

3次元 Smith-Waterman 法の提案と GPU を用いた性能評価

須戸 里織

Saori SUDO

1 はじめに

近年、脳血流量の変化を測定することで脳機能マッピングを行う fNIRS¹⁾ が注目を集めている。fNIRS データの解析手法のひとつに SW (Smith-Waterman) 法²⁾ を用いるものがある。ただし、SW 法は 2 つの文字列同士を比較を行うので、多数の出力が得られる fNIRS の解析を行う場合、すべての組み合わせを処理しなければならない。fNIRS の解析を SW 法で行う場合、比較できる系列数を増やすことが望ましい。また、SW 法は計算に時間がかかるため、GPU (Graphics Processing Unit) や FPGA などの並列計算ハードウェアで高速化を行う必要がある。

本研究報告では、比較できるデータ数を 3 つに拡張した 3 次元 SW 法の提案を行い、GPGPU 向けの統合開発環境である CUDA を用いて、GPU で高速に計算する手法について述べる。また、提案したアルゴリズムを CPU と GPU で比較検討を行う。

2 Smith-Waterman 法

2.1 概要

SW 法は 2 つの文字列の共通部分列を抽出するための手法であり、部分的な類似部分を探索する、局所的ペアワイズ配列アラインメントのひとつである。SW 法は他の配列アラインメントの手法と違い、類似度が最大の共通部分列のみでなく、複数の類似部分列を抽出することができる。文字列“ACAC”と文字列“AGCA”が入力である SW 法の計算時に使用する文字列テーブル $SW(i, j)$ を Fig. 1 に示す。

			j				
			0	1	2	3	4
	X	Y	-	A	C	A	C
0	-						
1	A						
2	G						
3	C						
4	A						
		i					

Fig. 1 SW 法の文字列テーブル

2.2 計算手順

SW 法のスコアの計算では match, mismatch, gap というパラメータを用いる。match は 2 つの文字列が一致したとき、mismatch は不一致のとき、gap はスペースの

挿入に関するスコアである。SW 法では一般的に match = 1, mismatch = -1, gap = -1 が用いられる。長さが m の配列 $X = x_1x_2\dots x_m$ および長さが n である配列 $Y = y_1y_2\dots y_n$ を対象とした、SW 法のアルゴリズムの流れを以下に示す。

Step1. 配列 X, Y について、文字列テーブルを作成し、それぞれの文字列を列と行に割り当てる。

Step2. i 行 j 列にある要素が $SW(i, j)$ であるとする。 $0 \leq k \leq m$ および $0 \leq l \leq n$ において、 $SW(k, l) = SW(k, 0) = SW(0, l) = 0$ と初期化を行う。

Step3. それぞれの要素について式 (1) を基にスコアを計算する。

$$SW(i, j) = \max \begin{cases} SW(i-1, j-1) + A \\ SW(i-1, j) + \text{gap} \\ SW(i, j-1) + \text{gap} \\ 0 \end{cases} \quad (1)$$

$$A: \begin{cases} \text{match} & \text{if}(x_i = y_j) \\ \text{mismatch} & \text{else} \end{cases}$$

Step4. 最も高いスコアを持つ要素から類似部分を抽出

3 3次元 Smith-Waterman 法

3.1 概要

本稿では、SW 法で 3 つの文字列の比較を行えるように、3 次元 SW 法を作成する。3 次元 SW 法では、SW 法の文字列テーブルを 3 次元に拡張したものをを用いる。文字列“GAT”と文字列“ATT”と文字列“AGT”が入力である 3 次元 SW 法の文字列テーブル $SW(i, j, k)$ を Fig. 2 に示す。文字列テーブルの各要素の計算を行ったのち、2 次元のときと同様に 3 次元的に類似部分を抽出する。

3.2 計算手順

長さがそれぞれ l, m, n である配列 $X = x_1x_2\dots x_l$, $Y = y_1y_2\dots y_m$, $Z = z_1z_2\dots z_n$ を対象とした、3 次元 SW 法のアルゴリズムの流れを以下に示す。

Step1. 配列 X, Y, Z について、文字列テーブルを作成し、それぞれの文字列を i, j, k 軸に割り当てる。

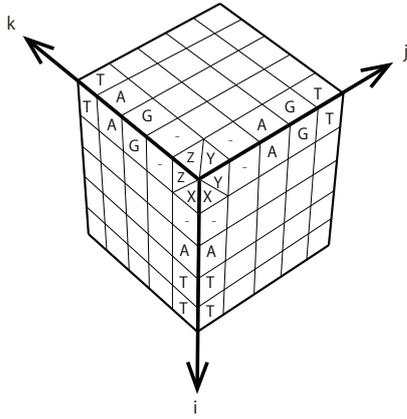


Fig. 2 3次元SW法の文字列テーブル

Step2. 位置 i, j, k にある要素が $SW(i, j, k)$ であるとする、 $0 \leq p \leq l$, $0 \leq q \leq m$ および $0 \leq r \leq n$ において、 $SW(p, q, r) = SW(p, 0, 0) = SW(0, q, 0) = SW(0, 0, r) = 0$ として初期化を行う。

Step3. それぞれの要素について、式 (2) を基にスコアを計算する。

$$SW(i, j, k) = \max \begin{cases} SW(i-1, j-1, k-1) + A \\ SW(i-1, j-1, k) + \text{gap} \\ SW(i, j-1, k-1) + \text{gap} \\ SW(i-1, j, k-1) + \text{gap} \\ SW(i-1, j, k) + \text{gap} \\ SW(i, j-1, k) + \text{gap} \\ SW(i, j, k-1) + \text{gap} \\ 0 \end{cases} \quad (2)$$

$$A: \begin{cases} A: \text{match} & \text{if}(x_i = y_j = z_k) \\ B: \text{mismatch} & \text{else} \end{cases}$$

Step4. 最も高いスコアを持つ要素から類似部分を抽出する。

3.3 実装

本研究報告では、3次元SW法をGPU向けの統合開発環境であるCUDAを用いて実装した。文字列テーブルの計算を高速化するために、文字列テーブルの要素を $4 \times 4 \times 4$ の64要素毎に区切ったサブテーブルを作成し、サブテーブル毎にまとめて処理を行う。

4 評価

4.1 概要

3次元SW法をfNIRSの脳血流量データに基づいて、GPUとCPUで実行時間について性能評価を行う。fNIRSのデータを変換して生成した3つの文字列を、3次元SW法にかけて、文字列テーブルを計算し、GCUPS(Giga Cell Updates Per Second:一秒間に文字列テーブルの要素を何個計算できるか)について比較検討を行う。SW法の性能評価の指標としてCUPSが一般的に用いられている。fNIRSのデータの個数、すなわ

ち文字列長が8, 16, 32, 64, 128, 256, 512のときについてそれぞれSW法で文字列テーブルを計算する。本稿では文字列テーブルを計算し、ホスト側に文字列テーブルを戻してくるまでの時間を実行時間とする。

3次元SW法を表1の構成のマシンを用いて評価を行う。

Table 1 使用マシン構成

CPU	Intel Core i5-2400 3.10GHz
GPU	GeForce GTX 460
Memory	8GB
OS	Ubuntu 11.04
開発環境	CUDA 4.0
コンパイルオプション	-O3

4.2 結果

GPUで文字列テーブルを分割したサブテーブルを使用して計算を行った場合(GPUI)、GPUでサブテーブルを使用しない場合(GPUN)、CPUでサブテーブルを使用しない場合(CPU)の3次元SW法について評価の結果をFig.3に示す。

評価の結果、GPUIではCPUに比べて最大1.53倍、GPUNではCPUに比べて最大1.01倍、GPUIはGPUNに比べて最大1.50倍の性能向上がみられた。また、GPUIは最大で0.172GCUPSを示した。以上のことから、GPU版3次元SW法はCPU版SW法に比べて有効であることがわかった。

GPUIがGPUNに比べてGCUPSの値が増加しているのは、サブテーブルを利用することで一度に処理する要素数が増加しているためであると考えられる。

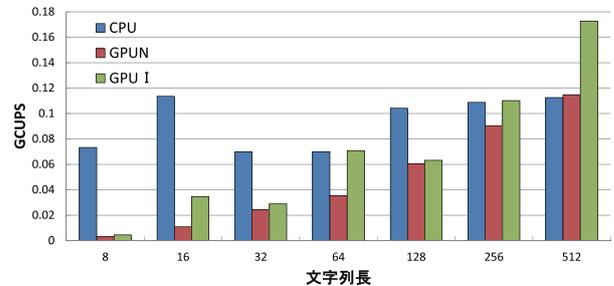


Fig. 3 3次元SW法の評価結果

5 まとめ

本稿では、3次元SW法の提案を行い、fNIRSの脳血流量データに基づいて評価を行った。結果として工夫ありのGPU実装は工夫なしのCPUの実装に比べて最大1.53倍の性能向上がみられた。今後は、SW法をn次元に拡張することが考えられる。

参考文献

- 1) 松下晋, 中川匡弘. 光トポグラフィーによる感性情報解析 (ヒューマンコミュニケーション). 電子情報通信学会論文誌. A, 基礎・境界, Vol. 88, No. 8, pp. 994-1001, 2005-08-01.
- 2) T. Smith and M. Waterman. Identification of common molecular subsequences. *Journal of Molecular Biology*, Vol. 147, No. 1, pp. 195-197, 1981.