

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

理研での所属研究室名 :

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

次世代スパコン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、次世代スパコン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

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、通常の SMAC 系解法に比べて、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

三次元流体構造連成問題 (血球形状を模擬した超弾性体粒子を含むチャネル流れ) を対象として、擬似圧縮性法と従来の SMAC 法 (4 color SOR 法) の並列性能比較を実施した。以下に RICC での性能評価を示す。図 1-a は、コア当たりの格子点数を $64 \times 64 \times 64$ に固定した、weak scalability test の結果である。縦軸は、計算時間の逆数 (1 コアの結果を用いてスケールリング)、横軸はコア数である。図中の Present ACM は擬似圧縮性法、SOR は従来手法を表す。従来手法の試験では、ノンブロッキング/ブロッキング通信、および、打ち切り残差 ϵ の大きさの影響について調べた。図より、従来手法に比べて、本研究で開発された擬似圧縮性の並列性能が高いことがわかる。図 1-b は、全格子点数を $2,048 \times 1,024 \times 1,024$ とした、strong scalability test の結果である。縦軸は、1024core の結果を 1 とした並列性能、横軸はコア数である。図より、strong scalability についても、従来手法に比べて、本研究で開発された擬似圧縮性の並列性能が高いことが確認された。

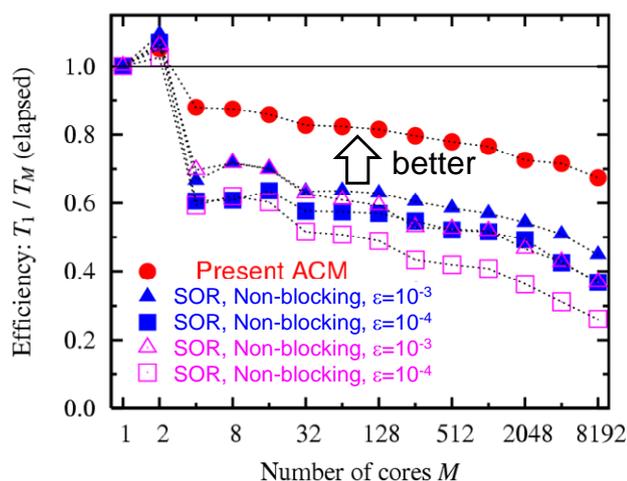


図 1-a: The efficiency, corresponding to the inverse of elapsed time T_M normalized by that at one core T_1 , versus the number of cores M , showing the weak scaling performance with a 64x64x64 mesh per core.

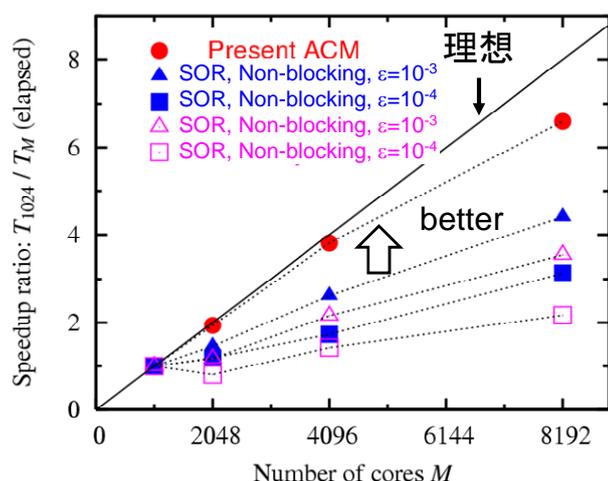


図 1-b: The speedup ratio, corresponding to the inverse of elapsed time T_M normalized by that at 1,024 cores T_{1024} , versus the number of cores M , showing the strong scaling performance with a 2,048x1,024x1,024 mesh in total.

4. まとめ

臓器を対象とした新しい計算手法を用いたシミュレーションシステムの研究開発を行っている。完全オイラー法、擬似圧縮性解法を用いた流体構造連成解析コードの並列性能における線形拡張性は高く、より大規模な計算に適用できる可能性が示された。今後、実問題への適用とその評価を行う必要があり、来年度も引き続き簡易利用として継続した利用をお願いしたい。

5. 今後の計画・展望

現在、本シミュレーションの精度／性能の向上を目指し、膜モデルの実装、チューニングについても並行して実施している。今後、実問題の計算を実施し、その結果を踏まえたプログラムの改修や問題点のつぶし込みを実施していく計画である。また、「京」の本格運用に先立ち、シミュレーションシステムのさらなる高効率化が求められるため、大規模計算評価のフェーズが継続する。引き続き、来年度も RICC を利用させていただき、より多くの計算結果（研究成果）を排出していきたい。

6. RICC の継続利用を希望の場合は、これまで利用した状況（どの程度研究が進んだか、研究においてどこまで計算出来て、何が出来ていないか）や、継続して利用する際に行う具体的な内容

これまで開発を進めてきた、医用画像データを用いた数値シミュレーション手法に加えて、動的パラメータを持つ擬似圧縮性解法を新たに開発、導入することによって、線形拡張性の高い超大規模並列計算が可能となることを確認した。今後、血栓症のシミュレーションや微少循環系のシミュレーションなど実問題への適用とその評価を行う必要があり、継続利用を希望する。

7. 一般利用で演算時間を使い切れなかった理由

8. 利用研究成果が無かった場合の理由

平成 23 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】

【国際会議などの予稿集、proceeding】

Sugiyama, K., Kawashima, Y., Koyama, H., Noda, S., Ii, S., Takagi, S., Matsumoto, Y. and Himeno, R. (2012) "Development of explicit Eulerian finite difference solver for large-scale fluid-structure interaction systems," 2012 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 (HPCS2012), IPSJ-HPCS2012056, (2012.1 名古屋, 名古屋大).

【国際会議、学会などでの口頭発表】

杉山 和靖, (2012) "超大規模並列計算に適した流体構造連成手法 (ZZ-EFSI)," 2011 年度理研シンポジウム世界最速の京と、その次 (2012.2 和光, 理化学研究所)

【その他】