

課題名(タイトル):

霊長類規模の全脳モデル構築

利用者氏名:

五十嵐潤(1)、Sun Zhe(1)、Morteza Heidarivejad(1)、來山至(2)

(1)情報システム本部 計算工学応用開発ユニット、(2)計算科学研究センター プログラミング環境研究チーム
理研における所属研究室名

1. 本課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

人間の脳は 1000 億近くの神経細胞が 1000 兆本にも及ぶ結合を介して、信号をやり取りすることで情報処理を行っている。脳の情報処理を理解するには、この膨大な数の神経細胞間の相互作用を理解する必要があるが、対象の数の膨大さ、複雑さ、生体を扱う難しさなどのため、いまだ解明には至っていない。

このような困難に対して、リアリスティックな神経回路シミュレーションは任意の神経回路状態の設定と任意の要素の観測を行うことが可能であり、神経細胞間の相互作用の理解にとって非常に有効な手法である。リアリスティックな神経回路シミュレーションは、近年のムーアの法則に従う計算機性能の指数関数的な向上の恩恵を受け、扱える脳モデルの大規模化が急速に進んでおり、全脳規模の膨大な数の神経細胞やシナプス結合の振る舞いのシミュレーションを可能にしつつある。さらに、光計測などによる神経細胞集団活動の大規模計測技術や脳の中の全結合情報計測を行うコネクトーム技術などが近年盛んになっており、そうした大規模な包括的な脳データをもとにした大規模モデル構築の機運がたまっており、全脳規模の大規模脳シミュレーションが求められている。

我々は、ポスト京萌芽的課題 4-1「脳のビッグデータ解析、全脳シミュレーションと脳型人工知能アーキテクチャ」という研究課題において、次世代スーパーコンピュータポスト京による全脳規模の神経回路シミュレーションの実現と脳機能の理解を目指し、取り組みを進めている。特に、大脳皮質、大脳基底核、小脳などの脳の主要な構成領域間の相互作用を調べ、運動や思考に関する情報処理機構について明らかにすることを目指している。これまで、次世代計算機向けの神経回路シミュレータ開発、MONET シミュレータによる 50

億個の神経細胞規模の大脳皮質シミュレーションや、100 億個以上の神経細胞規模の小脳シミュレーション、NEST シミュレータを用いた大脳皮質、視床、大脳基底核、小脳からなる全脳モデルの構築(図 1)などを、京や HOKUSAI を用いて行ってきた。京や HOKUSAI では不可能な、人間規模の大脳皮質、視床、小脳、大脳基底核からなる脳シミュレーションを富岳で実現するため、神経回路シミュレータの開発と神経回路モデル開発の準備を進めた。

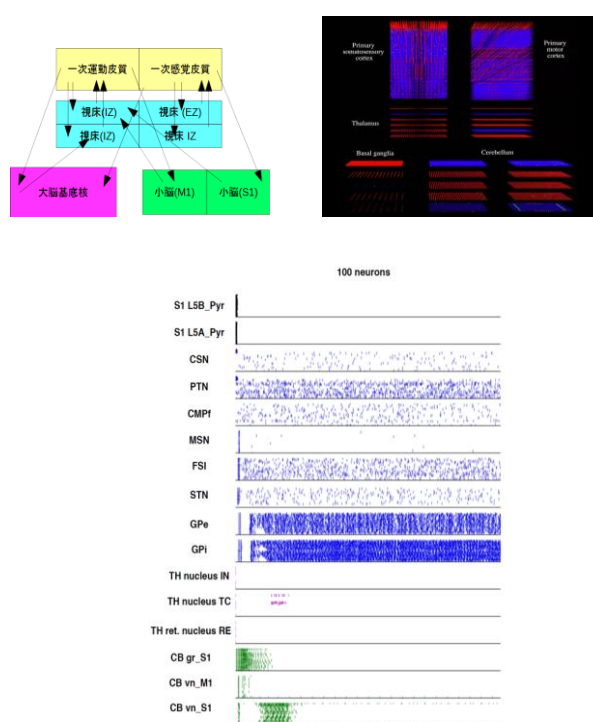


図 1 大脳皮質、視床、小脳、大脳基底核からなる全脳モデル構築。上左図：全脳モデルの領域と結合関係を示す概略図。上右図：3次元空間で表示される全脳モデルシミュレーションムービーのスクリーンショット。下図：各脳領域の代表的な神経細胞の発火活動。上から順に、体性感覚皮質、大脳基底核、視床、小脳の神経細胞の発火の時刻を点で示している。

2. 具体的な利用内容、計算方法

本申請課題では、大別して 3 種類の脳シミュレーションの計算を行った。

一つ目は計算性能のベンチマークとして用いられている、大脳皮質局所神経回路モデルのシミュレーションで、來山が担当した。これまで、京コンピュータや Jülich Research Centre のスーパーコンピュータで NEST シミュレータを用いて、スケール性能が調べてきている。今回は、CPU コア数、ネットワーク性能について富岳に準じたノード性能を持つ Hokusai を用いて、スケール性能について調べた。計算内容は連立微分方程式の数値的な求解になり、計算ステップは 0.1 ms で、1 秒程度のシミュレーションを行った。

二つ目は NEST シミュレータを用いた一次体性感覚皮質、一次運動皮質、視床、大脳基底核、小脳を含む、全脳モデルのシミュレーションで、Sun と Heidarinejad が担当した。積分発火型神経細胞モデルとコンダクタンスベースのシナプス結合モデルを用いる。計算内容は連立微分方程式の数値的な求解になり、計算ステップは 0.1 ms で、1~10 秒程度のシミュレーションを行った。

三つ目は、MONET シミュレータを用いた大脳皮質と小脳の脳シミュレーションで、五十嵐が担当した。MONET は層状シート型神経回路のシミュレーションを、富岳のようなワイド SMID ユニットを持つマルチコア CPU で効率的に計算することを目指して開発されている。Hokusai GW の CPU である FX100 は 32 コア、256 bit SIMD ユニット、ノードあたり 32GB メモリを搭載し、富岳に搭載される A64FX とアーキテクチャは異なるものの、構成のパラメータが近く、同じベンダーであり、富岳利用前の調査を行うシステムとして適している。そこで、ノードあたりの計算負荷を変え、弱スケール性能について調べた。計算内容は連立微分方程式の数値的な求解で、計算ステップは 0.1 ms で、数値計算法としては前進オイラー法を用いた。

3. 結果

3.1 Hokusai GW 上で NEST を用いた大脳皮質局所回路シミュレーションのスケール性能調査

標準的な HPC 環境向けジョブ実行スクリプトを用意し、

最大 FX100 512 ノードまで利用して NEST の弱スケール性能を測定した。良好な結果が得られた。NEST のアプリケーションカーネルは第 5 世代目であり、その特徴はノード間にまたがる集団通信を”Alltoall”で実施する実装である。並列アプリ性能測定ツールである Score-P を利用し、関数にフックを入れる手法を用い Hokusai 上でのボトルネックを探索した。結果性能ボトルネックは集団通信用バッファのハンドリング等単体ノードでの計算部分にあることが判明した。(SPARC64 アーキテクチャである京とほぼ同様の結果)得られた結果は NEST 開発コミュニティに報告し、コミュニティ内で機能改善と強化が進められている。Tofu インターコネクト 2 は Alltoallv も性能低下をまねくことなくアプリ内で利用することを可能にする。NEST 向けにも Alltoallv の実装が予定されたが、実装の進展と大規模実行期間が十分に同期せず、Alltoallv の性能測定は今後富岳上で実施することとした。

3.2 一次体性感覚皮質、一次運動皮質、全脳モデルシミュレーション

ポスト京萌芽的課題 4-1 で開発している一次体性感覚皮質、一次運動皮質、全脳モデル(大脳皮質、視床、小脳、大脳基底核)に関して、動作テストと安静時の自発活動のシミュレーションを行った。

一次体性感覚皮質について、弱スケール性能を調べた(図 1, 2, 3)。1CPU あたり、1mm² の一次体性感覚皮質モデルを割り当て、CPU 数の増加とともに規模を増加させた。図 2 は、シミュレーションを始める前の神経回路の構築にかかる時間について、弱スケール性能テストの結果を示す。構築時間は理想的な一定とはならず、ほぼ線形に増加した。

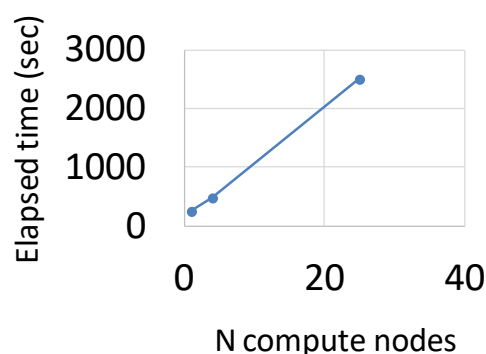


図 2 NEST による体性感覚皮質の神経回路構築時間に関する弱スケール性能

図3はシミュレーション時間に関する弱スケール性能テストの結果を示す。シミュレーション時間についてもCPUの数が増えると、時間が上昇した。

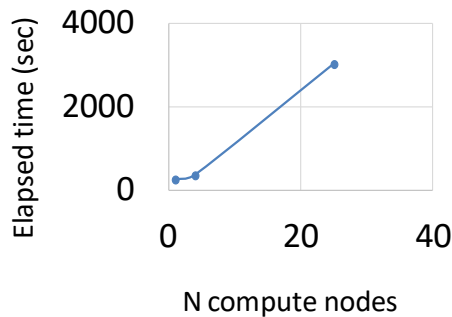


図3 NESTによる体性感覚皮質シミュレーションに関する弱スケール性能

図4は、図2、3の場合のメモリの消費量について示す。メモリ消費量についても、CPUの数が上昇するとともに増加した。

これらの結果から、体性感覚皮質のような複雑なモデルのシミュレーションにおいて、スケールの拡大に問題があるようであった。簡単なモデルを用いた場合には、優れた性能を示すことから、複雑なモデルを記述するときに生じる問題であると考えられる。

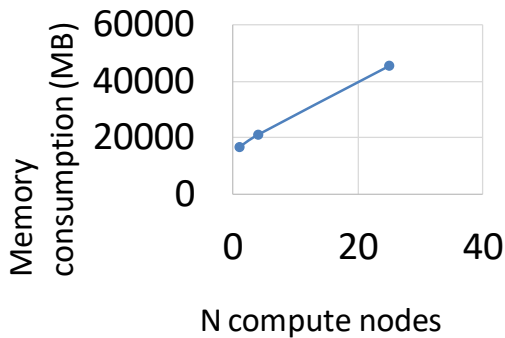


図4 NESTによる体性感覚皮質シミュレーションのメモリ消費量

3.3 Hokusai GW 上での MONET シミュレータによる大脳皮質と小脳シミュレーションのスケール性能の調査

Hokusai GW と BW を用いて、MONET による大脳皮質と小脳モデルのスケール性能について調べた。本研究では、富岳での実行を想定して新たなデータ構造を導入した MONET シミュレータを用いた。従来の MONET では、細胞タイプごとに状態変数は別の配列に保存されており、配列長がその分短くなっていた。そのため、

FX100, XEON Gold 6148, 富岳の A64FX のような 20 コア以上かつ 8 要素以上の SIMD ユニットを持つ CPU では、並列化後のループの回転数に対して、ソフトウェアパイプラインを適用するのに十分な要素数を確保することが難しくなっていた。そこで、神経細胞タイプでの分割をせず、すべての細胞タイプのデータを一つの配列にまとめた新たなデータ構造を導入した。その結果、SIMD とソフトウェアパイプラインが適用されやすくなっている。

計算ノードあたり大脳皮質モデルは 1.69 mm^2 を割り当て、小脳は 1 mm^2 を割り当て、弱スケール性能を調べた。図5、6は大脳皮質モデルと小脳モデルの弱スケール性能テストの結果を示す。HOKUSAI BW, GW ともに緩やかな計算時間の上昇を示したが、BWの方がコア数が少ないにもかかわらず、高速に計算を実行した。BWのSIMDはAVX512でGWの倍あり、また駆動周波数が速くキャッシュ容量も大きいことが要因と考えられる。GW, BW いずれも、京で同程度の計算を行ったときに比べて、大脳皮質は20倍以上、小脳は8倍以上高速に計算を実行した。

最大規模としては、ノードあたりの計算規模を2-2.25倍増加することで、大脳皮質では0.5億神経細胞、小脳では4億神経細胞に達した。大脳皮質は霊長類のマーマセットの片半球の規模に達し、小脳は全脳規模に達した。計算時間は、秒 秒と、京に比べて倍高速化することができた。

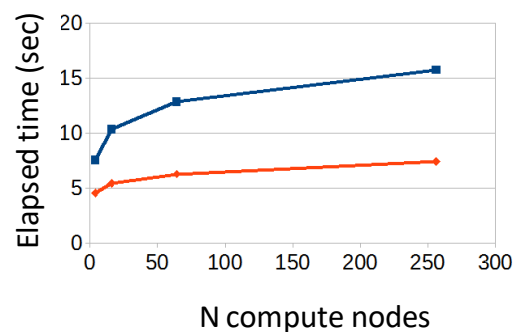


図5 MONETによる大脳皮質シミュレーションの弱スケール性能。青線がGWで赤線がBWを示す。

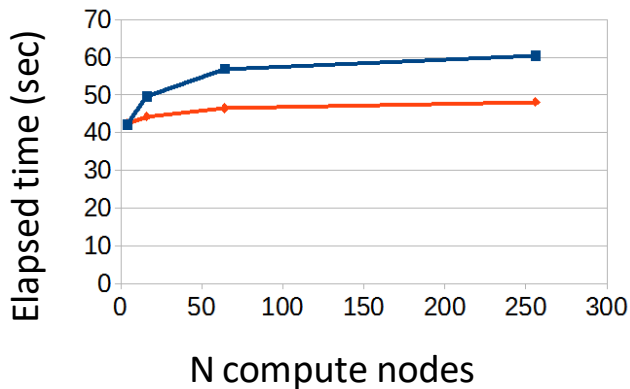


図 6 MONET による小脳シミュレーションの弱スケール性能。青線が GW で赤線が BW を示す。

4. まとめ

Hokusai GW 上で NEST を用いた大脳皮質局所回路シミュレーションのスケール性能調査を行い、良好なスケール性能を得た。

Hokusai BW 上で NEST シミュレータを用いて、一次体性感覚皮質、一次運動皮質、全脳モデルシミュレーションを行い安静時の自発活動のシミュレーションを行った。

Hokusai GW と BW 上での MONET シミュレータによる大脳皮質と小脳シミュレーションのスケール性能の調査で、MONET への新しいデータ構造により、メニーコアや SIMD を活用した、霊長類規模の脳シミュレーションを高速に実行することができた。

5. 今後の計画・展望

NEST を用いた大脳皮質局所回路シミュレーションについては、今後実装される Alltoallv の性能測定を富岳上で実施し、本研究結果と比較を行う。

一次体性感覚皮質、一次運動皮質、全脳モデルシミュレーションについては、今後登場する次世代の NEST3 と、富岳によるさらなる大規模化や、上肢到達運動など運動制御のシミュレーションへの展開を検討している。

MONET による大脳皮質、小脳については、Hokusai GW、BW と同等の計算ノードによるシミュレーションを富岳で行い、CPU 性能の違い、ネットワーク性能の違いについて比較を行う。

2019年度 利用研究成果リスト

【雑誌に受理された論文】

Igarashi J., Yamaura H., & Yamazaki T. (2019) Large-Scale Simulation of a Layered Cortical Sheet of Spiking Network Model Using a Tile Partitioning Method, *Front. Neuroinform.*, 29.

【会議の予稿集】

Igarashi J., Yamaura H., & Yamazaki T., Parallel computing of a cortico-thalamo-cerebellar circuit using tile partitioning parallelization method by MONET simulator. *Computational Neuroscience (CNS*2019)*, July 13-17, 2019, Barcelona, Spain.

Gutierrez C., Gutierrez C., Sun Z., Yamaura H., Heidarinejad M., Igarashi J., et al. A whole-brain spiking neural network model linking basal ganglia, cerebellum, cortex and thalamus. *Computational Neuroscience (CNS*2019)*, July 13-17, 2019, Barcelona, Spain.

Hedarinejado M., Sun Z., & Igarashi J. Hierarchy of inhibitory circuit acts as a switch key for network function in a model of the primary motor cortex. *Computational Neuroscience (CNS*2019)*, July 13-17, 2019, Barcelona, Spain.

Sun Z., Hedarinejado M., & Igarashi J. Spatially organized connectivity for signal processing in a model of the rodent primary somatosensory cortex. *Computational Neuroscience (CNS*2019)*, July 13-17, 2019, Barcelona, Spain.

Yamaura H., Igarashi J., & Yamazaki T. Building a spiking network model of the cerebellum on K computer using NEST and MONET simulators. *Computational Neuroscience (CNS*2019)*, July 13-17, 2019, Barcelona, Spain.

Igarashi J., Yamaura H., & Yamazaki T., Parallelization of building spiking neural networks in MONET simulator, 第42回日本神経科学学会全国大会, 2019年7月

Gutierrez C., Gutierrez C., Sun Z., Yamaura H., Heidarinejad M., Igarashi J., et al., A spiking neural network model of the whole-brain circuit linking basal ganglia, cerebellum and cortex, Annual Meeting of the Japan Neuroscience Society 第42回日本神経科学学会全国大会, 2019年7月

Sun Z., Hedarinejado M., & Igarashi J., Spatial summation of excitatory and inhibitory signals in a model of the rodent primary somatosensory cortex, , 第29回日本神経回路学会全国大会, 2019年9月

Hedarinejado M., Sun Z., & Igarashi J., Switches of activation in hierarchical inhibitory

circuitry in simulated primary motor cortex, 第29回日本神経回路学会全国大会, 2019年9月

【口頭発表】

Jun Igarashi. Parallelization method of cortico-thalamo-cerebellar circuits toward exascale computing. Neuromodulator of neural microcircuitis NM2, 2019, Champéry, Switzerl.

Gutierrez C., Sun Z., Yamaura H., Heidarinejad M., Igarashi J., et al., Large-scale simulation of a spiking neural network model consisting of cortex, thalamus, cerebellum and basal ganglia on K computer, NEST conference 2019, June 24-25, 2019, Ås, Norway.

Sun Z., Hedarinejado M., & Igarashi J., Spatial summation of excitatory and inhibitory signals in a model of the rodent primary somatosensory cortex, , 第29回日本神経回路学会全国大会, 2019年9月

【ポスター発表】

Igarashi J., Yamaura H., & Yamazaki T., Parallel computing of a cortico-thalamo-cerebellar circuit using tile partitioning parallelization method by MONET simulator. Computational Neuroscience (CNS*2019), July 13-17, 2019, Barcelona, Spain.

Gutierrez C., Gutierrez C., Sun Z., Yamaura H., Heidarinejad M., Igarashi J., et al. A whole-brain spiking neural network model linking basal ganglia, cerebellum, cortex and thalamus. Computational Neuroscience (CNS*2019), July 13-17, 2019, Barcelona, Spain.

Hedarinejado M., Sun Z., & Igarashi J. Hierarchy of inhibitory circuit acts as a switch key for network function in a model of the primary motor cortex. Computational Neuroscience (CNS*2019), July 13-17, 2019, Barcelona, Spain.

Sun Z., Hedarinejado M., & Igarashi J. Spatially organized connectivity for signal processing in a model of the rodent primary somatosensory cortex. Computational Neuroscience (CNS*2019), July 13-17, 2019, Barcelona, Spain.

Yamaura H., Igarashi J., & Yamazaki T. Building a spiking network model of the cerebellum on K computer using NEST and MONET simulators. Computational Neuroscience (CNS*2019), July 13-17, 2019, Barcelona, Spain.

Jun Igarashi. Parallelization method of cortico-thalamo-cerebellar circuits toward exascale computing. Neuromodulator of neural microcircuitis NM2, 2019, Champéry, Switzerl.

Sun Z., Hedarinejado M., & Igarashi J., Spatial summation of excitatory and inhibitory signals in a model of the rodent primary somatosensory cortex, , 第29回日本神経回路学会全国大会, 2019年9月

Igarashi J., Yamaura H., & Yamazaki T., Parallelization of building spiking neural networks in MONET simulator, 第 42 回日本神経科学学会全国大会, 2019 年 7 月

Sun Z., Hedarinejado M., & Igarashi J., Spatial summation of excitatory and inhibitory signals in a model of the rodent primary somatosensory cortex, , 第 29 回日本神経回路学会全国大会, 2019 年 9 月

Hedarinejado M., Sun Z, & Igarashi J., Switches of activation in hierarchical inhibitory circuitry in simulated primary motor cortex, 第 29 回日本神経回路学会全国大会, 2019 年 9 月