

課題名 (タイトル) :

次世代生命体統合シミュレーションソフトウェアの研究開発
Integrated Simulation of Living Matter

利用者氏名 : ○高木 周, 杉山 和靖, 川島 康弘

所属 : 社会知創成事業 次世代計算科学研究開発プログラム

次世代生命体統合シミュレーション研究推進グループ 臓器全身スケール研究開発チーム

1. 本課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

「京」向けのグランドチャレンジとして、臓器全身スケールのシミュレーションシステムの開発を実施している。臓器全身スケールチームでは、臓器レベルのスケールの力学的挙動を取り扱うシミュレーションソフトウェアの研究開発に取り組んでいる。力学シミュレーションは製造業等で数多く実績があるが、そのまま臓器の力学シミュレーションに適用する事は難しい。それは、臓器は機械部品等と異なり、設計図が無く、また柔らかさを持っているという事が要因である。そこで、我々は臓器の形状を示す情報として得る事ができる画像診断装置等から得られるボクセル情報に着目し、新たなシミュレーションソフトウェアの開発に取り組んでいる。また特徴として、柔らかさを持った固体と流体としての連成解析シミュレータとして開発を行っている。これらのシミュレーションシステムは、空間を細密に分割し、かつ大規模な計算を行う必要がある。そのため、「京」での大規模並列な環境をターゲットとし、高い並列性能を達成するシミュレーションシステムを構築する必要がある。

2. 具体的な利用内容、計算方法

本研究における RICC の利用方法は、「京」による超大規模並列計算を実施するための並列化コードの開発、および、予備計算による動作確認である。

これまで、生体内の連続体レベルの流体構造連成解析を容易に、高効率に実現するため、新たな数値シミュレーション手法の開発を進めてきた。その特徴として、有限差分法を利用しボクセル格子を用い、流体力学、構造力学の式を同じ固定メッシュ上で離散化する完全オイラー型であることが挙げられる。オイラー法

には、複雑な境界形状を持つ/多数の分散体を含む問題の取り扱いが容易であるとともに、MPI 並列計算に際しては、計算領域を均等に分割することが容易であり、通信待ちによる並列性能劣化が起こりにくいという長所がある。また、誤差の最小化処理を導入することにより、計算パラメータを動的に決定する擬似圧縮性法を新たに開発した。擬似圧縮性法は、反復計算を必要としないため、通常非圧縮性流体アプリに比べて、演算コストが少なく済むとともに、MPI 並列計算に際しては、隣接通信が少なく済むため、並列化効率を出しやすいという長所がある。

3. 結果

、赤血球、血小板の形状を模した超弾性体粒子群を含む径約 $40\mu\text{m}$ の管内流を対象とする数値シミュレーションについて説明する。一定の圧力勾配を系に課し、流れを駆動した。血管壁の部分は超弾性体として扱い、変形の影響を考慮した。全格子点数は $2,048 \times 256 \times 256$ であり、512 ノードを利用して MPI・OpenMP ハイブリッド並列計算を行った。計算結果の例として血球形状、位置を図 1 に示す。流れの発展に伴い、粒子は変形しながら下流方向に移動し、複雑に分布する。分割された計算領域間を、物理量が正しく受け渡されており、コードの並列化が正常に行われていることを確認するとともに、運動エネルギー収支を調査し、粒子変形を介した、固体・流体間のエネルギー交換が精度良く捉えられることを確認した。

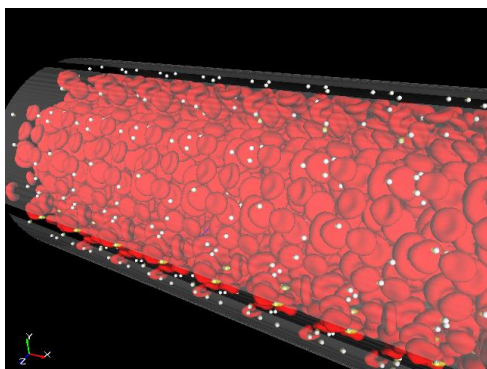


図 1 血管内における多数の分散体の計算結果. 血球分布のスナップショット (赤 : 赤血球. 白 : 血小板).

4. まとめ

連続体レベルの生体力学解析に適したシミュレーションシステムの研究開発を行ってきた。RICC を利用することで、計算規模の拡張性が極めて高い、流体構造連成解析コードの開発が可能となった。

5. 今後の計画・展望

今年度で、「次世代生命体統合シミュレーションソフトウェアの研究開発」の研究プロジェクトが終了するため、本課題での RICC の利用も終了する。

平成 24 年度 RICC 利用研究成果リスト

【論文、学会報告・雑誌などの論文発表】

杉山 和靖, 伊井 仁志, 高木 周, 松本 洋一郎 (2013) 超大規模並列計算に適した流体・構造連成手法の開発と血流シミュレーションへの適用, ながれ・小特集「京による最新計算事例の紹介」, (submitted).

【国際会議などの予稿集、proceeding】

Sugiyama, K., Kawashima, Y., Noda, S., Ii, S., Koyama, H., Takagi, S., Matsumoto, Y. and Himeno, R. (2013) Massively parallel computing of novel fluid-structure interaction solver on the K computer, 2013 年ハイパフォーマンスコンピューティングと計算科学シンポジウム, IPSJ-HPCS2013050.

Matsumoto, Y., Ii, S., Shiozaki, S., Sugiyama, K. and Takagi, S. (2013) Toward the multi-scale simulation for a human body using the next-generation supercomputer, Procedia IUTAM - the 23rd Int. Cong. Theor. Appl. Mech (ICTAM2012), Beijing, China, Aug. 2012 (submitted).

【国際会議、学会などでの口頭発表】

Sugiyama, K. (2013) Full Eulerian Methods for fluid-structure/membrane interaction problems, Japan-US Seminar on Two-Phase Flow Dynamics, Tokyo, June, 2012, T21 (keynote lecture).