

令和元年6月13日現在

機関番号：33107

研究種目：挑戦的萌芽研究

研究期間：2016～2018

課題番号：16K12528

研究課題名（和文）3次元細胞シミュレーション専用機の開発

研究課題名（英文）Development of a special-purpose computer for 3D cell simulations

研究代表者

近山 英輔（Chikayama, Eisuke）

新潟国際情報大学・経営情報学部・教授

研究者番号：00525602

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 2,600,000円

研究成果の概要（和文）：本研究課題は3次元細胞シミュレーション専用機を開発することを目的とした。FPGA Artix-7-100T基板37枚を用いた。FPGA間インターコネクトはリング型、計算コア部は格子ボルツマン（LBM）回路を3次元部分空間内に配置することでモジュール間通信の律速問題に対処できた。PC上の3次元細胞シミュレーション可視化等プログラム、LBMプログラム、PC-USB間コマンド送信プログラム、FPGA側受信回路を開発した。結果的には基板実装装置の故障による遅れにより、要素モジュール設計、実装、製作に留まる結果になり、これらを完成形にし、検証、実験との比較等を行うことが課題として残された。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究課題は、生物学研究者等の数値シミュレーションの非専門家にも占有利用可能で、かつ、実験的な時系列計測データの解析に対応した3次元細胞シミュレーション専用機を開発することを目的とした。3D細胞シミュレーションをハードウェア回路化した専用機はまだ存在しないことから、この専用機が完成した場合は、オープンソースハードウェアとして公開するなどにより、蛍光イメージング等の高度化による細胞内3D計測データの解析に資することができると思われる。

研究成果の概要（英文）：This research aimed at the development of a special-purpose computer for three-dimensional cell simulations. 37 FPGA Artix-7-100T boards were used. The FPGA interconnect is a ring type, and the calculation core can cope with the bandwidth problem of inter-module communication by divide a simulation space into sub-spaces. Lattice Boltzmann Method (LBM) small circuits were designed for a three-dimensional subspace. We developed 3D cell simulation visualization program on PC, LBM program, PC-to-USB command program, and FPGA receive circuits. As a result, the delay due to the failure of the NC machines made this research project only element module designs, implementations, and assembly in part, and then making them to assemble and validations will be needed in future.

研究分野：生物物理学

キーワード：3次元細胞シミュレーション

## 様式 C-19、F-19-1、Z-19、CK-19 (共通)

### 1. 研究開始当初の背景

- (1) 蛍光イメージング等の高度化が進み、膨大な細胞内 3D/4D 時空計測データの解析が急務になっていた。
- (2) 3D 細胞シミュレータとして、米国の VCell、日本の E-cell、RICS などがあるが、3D 細胞シミュレーションをハードウェア回路化した専用機はまだ存在しなかった。

### 2. 研究の目的

- (1) 低価格で構築できる 3D 細胞シミュレーション専用機を複数個の FPGA を接続してハードウェアに実装することで開発する。また PC 側制御ソフトウェア、PC-専用計算機インターフェースも開発する。生物学研究者等の数値シミュレーションの非専門家にも占有利用を可能にすることへ向けて、完成した場合はオープンソースハードウェアとして公開することを目指すこととする。
- (2) 4D 時空計測データ解析機能について有用性を検討する。

### 3. 研究の方法

(1) 計算コア部は、FPGA Artix-7-100T (Xilinx) (図 1) を搭載する 7.3×3.5cm 基板 (trenz electronic) 37 枚、USB インターフェースは FT2232 を持つ Arty (Digilent)、電源部は LFA150F 3.3V/30A (Cosel)、VHDL 言語開発環境は Vivado 2018 (Xilinx) を用いた。37 枚の FPGA モジュール間インターコネクトはスケールアップが容易なリング型、計算コア部は単位回路として D3Q19-BGK 型格子ボルツマン (LBM) 回路、それらを 3 次元空間内に配置する回路を設計した。



図 1. Artix-7-100T

(2) この方式では並列度が高い反面、モジュール間通信が律速になるため、FPGA 1 個に割当て部分空間をさらに部分空間に分割する回路設計を行い、LBM 計算パイプラインを設計した。

(3) PC 上で稼働する 3 次元細胞シミュレーションについて、連続体方程式に粘弾性を表現する応力テンソルを設定して可視化できるプログラムを Java で開発した。さらに、LBM プログラムを Java で開発した。これにより専用機の計算結果と比較する PC 環境を構築した。Java による統合開発環境として Eclipse Neon を用いた。

(4) PC から USB インターフェースに UART 通信でコマンド送信する PC 側プログラム、FPGA 側受信回路を開発した。

### 4. 研究成果

FPGA Artix-7-100T 用の単位回路として D3Q19-BGK 型格子ボルツマン (LBM) 回路を適用するために、単位セルを 3 次元空間内に配置する回路を設計した。この回路では、並列度が高い反面、モジュール間通信が律速になるため、FPGA 1 個当たり数千ボクセルしか扱えなかった。そのため FPGA 1 個に割当て部分空間をさらに部分空間に分割する回路設計を行った。その結果、それを 1 つのストリームとする LBM 計算パイプラインを設計でき、モジュール間通信の律速問題に対処できた (図 2)。

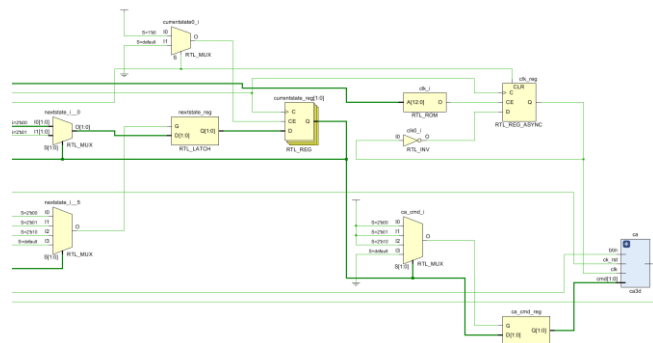


図 2. ラッチ、フリップフロップ等で構成される単位セル回路 (一部を抜粋)

PC 上で稼働する 3 次元細胞シミュレーションについては連続体方程式に粘弾性を表現する応力テンソルを設定して可視化等も行ふことのできるプログラム、LBM プログラムを Java で開発し専用機の計算結果と比較する PC 環境を構築した。共焦点レーザー走査型顕微鏡による植物細胞 3 次元再構築データを初期座標としてシミュレーションを行い、可視化プログラムで表示している例を示す (図 3)。応力テンソルは濃度と応力の関数として実装するプログラムを構築した。この系を試した場合、2 成分では濃度と質量流が振動する系を構築することは困難であることがわかった。そのため、現在では、応力テンソルの速度式を連続体の基礎方程式に追加する方向性を検討すべきであるという結論に至っている。

PC から USB インターフェースに UART 通信でコマンド送信する PC 側プログラム、FPGA 側受信回路を開発した。PC 側では Java の COM ポート通信プログラムを用いて USB 経由でコマンドを送信することができた。FPGA 受信回路の実装後、動作シミュレーションした結果を示す (図 4)。

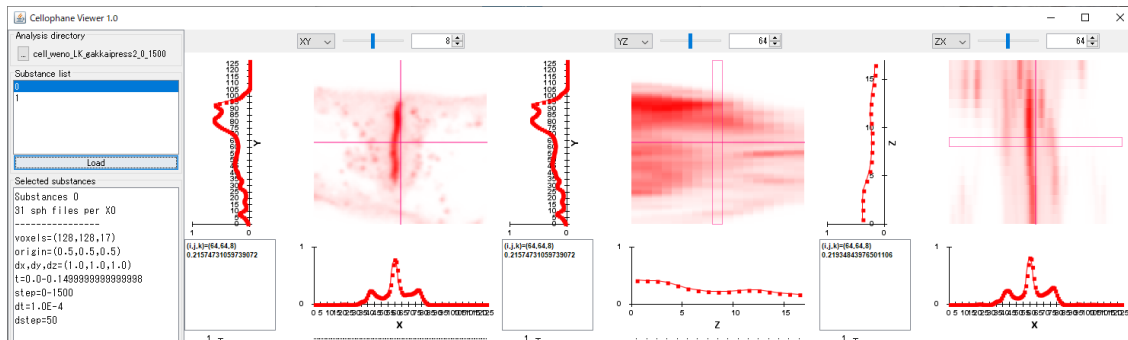


図 3. 専用機の計算結果と比較する PC 環境の構築。植物細胞 3 次元再構築データの例。

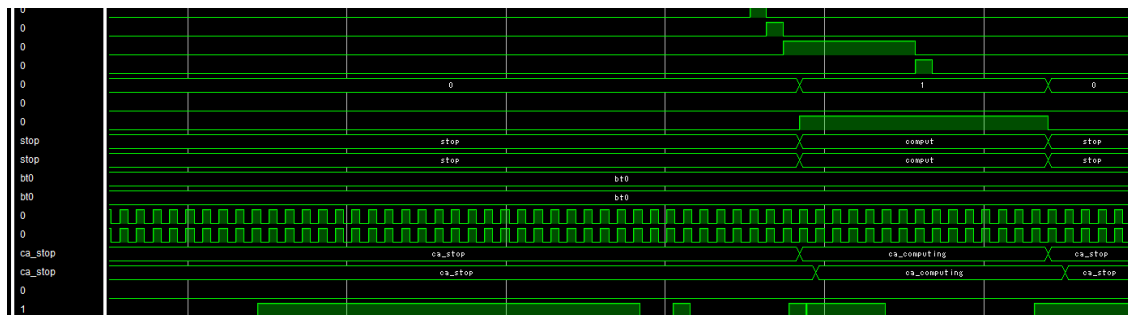


図 4. PC から FPGA へコマンド送信する FPGA 受信回路動作確認結果の例（シミュレーション時のロジックの一部を表示）

結果的には、基板実装装置が適切に使用できないことによる計画変更により、研究実施の遅れを解消できず、要素モジュールの設計、実装、製作に留まる結果になった。

申請時の計画では、低価格の Altera 社 Cyclone III を用いて 1 基板 9 ノード機で多数の基板を作成して 1 基板あたり 2 次的に東西南北の FPGA をインターコネクトする計画であったが、計画変更による研究予算と開発環境ライセンス費用の関係、Altera 買収などの不安要素を考慮し、Xilinx 社の Spartan 6 に変更してコンフィギュレーション用 IC、USB 用 IC、USB コネクタ、JTAG 用配線、各種電源用レギュレーターなどの部品を含む回路設計と基板パターン設計を進めていた。しかし当初予定していた基板実装機が故障して 0.1~0.2 mm オーダーで精度よくパターン切削できない状態になり、研究実施が大幅に遅れることになった。結局、基板実装が間に合わなくなる恐れが出現したため、FPGA を小ロジックサイズの Spartan 6 から、比較的ロジック数が大きい Artix-7-100T かつ最小モジュール化した基板を複数枚発注することに変更した。このことでモジュール数を減らし、リング型にインターコネクトする設計に変更することになった。しかし、VHDL の回路設計においては、Xilinx ISE から新しい Vivado に変更を余儀なくされ、使用方法などの調査も必要になり、またそれまでの計画変更などにより予算が不足し、最終年度では当初予定の計算能力を出す FPGA の数の確保が困難になった。結果的には、要素モジュールの設計、実装、製作に留まる結果になったため、これらを組み立てて完成形にし（図 5 は構築途中の写真）、検証、実験との比較等を行うことが課題として残された。



図 5. 専用機（構築途中）

## 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕（計 0 件）

〔学会発表〕（計 0 件）

〔図書〕（計 0 件）

〔産業財産権〕

○出願状況（計 0 件）

名称：

発明者：

権利者：

種類：

番号：

出願年：

国内外の別：

○取得状況（計 0 件）

名称：

発明者：

権利者：

種類：

番号：

取得年：

国内外の別：

〔その他〕

ホームページ等

## 6. 研究組織

(1) 研究分担者

なし

(2) 研究協力者

なし

※科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属されます。