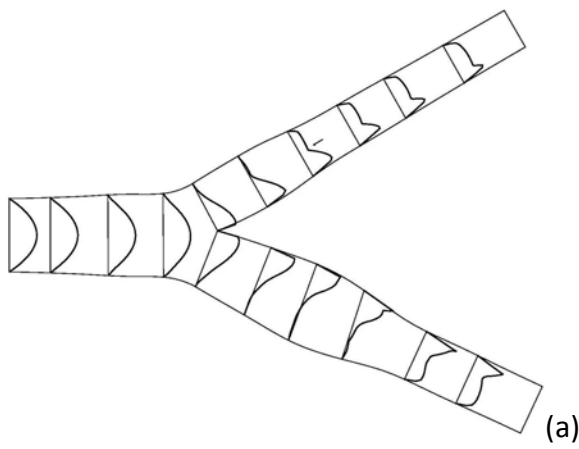


圖 13：(a) streamwise 速度分佈；(b)管壁上流線分佈

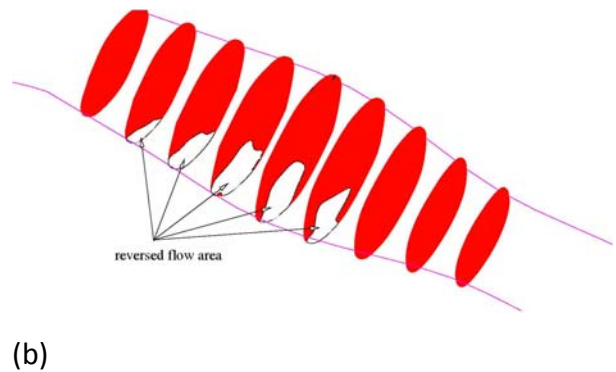
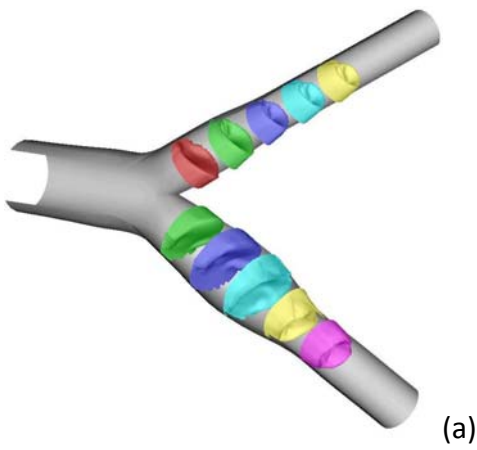


圖 14：三維數值結果(a)軸速度；(b) reversed flow regions

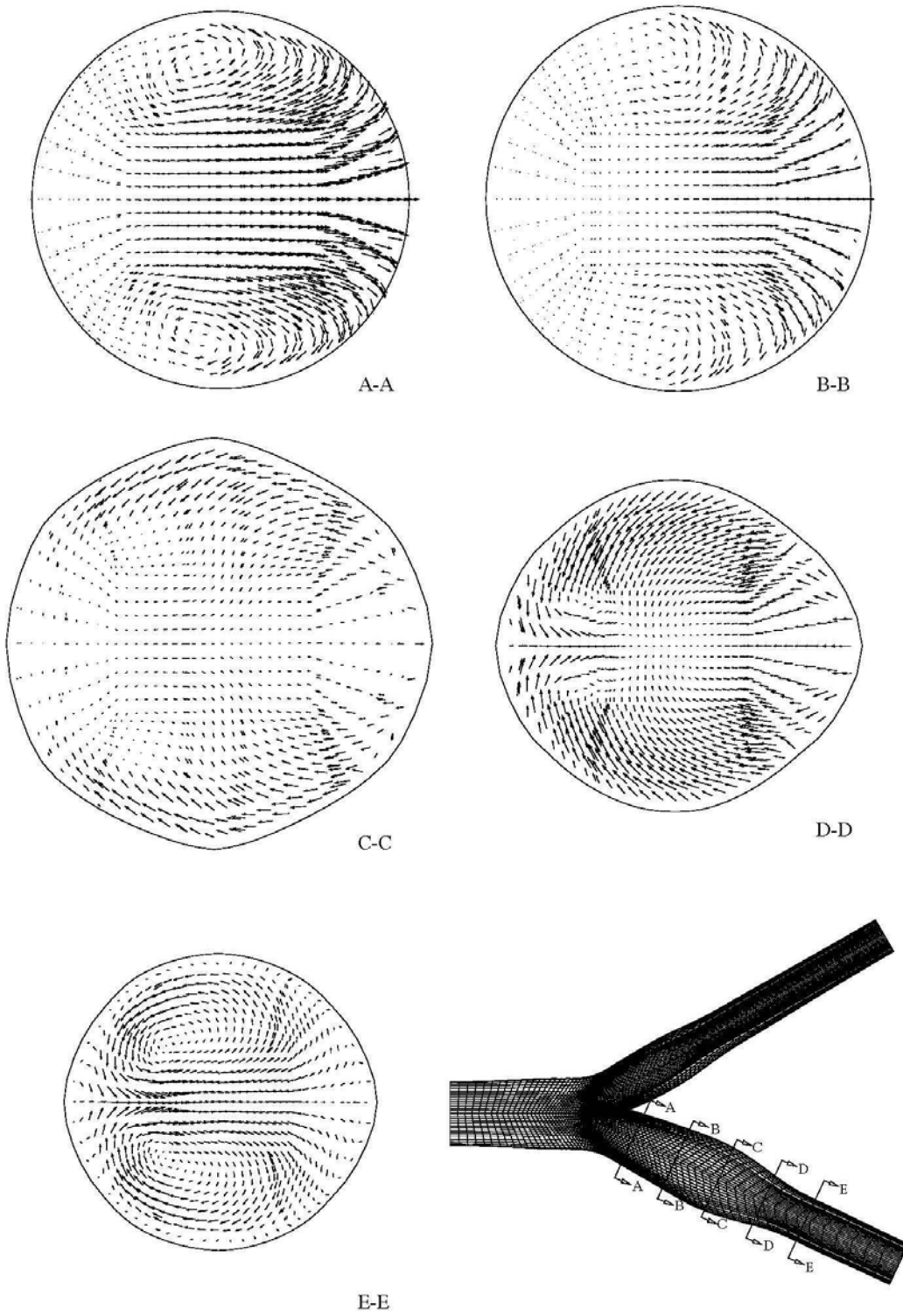


圖 15：三維數值模擬結果截取在五個不同的截面之 secondary 流

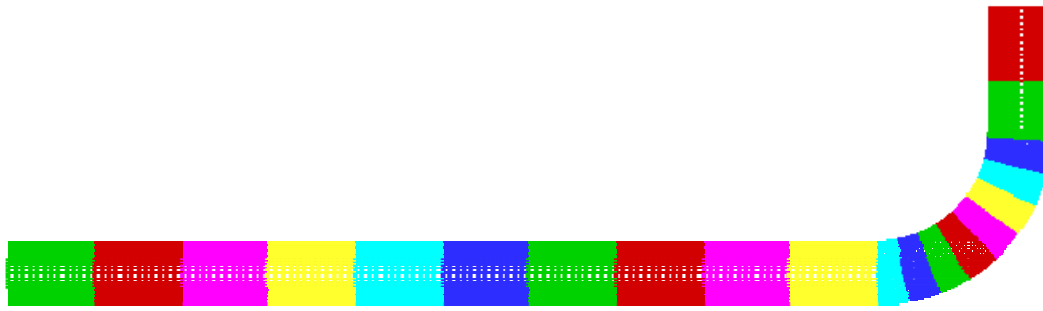


圖 16：彎管切割成 20 份計算網格之示意圖

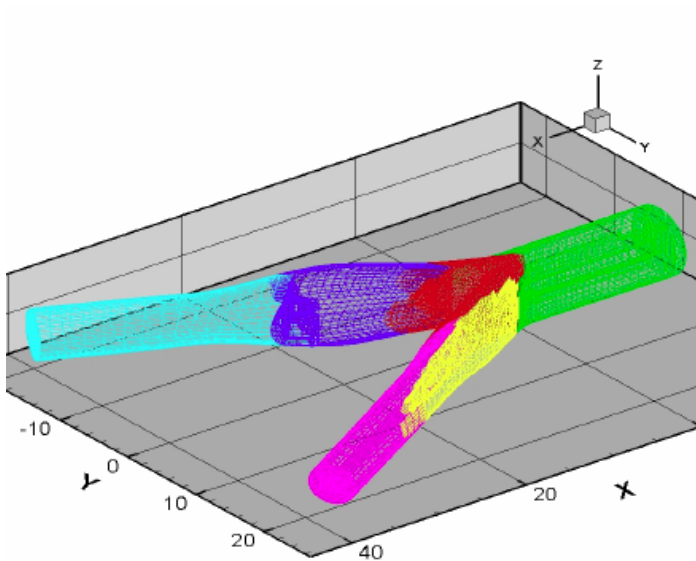
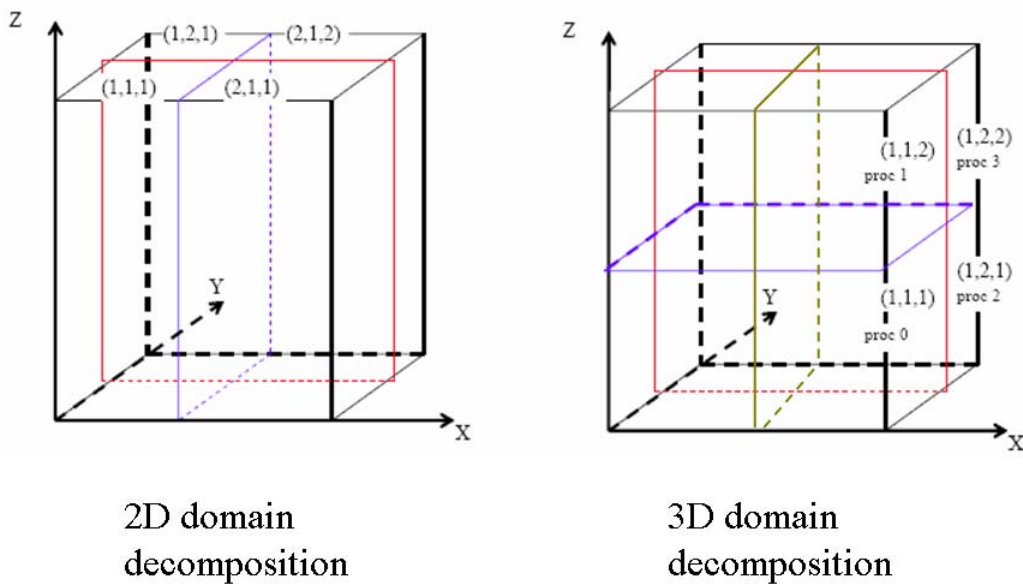


圖 17：心血管切割成 8 份計算網格之示意圖



2D domain
decomposition

3D domain
decomposition

圖 18：有限差分程式計算網格分割之示意圖