超並列計算によるマルチスケール・マルチフィジックス心臓シミュレーション

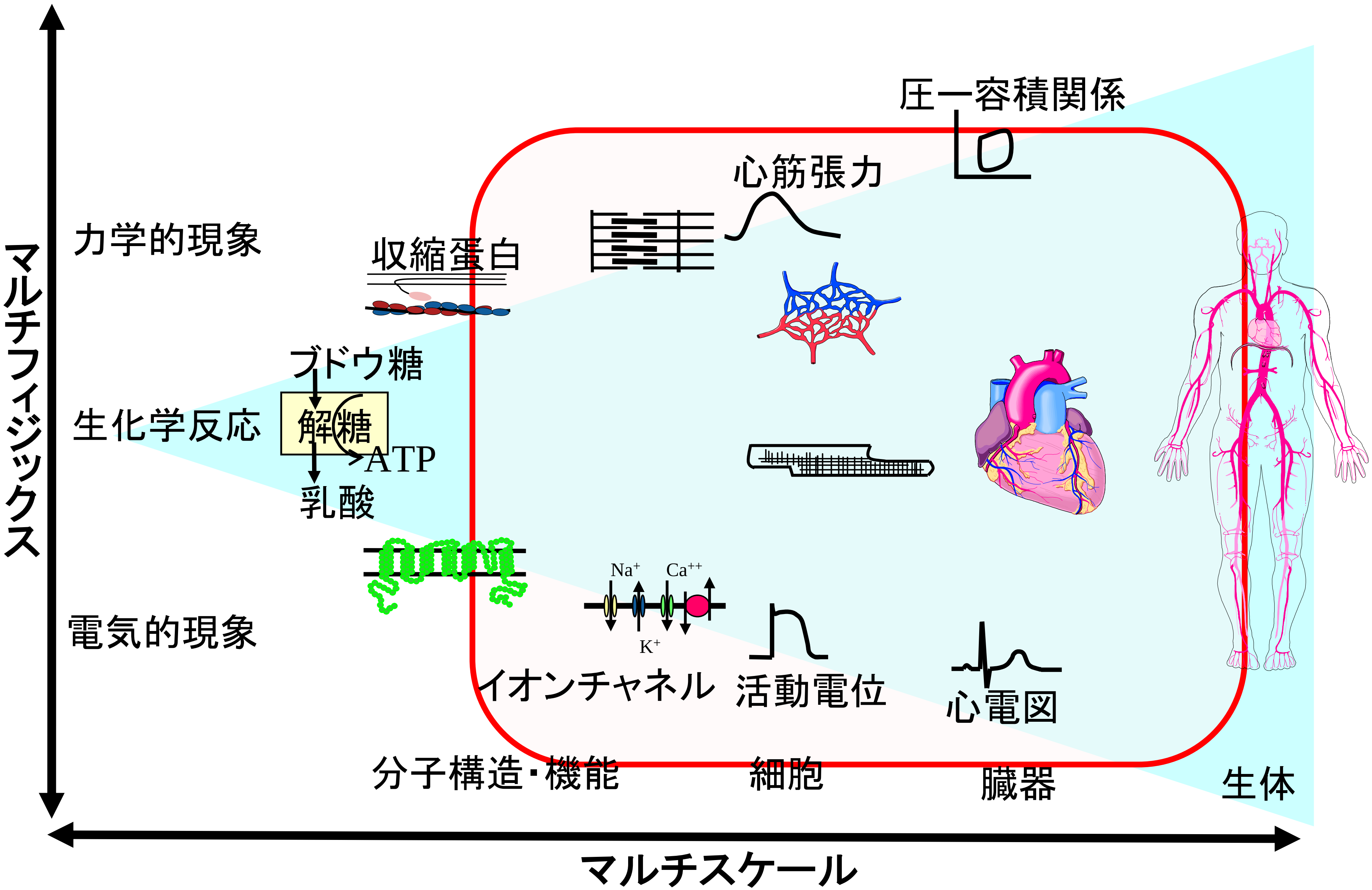
2010/5/21

久田 俊明[1], 杉浦　清了[1], 鷲尾 巧[1], 岡田 純一[1],
門岡 良昌[2], ○細井　聡[1,2]
1:東大院新領域創成科学研究科
2:富士通株式会社

本日の内容

- マルチスケール・マルチフィジックス心臓シミュレータの紹介
- ミクロ数値細胞と均質化法を用いたマルチスケール解析
- 東大T2Kによるマルチスケールシミュレーション
- 現状、まとめ、今後の予定

心臓におけるマルチスケール・マルチフィジックス現象



UT-Heart の概要

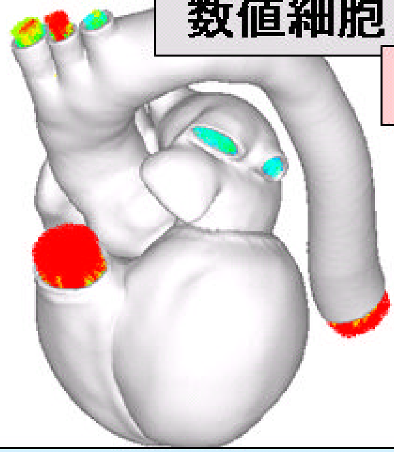
医療・創薬への応用

マクロ構成則に基づく心臓シミュレータ

マルチスケール心臓シミュレータ

医学・生理学モデル

- 細胞電気生理学
- 興奮収縮連関
- 心筋構成則
- 刺激伝導系
- 体循環
- 胸部
- 機械－電気帰還現象



数値細胞

心筋細胞計測実験

シミュレータ検証実験

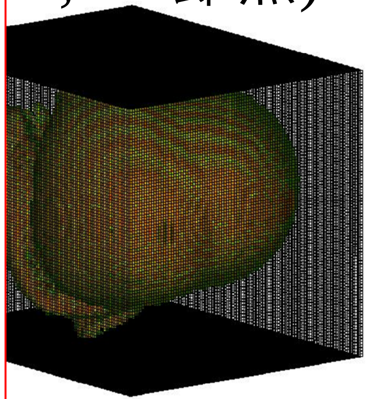
- 細胞実験
- 心筋組織実験
- 摘出心臓実験
- 動物実験
- 臨床データ

シミュレーション技術

流体構造連成解析　マルチスケール解析
電気化学現象解析　高速ソルバー
並列計算手法　プリ・ポスト処理

電気および力学現象解析用有限要素モデル

- 電気現象解析用 … 25,860節点)



胸郭モデル … 全心臓モデル30,819,249節点

細胞モデル

Noble
Luo-Rudy
Nattel
DiFrancesco-Noble

細胞接続モデル

Bi-domain＆Mono-domain

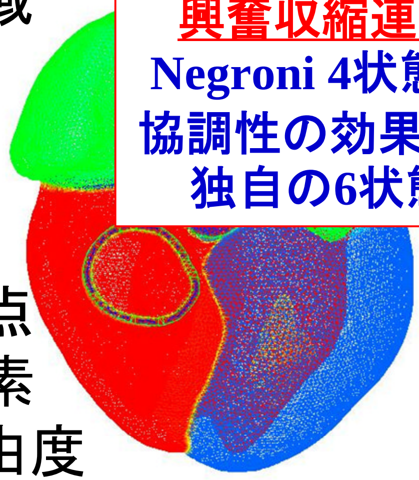
＋

興奮収縮連関モデル

Negroni 4状態モデルに協調性の効果を導入した独自の6状態モデル

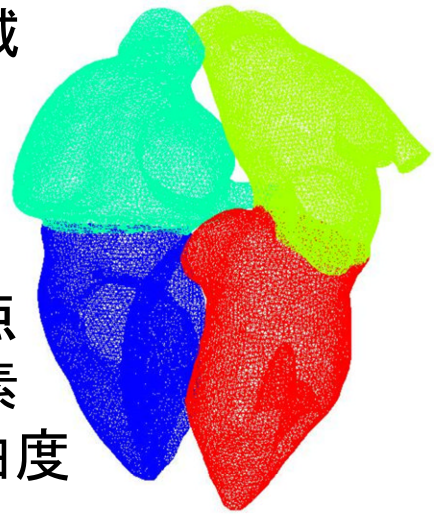
- 力学現象解析用 … 20万自由度)

心筋領域



948,708節点
664,334要素
2,561,750自由度

血液領域

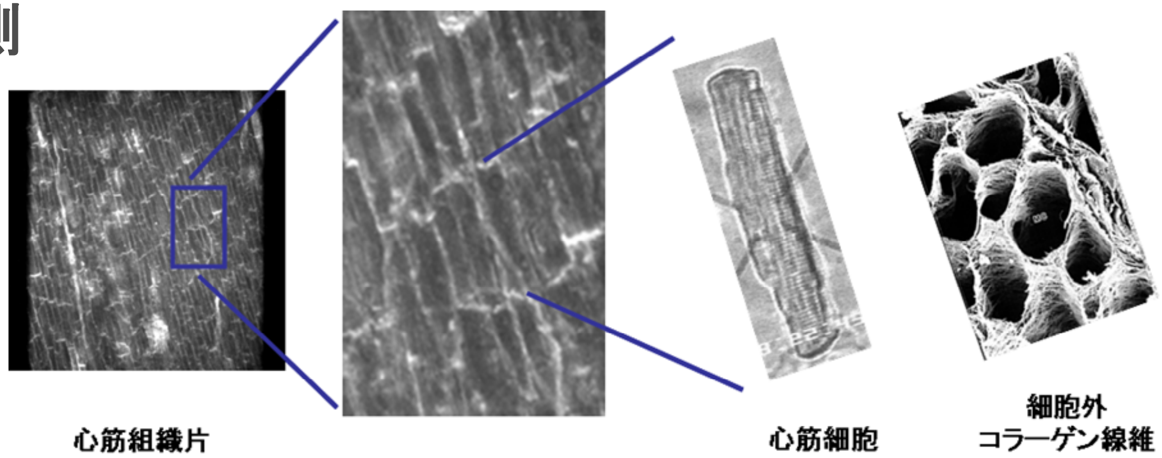


616,721節点
435,227要素
1,668,669自由度

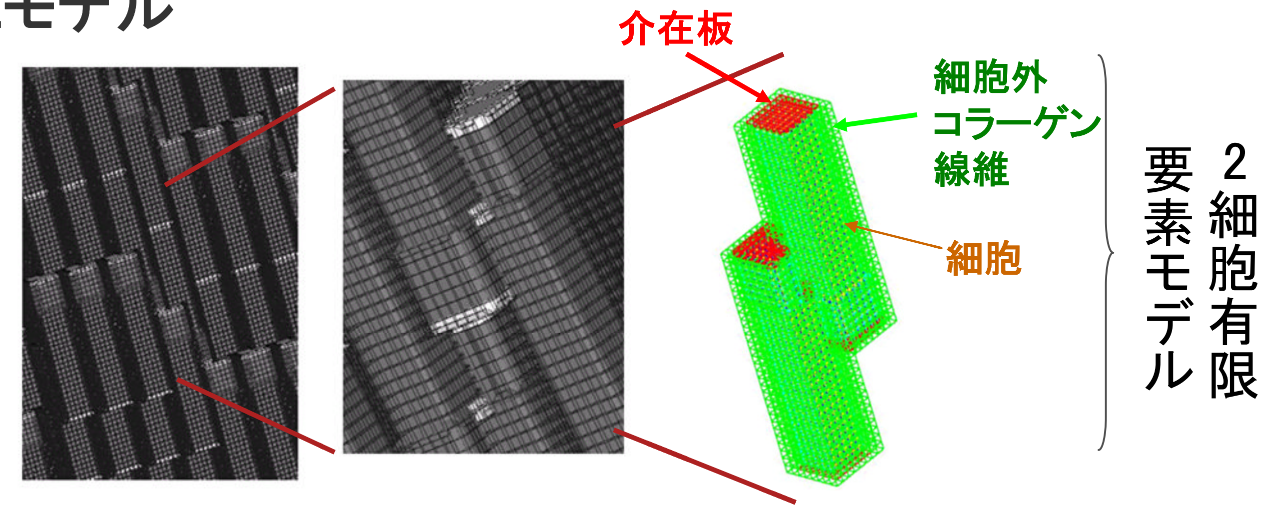
ミクロ数値細胞:心筋細胞を有限要素モデル化

- 心筋細胞: 局所的には周期的に配置

実測



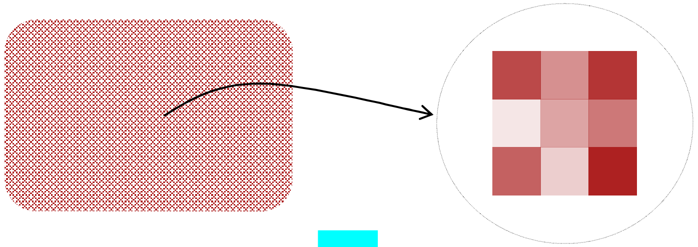
FEモデル



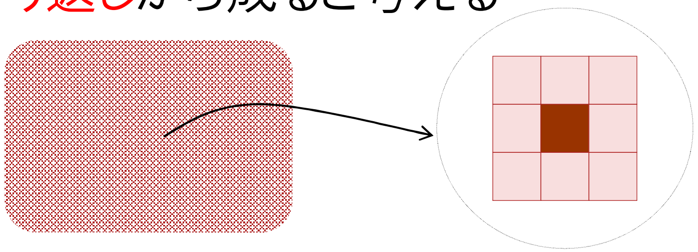
➡ 均質化法(homogenization method)の適用が可能

均質化法とそのマルチスケール解析への適用

- 物体：微視的には非均質

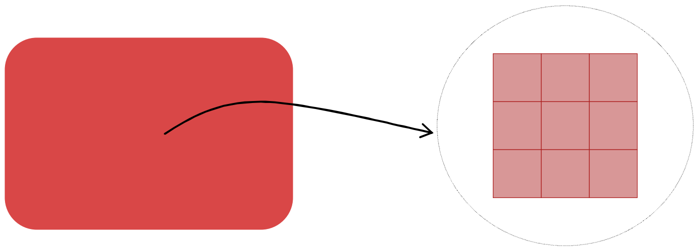


- 物体：ある微視構造の周期的な繰り返しから成ると考える

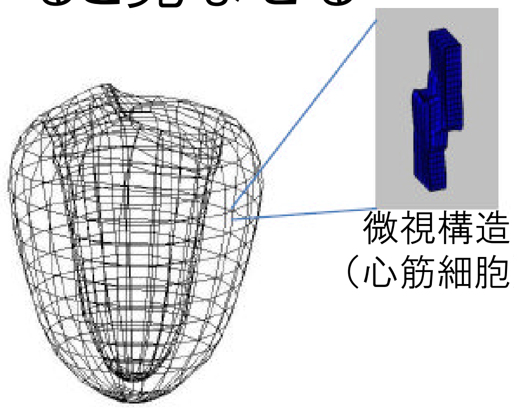


均質化

- 物体：巨視的には，近似的に等価な均質体と見なす事が出来る



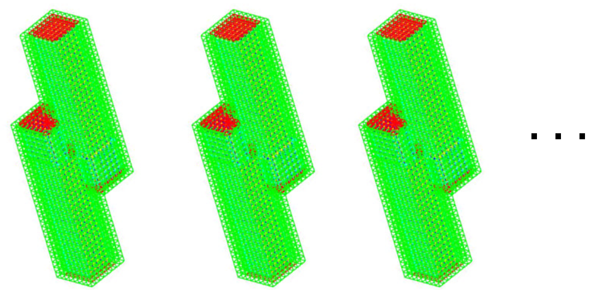
- 心臓：充分局所的には、心筋細胞（微視構造）が周期的に分布していると見なせる



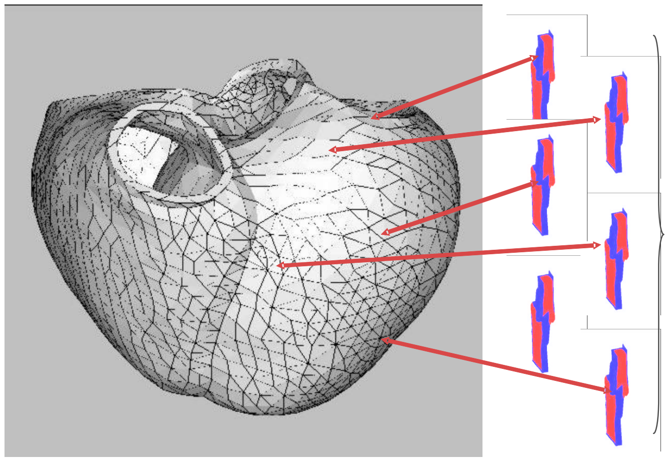
- 巨視的応答は微視的応答の体積平均で与えられると仮定
  - 微視構造上での構成則のみ用いる
  - 独自開発の「高精度低負荷均質化アルゴリズム」により大幅に計算量を削減

均質化法は超並列化向き

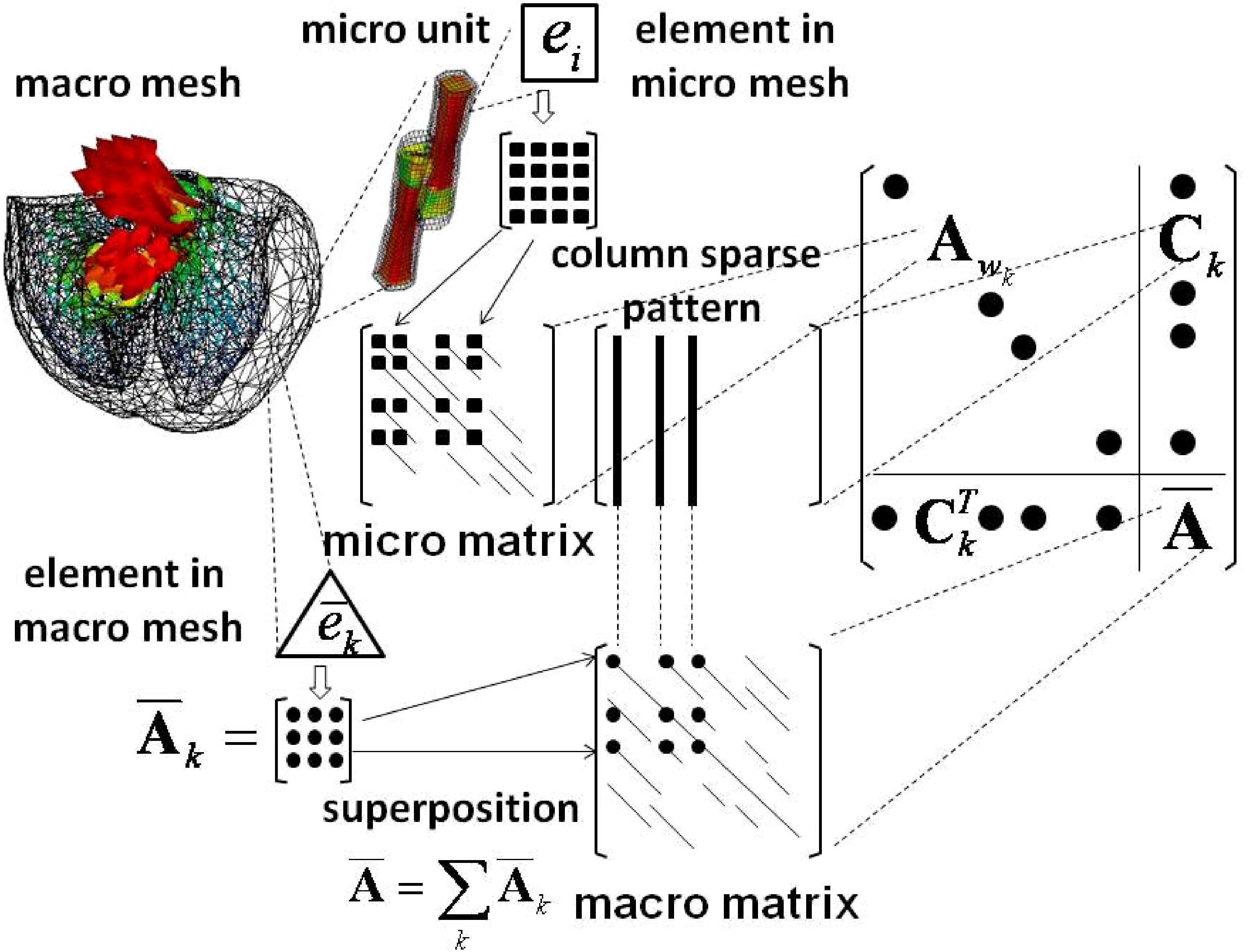
- 各微視構造上での計算量が非常に多い
  - 各要素上の各積分点での計算が必要
- 高精度シミュレーションには、非常に多くの微視構造が必要
- 並列化に伴う通信
  - 局所的
    - 微視構造間: なし
      - 各微視部構造の計算は完全に独立
    - 微視構造⇔巨視部: 対応する部分のみ
    - 巨視部内: 隣接間通信のみ
  - 通信量が少ない
    - (例)微視構造 ⇒巨視部
      - 要素剛性行列、等価節点力のみ



(例)



マルチスケール解析に現れる行列のイメージ図



マルチスケール解析に出現する行列とその演算

■ マルチスケール解析で解く連立1次方程式

$A_w \overset{\text{def}}{=} P^T AP$
$\bar{A} \overset{\text{def}}{=} U^T AU$

$$\begin{bmatrix} A_w & P^T AU \\ U^T AP & \bar{A} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \{\Delta w\} \\ \{\Delta \bar{u}\} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \{r_w\} \\ \{\bar{r}\} \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} \mathbf{A}_{w,1} & 0 \cdots & & 0 & \mathbf{P}_1^T \mathbf{A}_1 \mathbf{U}_1 \\ & \ddots & & & \vdots \\ 0 & \cdots 0 & \mathbf{A}_{w,I} & 0 \cdots 0 & \mathbf{P}_I^T \mathbf{A}_I \mathbf{U}_I \\ & & \ddots & & \vdots \\ 0 & \cdots & & 0 \ \mathbf{A}_{w,N} & \mathbf{P}_N^T \mathbf{A}_N \mathbf{U}_N \\ \mathbf{U}_1^T \mathbf{A}_1 \mathbf{P}_1 & \cdots & \mathbf{U}_1^T \mathbf{A}_1 \mathbf{P}_1 & & \bar{\mathbf{A}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta \mathbf{w}_1 \\ \vdots \\ \Delta \mathbf{w}_I \\ \vdots \\ \Delta \mathbf{w}_N \\ \Delta \bar{\mathbf{u}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{r}_{w,1} \\ \vdots \\ \mathbf{r}_{w,I} \\ \vdots \\ \mathbf{r}_{w,N} \\ \bar{\mathbf{r}} \end{bmatrix}$$

$A_{w,I}\{\Delta \tilde{w}_I\} = \{r_{w,I}\} (1 \le I \le N)$を並列に解く

$\bar{S}\{\Delta \bar{u}\} = \{\bar{r}\} - U^T AP\{\Delta \tilde{w}\}$を解く

ただし $\bar{S} = \bar{A} - U^T APA_w^{-1} P^T AU$

$(\bar{S}: \mathit{Schur\ Complement})$

■ 特性モードを用いた計算量削減

$A_w \chi = P^T AG$ を満たすχ を用いると $U = G\bar{B}$ なので

$$\begin{bmatrix} A_w & P^T AU \\ U^T AP & \bar{A} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A_w & A_w \chi \bar{B} \\ \bar{B}^T \chi^T A_w & \bar{A} \end{bmatrix}$$

$\bar{S}\{\Delta \bar{u}\} = \{\bar{r}\} - \bar{B}^T \chi^T \{r_w\}$を解く

ただし $\bar{S} = \bar{A} - \bar{B}^T \chi^T A_w \chi \bar{B}$

東大T2Kを用いたマルチスケールシミュレーション

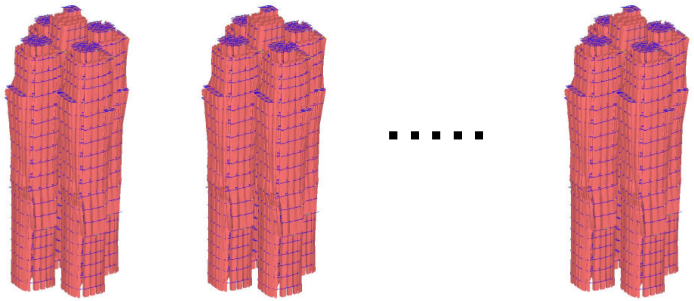
T2Kによるマルチスケールシミュレーションの目的

- *UT-Heart* が超並列向きアプリケーションであることを確認する

- 可能な限り高精度・大規模なマルチスケールシミュレーションを実施
  - T2Kの計算リソースに合わせて細胞の数と自由度を削減

<u>近い将来に解きたい問題</u>

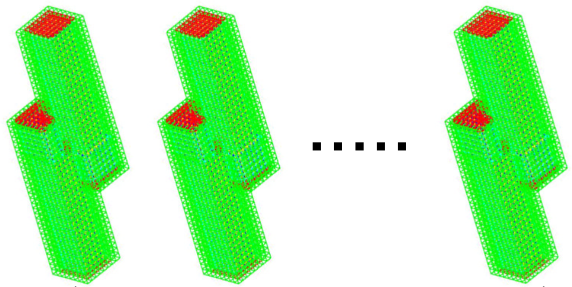
100,000～
200,000自由度



細胞660,000個

<u>T2Kで用いた問題</u>

26,121自由度

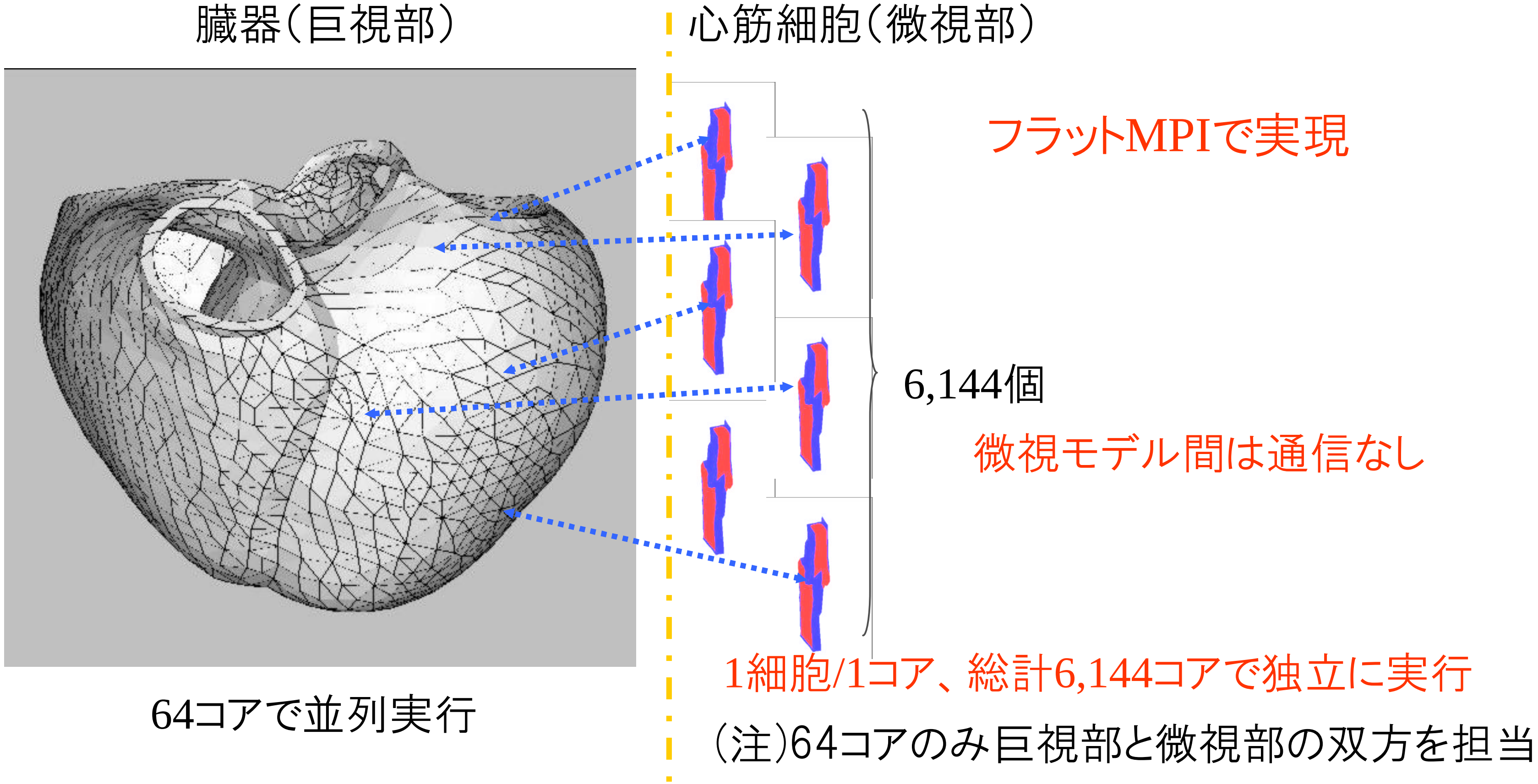


細胞6,144個
微視部総自由度160,000,000

  - スケーラビリティ、安定性等を確認

東大T2Kを用いた評価

- 両心室＋心筋細胞（要素数5,736, 自由度26,121）6,144個



- 6,144コア使い約16時間連続実行に成功
  - 心臓一拍半をシミュレート

（「東大T2KオープンスパコンHPC特別プロジェクト」により行なわれた）

従来の計算アルゴリズムの概要

for *istep* = 1, …(time step)

for *iter* = 1, …(Newton-Raphson step)

巨視部の有限要素節点上の変位･速度ベクトル等 ⇒ 微視構造（通信①）

for e = 1, …

$A_{w,e}$, $r_{w,e}$を計算（ミクロモデルの剛性行列と残差ベクトル）

solve $\boldsymbol{A_{w,e}\{\Delta w_e\}=\{r_{w,e}\}}$ **（ミクロモデル求解）**

if (*istep* % *nstep* == 0 && *iter* == 1) *solve* $\boldsymbol{A_{w,e}\chi_e = P_e^T A_e G_e}$

巨視有限要素に対する剛性行列と等価節点力を計算

endfor

微視構造で計算した要素剛性行列と等価節点力 ⇒ 巨視部（通信②）

（全実行時間の大半）

ミクロ部実行時間

$\bar{S}\{\Delta\bar{u}\} = \{\bar{r}\} - \bar{B}^T\chi^T\{r_w\}$

マクロ部実行時間

if ({r_w}と{$\bar{r}$}が充分小さい) 次の*istep*へ

{$\bar{u}$}と{w}を更新

endfor

endfor

係数行列が同じ方程式を9回解く

（注1）①②以外の通信時間は全実行時間に対してごく僅か

改良した計算アルゴリズムの概要

・非線形問題の特性を利用
⇒ 数*step*間は $A_{w,e}$ はそれ程大きく変わらない
同じ $L_{w,e}$ $U_{w,e}$を前処理行列として解く

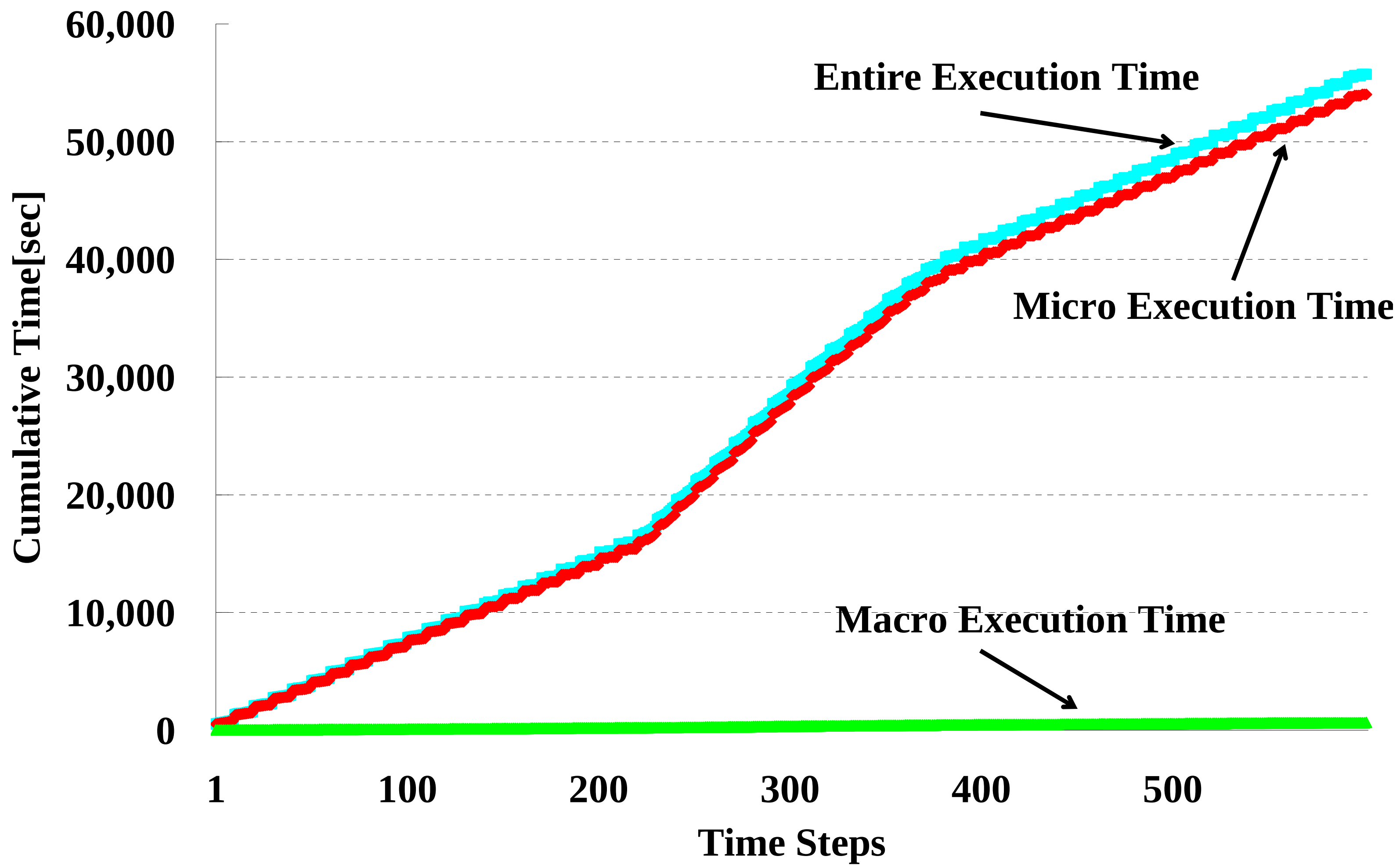
for *istep* = 1, …(time step)
　for *iter* = 1, …(Newton-Raphson step)
　　巨視部の有限要素節点上の変位・速度ベクトル等 ⇒ 微視構造（通信①）
　　for *e* = 1, …
　　　A_w , r_wを計算（ミクロモデルの剛性行列と残差ベクトル）
　　　if (*istep* % *nstep* == 0 && *iter* == 1) $A_{w,e}=L_{w,e}U_{w,e}$（LU分解）
　　　solve $A_{w,e}\{\Delta w_e\}=\{r_{w,e}\}$ ***using*** $L_{w,e}U_{w,e}$
　　　if (*istep* % *nstep* == 0 && *iter* == 1) *solve* $A_{w,e}\chi_e= P_e^T A_e G_e$ ***using*** $L_{w,e}U_{w,e}$
　　　巨視有限要素に対する剛性行列と等価節点力を計算
　　endfor
　　微視構造で計算した要素剛性行列と等価節点力 ⇒ 巨視部（通信②）

（全実行時間の大半）
ミクロ部実行時間

　　$\overline{S}\{\Delta\overline{u}\}=\{\overline{r}\}-\overline{B}^T\chi^T\{r_w\}$
　　if ($\{r_w\}$と$\{\overline{r}\}$が充分小さい) 次の*istep*へ
　　$\{\overline{u}\}$と$\{w\}$を更新
　endfor
endfor

全実行時間の内訳

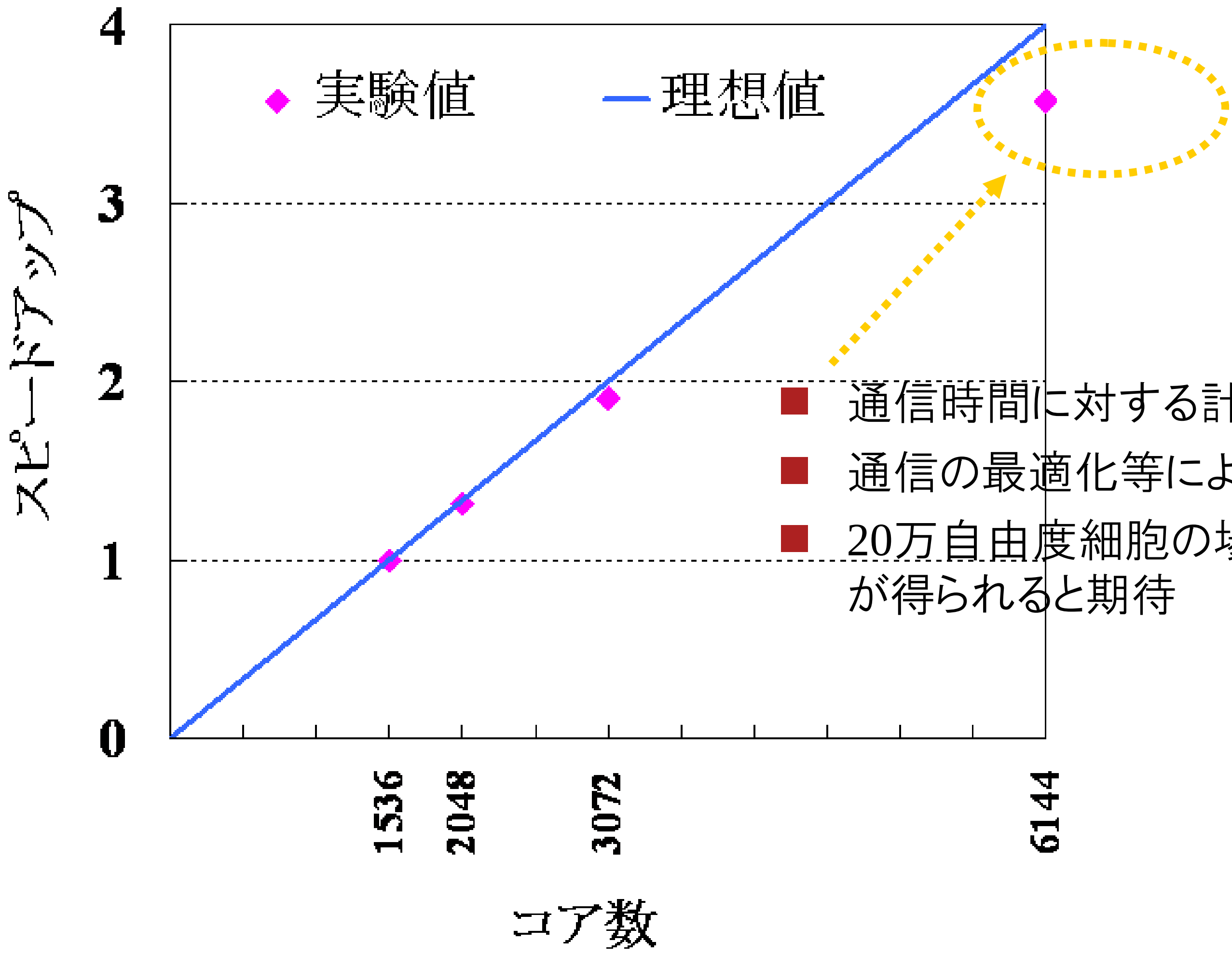
- 1周期半(600ステップ)における累積計算時間
  - 全実行時間の大半をミクロ部処理時間が占める



(「東大T2Kオープンスパコン HPC特別プロジェクト」により行なわれた)

スケーラビリティ

- 1536コア実行時に対するスピードアップ：非常に良好



- 通信時間に対する計算時間の割合の減少のため
- 通信の最適化等により、若干改善の余地あり
- 20万自由度細胞の場合は、充分なスケーラビリティが得られると期待

（「東大T2Kオープンスパコン HPC特別プロジェクト」により行なわれた）

現在取り組んでいること

- フラットMPI ⇒ ハイブリッド並列化
- ミクロ部ソルバー
  - さらなる高速化
    - 直接法
      - 近隣細胞のLU分解結果を使い回す
      - より高速なアルゴリズムの採用
    - 反復法：前処理行列の改良による高速化
      - 既に解いた方程式の情報を利用
      - 粗いグリッドを利用

利点

省メモリ

反復回数削減

性能向上

課題

反復回数増加

演算コスト増

マテリアル情報を
考慮したfine⇒coarse
メッシュ生成

  - 並列化（特に、20万自由度細胞の場合は必須）
    - 直接法
    - 反復法
  - 以上の（一部の）統合

非線形問題における前処理付き反復法の収束性改善法について

Krylov部分空間法と前処理付きGMRES

Krylov部分空間法の収束性に関する問題点
　生成されるKrylov部分空間が
　初期誤差ベクトルの低周波成分を含むようになるまで
　収束が非常に緩やか

対策

係数行列 A の小さな固有値に対応する
反復解の誤差を素早く除去して反復回数削減
（注）前処理行列 M が適用される場合は
AM^{-1} を係数行列と見なす

GMRESでは、以下を有効に使って低周波
モードの素早い除去が可能：
- Hessenberg行列
- 直交基底ベクトル
- 固有値
- 固有ベクトルの張る空間 etc

通常の前処理付きフルGMRES

$r_0 = b - Ax_0,\ \beta = \|r_0\|_2,\ v_1 = r_0 / \beta$

$for\ \ j = 1, \dots$

$\quad w_j = M^{-1} v_j$

$\quad v_{j+1} = A w_j$

$\quad for\ \ i = 1, j$

$\quad\quad h_{i,j} = v_{j+1}^T v_i,\ v_{j+1} = v_{j+1} - h_{i,j} v_i$

$\quad endfor$

$\quad h_{j+1,j} = \|v_{j+1}\|_2,\ v_{j+1} = v_{j+1} / h_{j+1,j}$

$\quad if$ (収束条件を満たす) $m = j$ とし j ループを終了

$endfor$

$V_m = [v_1, \cdots, v_m],\ \overline{H}_m = \{h_{i,j}\}_{1 \le i \le j+1, 1 \le j \le m}$ とする

$\|\beta e_1 - \overline{H}_m y\|_2$ を最小にする y を求める

$x = x_0 + M^{-1} V_m y$ が解となる

非線形問題中のソルバーの反復回数削減

- 連立1次方程式を繰り返し解く
  - 複数の方程式を同時には解けない
- 充分短期間には、左辺の係数行列は大きくは変化しない

$$A_3 M_3^{-1} \approx A_2 M_2^{-1} \approx A_1 M_1^{-1}$$

- 既に解いた方程式の情報を利用して前処理行列を改良

元の前処理行列 M_j^{-1} ⇒ 改良された前処理行列 $\tilde{M}_j^{-1}$

ある部分空間基底ベクトルを用いて改良

$(A_j M_j^{-1})^T A_j M_j^{-1}$の小さな固有値で張られる部分空間

- 新規に解く方程式の反復回数を削減

$$A_1 M_1^{-1} x_1 = r_1$$

$$A_2 M_2^{-1} x_2 = r_2$$

$$A_3 M_3^{-1} x_3 = r_3$$

$\cdots$

既に解いた方程式の情報を利用

前処理行列の改良の実際

前処理行列を改良するためのセットアップ

(*a*)前回の*GMRES*がm回で収束した場合
$s=\min(m,l)$個の小さな固有値に対応した
基底ベクトル $\hat{\mu}_1,\dots,\hat{\mu}_s$ を選択
(*b*)(*a*)で選択した基底ベクトルをこれまでに
収集した基底ベクトルの集合 P に追加

基底ベクトル $\hat{u}_k=V_m u_k$
ただし $V_m:[v_1 \quad v_2 \quad \dots \quad v_m]$
$\mu_k(1\le k\le m):\overline{H}_m^T\overline{H}_m$の固有ベクトル
$\overline{H}_m:(m+1)\times m$の*Hessenberg*行列
l:あらかじめ定めた正定数

$r_0=b-Ax_0,\ \beta=\|r_0\|_2,\ v_1=r_0/\beta$
for $j=1,\dots$
　$w_j=M^{-1}v_j$
　$v_{j+1}=Aw_j$
　for $i=1,j$
　　$h_{i,j}=v_{j+1}^T v_i,\ v_{j+1}=v_{j+1}-h_{i,j}v_i$
　endfor
　$h_{j+1,j}=\|v_{j+1}\|_2,\ v_{j+1}=v_{j+1}/h_{j+1,j}$
　if (収束条件を満たす) $m=j$としjループを終了
endfor
$V_m=[v_1,\cdots,v_m],\ \overline{H}_m=\{h_{i,j}\}_{1\le i\le j+1,1\le j\le m}$とする
$\|\beta e_1-\overline{H}_m y\|_2$を最小にする$y$を求める
$x=x_0+M^{-1}V_m y$が解となる

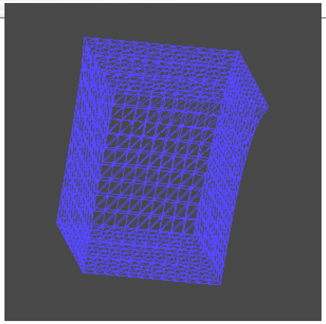
変更

前処理行列をMから$\tilde{M}$へ
改良したと見なせる

$w_j=\tilde{M}^{-1}v_j$

PからL個の基底ベクトル$\mu_k(1\le k\le L)$を選ぶ
$\tilde{v}_j=AM^{-1}\sum_{k=1}^{L}\alpha_k\hat{\mu}_k$とおき
$\|v_j-\tilde{v}_j\|_2$を最小とするα_kを求める
$\tilde{r}_j=v_j-\tilde{v}_j$
$M\Delta v_j=\tilde{r}_j$ を解く
$w_j=\tilde{v}_j+\Delta v_j$

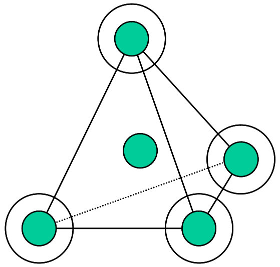
数値実験例



- 3次元超弾性体伸縮シミュレーションのソルバーに対して適用
  - 節点数16×16×16+バブル節点(総自由度 75374)
  - 係数行列 A は対称だが不定値
  - 四面体の各頂点に静水圧点、各頂点と重心に変位節点を追加

    ⇒ 静水圧の自由度数だけ負の固有値が存在

    ⇒ 通常のILU前処理では解くのが困難



  - 元の前処理行列 M

$$\begin{bmatrix} A & B^T \\ B & -C \end{bmatrix}$$

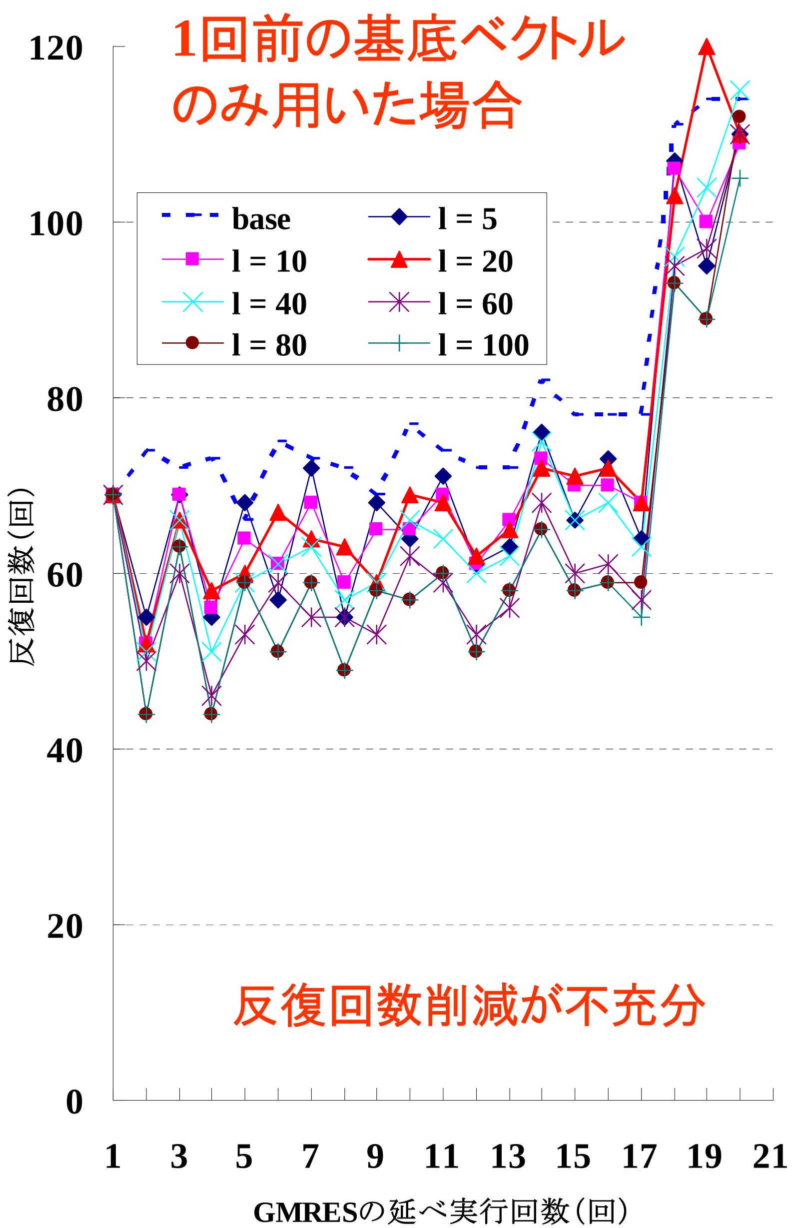
「変位自由度を消去する際に圧力対角に生じるフィルインを取り込む」ようにしてILU分解

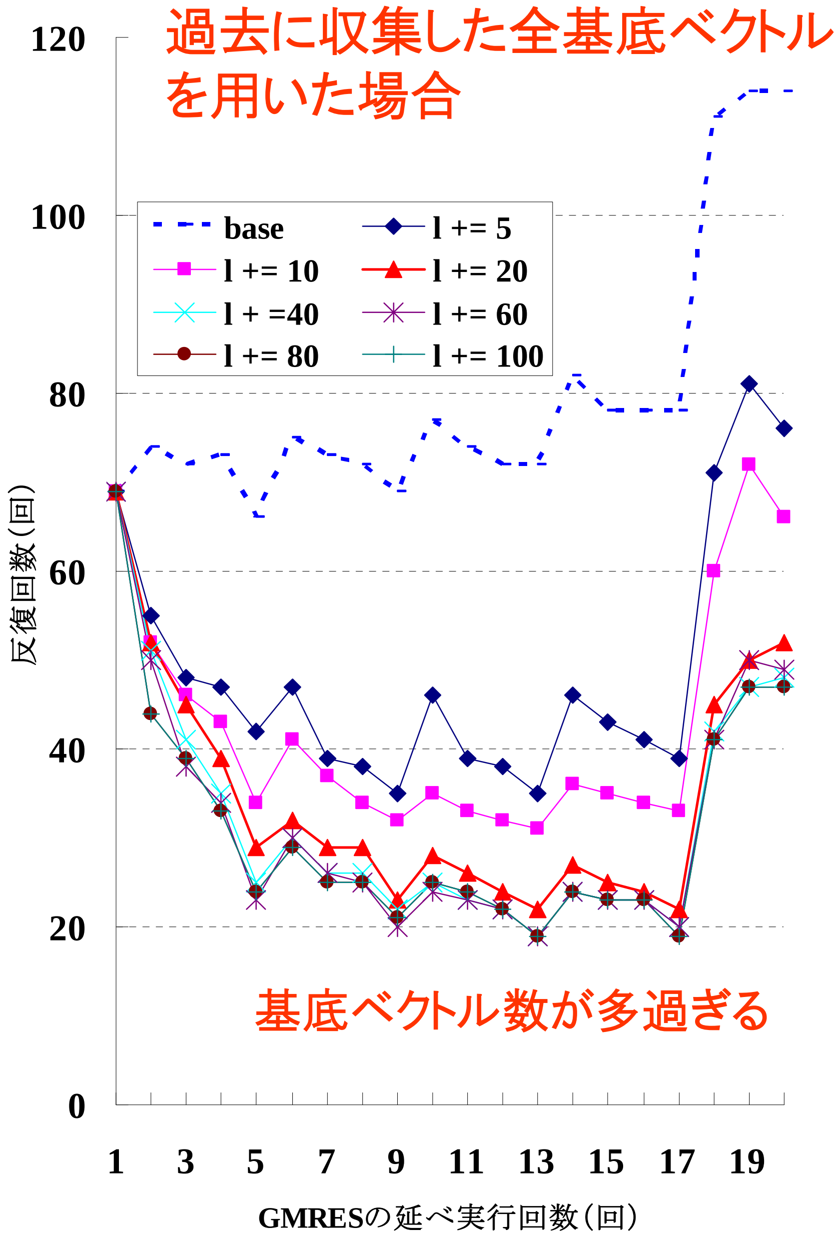
    - AM^{-1} は非対称となる

  - 相対残差が10^{-8}以下となるまでの反復回数を比較

当プログラムおよび入力データは、東京大学大学院新領域創成科学研究科の渡邊浩志先生からご提供頂きました. ここに厚く御礼申し上げます

前処理行列改良の効果


1回前の基底ベクトル
のみ用いた場合
base
l = 5
l = 10
l = 20
l = 40
l = 60
l = 80
l = 100
反復回数（回）
GMRESの延べ実行回数（回）
反復回数削減が不充分


過去に収集した全基底ベクトル
を用いた場合
base
l += 5
l += 10
l += 20
l + =40
l += 60
l += 80
l += 100
反復回数（回）
GMRESの延べ実行回数（回）
基底ベクトル数が多過ぎる

基底ベクトル数の削減

- 極力少数の基底ベクトルで低周波部分空間を効率良く表現

↓

収集した基底ベクトルの線形結合を用いる

（例）$t(\geq 3)$ 回目のGMRES呼び出し時に利用可能な2組の l 個の基底ベクトル：

- $\hat{\mu}_{t-1,k}(1 \leq k \leq l)$: $t-1$回目の$GMRES$実行により得られた基底ベクトル
- $\hat{\mu}_{t-2,k}(1 \leq k \leq l)$: $t-2$回目の反復回数削減に用いた基底ベクトル

↓

反復回数削減に用いる
基底ベクトルは常に l 個で済む

①$\hat{\mu}_{t-1,k}$ を $\hat{\mu}_{t-2,k}$ に対して直交化

②$(AM^{-1}\hat{U})^T AM^{-1}\hat{U}$ のl個の小さな固有値に対応した固有ベクトル $\mu_k(1 \leq k \leq l)$ を選ぶ

ただし $\hat{U} = \begin{bmatrix} \hat{\mu}_{t-2,1} & \cdots & \hat{\mu}_{t-2,l} & \hat{\mu}_{t-1,1} & \cdots & \hat{\mu}_{t-1,l} \end{bmatrix}$

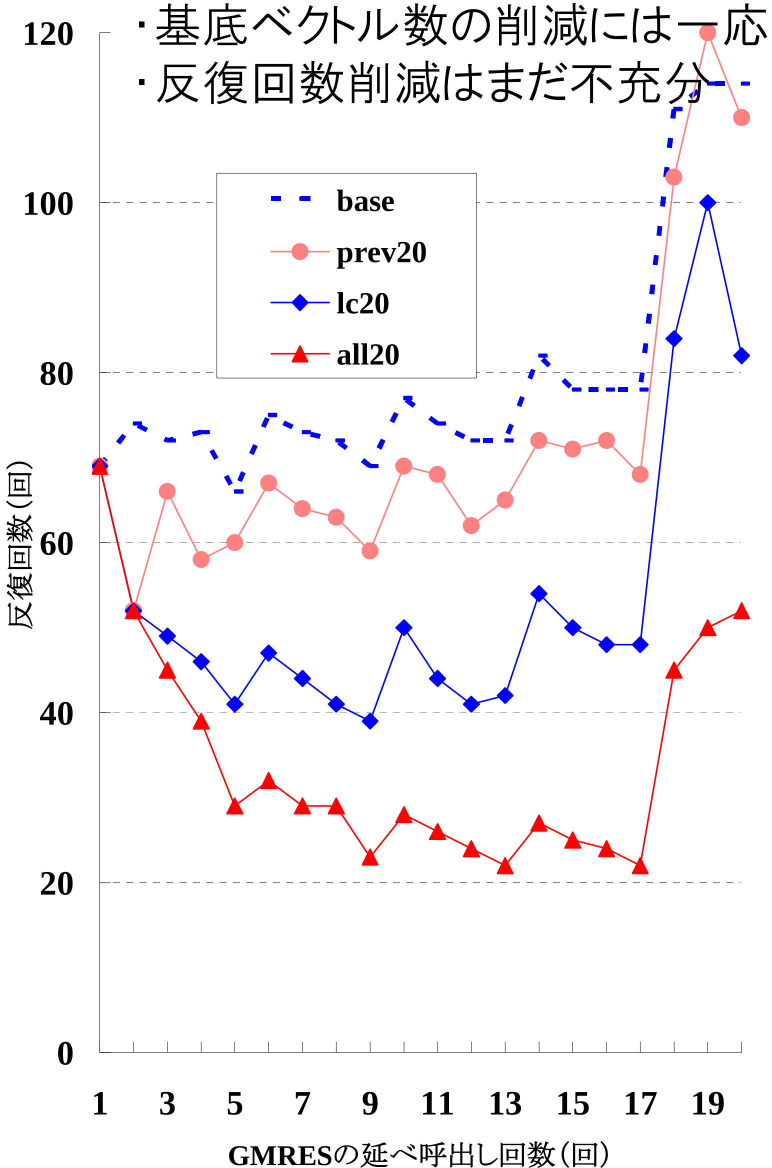
③$\hat{\mu}_{t,k} = \hat{U}\mu_k(1 \leq k \leq l)$ を新たな基底ベクトルとし、t回目の$GMRES$呼び出しの反復回数削減に用いる

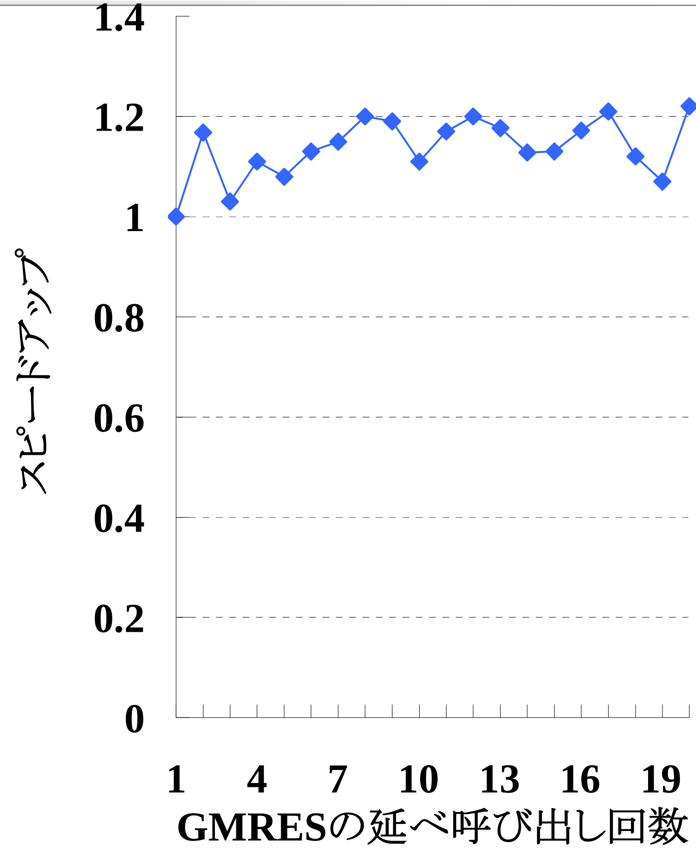
基底ベクトル数削減の効果

baseに比べて反復回数は最大で40%程度削減

・基底ベクトル数の削減には一応成功

・反復回数削減はまだ不充分





しかし、・基底ベクトルを用いる演算のコストが大きいため、スピードアップは最大でも2割程度

まとめと将来の予定

- マルチスケール心臓シミュレータを最大6144コアを用いて実行
  - 連続16時間弱安定稼動：心臓一拍半のシミュレートに相当
  - 均質化法をベースとした手法により、非常に良好なスケーラビリティ

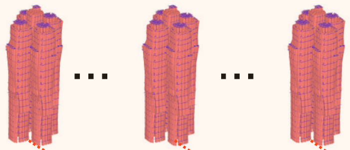
+ミクロ部ソルバーの高速化、ハイブリッド並列化・・・

ペタスケールコンピュータ上での実行

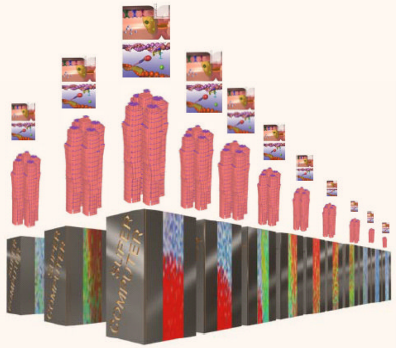
ミクロ部計算：10～20万自由度×66万個

計660～1320億自由度

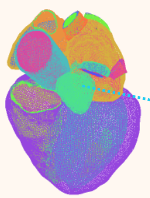
10～20万自由度　10～20万自由度　10～20万自由度



細胞66万個



マクロ部計算



巨視部(420万自由度)

$$
\begin{bmatrix}
\mathbf{A}_{w,1} & 0 \cdots & & 0 & \mathbf{P}_1^T\mathbf{A}_1\mathbf{U}_1 \\
 & \ddots & & & \vdots \\
0 & \cdots 0 & \mathbf{A}_{w,I} & 0 \cdots 0 & \mathbf{P}_I^T\mathbf{A}_I\mathbf{U}_I \\
 & & & \ddots & \vdots \\
0 & \cdots & & 0 \ \mathbf{A}_{w,N} & \mathbf{P}_N^T\mathbf{A}_N\mathbf{U}_N \\
\mathbf{U}_1^T\mathbf{A}_1\mathbf{P}_1 & \cdots & \mathbf{U}_1^T\mathbf{A}_1\mathbf{P}_1 & & \bar{\mathbf{A}}
\end{bmatrix}
\begin{bmatrix}
\Delta\mathbf{w}_1 \\ \vdots \\ \Delta\mathbf{w}_I \\ \vdots \\ \Delta\mathbf{w}_N \\ \Delta\bar{\mathbf{u}}
\end{bmatrix}
=
\begin{bmatrix}
\mathbf{r}_{w,1} \\ \vdots \\ \mathbf{r}_{w,I} \\ \vdots \\ \mathbf{r}_{w,N} \\ \bar{\mathbf{r}}
\end{bmatrix}
$$

謝辞

- 本研究は，科学技術振興機構・産学協同シーズイノベーション化事業育成ステージ「心臓シミュレータの医療への実用化研究」、ならびに、東京大学情報基盤センター「東大T2Kオープンスパコン HPC特別プロジェクト」および「平成20～21年度T2Kオープンスパコン（東大）共同研究プロジェクト」の一環として行なわれました。
ここに、関係各位に感謝の意を表する次第です。