

大規模計算のための HIFU シミュレータの開発

沖田浩平^{†1} 高木周^{†2} 松本洋一郎^{†3}

低侵襲治療の一つとして注目されている集束超音波治療において、超音波治療機器の設計開発および制御や術前の治療計画等の支援を目的に、生体内の超音波伝播過程を再現する HIFU シミュレータを開発している。本論文では、MHz オーダの超音波伝播シミュレーションに求められる高精度かつ大規模な計算を実現するための工夫について述べる。また、京コンピュータにおいて 24576 ノード利用時に 20% 以上の実行性能を引き出すに至った HIFU シミュレータのチューニング過程で得られた知見について述べる。一方、チューニングされた HIFU シミュレータの並列性能評価として weak scaling を行った。その結果、12288 ノード利用時の実行時間が 1 ノード利用時に比べて約 10% の増加であり、HIFU シミュレータの京コンピュータにおける並列性能が高いことを確認した。

Development of High-Intensity Focused Ultrasound Simulator for Large-scale Computing

KOHEI OKITA^{†1} SHU TAKAGI^{†2}
YOICHIRO MATSUMOTO^{†3}

High-intensity focused ultrasound (HIFU) has been of interest for the noninvasive treatment deep cancers. HIFU simulator, which reproduces ultrasound propagation through the body, has been developed for the assistances of the development and control of HIFU devices and the support of preoperative planning. In the present study, the solutions to achieve the numerical accuracy of the ultrasound simulation and the generation method of input data required for large-scale computing are mentioned. After the tuning process of HIFU simulator on the K computer, the effective performance takes over 20% by using 24576 nodes of the K computer. As the result of the weak scaling, the elapse time at 12288 nodes is only 10% longer than that at 1 node. So the HIFU simulator performs on the K computer efficiently.

1. はじめに

三大疾患の一つである癌の治療において、強力集束超音波 (High Intensity Focused Ultrasound : HIFU) の焦点で組織を加熱凝固によって壊死させる治療法 (HIFU 治療) が注目されている¹⁾。既に前立腺腫瘍や子宮筋腫といった体表に近い腫瘍に対する超音波治療機器は承認され、治療に用いられている。一方で、脳腫瘍や肝腫瘍等の深部の腫瘍に対して臨床試験が行われつつある。これらの腫瘍に対する HIFU 治療が実現されれば、切開手術が不要になり、治療・入院期間の短縮等による患者の負担減少し、医療費の削減や社会の活性化が期待される。

深部の腫瘍治療の際に問題となるのが、骨などの各臓器の界面における超音波の反射・屈折による焦点のずれと拡散である。そこで、超音波がターゲットに集束するように HIFU 装置を制御するために体の中をどのように超音波が伝播するかを知る必要がある。

このような背景の下、アレイ型超音波発信装置の制御、施術前の検討および超音波発信装置の設計等の支援を目的として、多媒質場を過ぎる超音波の伝播挙動、温度分布および加熱凝固領域の変化を再現するシミュレータの開発を

行っている^{2), 3)}。

本研究では、これまでに HIFU シミュレータ (ZZ-HIFU) の開発を行っており、図 1 はシミュレーションに至るまでの入力データの流れを示している。CAD で定義された治療機器等は符号付き距離関数 (Signed Distance Function : SDF) によって陰関数表現する。一方で、CT や MRI で得られる生体情報から生体のボクセルデータを作成する。これらを入力データとして、超音波発信装置から治療部位までの多媒質からなる非一様な場を過ぎる超音波の伝播をシミュレーションする。

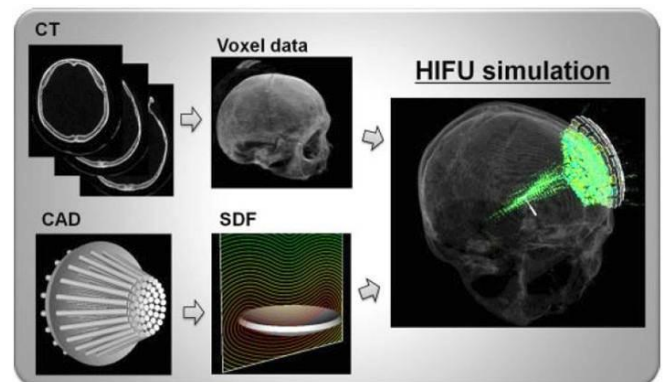


図 1 HIFU シミュレータの概要

Figure 1 Schematic diagram of the data flows to HIFU simulation.

*†1 日本大学

Nihon University

†2 東京大学

The University of Tokyo

†3 東京大学

The University of Tokyo

治療で用いられる超音波の周波数は MHz オーダであり、仮に 2MHz として、生体中の軟組織の音速を 1500m/s とすると波長が 0.75mm となる。この 1 波長を 15 格子点で解像すると、格子幅は $\Delta x=0.05\text{mm}$ となる。よって、超音波発信装置を含む頭蓋骨全体や体幹の一部における超音波の伝播挙動を解析するためには、 $300 \times 300 \times 300\text{mm}$ の計算領域に対して $6000 \times 6000 \times 6000=216\text{G}$ 格子点が必要であり、倍精度の 1 変数あたり 1.7TB のメモリが必要となる。解析のために仮に 32 変数を用いるとすると、必要なメモリ容量が 54.4TB となるため、通常の計算資源では計算を実行することが難しく、京のような超並列のスーパーコンピュータの利用が必要不可欠となる。この規模の解析を京で実行する際には、8000 ノード (64000 コア) を利用することによって約 30 時間で実行できると予想され、京利用によって高精度な解析が可能となる。

本論文では、HIFU シミュレータにおける大規模計算のための大規模な入力データ作成方法と京コンピュータ用計算コード ZZ-HIFU-K の開発におけるチューニングの要点について述べ、京コンピュータを利用した並列性能の評価結果について示す。

2. 基礎方程式

媒質 k の密度を ρ_k 、体積率を f_k とすると、局所均質媒体の密度は $\rho_m = \sum_k \rho_k f_k$ と表される。また、密度 ρ と圧力 p と断熱音速 c_s の関係と音響マッハ数 $M = u/c_s$ が小さいという仮定の下で、質量保存式は次のようになる。

$$\frac{1}{\rho_m c_{sm}^2} \frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\partial u_j}{\partial x_j} = 0 \quad (1)$$

ここで、局所均質媒体の断熱音速 c_{sm} は次式で与えられる。

$$\frac{1}{\rho_m c_{sm}^2} = \sum_k \frac{f_k}{\rho_k c_{sk}^2} \quad (2)$$

一方、運動方程式は

$$\rho_m \frac{\partial u_i}{\partial t} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left\{ \zeta_m e_{kk} \delta_{ij} + 2\mu_m \left(e_{ij} - \frac{1}{3} e_{kk} \delta_{ij} \right) \right\} \quad (3)$$

となり、 ζ_m および μ_m はそれぞれ体積粘性およびせん断粘性で、速度勾配テンソル e_{ij} は次式で表される。

$$e_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (4)$$

以上の式に加えて媒質の状態方程式として Tait 式を解くことで生体内の超音波伝播を再現している。また、本研究では、温度場の時間変化を得るために粘性散逸を生成項とした Bio-Heat 方程式、媒質の熱変性をモデル化した疑似自由エネルギーの時間発展を行うための Cahn-Hilliard 式を解い

ているが、詳細は文献^{2),3)}を参考にされたい。

3. 数値計算法

3.1 基礎方程式の離散化

超音波伝播を高精度に再現するためには、数値的な波の減衰および位相誤差をできるだけ小さくする必要がある。とりわけ、超音波の波長に比べて計算領域が大きくなる大規模計算では、時間発展に伴うこれらの誤差の影響が大きくなる懸念される。このため、本研究では物理量をスタッガード配置して基礎方程式を空間 $2m$ 次の中心差分法によって離散化し、FDTD 法^{4),5)}を基に時間積分することで、解を時間発展している。

空間 $2m$ 次の補間と差分は、Lagrange 補間により、 $N=2m$ として、それぞれ次のように表される⁶⁾。

$$\tilde{f}(x_{i+1/2}) = \sum_{k=i-N/2+1}^{i+N/2} \phi_k(x_{i+1/2}) f(x_k) \quad (5)$$

および

$$f'(x_{i+1/2}) = \sum_{k=i-N/2+1}^{i+N/2} \phi'_k(x_{i+1/2}) f(x_k) \quad (6)$$

ここで、補間係数 ϕ_k および差分係数 ϕ'_k は

$$\phi_k(x) = \frac{\pi(x)}{(x-x_k)\pi'(x_k)}, \quad \phi'_k(x) = \frac{(x-x_k)\pi'(x) - \pi(x)}{(x-x_k)^2 \pi'(x_k)} \quad (7)$$

であり、 $\pi(x)$ および $\pi'(x)$ は、

$$\pi(x) = \prod_{m=1}^N (x-x_m), \quad \pi'(x) = \sum_{n=1}^N \prod_{m=1, m \neq n}^N (x-x_m) \quad (8)$$

である。これら $2m$ 次精度の補間と差分の演算は、繰り返し文を用いて計算コードに実装されるとともに、とりわけ 4, 6 および 8 次精度に対しては、繰り返し文を展開した形式で実装されている。

一方、FDTD 法を基に圧力および速度を $p^n = p(t_0 + n\Delta t)$ および $u_i^{n+1/2} = u_i\{t_0 + (n+1/2)\Delta t\}$ のように定義して、以下のように時間発展を行った。まず、式(3)において応力の各成分を次式より求める。

$$\sigma_{ij}^n = -p^n \delta_{ij} + \left(\zeta_m - \frac{2}{3} \mu_m \right) e_{kk}^{n-1/2} \delta_{ij} + 2\mu_m e_{ij}^{n-1/2} \quad (9)$$

得られた応力を用いて、速度を更新する。

$$u_i^{n+1/2} = u_i^{n-1/2} + \frac{\Delta t}{\rho_m^n} \frac{\partial \sigma_{ij}^n}{\partial x_j} \quad (10)$$

次に、式(3)より圧力の更新は次式のようになる。

$$p^{n+1} = p^n - \Delta t \rho_m^n c_{sm}^n \frac{\partial u_i^{n+1/2}}{\partial x_i} \quad (11)$$

以上のステップを繰り返すことで、速度と圧力の時間発展を行った。

3.2 大規模入力データの作成

本研究では、生体中を伝播する超音波を高精度に再現するために、超音波の波長を十分に解像できる格子幅で、直交等間隔格子によって計算領域全体を離散化している。また、計算負荷が計算領域内で等しいため、ロードバランスが均一な領域分割によるプロセス並列を容易に行うことができる。ただし、格子と一致しない CAD で形状が定義されたトランスデューサや診断で得られた医療画像データから、計算に適切な入力データを作成する必要がある。

本研究では、図 1 に示すように、CAD で定義された形状をボリュームデータである SDF のゼロ等値面として表現している。この際、V-SDFlib⁷⁾を利用することで、容易に SDF を得ることができる。一方、医療画像データは、2次元の画像データを重ねることで3次元のボリュームデータとすることができる。しかし、計算領域の座標系と必ずしも一致せず、また、解像度が計算格子と異なるため、tri-linear 補間によって計算格子の解像度に合うように入力データを作成している。また、画像データが持つ輝度情報をそのまま利用する際には問題ないが、臓器ごとにセグメンテーションが必要な場合には、別途対応となる。

これらの入力データの作成では、直交等間隔格子を用いているため、領域分割された小領域ごとに入力データの作成を行うことができ、一度に計算領域全域を対象に行う必要がない。そのため、 10^9 オーダの計算格子の入力データも、計算ノードと同等のメモリを持ったワークステーションによって、領域ごとに分割された入力データとして作成することができる。当然、並列計算機を利用して入力データを作成することも可能である。

4. 超音波治療シミュレータの次世代計算機への実装

4.1 並列化手法

これまで開発を進めてきた超音波治療シミュレータ (ZZ-HIFU) は、Fortran90 に準拠して実装されており、MPI を用いた領域分割によるプロセス並列に加えて OpenMP を用いたスレッド並列によってハイブリッド並列化されている。また、理化学研究所情報基盤センターの RICC の最大 8192 並列までスケールし、大規模並列計算が効率的に実行可能であることが確認されている。以下では、この ZZ-HIFU を「京」コンピュータ用に ZZ-HIFU-K としてプログラムのチューニングを行った過程で得られた要点について述べる。

4.2 単体チューニング

チューニングの前段階として、「京」でのコンパイルとプロファイラによって、オリジナル版 ZZ-HIFU の単体性能を評価した。プロファイラの結果、高次精度の中心差分を複

数の変数に対して行うループおよび条件分岐を含むループがホットスポットであることが分かった。そこで、チューニングの第 1 段階として、「京」1 コアを利用した計算コードの高速化を目的として、以下の項目を実施した。

- 配列を用いた演算による if 条件文の削減
- if 条件文において else 文の挿入による SIMD 化の促進
- 繰り返し行われる演算を配列に保存することで総演算量の削減
- ループ分割によるキャッシュヒット率の向上
- コンパイルオプションの検討

これらのチューニングによって、オリジナル版で 20 秒程度要する演算がチューニング版で 15 秒程度と大幅に高速化することができた (単体チューニングでは、実行性能は計測していない)。

4.3 ノード内スレッド並列

チューニングの第 2 段階として、「京」1 ノードの 8 コアを利用してノード内スレッド並列による性能向上を行った。その結果、前述の単体チューニングにおいて、配列を利用した if 条件文や総演算量の削減が 1 コアでは性能向上に有効であったが、8 コア利用時には配列アクセスがボトルネックとなりノード内スレッド並列による性能向上が十分に得られないことが分かった。この結果を踏まえて、単体チューニングで実施した項目の有効性をノード内並列時において再検討するとともに、以下の項目をさらに実施した。

- 演算量の削減を目的として、演算のアルゴリズムレベルでの見直し
- 3 重ループにおける外側ループの部分融合によるキャッシュヒット率の向上

(例：

```
do k=ksta, kend ; do j=jsta, jend; do i=ista, iend
    処理①
enddo; enddo; enddo
do k=ksta, kend ; do j=jsta, jend; do i=ista, iend
    処理②
enddo; enddo; enddo
依存しない処理①と処理②を部分融合。
do k=ksta, kend ; do j=jsta, jend
    do i=ista, iend
        処理①
    enddo
    do i=ista, iend
        処理②
    enddo
enddo; enddo
)
```

- OpenMP 指示行によるスレッド並列からコンパイラの自動並列への移行と自動並列の促進 (例: `!ocl temp` 指示行の挿入)
- スレッド並列に関するコンパイルオプションの検討 (例: `-Kvisimpact,ocl,ilfunc,preex,array_private,auto,simd=2`)

これらのチューニングによって、1ノードの8コア利用で空間差分近似が6次精度の場合に23.6%の実行性能が得られるようになった。これは、演算量に比べて配列アクセスが多いアプリケーションとしては比較的高い実行性能である。また、空間差分の近似精度による実行性能への影響については、8次精度の場合に実効性能が23.0%であり、演算量の増加に伴って計算時間が増加し、実行性能は低下する結果となった。

4.4 ノード間プロセス並列

チューニング第3段階として、ノード間通信によるプロセス並列を行った。ZZ-HIFU-Kでは、前述のとおり、3次元の計算領域を領域分割することでプロセス並列を行っており、各領域の一部分を隣接する領域とMPIによってデータ通信する。「京」コンピュータのTofuネットワーク⁸⁾では、このような隣接するノード間のデータ通信が効率的に行われる。しかし、オリジナル版で用いていた派生データ型によるMPI通信では、「京」には不適切であったため、コード内で通信用にバッファ配列を確保してMPI通信する方式に変更した。また、隣接する6ノードとのデータ通信は、各方向に2つずつを非同期で行っている(通信の隠蔽は行っていない)。これらによって、ノード間の通信性能が大幅に向上し、「京」のマルチコアとTofuネットワークの特性を有効利用したノード間のデータ通信が可能になった。その結果、試験運用で利用可能な最大ノード数24,576ノード(196,608コア)利用時に20.9%の実行性能が得られた。

5. 並列性能の評価結果

ZZ-HIFU-Kの並列性能の評価結果として、Weak scaling時の実行時間(Elapse time)、演算時間(Calculation time)および通信時間(Communication time)の計測結果を図2に、また、このときの実行性能を図3にそれぞれ示す。ここで、問題規模は1ノード(8コア)当たり $304 \times 304 \times 304$ 格子点で100時間ステップの計算である。ただし、前述の24,576ノード(196,608コア)利用時の結果は計測時期が異なるため図には含まれていない。また、空間差分近似は6次精度である。図2より、ノード数が増えるにつれて実行時間が増加する傾向があるが、計算時間は増加しておらず、その要因は通信時間の増加によるものであることがわかる。ま

た、通信時間のノード数による変動は、計算実行に提供されたノード構成の影響であると考えられる。一方、図3より、ZZ-HIFU-Kの実行性能としては98304コア(12288ノード)利用時においても実行性能が21.2%と、ノード拡大による性能低下が比較的小さく良好な結果が得られた。これは、1ノードの実行性能23.6%に比べると2.4%の低下であるが、6方向のデータ通信が生じる27ノード(3x3x3)利用時の実行性能22.7%に比べると1.3%の低下に抑えられており、「京」のTofuネットワークが効率的に利用できていると考えられる。

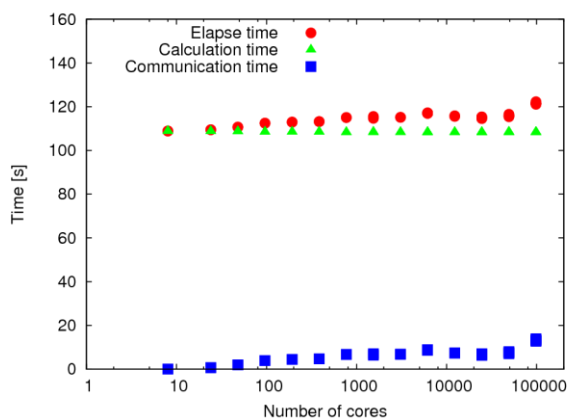


図2 ZZ-HIFU-Kのweak scalingにおけるコア数に対する実行時間、演算時間および通信時間

Figure 2 Elapse time, calculation time and communication time as function of number of cores in the weak scaling of ZZ-HIFU-K.

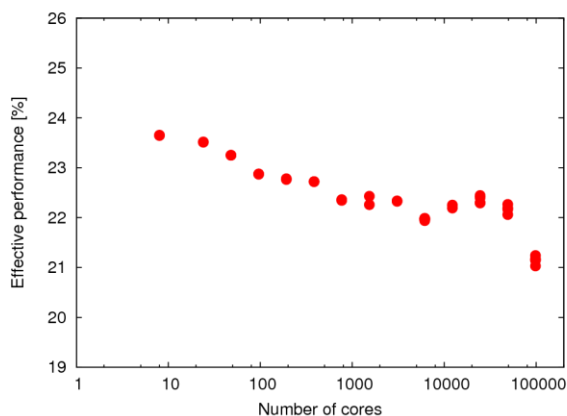


図3 ZZ-HIFU-Kのweak scalingにおけるコア数に対する実行性能

Figure 3 Effective performance as function of number of cores in the weak scaling of ZZ-HIFU-K

6. おわりに

HIFUシミュレータの概要、大規模入力データの作成方法および京コンピュータ用計算コードZZ-HIFU-Kの開発

におけるチューニングの要点について述べ、京コンピュータを利用した並列性能の評価として **weak scaling** を実施した。その結果、1 ノードの実行性能として 23.6% という演算量に比べて配列アクセスが多いアプリケーションとしては高い実行性能を得ることができた。また、24,576 ノード (196,608 コア) 利用時においても実行性能で 20.9% と性能の低下が少なく、「京」の **Tofu** ネットワークが効率的に利用できていることを確認した。

HIFU シミュレーションを実施する際に必要となる前処理および後処理プログラム群の「京」のコンパイラに対応し、計算の入力データが作成できること、また、この入力データを読み込んで実際の計算を行い、得られた出力データが解析できることを確認している。

謝辞 理化学研究所情報基盤センターの青山幸也氏にはチューニングに関して多大なご尽力を頂きました。また、本研究を遂行するに際して、理化学研究所情報基盤センターの **RICC** および計算科学機構の京コンピュータを利用させていただきました。本研究の一部は、文部科学省次世代生命体統合シミュレーションの研究開発プロジェクトの支援を受けました。謹んで感謝の意を表します。

参考文献

- 1) Duck, F. A. et al.: *Ultrasound in Medicine*, IoP (1997)
- 2) Okita, K. et al.: *Development of High Intensity Focused Ultrasound Simulator for Large-scale Computing*, *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, Vol.65, pp.43-66 (2011).
- 3) Okita, K. et al.: *Numerical Simulation of the Tissue Ablation in High Intensity Focused Ultrasound Therapy with Array Transducer*, *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, Vol.64, pp.1395-1411 (2010).
- 4) Yee, K. S.: *Numerical Solution of Initial Boundary Value Problems Involving Maxwell's Equations in Isotropic Media*, *IEEE Trans. Antennas Propag.*, pp.301-307 (1966).
- 5) 佐藤雅弘: *FDTD 法による弾性振動・波動の解析入門*, 森北出版 (2003)
- 6) 梶島岳夫: *乱流の数値シミュレーション*, 養賢堂 (1999).
- 7) **V-SDFlib**,
http://vcad-hpsv.riken.jp/jp/release_software/VSDFlib/
- 8) 安島ら: *スーパーコンピュータ「京」のインターコネク トofu*, *FUJITSU*. 63, 3, pp.260-264 (2012).