

プロジェクト名(タイトル):

Blood Flow simulation with cell movement

利用者氏名:

○野田茂穂、Xiaobo Gong

理研における所属研究室名:

光量子工学研究センター 画像情報処理研究チーム

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

RIKEN-MOST 連携プロジェクトとして、血中に含まれる腫瘍細胞(CTC : Circulating Tumor Cells)の検出手法について実験とシミュレーションを用いた研究を行なっている。CTC の検出には螺旋状のマイクロ流路を使用しており、これは流体力学的に CTC を血液の中から分離回収することが可能となっている。しかしながら螺旋状マイクロ流路を流れる CTC や血液の振る舞いは十分に解明されておらず、回収性能の向上はあまり進んでいない。シミュレーションの実行は京コンピュータで研究開発を行なってきた FSI シミュレーションソフトウェアを元に改良をおこない使用している。HOKUSAI ではこのシミュレーションソフトウェアのテストを目的に使用しており、実規模計算を行う前段階の検証計算に重点を置いている。

2. 具体的な利用内容、計算方法

FSI シミュレーションソフトウェアは直交座標系で離散化されたNS方程式にSMAC法を適用した自作のソフトウェアである。構造物(流体・固体の区別)の表現にはVOF (Volume Of Fluid)法を用いており、固体の変形もVOF値の変化として取り扱う。この手法は形状を精度よく捉えるために高精細な空間解像を必要とする。そのため、多くの計算格子を必要とし、結果として多くの演算を必要とする。そこでハイブリッド並列化を適用し、大規模な問題にも適用できる様に開発されている。また、変形や移動の界面を追跡する手法としてMTHINCを元としており、ロバストに精度高く連成解析を取り扱うことができる。

3. 結果

流体固体連成シミュレーションソフトウェアは、中国科学技術部募集のRIKEN-MOST 連携プロジェクトとして、上海交通大学との共同プロジェクト向けに改良し利用している。

HOKUSAI を用いたソフトウェアの安定性・性能などの評価をもとに、FUGAKU の令和2年度の早期利用課題として採択され、開発したソフトウェアの大規模計算実行の試験・評価を HOKUSAI を用いて実施した。また、令和3年度のHPCI システム利用研究課題(利用促進課題)として採択された。FUGAKU での実規模での計算を実行したところ、時間積分が進むと異常な振る舞いをする可能性が出てきた。そこで、HOKUSAI を用いて小規模なテストケースを重ね、シミュレーションソフトウェアの改良を継続している。来年度も FUGAKU 利用課題として採択されており、HOKUSAI を用いた実証計算がより良いシミュレーションソフトウェアの開発に欠かせないものであったと考えている。

FUGAKU での利用結果も含め、Physics of Fluids にて Effects of fluid cell vessel interactions on the membrane tensions of circulating tumor cells in capillary blood flows として論文が採択され、現在発行に向けた修正を実施中である。

4. まとめ

HOKUSAI を利用したことで FUGAKU の早期利用課題早期利用課題・利用促進課題として採択されるシミュレーションソフトウェアが実現でき、我々のプロジェクトの成果としての計算実行環境を獲得することができた。計算結果とこれまでの実験から論文として採択され、プロジェクトの成果が示されるとともに、令和4年度のFUGAKU 一般課題としても採択された。次年度以降もHOKUSAIを有効に利用し、さらに研究を進めていく。

5. 今後の計画・展望

上海交通大学と共同プロジェクトは来年も継続する。そのため、HOKUSAI を用いた数値実験とプログラムの実行確認が必要であり、その結果をもとにさらに研究を継続する計画である

2021 年度 利用研究成果リスト

【雑誌に受理された論文】

Physics of Fluids に Peng Jing, Satoshi Ii, Xiaolong Wang, Kazuyasu Sugiyama, Shigeho Noda, Xiaobo Gong, “Effects of fluid cell vessel interactions on the membrane tensions of circulating tumor cells in capillary blood flows”として採択。
現在発行に向けて修正中。

【会議の予稿集】

【口頭発表】

【ポスター発表】

【その他(著書、プレスリリースなど)】