

Моделирование живых систем с использованием высокопроизводительных вычислений*

В.М. Соловьев, Л.Ю. Коссович, И.В. Кириллова
Саратовский государственный университет

При построении оптимальных компьютерных моделей на основе механики деформируемого твердого тела (ДТТ), позволяющих создавать трёхмерные модели живых (биологических) систем, приходится сталкиваться с проблемой расчета систем со сложной геометрической конфигурацией и нерегулярной физической структурой. Например, в медицине при высокотехнологичных методах лечения перелома бедренной кости с учётом действия сил различных мышц на костные отломки. Такая сложная задача может быть решена на основе высокопроизводительного вычислительного программно-информационного комплекса (ПИК). Программно-информационный комплекс может использоваться для оперативной выработки лечебных рекомендаций. Он позволит выполнить расчеты с использованием приближенных численных методов – методов конечных элементов (МКЭ). Для использования МКЭ необходима адекватная трехмерная геометрическая модель и «решатель», специально разработанный для моделирования живых систем. Таким образом, весь процесс моделирования, например, переломов бедренной кости в ПИК может быть сведен к трем фазам: препроцессингу – подготовке адекватной трехмерной модели перелома бедренной кости; процессу моделирования с использованием «решателя», созданного на основе МКЭ; постпроцессингу – визуализации и интерпретации результатов моделирования.

Все три фазы могут быть реализованы в ПИК, на основе имеющихся вычислительных комплексах инженерных расчетов (CAE-систем) с проприетарным (proprietary) или свободно распространяемым (open source) программным обеспечением (ПО). В случае проприетарного ПО CAE-системы должны предусматривать возможность подключения автономных решателей (solvers), реализующих параллельные вычисления. Для свободно распространяемого ПО CAE-системы должны собираться (компилироваться) на основе создаваемых решателей. Причем вся структура программных модулей ПИК должны адаптироваться под решаемую задачу.

При создании такого ПИК необходимо учитывать, что трехмерная геометрическая модель должна быть ориентирована на численные методы с использованием МКЭ. Она должна быть реализована для множества трехмерных элементарных геометрических объектов, в совокупности адекватно представляющих живую систему, как твердое тело.

Однако на «негладких» поверхностях геометрической модели трудно обеспечить стыковку на линиях излома. Кроме того, в слоистых материалах, к которым относятся биологические объекты, возникают дополнительные трудности. Так, при моделировании каждого слоя бедренной кости, трудно стыковать, например, две слоистые структуры со слоями разной толщины. Поэтому вопросы «аккуратного» моделирования на фазе препроцессинга очень актуальны. Они могут быть решены только путем использования соответствующих технологий твердотельного моделирования в современных CAD-системах. При моделировании перелома бедренной кости с применением МКЭ основой моделей являются матричные вычисления. Используя перемещения в качестве параметров, вариационные принципы и соотношения трехмерной теории упругости, получают матрицы жесткости как линейные операторы, действующие на поле перемещений.

С другой стороны, поверхностный элемент в процессе деформации порождает многообразие перемещений точек поверхности и углов поворота, которые можно использовать в качестве параметров. В сочетании с инженерными теориями, основанными на гипотезах поведения, можно построить матрицы жесткости поверхностных элементов, как линейные операторы, действующие на перемещения и углы поворота поверхности. Применяя обычную технику МКЭ, требуется решить эти две задачи, используя соответствующие решатели, спроектированные для высокопроизводительных вычислений.

* Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ, шифр 2009-04-1.4-20-05-014.