

ポスト「京」重点課題 2

個別化・予防医療を支援する統合計算生命科学

NEWS LETTER

Vol. 15

Contents

• Research Report

何してるの?なぜ?どうやって?ちょっと解りやすく
教えて!に研究者が応える

全脳循環シミュレータの開発～大規模計算～

• Information

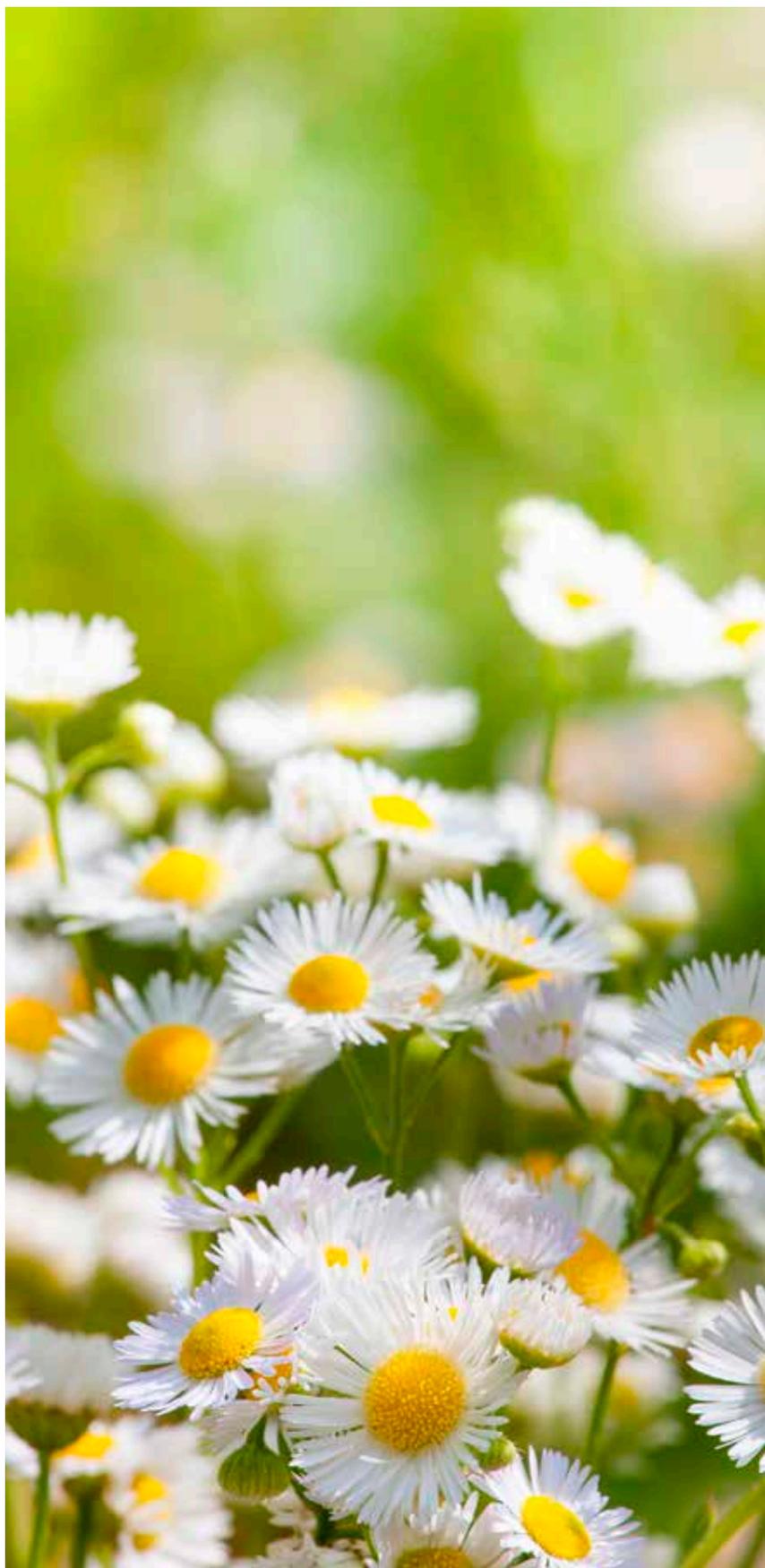
お知らせやイベント情報

INTEGRATED
COMPUTATIONAL
LIFE
SCIENCE
TO SUPPORT
PERSONALIZED AND
PREVENTIVE MEDICINE



ポスト「京」
重点課題2

個別化・予防医療を支援
する統合計算生命科学



■ Research Report

Subtheme **B**

全脳循環シミュレータの開発～大規模計算～

サブ課題B

神戸大学大学院工学研究科
神戸大学大学院工学研究科
大阪大学大学院基礎工学研究科

石田 駿一
今井 陽介
和田 成生
(左から)



私たちの脳が正常に機能するためには、脳を構成している全ての細胞に満遍なく酸素や栄養分を供給することが必要です。これを可能にしているのが脳循環ですが、そのメカニズムは十分明らかになっていません。我々は、ヒトの脳血管の実形状データと解剖学的知見に基づいた全脳血管モデルを構築し、ポスト「京」コンピュータを用いた大規模な血流シミュレーションによって、脳循環のメカニズムを明らかにしようとしています。NEWS LETTER Vol.13では、医用画像と数理モデリングを組み合わせた全脳血管のモデルについて紹介しました。今回は、この全脳血管モデルを使って大規模血流シミュレーションを行う方法について紹介します。

大規模血流シミュレーションに向けたシミュレータ開発

大規模血流シミュレーションに限らず、流れのコンピュータシミュレーションを行うためには、初めに計算格子を作成する必要があります。流れを計算したい空間、ここでは血管内腔の血液が流れている空間を格子状に分割します。格子の形状や配置には色々な種類がありますが、我々はボクセル型の流体シミュレータを開発してきました。液晶ディスプレイの画素を表す言葉にピクセルというものがありますが、ボクセルとはその三次元版であり、ボクセル型シミュレータでは立方体形状の計算格子が上下前後左右に並んでいます。脳血管の形状は複雑であり、一般に、血管内腔の空間を格子に分割することは容易ではありません。しかし、ボクセル型シミュレータでは単純に立方体を並べて積み上げるだけなので、格子生成が極めて容易になります。また、計算格子が規則的に並んでいるので、近接する格子の情報へのアクセスが容易です。コン

ピュータシミュレーションの計算速度は、演算性能だけで決まるわけではなく、むしろ情報にアクセスする速度が律速となることが多いです。計算格子が規則正しく並んでいることは、この点でも有利になります。

さて、流れのコンピュータシミュレーションというのは、流体の質量保存の式と流体の運動量保存の式（それぞれ連続の式と Navier-Stokes 方程式と呼ばれています）をコンピュータで解いて、流体の速度や力を求めることです。このとき、流体の圧力を求めるために Poisson 方程式という式を解く必要が生じます（半陰解法といいます）。ところが Poisson 方程式というのは厄介な方程式で、何度も何度も繰り返し計算をして、ようやく解を得ることができるという性質を持っています。通常の小さい規模のシミュレーションであればまだ良いのですが、ポスト「京」コンピュータで実施するような超大規模なシミュレーションの場合には、繰り返し計算の回数が著しく増加し、さらに、

ピュータ全体を跨ぐような超大規模な通信の回数が増加するため、適用が難しくなることが予想されます。

我々はまず、この半陰解法の適用を見直すことにしました。Poisson 方程式を解かなくても良い計算手法として、格子ボルツマン法という計算手法があります。格子ボルツマン法による流体シミュレーションは、繰り返し計算の必要がなく（完全陽解法といいます）、さらにアルゴリズムの局所性が高いため、大規模な並列計算に適した手法であると考えられています。このような背景から、近年格子ボルツマン法は注目されており、改良が続けられています。本研究ではその中から、安定性に優れた D3Q27 Cumulant 格子ボルツマン法 [1] を採用することにしました。ボクセル型シミュレータでは、立方体形状の計算格子を用いることから血管表面の形状が階段状になってしまうのですが、符号付き距離関数を用いた Interpolated bounce-back 法 [2] という特別な境界形状の表現方法を適用し、複雑な血管形状に対してもボクセル型シ

■ Research Report

Subtheme **B**

ミュレータで高精度に計算することを可能にしました。

大規模並列計算では、計算する領域全体を区画に分割し、スーパーコンピュータを構成する多数のコンピュータ (MPI ノード) にそれぞれ担当の区画を割り当てて計算します。ただし、個々の MPI ノードで計算される式は独立して解を得られるわけではないので、MPI ノード間で情報のやり取り、通信が必要になります。領域分割の方法として、これまでは、血管形状に沿って $32 \times 32 \times 32$ のボクセルで構成される立方形状の区画 (ボックス) を配置し、1つの MPI ノードに $32 \times 32 \times 32$ のボクセルの計算を担当させていました。この方法は簡便ですが1つ問題がありました。今、血液が流れているのは血管内の領域だけです。血管壁や血管の外の組織の領域は式を解く必要

がありません。しかし、 $32 \times 32 \times 32$ ボクセルを配置する方法では、計算が不要な血管壁や血管外の格子を多く含むこととなります。 $32 \times 32 \times 32$ ボクセル全てが血液の領域である MPI ノードもあるので、MPI ノード毎に計算負荷が大きく異なるということになります。このことはインバランスと呼ばれ、並列計算の性能を低下させてしまいます。

我々は過去に、大規模な GPU コンピューティングで同じ問題に遭遇していました。GPU コンピューティングとは、グラフィックスカードという画像処理用のコンピュータパーツを使ってシミュレーションをする技術です。「京」コンピュータとは異なる仕組みのコンピュータですが、共通の問題点も多く、言い換えると、それぞれで開発された技術は、互いに効果的に応用できることも少なくありま

せん。我々は、適合サブドメイン法という手法を開発しました [3]。この手法は、サブドメインと呼ばれる $N \times N \times N$ のボクセルで構成されるブロックを形状に適合するように配置し、個々の MPI ノードが担当するサブドメインの数が等しくなるように領域を分割する手法です。N の大きさは任意なので、例えば $N = 32$ として、1つの MPI ノードが1つのサブドメインを担当する場合には前述の方法と同じになります。全脳循環シミュレータでは $N = 2$ を採用し、血管壁や血管外の計算の必要のないボクセルをほとんどなくすることができました。したがって計算資源を有効に使用できると同時に、個々の MPI ノードが担当する流体の格子数がほぼ等しくなり、計算負荷のバランスが大幅に改善されます。

改良した新しいシミュレータについて、

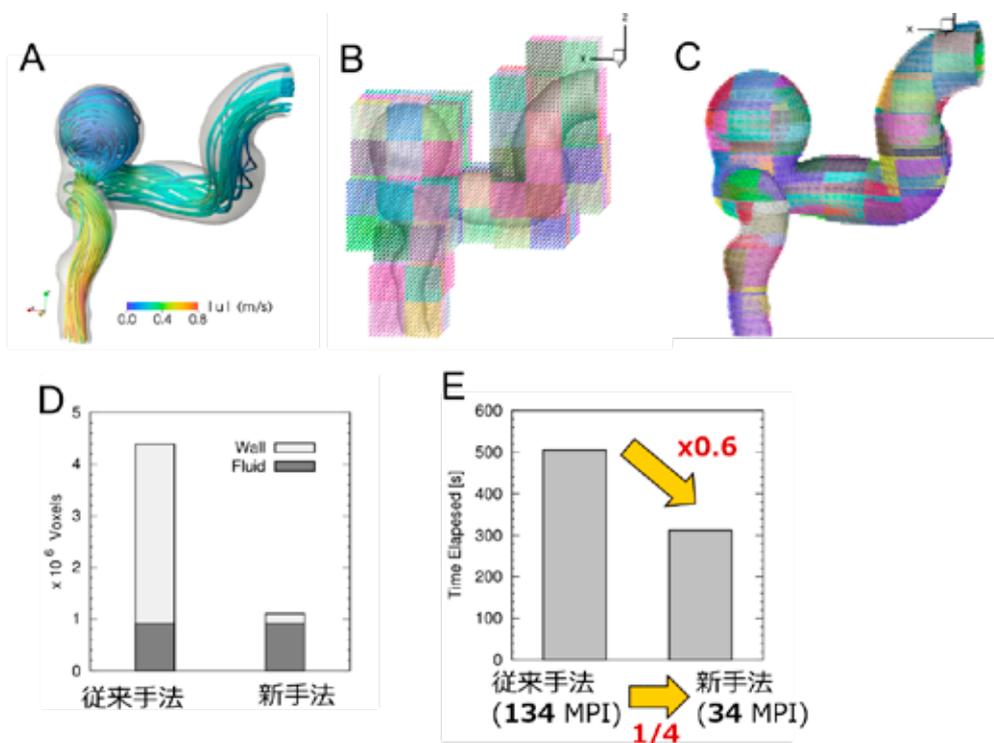


図1: 従来手法と新手法の比較。(A) 解析対象となる脳動脈瘤を含む血管内流れ。(B) 従来手法によるMPI領域分割。色はMPIリンク番号。 $32 \times 32 \times 32$ ボクセルで構成されるボックスで形状を覆い、1つのMPIノードが1ボックスの計算を担当する。(C) 新手法によるMPI領域分割。 $2 \times 2 \times 2$ ボクセルで構成されるブロックを形状に適合するように配置し、全てのMPIノードが等しい数のブロックの計算を担当する。(D) 流体領域のボクセルと血管壁(血管外)領域のボクセルの数。従来手法では計算の不要な血管壁の領域が多く含まれているのに対し、新手法では計算の不要な領域がほとんど含まれていない。(E) 計算時間の比較。新手法では、従来手法の1/4の数のMPIノードしか使用していないにもかかわらず、計算時間が60%程度に短縮された。

■ Research Report

Subtheme **B**

ベンチマークテストを行い、従来のシミュレータと比較しました。ここでは、図 1A に示すような脳動脈瘤を含む血管内の血液の流れを対象としました。流体の領域は約 92 万ボクセルです。二つのシミュレータで 1MPI ノードあたりの格子数が等しくなるように(約 32700 ボクセルになるように) 分割すると、従来のシミュレータでは 134MPI ノード、新しいシミュレータでは 34MPI ノードに領域分割されます。このとき、それぞれのシミュレータの領域分割は、図 1B と図 1C のようになります。色は MPI ランク番号というもので、MPI ノードに割り振られた個人番号のようなものです。従来のシミュレータでは 32 × 32 × 32 ボクセルのボックスを用いて領域分割を行っているために、血管壁や血管の外の領域など、計算の不要な領域が多く含まれていることがわかります。一方、新しいシミュレータでは血管形状に適合したサブドメインが配置されており、血管外の領域はほとんどありません。したがって、1つの MPI ノードが担当する流体のボクセル数にばらつきがほとんどなくなっています。図 1D は流体領域のボクセル数と血管外の領域のボクセル数を比較したものです。従来のシ

ミュレータでは血管外のボクセル数が流体領域のボクセル数の 3 倍以上存在しているのに対し、新しいシミュレータでは、10% 程度に抑えられています。次に、実際にシミュレーションにかかる時間を比較します。図 1E は血液が 0.1 秒間流れるシミュレーションを行うのにかった計算時間です。新しいシミュレータでは、従来のシミュレータの 1/4 の MPI ノードしか使用していません。それにも関わらず、計算時間は 60% に短縮されました。

全脳循環の大規模血流シミュレーション

脳循環には多数の細い血管が脳表面全体を覆うように存在しています。全脳循環を対象とするシミュレーションでは、新しく導入した手法の恩恵はさらに大きくなると考えられます。そこで、前回の NEWS LETTER で紹介した全脳血管モデルを用いて、「京」コンピュータで大規模血流シミュレーションを実施してみました。この全脳血管モデルは、医用画像と数理モデリングを組み合わせる脳血管網を構築するものです。ここでは図 2 のように、直径 400 μm (μm は mm の

1/1000) までの血管網を生成しました。最も細い血管内の流れを十分解像できるようにボクセルのサイズは 60 μm としました。計算領域全体の総ボクセル数は約 4 億ボクセルになります。図 3 のように計算領域を分割し、「京」コンピュータ 20000 ノードを使用して計算しました。このような非常に複雑な血管形状に対しても、領域分割が適切に行われていることが確認できます。

計算結果のスナップショットを図 4 に示します。左右の内頸動脈および椎骨動脈から造影剤を模擬した液体を一定量注入するシミュレーションを同時に行い、血液の流れを可視化しています。青色は左の内頸動脈、黄色は右の内頸動脈、赤色は椎骨動脈から流入した血液を表しています。流入した血液が脳全体へ行きわたり、その後、頸静脈から流出する過程を可視化することができました。このことは、本研究で開発したシミュレータによって従来のシミュレータではなしえなかった規模の脳循環の大規模血流シミュレーションを実行できることを示しています。ポスト「京」コンピュータの実行性能は、最大で「京」コンピュータの 100 倍であると言われており、ボクセルサイ

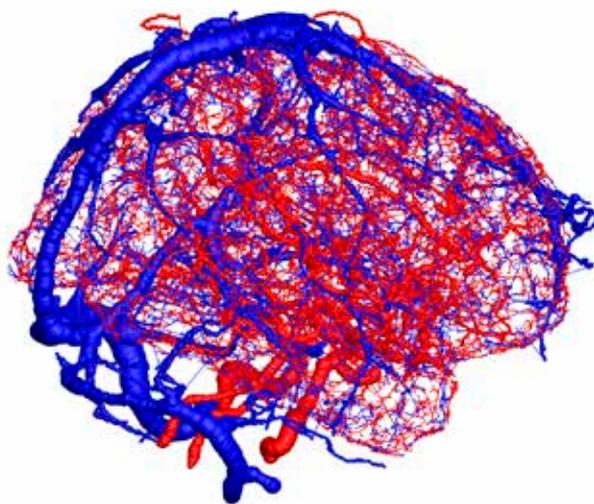


図2: 医用画像と数理モデリングを組み合わせた脳血管モデル。赤い血管は動脈、青い血管は静脈を表す。詳細についてはNEWS LETTER Vol.13を参照のこと。

■ Research Report

Subtheme **B**

ズ $10\ \mu\text{m}$ に迫るシミュレーションも夢ではありません。毛細血管を除けば、脳血管は最小でも数十 μm 程度であり [4]、

全脳循環シミュレータとポスト「京」コンピュータによって、脳血管全てを解像するフルスケールの全脳循環血流シミュ

レーションが可能になるかもしれません。

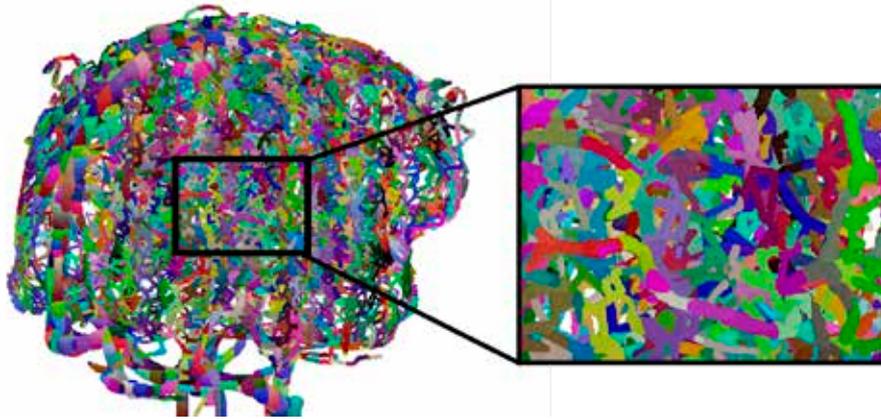


図3: 脳血管モデルに対する20000MPIノードの領域分割。色はMPIのランク番号。複雑な血管形状に対しても、領域分割が適切に行われている。

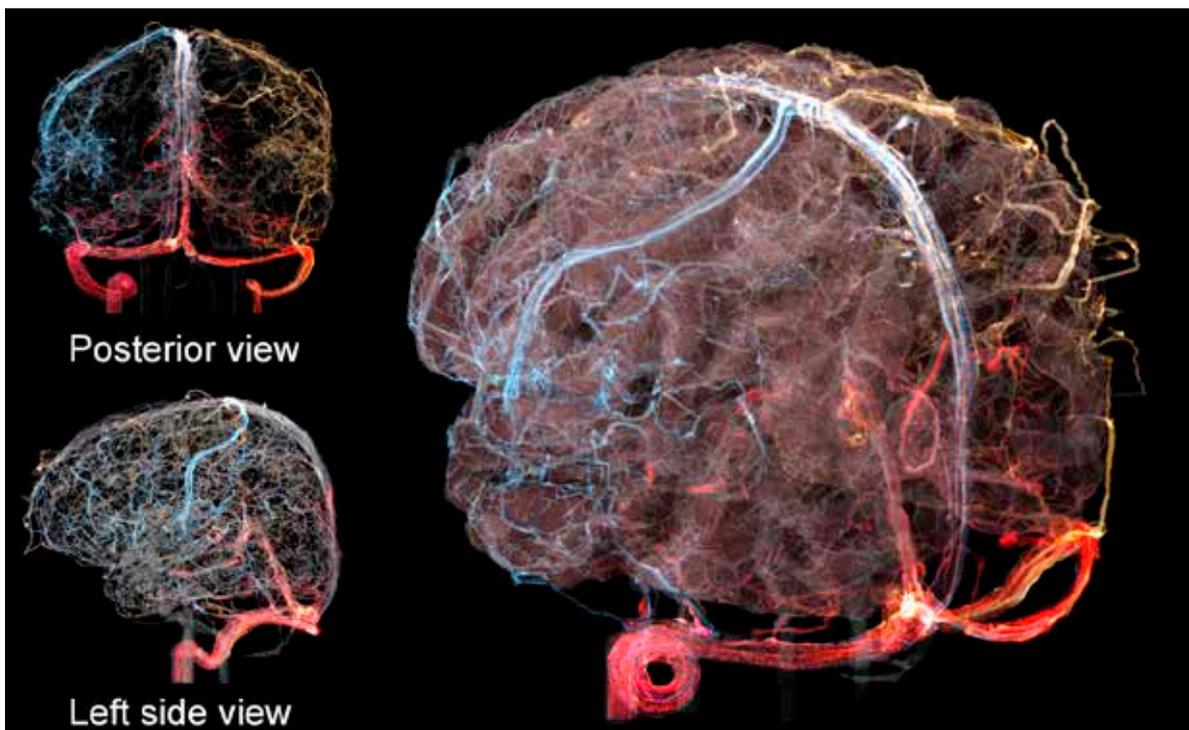


図4: 脳循環の大規模血流シミュレーション。青色は左の内頸動脈、黄色は右の内頸動脈、赤色は椎骨動脈から流入した血液を表している。

<参考文献>

- [1] Geier M. et al, The cumulant lattice Boltzmann equation in three dimensions, Theory and validation, *Computers & mathematics with Applications*, 70(4), 507-547, 2015
- [2] Bouzidi, M. et al., Momentum transfer of a Boltzmann-lattice fluid with boundaries, *Physics of fluids*, 13, 3452-3459, 2001
- [3] Miki, T. et al., Patient-specific modeling of pulmonary airflow using GPU cluster for the application in medical practice, *Computer methods in biomechanics and biomedical engineering*, 15, 771-778, 2012
- [4] Duvernoy, H.M. et al., Cortical blood vessels of the human brain, *Brain research bulletin*, 7, 519-579, 1981

Information

News & Events

令和元年 ポスト「京」重点課題1×ポスト「京」重点課題2シンポジウム 個別化医療・創薬基盤に衝撃 Personalized and Preventive Medicine, and Drug Discovery (仮題)

ポスト「京」重点課題プロジェクトは、令和元年度に最終年度を迎えました。今回のシンポジウムは、同じ生命科学分野の研究開発を担うポスト「京」重点課題1「生体分子システムの機能制御による革新的創薬基盤の構築」との合同主催で開催することになりました。

重点課題1 & 2は、環境・生体時空間的にゲノム、タンパク質、細胞、臓器の全身にわたる生命現象を理解することにより、疾病メカニズムの解明と予測を行っています。シンポジウムでは、これまでの成果、ポスト「京」で実現可能になることなどを講演する予定です。

詳細は、決まり次第ウェブサイトや本誌にてご案内します。

- 日程：2019年8月8日(木) 10:00～17:25
- 場所：秋葉原UDX GALLERY NEXT-1(4F) (東京都千代田区)
- 参加費：無料
- 定員：180名程度

第24回計算工学講演会

- 日程：5月29日(水)～31日(金)
- 場所：ソニックシティ (埼玉県さいたま市)
- Web：https://www.jsces.org/koenkai/24/

○セッション

- 日時：5月30日(木) 14:45～15:00
- 題目：全脳循環血流場の大規模並列シミュレーション
- 著者：石田 駿一、北出 宏紀、伊井 仁志、今井 陽介、和田 成生

○セッション

- 日時：5月30日(木) 15:15～15:30
- 題目：弾性管の微小変形挙動を考慮したボクセル型流体シミュレーション手法の開発
- 著者：伊井 仁志

日本機械学会 第30回バイオフィロンティア講演会

- 日程：7月19日(金)～20日(土)
- 場所：霧島国際ホテル (鹿児島県霧島市)
- Web：https://www.jsme.or.jp/conference/bioconf19/

○講演

- 日時：7月19日(金) 9:00～10:30
- 題目：医用画像に基づく被験者個別の舌力学モデルによる変形解析
- 著者：竹中 峻、吉永 司、野崎 一徳、伊井 仁志、和田 成生

○講演

- 日時：7月19日(金) 14:45～15:45
- 題目：血液中の波動伝播における赤血球の音響学的な寄与の検討
- 著者：伊井 仁志

6th International Conference on Computational and Mathematical Biomedical Engineering (CMBE2019)

- 日程：June 10-12, 2019
- 場所：Tohoku University, Katahira Campus, Sendai City, Japan
- WEB：http://www.compbimed.net/2019/

○Paper

- Title : Modeling cerebral vasculatures for analysis of the whole cerebral circulation
- Author : Hiroki Kitade, Satoshi Ii, Shunichi Ishida, Yohsuke Imai, Shigeo Wada

ポスト「京」の名称「富岳(ふがく)」に 決定

ポスト「京」の名称が「富岳(ふがく)」に決まりました。(5月23日理化学研究所発表)

- WEB：http://www.riken.jp/pr/topics/2019/20190523_1/

※上記は最新情報のため、今号内容はポスト「京」で記載しています。



文部科学省 ポスト「京」開発事業

重点的に取り組むべき社会的・科学的課題に関するアプリケーション開発・研究開発

重点課題2 個別化・予防医療を支援する統合計算生命科学

Integrated Computational Life Science to Support Personalized and Preventive Medicine

■問い合わせ先

国立大学法人東京大学医科学研究所 ヒトゲノム解析センター DNA情報解析分野
ポスト「京」重点課題2 個別化・予防医療を支援する統合計算生命科学 事務局

〒108-8639 東京都港区白金台 4-6-1 TEL : 03-5449-5615 FAX : 03-5449-5442

E-mail : icls-office@hgc.jp URL : http://postk.hgc.jp/



ポスト「京」重点課題は、国家基盤技術としてスーパーコンピュータ「京」の後継機となるポスト「京」を活用し、国家的に解決を目指す社会的・科学的課題に戦略的に取り組み、世界を先導する成果の創出を目指す文部科学省の事業です。重点課題2「個別化・予防医療を支援する統合計算生命科学」は、東京大学医科学研究所を代表機関として、ポスト「京」によって初めて実現できる「情報の技術」、「物理の原理の応用」、そして「ビッグデータの活用」により、病態の理解と効果的な治療の探索法の研究を行い、その成果を個別化・予防医療へ返す支援基盤となる統合計算生命科学を確立することを目的としています。