

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 29 年 6 月 7 日現在

機関番号：14401

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2014～2016

課題番号：26730035

研究課題名(和文)大規模汎用生体モデル開発のための高性能シミュレーションクラウド

研究課題名(英文)High-performance simulation cloud for development of large-scale general biophysical model

研究代表者

置田 真生 (Okita, Masao)

大阪大学・情報科学研究科・助教

研究者番号：50563988

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 2,900,000円

研究成果の概要(和文)：並列実行可能な汎用生体シミュレータFlintおよびそのクラウドサービスFlint K3の実行効率を改善し、超大規模な生体モデルのシミュレーションを実用的な実行時間で実現した。具体的には、自動並列化に際して、2階層グラフ方式に基づく並列化効率の向上、負荷分散の改善、計算順序とデータレイアウトの最適化の3つの手法を開発した。
2,800万以上の連立常微分方程式からなる視覚野脳神経細胞モデルに対してシミュレーションを行い、並列化効率98.7%、速度向上27.4倍の性能を達成した。

研究成果の概要(英文)：We improved the efficiency of Flint and Flint K3, a parallel general biophysical simulator and a cloud service powered by Flint respectively, and accomplished a practical simulation of large-scale biophysical model.
Our contributions are three auto-parallelization refinement techniques: improving parallel efficiency based on two-layers graph structure, load balancing, and optimizing calculation order and data layout.
For a simulation of a 2D visual cortex neuron model that consists of more than 28 million ODEs, our method achieved 98.7% of parallel efficiency and 27.4 times speed-up.

研究分野：並列ソフトウェア開発

キーワード：並列・分散処理 生体シミュレーション 自動並列化

1. 研究開始当初の背景

それまでの研究成果として、多階層生体モデル記述言語 PHML で記述された生体モデルをシミュレーションするための生体シミュレータ Flint[Y13]がある。Flint の主な特徴は汎用性および自動並列化である。PHML で記述されたモデルは複数の生体ドメインに渡るため、Flint は特定の生体ドメインに依存しない汎用的なシミュレーション手法を提供する。さらに、多階層からなる生体モデルは必然的に大規模化するため、生体モデルを自動的に分割し、並列実行環境(マルチコア CPU あるいは GPU、PC クラスタ)ごとに最適化した並列シミュレーションを提供する。

Flint は PhysioDesigner プロジェクトの一部として公開されており、自由にダウンロードできる。さらに Flint をクラウドサービスとして利用できるシステム Flint K3 (図 3) のプロトタイプ版が当時開発中であった。このプロトタイプ版は利用できる資源に制限があり、並列実行に未対応であった。

数十万~数百万モジュールの三次元心筋細胞モデルの開発およびシミュレーションに取り組むにあたり、モデルの大規模化に伴う Flint の課題が 2 つ浮上した。

第 1 は、並列化の前処理が性能ボトルネックとなる点である。Flint は各モジュールを構成する数式を全て抽出し、数式を頂点、式間の依存関係を辺とする依存グラフとしてモデルを解釈する。自動並列化においてはこのグラフをもとにモデルを分割し、負荷分散やメモリ参照の効率化などの最適化を施す。大規模なモデルでは依存グラフの頂点数が数千万~数億以上に達し、生成および分割のためのコストが大きい。

第 2 は、複数のシミュレーション実行のスループット向上が重要となる点である。生体モデルの新規開発においては、モデルを変更しながらシミュレーションを繰り返す試行錯誤が必要である。パラメータスイープのように複数のシミュレーションを同時に実行できる場合も多く、各シミュレーションを並列化するだけでなく、複数のシミュレーションを並列に実行することも有用である。この場合、有限の計算資源を用いて得られるスループットを最大化するために、シミュレーションごとの資源割り当てを適切に定める必要がある。

2. 研究の目的

本研究では、数百万モジュールの生体モデルの開発をシミュレーションの面から支援することを目標とし、次の 2 つの課題に取り組む。

(1) Flint における並列処理のスケーラビリティを向上

- 軽量の生体モデル分割手法の開発: 1 回のシミュレーション実行を実用時間内に完了することを目指して、現行の処理におけ

る性能ボトルネックを解消する。

- (2) Flint K3 におけるスループットの向上
- Flint K3 の並列実行対応: (1) で開発した手法を Flint K3 に組み込む
 - 資源利用効率の自動最適化: クラウド環境において複数のシミュレーションを同時実行する場合に、最も効率的な資源割り当てを自動的に決定するシステムを開発する。

3. 研究の方法

本研究を以下の 3 段階に分けて遂行した。

(1) Flint における単一シミュレーションのスケーラビリティ向上

(2) 超大規模生体モデルのシミュレーションに対する Flint の実証

(3) Flint K3 における複数シミュレーションのスループット向上

まず(1)においては、生体モデル分割を異なる粒度で 2 段階に分けて行う手法を開発する。PHML では生体モデルを階層的なモジュールのネットワークとして記述する。そこで、まず生体モデルをモジュールを頂点とする粗粒度グラフとして解釈し、この粗粒度グラフに対してグラフ分割アルゴリズムを用いて生体モデルを分割する。この際、モジュールの階層構造を利用することで効率的なグラフ分割を目指す。次に、分割した各サブグラフを元に細粒度グラフを作成し、現行の Flint が備える最適化手法を適用する。

次に(2)においては、生体機能分野の研究者の協力を得て超大規模な生体モデルを作成し、そのシミュレーションを現実的な時間内に実行出来る方法を確認する。実験を通じて Flint の性能面における課題を洗い出し、さらなる改善方法を検討する。

最後に(3)においては、(1)および(2)で開発した新方式の Flint を Flint K3 に組み込んだうえで、複数シミュレーションを同時実行する場合のスループットを最大化する手法の完成を目指す。具体的には、シミュレーション対象となる生体モデルの規模とネットワーク構造から資源量を推定し、そのシミュレーションに適切な資源を自動的に割り当てるシステムを開発する。

4. 研究成果

(1) 単一シミュレーションのスケーラビリティ向上に関する主な成果。以下の 3 つの改善手法を開発した。

2 階層グラフ方式に基づく生体モデル分割

並列実行における負荷分散の改善

計算の実行順序およびデータレイアウトの自動最適化

まずは 3.(1) で述べた方法を実現したものである。この手法を用いることで、並列化の前処理を大幅に削減し、大規模な生体モデルに対するシミュレーション・プログラムの生成を高速化できた(図 1)。具体的には

約 460 万個の常微分方程式を含むモデルに対するプログラムの生成において、主記憶使用量を 1/5 に削減し、従来は 32 並列実行時に高々 2.7 倍の速度向上しか得られなかったところを改善後は約 15.6 倍の速度向上を得られた。

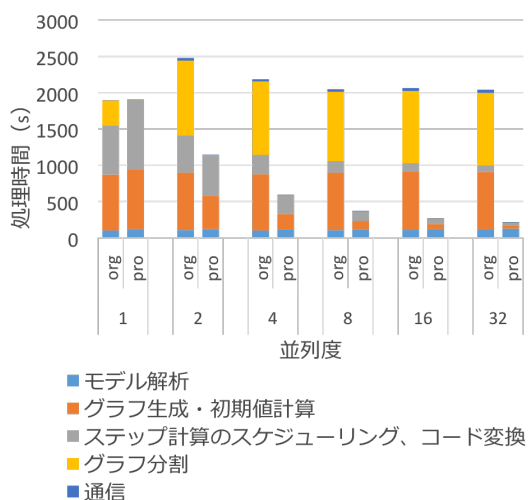


図 1 プログラム生成処理の高速化

および は生成されるシミュレーション・プログラムの実行効率を改善する手法である。

並列実行の効率向上のためには、通信量が最小かつプロセッサ間の計算負荷が均等になるような分割が望ましい。Flint のシミュレーションでは特に計算負荷の均等化が重要であると判明したため、負荷均衡を重視するよう分割手法を改善した()。結果、16 台からなる PC クラスタでの実行時に 1.22 倍の速度向上を得た。

さらに、プロセッサ単位の処理時間を解析すると、主記憶へのアクセス時間が支配的であった。そこでキャッシュ効率を最大化するような計算の実行順序とデータレイアウトを自動的に求め、シミュレーション・プログラムに反映する手法を開発した()。結果、CPU 実行時に最大 1.57 倍、GPU 利用時には最大 1.6 倍の高速化を達成した。

(2) 超大規模生体モデルのシミュレーションに関する成果。実際に生体機能分野の研究で利用する生体モデルを PHML で記述した。このモデルは視覚野を構成する脳神経細胞ネットワークを模したもの(図 2)で、数学的には 2,800 万個以上の連立方程式で構成される大規模なものである。並列実行を用いずにこのモデルをシミュレーションした場合には、170 時間以上を要する。これを現実的な時間内に実行出来る方法として、上記 および を開発・検証した。その結果、処理全体のうち 98.7%を並列化でき、シミュレーション時間を 6.2 時間(40 並列の場合)に削減できた。生体機能分野の研究者から、この時

間であれば繰り返し実行に耐えられるとの見解を得た。

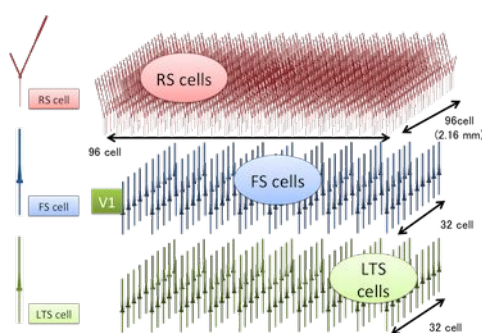


図 2 視神経回路網モデル

(3) Flint K3 における複数シミュレーションのスループット向上。Flint K3 を拡張し、実行前に生体モデルの特徴(主にモデルを構成するモジュール数)を解析し、最小二乗法による予測を用いて適切な使用計算機数を推定してシミュレーションを実行する機能を開発した。これにより、計算機資源の無駄な利用を削減し、複数のシミュレーションを効率良く実行することが期待できる。

上記(1)～(3)の研究成果を Flint K3 に反映し、Web サービスとして一般に公開している。ただし、一部の機能は現在ベータ版として利用者を限定している。

<引用文献>

[Y13] Y. Asai, T. Abe, H. Oka, M. Okita, T. Okuyama, K. Hagihara, S. Ghosh, Y. Matsuoka, and H. Kitano. "A versatile platform for multilevel modeling of physiological systems: Template/instance framework for large-scale modeling and simulation". Proc. EMBC'13, (2013-07)

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[学会発表](計4件)

- 角田優貴, 置田真生, 萩原兼一. "数式の依存グラフを仕様とする OpenMP プログラムのメモリ参照効率向上". 情報処理学会研究報告, 2016-HPC-155, (2016-08)
- 米尾謙史, 置田真生, 萩原兼一. "並列分散処理基盤 Apache Spark における系譜つき中間データに対する効果的なメモリ内キャッシュ指示の検討". 第16回ハイパフォーマンスコンピューティングと計算科学シンポジウム論文集(HPCS 2016), p. 55, (2016-06)
- 永井美穂, 置田真生, 安部武志, 浅井義之, 北野宏明, 萩原兼一. "生体シミュレーションサービス Flint K3 にお

ける高性能計算に向けて''. 情報処理学会第 77 回全国大会, (2015-03)

- 中村亜希, 吉川禎, 置田真生, 萩原兼一. ``大規模生体モデルを対象とする Flint シミュレーションコードの並列生成''. 平成 26 年度情報処理学会関西支部大会講演論文集, D-05, (2014-09)

〔その他〕

Flint K3

<https://flintk3.unit.oist.jp>

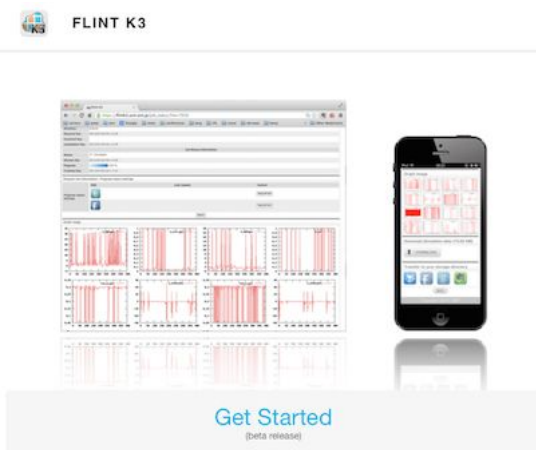


図 3 Flint K3

6. 研究組織

(1) 研究代表者

置田 真生 (Okita, Masao)

大阪大学・大学院情報科学研究科・助教

研究者番号: 50563988