TSUBAME 共同利用　令和元年度　学術利用　成果報告書

利用課題名　マルチ GPU による心血管系の血流の数値シミュレーション
英文：GPU-based numerical simulation of cardiovascular blood flow

利用課題責任者 水藤寛
Hiroshi Suito

所属　東北大学　材料科学高等研究所
Affiliation　Advanced Institute for Materials Research, Tohoku University
URL https://www.wpi-aimr.tohoku.ac.jp/jp/index.html

邦文抄録
安定化有限要素法は、複雑な境界形状を持つ領域での 3 次元非圧縮性 Navier-Stokes 方程式の数値計算に広く用いられているが、その GPU による高速化には、実装上いまだ困難な点が多い。そこで、本研究課題では、マルチ GPU による大規模計算が行える TSUBAME の計算環境を利用し、安定化有限要素法による 3 次元非圧縮性 Navier-Stokes 方程式のマルチ GPU 並列解法を構築し、血流などの体内流れについての評価を行った。

英文抄録
A numerical method for simulating blood flow is presented. The Navier-Stokes equation is used as a governing equation and discretized using the streamline upwind Petrov-Galerkin(SUPG)/pressure stabilizing Petrov-Galerkin(PSPG) stabilized finite element method(FEM). The system of linear equation was solved iteratively at each time step via the generalized product bi-conjugate gradient (GPBi-CG) algorithm. We developed a multi-GPU implementation of the GPBi-CG.

Keywords: Navier-Stokes equation, SUPG/PSPG, FEM, multi-GPU

背景と目的

循環器系における血流評価においては、臓器内や毛細血管床など多孔性媒質中の流れの評価も重要となる。そこで本研究ではそのような状況のモデルとして微視的な流路を設定し、そこでの流れの解析を GPU を用いて高速に行う手法を構築することとした。なお本研究は主に、東北大学材料科学高等研究所の Viet Q.H. Huynh、及び研究協力者である埼玉県環境科学国際センターの鈴木和将によって実施された。

近年、安定化有限要素法は、複雑な境界形状を持つ領域での 3 次元圧縮性 Navier-Stokes 方程式の数値計算に広く用いられているが、その GPU による高速化には、実装上いまだ困難な点が多い。本研究では、マルチ GPU による大規模計算が行える TSUBAME の計算環境を利用し、安定化有限要素法による 3 次元非圧縮性 Navier-Stokes 方程式のマルチ GPU 並列解法を構築し、生体内流れの数値シミュレーションを行うことを目的とした。特に微細な組織内での幾何形状の特徴とマクロな流れの構造との関係性に着目して研究を行った。

概要

単純化した系として、三次元空間にランダムに球を配置した計算モデル（多孔性媒質、図 1）を用いた。球径を数段階に変化させたモデルを作成した。

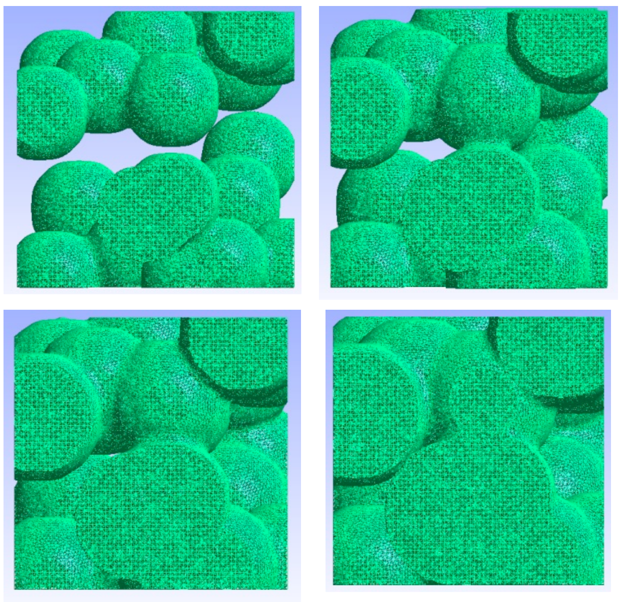

図 1 多孔性媒質モデル（R=11, 13, 15, 17）

支配方程式には、非圧縮性 Navier-Stokes 方程式、連続の式を用いた。

$$\frac{\partial u_i}{\partial t}+u_j\frac{\partial u_i}{\partial x_j}=-\frac{\partial p}{\partial x_i}+\frac{1}{\mathrm{Re}}\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j}+\frac{\partial u_j}{\partial x_i}\right) \; in \quad \Omega, (1)$$

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i}=0 \; in \quad \Omega. \quad (2)$$

ここで、u は流速、p は圧力、Re は Reynolds 数、Ω は計算領域である。

上記(1),(2)の支配方程式に対して、安定化有限要素法（SUPG/PSPG 法）を適用すると以下のように弱形式が導かれる。

$$\int_\Omega w_i\left(\frac{\partial u_i}{\partial t}+\bar{u}_j\frac{\partial u_i}{\partial x_j}\right)d\Omega-\int_\Omega \frac{\partial w_i}{\partial x_i}$$

$$+\int_\Omega \frac{1}{Re}\frac{\partial w_i}{\partial x_j}\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j}+\frac{\partial u_j}{\partial x_i}\right)$$

$$+\sum_{e=1}^{n_{el}}\int_\Omega \left(\beta\overline{u_k}\frac{\partial w_i}{\partial x_k}\right)\left(\frac{\partial u_i}{\partial t}+\bar{u}_j\frac{\partial u_i}{\partial x_j}+\frac{\partial p}{\partial x_i}\right)d\Omega=0,(3)$$

$$\int_\Omega q\frac{\partial u_i}{\partial x_i}d\Omega$$

$$+\sum_{e=1}^{n_{el}}\int_\Omega \left(\beta\frac{\partial q}{\partial x_i}\right)\left(\frac{\partial u_i}{\partial t}+\bar{u}_j\frac{\partial u_i}{\partial x_j}+\frac{\partial p}{\partial x_i}\right)d\Omega=0, \quad (4)$$

ここで、w_i, q は、それぞれ式(1),(2)に対する Galerkin 項の重み関数である。また、$\bar{u}_i$ は移流速度を表し、β は安定化パラメータである。

これら(3), (4)式に対して、空間の離散化要素には、四面体 1 次要素を用い、時間方向の離散化には、Crank-Nicolson 法を適用した。なお、最終的に得られる連立一次方程式の解法には GPBi-CG 法を適用した。本研究では、計算の高速化を達成するために、NVIDIA 社の統合開発環境である CUDA と cuBLAS, cuSPRASE 等のライブラリを用いて GPBi-CG の並列化を行い、GPU スパコンを利用して計算を実施した。

結果および考察

多孔性媒質モデルに対して、数値シミュレーションにより流れ場計算を実施した。流れの状況を流線として図化した結果を図 2 に示す。図の上部が流入面、下部が流出面であり、流入面は、一様流を与えた Dirichlet 条件である。図に示されるように、モデル領域の球が結合する箇所の狭さく部や分岐部で大きな流れの変化がみられた。また、球径を変化させて数値シミュレーションを行った結果、径が大きくなるにしたがい、流路が狭くなり、流速が速くなった。

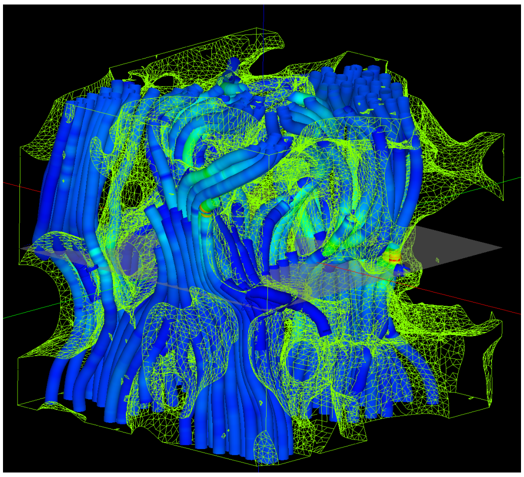

図 2 多孔性媒質内流れの様子（流線）

そこで、球径の違いによる流れの影響を定量的に評価するため、流入境界と流出境界の間の圧力を変化させ、数値解析を行った。図 3 に圧力差と流量の関係を示す。球径が大きくなるほど、圧力損失が大きくなった。また、調べた範囲では、圧力差と流量の間に線形関係が成り立っていることが示された。

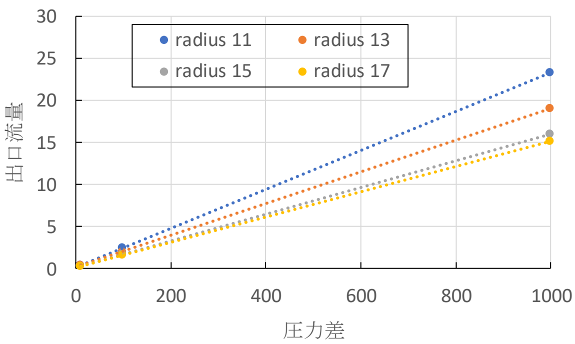

図 3 圧力差と出口流量との関係

まとめ、今後の課題

本研究の発展として形状の幾何学的な取り扱いをさらに進め、流れと流路形状の関係を明らかにする数理モデルの構築を目指すことが必要であると考えられる。