

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

利用者氏名 :

○高木 周\*  
杉山 和靖\*\*

所属 :

\*和光研究所 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

\*\*東京大学大学院工学系研究科機械工学専攻

## 1. 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、臓器レベルのサイズ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唯一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、従来法とは異なり、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

## 赤血球／血小板シミュレータ

従来にない、Euler 表記を用いた固体流体連成シミュレータ。有限差分法を利用しボクセル格子を用い、固体／流体を同時に取り扱う。並列計算においては、領域分割型の並列計算を実装し、並列性能のボトルネックとなる通信処理を隠蔽する設計としている。これは、領域間の袖領域の物理量の通信を行っている間に、その値が影響を及ぼさない他の計算を同時に行う事により、見た目上通信コストを見えなくする設計である。

## 3. 結果

現在のところ、プログラムの開発途中であるが、赤血球／血小板シミュレータの RICC での性能評価を示す。横軸に core 数(並列度数)縦軸に並列性能を示す。図 1-a は問題規模が中規模であり、図 1-b は問題規模が図 1-a より大きい。また、図 1-a は 128core の結果を 1 とし、図 1-b は 512core の結果を 1 として整理している。2048core までの計測では、中規模な計算規模であっても並列性能が劣化していないが、並列度数を上げていくと劣化する事が予想される。8000core での並列計算の時間測定により、そのポイントを知り、問題規模との相関を明確にする。

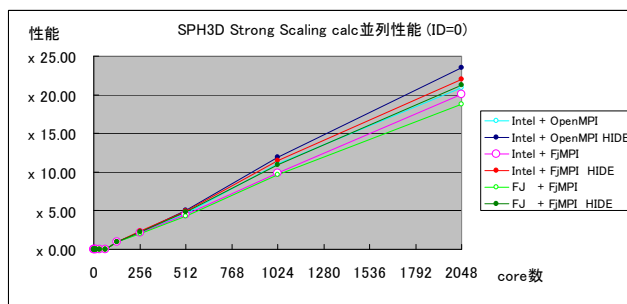


図 1-a 赤血球／血小板シミュレータでの中規模データ(480x480x480Element)の並列性能

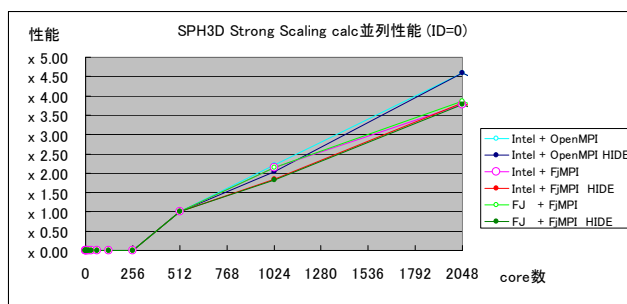


図 1-b 赤血球／血小板シミュレータでの大規模データ(960x960x960Element)の並列性能

本結果をふまえ、別途特別利用申請にて8000core 並列テストを実施した。その結果については特別利用の報告書に記載した。

また、現在、開発したプログラムを用いて、血管内を多数の赤血球が存在する計算を実行している。(図2) この計算は現在も実施中である。

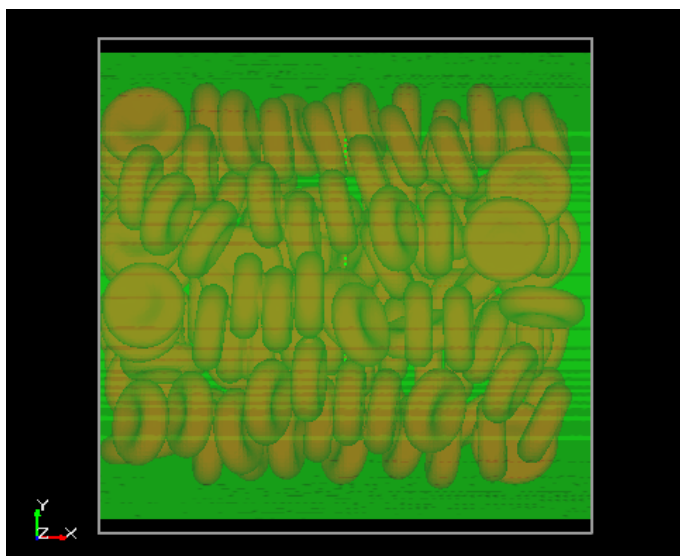
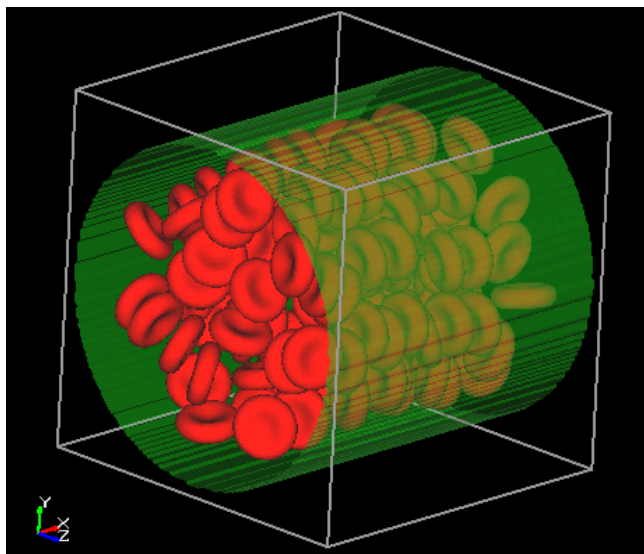


図2 血液中を流れる赤血球の配置

#### 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。現在のところ、並列性能も良好であり、大規模計算機を用いる事により、これまでに無い計算が実現できる事が示された。現在、実問題の適用として、血液中を流れる多数の赤血球の計算を実行している。本年度だけでは計算が終了し、評価を行う事は時間的に困難なため、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・展望およびRICCの継続利用を希望

現在、実問題の計算を実施中であり、今年度中に最初の計算結果が出る予定である。その結果をふまえ、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、FX1への移植作業やハイブリッド並列化等プログラム開発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、更に効率のよいシミュレーションシステムを構築し、より多くの計算結果(研究成果)を排出していきたい。

以上