

グリッドによる神経回路モデルのシミュレーション Neural Circuit Simulation on the Grid

田中 栄二 神山 斉己
Eiji Tanaka Yoshimi Kamiyama

愛知県立大学大学院情報科学研究科

1 背景と目的

神経システムの機能を理解・解明するため、数理モデルによるシミュレーション研究が行われている。神経細胞の生物物理学的特性を微分方程式で記述したモデルやそれらを多数接続した神経回路モデルのシミュレーションには莫大な量の数値計算が必要となる。さらに、このようなシミュレーションでは、異なる条件下での応答を求めるために複数のパラメータセットに対するシミュレーションを繰り返し行う場合も多い。そのため、シミュレーションを行うための計算資源が不足し、研究者の作業量が増大してしまう。さらに、このようなシミュレーションを行うには研究者のコンピュータスキルが少なからず必要である。

このような問題を解決する手段として、グリッドポータルによるシミュレーション環境の構築が考えられる。グリッドポータルにより、資源を共有することで計算資源を確保し、シミュレーション処理の大半を自動化することで作業量を軽減できる。また、ブラウザを介した容易な操作で利用できるため研究者は特別なソフトウェアを使用するためのスキルを必要としない。また、ニューロインフォマティクスの分野では、データベースに登録されたモデルを手軽に動かす環境も必要とされている。しかし、こうした神経科学研究に特化したグリッドポータルはまだ構築されていない。

そこで本研究では、計算資源を確保及び、作業負担を軽減し、研究者が容易に利用可能なグリッドポータルを介した神経回路モデルのシミュレーション支援環境を構築した。

2 支援環境の概要

本研究で対象とする神経回路モデルは時間に対する連立常微分方程式によって記述される。シミュレーションは、入力ファイルから読み込んだパラメータセットに対して、モデルに関する常微分方程式を解く C プログラムを実行し、結果をファイルに出力する形で行われる。

本グリッド環境はユーザホスト、ユーザからのシミュレーション要求等を処理するスケジューラホスト、実際にシミュレーションを行う実行ホスト群により構成される。

本グリッド環境は大きく 2 つの機能に分けることができる。Web Interface はユーザが本グリッド環境を利用する窓口であり、視覚的な操作で行いたいシミュレーションの要求やシミュレーション結果を利用した処理を行うための機能である。Grid Scheduler は Web Interface からシミュレーション要求を受け取り、実行ホスト群に処理を振り分ける。

Web Interface の作成には、グリッドポータルの構築を支援するツールキットとして GridPort Toolkit[3] や Grid Portal Development Kit[4] 等が考えられる。しかし、これらのツ

ルキットを利用して構築した環境では固定された UI でファイル転送やジョブの実行を行うため、神経回路モデルシミュレーションに特化した UI を実現することは難しい。そこで本研究では、これらのツールキットは用いず、Apache 及び PHP5 を用いた。

また、Grid Scheduler の作成には、グリッド環境構築の代表的ミドルウェアである Globus Toolkit によって提供される API を用いている。これらの API を、独自開発した bash シェルスクリプトに組み込んで使用することで Grid Scheduler を構築した。

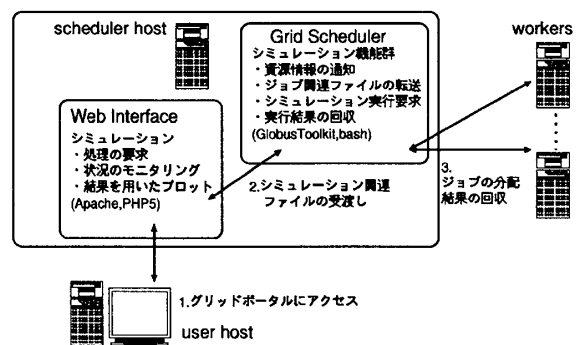


図1 グリッドポータルによるシミュレーション環境の構成

3 Grid Scheduler

Grid Scheduler は、Web Interface から行いたいシミュレーションのモデルプログラム及び、全てのシミュレーション条件をまとめて記述したテンプレートファイルを受け取る。

Grid Scheduler がファイルを受け取ると、各シミュレーションの入力ファイルが自動的に作成される。また、Grid Scheduler によって全ての worker からシミュレーションを実行する worker が選択され、選択された各々の worker に一つずつ job が振り分けられる。そして、実行結果は自動的に Grid Scheduler のホスト上に回収される。これらの環境は、x86 系 CPU の計算機及び、SunBlade2000 で構築し、シミュレーションを実行するホスト群 (74 台)、実行ホスト群の資源情報を管理するスケジューラホスト (1 台) から構成した。

図 2 は、シミュレーション計算全体の流れである。以下、図 2 の各処理の番号に対応させ、実現した機能の詳細を説明する。

- (1) モデルプログラムとテンプレートファイルを受け取った Grid Scheduler は、シミュレーション (job) を実行するための worker の選択を要求 (GRAM) する。
- (2) Grid Scheduler は、全実行ホスト (workers) の資源情報を元にシミュレーションを行うための worker を選択する
- (3) 選択した worker、及び、使用コンパイラの list をファイ

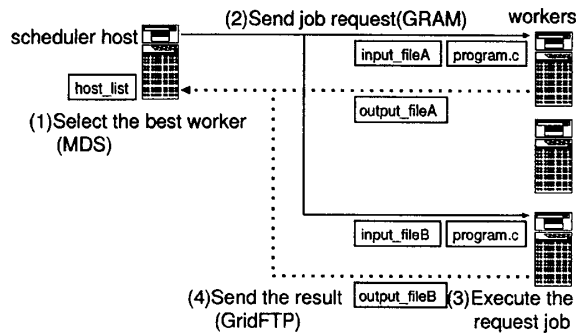


図2 Grid Scheduler でのシミュレーション計算の流れ

- ルとして Grid Scheduler に転送 (GridFTP) する。
- (4) Grid Scheduler は、選択された worker にプログラム、作成した入力ファイルを自動的に転送 (GridFTP) し、(5)(6) の処理の実行を要求 (GRAM) する。
- (5) 各 worker 上では、Grid Scheduler によって選択されたコンパイラを用いて、プログラムをコンパイルした上で、シミュレーションを実行する。
- (6) job が終了した各 worker は、実行結果として作成されたファイルを自動的に Grid Scheduler に返す (GridFTP)。
- (4)~(6) job の総数が選択されたホスト数を上まわり、実行されていない job が残っている場合は、job が終了した worker に残っている job を実行させ、全ての job を処理させる。

4 Web Interface

Web Interface は Grid Scheduler の機能を組み込み、ユーザがポータル上から利用する窓口となる。ユーザはグリッドポータルにアクセスし、

1. 神経回路モデルの選択
2. シミュレーション条件の指定

を行うだけで、残りのシミュレーション処理は自動的に行われ、実行結果はポータル上に回収される。また、シミュレーション処理の分配を行う際のホストの選択は、研究者自身で選択もできるように仕様を変更する予定である。

グリッドポータル上では、シミュレーション処理の自動化だけでなく、

- 実行状況のモニタリング機能
- 実行結果を利用する機能

を追加する予定である。

実行状況のモニタリング機能では、ユーザが要求したシミュレーション処理の進行状況をいつでも閲覧できるようにする。各条件ごとにシミュレーションの終了予定時間や現段階で各シミュレーションがどれくらい進行しているかを確認できるようにする。

また、グリッドポータル上でシミュレーションを行った実行結果のパラメータ変数を指定して、グラフを作成する機能を追加する。作成したグラフは eps 等の任意のファイル形式で保存できるようにする。これらのグラフ作成においても非常に手間

がかかるので、一度に複数のパラメータを指定して自動的に全てのプロット及び、ファイル作成を行う機能を付加する予定である。

5 Grid 環境の評価

構築した環境を用いて、視細胞モデル [3] のシミュレーションを行った。26 種の異なる条件下におけるシミュレーションを行うためのテンプレートファイルを作成し、作成したシェルスクリプトを実行した。その結果、全 26 種の入力ファイルが自動的に作成された。また、Grid Scheduler によって全 74 台の worker から 26 台が選択され、選択された各々の worker に一つずつ job が振り分けられた。実行結果は自動的に Grid Scheduler に回収された。

従来のシミュレーションでは、(1) パラメータファイルの作成、(2) リモートホストにモデルプログラム・パラメータファイルの転送、(3) リモートホスト上でのコンパイル・実行、(4) リモートホストから実行結果回収といった作業をシミュレーション回数だけ行う必要があった。しかし、本研究で構築した環境を利用することにより、(1) パラメータ生成用テンプレートファイルの作成、(2) プログラムソースファイルとテンプレートファイル投入の作業を一度行うだけでシミュレーションを行うことができる。

6 まとめ

本研究で構築したシミュレーション環境では、入力ファイルの自動生成機能、自動回収機能によって、ユーザは手動で行う煩雑な作業から解放される。また、全ての研究者がシミュレーション環境を共有できるため、各研究者がシミュレーション環境を構築する必要もなくなる。神経回路モデルのシミュレーションに要する時間のコスト・作業コストの軽減に有効といえる。また、各研究者は研究と直接関係のない作業から解放されたと言える。

今後の課題としては、実行状況のモニタリング機能及び実行結果を利用する機能の開発が挙げられる。また、モデルをグリッドポータル上で一元管理し、モデルを共有・利用する機能が挙げられる。さらに、現在は C 言語で記述されたモデルを対象とした環境であるが、その他のプログラム言語や専用シミュレータで記述されたモデルへの対応も課題である。

謝辞 本研究の一部は科研費 (17500195) によるものである。シミュレーション用のクラスタ環境を提供頂いた NTT 西日本に感謝する。

参考文献

- [1] Foster, I., Kesselman, C., Nick J.M. and Tuecke, S. (2002), "The Physiology of the Grid"
- [2] Kamiyama, Y., Ishihara, A., Aoyama, T., and Usui, S. (2005), "Simulation analyses of retinal cell responses", Modeling in the Neurosciences (Edited by Reeke, G.N. et al.), CRC, 313-338
- [3] <http://gridport.net/main/index.html>
- [4] <http://doesciencegrid.org/projects/GPDK>