

## 可変構造計算機による細胞シミュレーションの研究

●小長谷明彦<sup>1)</sup> ◆丸山便<sup>2) 1)</sup>

東北先端科学技術大学院大学知識科学研究科<sup>2)</sup> 筑波大学機能工学系

### 研究の目的と進め方

本研究は、細胞シミュレーションに必要なアルゴリズムの一部を部分的にハードウェアすることにより、汎用マイクロプロセッサの1,000倍以上の性能でシミュレーションする方式を確立することを目的とする。

### 2001年度の研究の当初計画

細胞内のタンパク間相互作用は非常に複雑であり、生化学反応による濃度の時間的変化だけでなく、拡散による空間的な局所性についても考慮する必要がある。このような観点から、タンパク質の空間的な拡散過程をシミュレーションするための方法として、セルラオートマトンに着目し、FPGA用ハードウェアライブラリの構築とセルラオートマトン専門言語ならびにコンパイラの開発を行なうこととした。

### 2001年度の成果

FPGA用ハードウェアライブラリに関しては、FPGA内に格納できるメモリサイズよりも大きな格子サイズを扱おうための仮想メモリ機構を実現した。また、セルラオートマトン専用言語としてC言語の仕様に従った記述言語を開発し、ハードウェア記述言語への自動変換を行うコンパイラの開発を行った。これにより、FPGA等のハードウェアに関する知識のない利用者でも容易にFPGAシステムを利用し、セルラオートマトンシステムを構築することが可能となった。ランダム

ウォークをする分子が反応しあうモデル(128×128の大きさの格子)において、1秒当たり180,000世代をいう非常に高速な計算が実現可能であることが確認できた。

### 国内外での成果の位置づけ

FPGAシステムについては、配列解析に商用システムが販売されているが細胞シミュレーションへの応用例は他には知られていない。

### 達成できなかったこと、予想外の困難、その理由

ランダムウォークを行うモデルにおいては、上記のセルラオートマトンとは、やや異なる分子の移動の制約条件が必要となるため、現在のセルラオートマトン専用言語では記述できない。

### 今後の課題

3次元のセルラオートマトンへの対応。

### 成果公表リスト

1. Yoshiki Yamaguchi, Tsutomu Maruyama and Akihiko Konagaya : An Approach for High Speed Homology Search with FPGAs, Knowledge-Based Intelligent Information Engineering Systems and Allied Technologies KES' 2001 (2001).
2. Yoshiki Yamaguchi, Tsutomu Maruyama and Akihiko Konagaya: High Speed Homology Search with FPGAs, Pacific Symposium on Biocomputing PSB2002, (2002).