

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 康弘所属 : 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

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。

今年度は、本シミュレータの性能/精度向上を目指し、擬似圧縮性解法の実装を実施した。

3. 結果

現在のところ、プログラムの開発途中であるが、実装した擬似圧縮性解法と、従来の手法（速度：クランク=ニコルソン法、圧力：SOR 法で計算）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。

問題規模は 1024x1024x2048Element（約 21.5 億 Element）とした。図 1-a は 1024core の結果を 1 とした並列性能で、横軸に core 数（並列度数）、縦軸に並列性能を示す。図 1-b は各並列度数での計算処理時間に対する通信処理時間の割合で、横軸に core 数（並列度数）、縦軸に通信処理時間の割合を示す。図中の「1CN-SOR」が従来手法、「3EUL」が擬似圧縮性解法の結果を示し、並列性能、通信コストともに新手法が従来手法と比較して有利であることを示している。

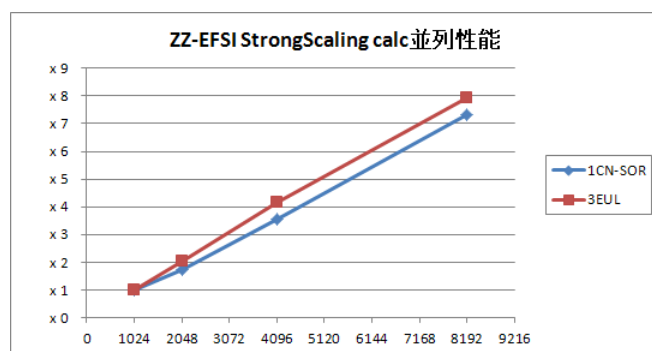


図 1-a 赤血球/血小板シミュレータでの新旧手法並列性能

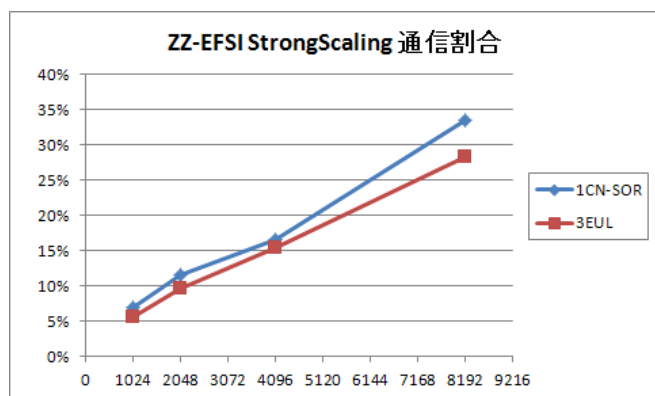


図 1-b 赤血球／血小板シミュレータでの
計算時間に対する通信処理の割合

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、開発途中ではあるが、今年度開発した擬似圧縮性解法の並列性能は良好であり、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、THINC 法、マルチグリッド法等のスキームの実装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、次世代スパコン実機での評価に向けた FX1 での検証等、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、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。

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

医用画像データを用いたシミュレーションに適した新しい計算手法を開発し、次世代スパコン「京」での計算に向け、良好な並列化性能を達成している。さらに今年度は、擬似圧縮を用いた新しい解法を開発中で、これについても良好な並列性能を達成し、より大

規模な計算に適用できる可能性が示された。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

ここで行なわれた計算は、次世代スパコン「京」で研究成果を出すための準備計算に相当する。したがって、並列化性能の評価などは行っているが、ここで得られた結果を研究成果として外部発表などは行っていない。