

ハイエンド計算技術の 社会シミュレーションへの応用

鈴木 正昭, Serban Georgescu, 奥田 洋司

10ペタフロップス級「次世代スーパーコンピュータ」の設計・開発がスタートし、広範な学術研究および産業分野において計算科学技術の重要性がますます高まっている。その一方で、高性能計算機を有効に利用するためには特有の技術を要し、アプリケーション開発者の負担となっている。本稿では、高性能・高品質な並列アプリケーションの開発基盤としてのミドルウェアという考えを中心に、社会シミュレーションにおけるハイエンド計算技術の応用について述べたい。

キーワード：大規模並列計算，ミドルウェア，マルチエージェントシミュレーション，イノベーション普及，メタヒューリスティクス

1. はじめに

地球シミュレータ開発の成功や廉価なPCクラスタの普及、グリッド環境の登場にみられる並列計算機環境の発展により、広範な学術研究および産業の分野において計算科学技術の重要性がますます高まっている。地球シミュレータに続くナショナルリーダーシップシステムとしては「次世代スーパーコンピュータ」開発プロジェクトがスタートしている[1]。2010年以降ペタフロップス（1秒間に 10^{15} 回の浮動小数点演算）超級の演算能力をもつ計算機が運用開始となる予定であり、次世代スパコンが可能とする時空間スペクトルの広い大規模・複雑なシミュレーションについての議論が盛んである[2]。

一方で、そのような高性能並列計算機環境の利用にあたっては計算機の理論性能と実効性能（実際にアプリケーションを実行して測定される演算性能）の乖離が問題となる。並列計算機環境においては、プロセッサタイプやメモリ・アーキテクチャなどを勘案し、計算機ハードウェアに即した適切なチューニングをアプリケーションに施さなければ、得られる実効性能は理論性能よりもはるかに低い値となってしまう。さらに、その性能乖離は計算機の並列規模が増すに連れて拡大

する傾向にある。しかしながら、チューニングは専門的知識と経験を要するものであり、アプリケーションのハイエンド計算機環境への対応の障害となっている。

このような背景のもと著者らは、解析者の負荷を軽減すべく、高性能・高品質な並列アプリケーションの開発を効率的に支援する基盤ツール群であるところのミドルウェアの開発を進めている。本稿では、従来型工学計算における開発事例について触れながら、社会シミュレーション向けミドルウェアの開発とその応用に関する取り組みについて紹介したい。

2. 従来型工学計算における事例：ハイエンド計算ミドルウェア HEC-MW の開発

本節では、従来型工学計算におけるミドルウェアの開発事例について紹介する。ここで言うところの“従来型”としては、有限要素法を用いた自然物/人工物の、流体/構造解析などをイメージされたい。

著者らは、文部科学省次世代IT基盤構築のための研究開発「革新的シミュレーションソフトウェアの研究開発[3]」におけるサブプロジェクト「HEC-MWカーネル援用構造解析システムによる汎用連成シミュレーションシステム」において、(1)ハイエンド計算機環境を有効に利用できるマルチフィジクス・シミュレーションソフトウェアの効率的な新規開発、(2)既存有限要素法コードのハイエンド計算機環境への効率的な適用を可能とするライブラリ群 HEC-MW の開発、(3) HEC-MW を援用した有限要素法構造解析システム FrontSTR の開発、を推進している[4]。

すぎき まさあき, おくだ ひろし
東京大学 人工物工学研究センター
〒277-8656 柏市柏の葉 5-1-5
Serban Georgescu
東京大学 工学系研究科
〒113-8654 文京区本郷 7-3-1

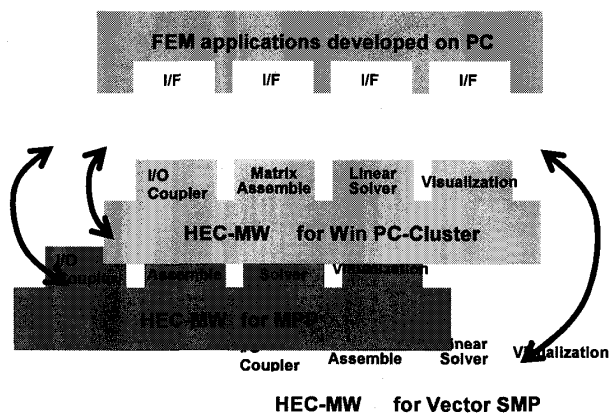


図1 HEC-MW を用いた有限要素法アプリケーション開発

有限要素法は汎用的な偏微分方程式の数値解法であり、共通する計算処理パターンや、連成解析に必要な共通インタフェースが抽出できる。こうした本質的な性質を、ハードウェアに依存しない形式で再利用可能な形に整備したものが、HEC-MWである。HEC-MWのサポートする機能としては、データ入出力、解析領域分割、線形ソルバ、並列可視化などがあり、各機能を実現するためのライブラリ群として整備されている。例えば、PCで開発されたソースプログラム(FORTRAN 90またはC言語で記述)をネットワーク上の各ハイエンド計算機にインストールされたHEC-MWとリンクすることにより、PCクラスタからベクトル並列計算機まで、それぞれのハードウェアに対して最適化されたコードを生成することができる。図1にHEC-MWとアプリケーションの関係を示す。従来の数値計算ライブラリよりも上流側のアプリケーション寄りに位置づけられることからミドルウェアと称している。

また、従前の商用構造解析コードが近年のハイエンド計算機環境への対応に苦慮する一方で、HEC-MW上で構築されたFrontSTRは地球シミュレータからパソコンに至る様々な環境において効率的な計算を実施できるという特徴をもつ。実際、例えば地球シミュレータにおける数億自由度規模の静解析においては、理論性能に対して約50%という高い実効性能を達成している。

3. 社会シミュレーション向けミドルウェアの開発とその応用

社会システムのような複雑な系において生じる現象

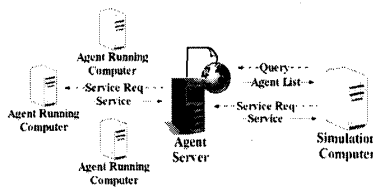
の理解において、マルチエージェントシミュレーションは有効なアプローチの一つである。解析対象である社会の構造は拡大と複雑化を続け、それを反映すべくシミュレーションにあっても系の構成要素たるエージェント数の大規模化、およびその行動ルールの高度化・知的化が進み、要求される計算量は増加している。

本節では、エージェントベース技術普及シミュレーションコードの開発基盤としての、並列分散エージェントシステムの開発について述べる。

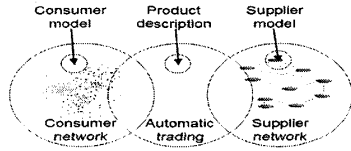
3.1 並列分散エージェントシステム MADS

著者らは、エージェントベース技術普及モデル・フレームワーク、およびそれを用いた並列シミュレーションコードの開発支援プラットフォームとして、並列分散エージェントシステム MADS (Multi-Agent Diffusion Simulation framework) を開発し、ウェブ上で公開している[5]。MADSは、エージェントベース技術普及シミュレーションに共通的な特徴・機能を抽出し、それらをサポートする汎用エージェントライブラリ群を提供するものである。その概要を図2に示す。

MADSにおいてエージェントは、メインシミュレーションを担うシミュレーションエージェントと、シミュレーションエージェントに対しサービスを提供するサービスエージェントに大別される。前者はシミュレーション全体のパターンを規定するもので、例えば、消費者などの意思決定主体間にネットワークが存在せず、周囲の影響を全く受けずに自身の行動を決定する理知的な人間を想定した *Disconnected* タイプや、ネットワークを有する消費者、製品生産者、およびそれらを仲介するマーケットから成る *Complex-interaction* タイプなどがある。サービスエージェントとしては、消費者や生産者などの各種アクターエージェントに加え、それらの間のネットワークトポロジーを定義するネットワークエージェントや、解析結果を可視化するためのプロットエージェントなども用意されている。当然、ユーザーが独自のサービスエージェントを作成・登録することもできる。各エージェントはその機能や引数、定義域といった仕様とともにエージェントサーバに登録され、それらはウェブインターフェースより検索・閲覧が可能である。そのため一度作成したサービスエージェントの再利用性も高い。並列分散環境において、メインシミュレーションを実行するマシンからエージェントサーバを介してサービスエージェントへリクエストが届き、それらが分散実行され、

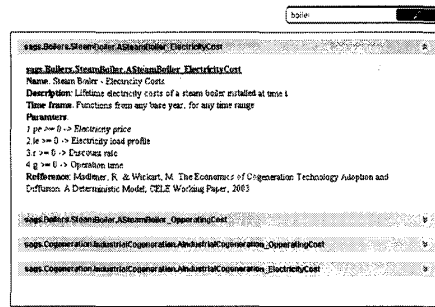


Distributed architecture

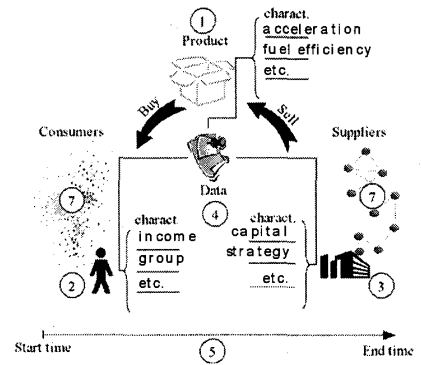


Automatic trading

MADS Agent Browser Utility



Web interface



Predefined simulation patterns

図2 並列分散エージェントシステム MADS の概要

所望のサービスが返される。

3.2 応用事例：省エネルギー自動車普及過程シミュレーション

ここでは MADS 上で構築・実施した、2000 年～2030 年の米国における燃料電池車 (Fuel Cell Vehicle: FCV), ガソリン車, ハイブリッド車普及過程のマルチエージェントシミュレーションについて紹介する [6].

持続性を有する社会の一つの形として、水素を利用する省エネルギー技術・製品を基軸とした水素エネルギー社会が有望視されている。特に FCV は、水素関連技術において現時点で最も実用化段階に近いものの一つであり関心を集めている。FCV の速やかな普及は、水素エネルギー社会移行の大きな駆動力となり得る。

本シミュレーションは、消費者、自動車メーカー、ガソリン・水素供給を担うステーション、の三種のエージェントから構成される。消費者エージェントはさらに *innovators*, *early adopters*, *majority* の三つのタイプに分類され、それぞれ新技術製品に対して異なる購買意欲を有する。消費者は初期状態としてガソリン車を保有し、4 年ごとに車両を買い替える。その際、自己の購買力 (収入)、各車種のコスト、技術特性、近隣の消費者の保有車種を考慮し、いずれの車種を購入するか意思決定を行う。車両の技術特性に対する消費者好みはアンケート [7] から得られた支払い意欲額に基づき設定した。これら条件のもと、省エネ車普及過程の政府介入 (設備投資および課税) レベルに対する感度解析、および車両の技術特性に対する感度解析を実施した。

省エネ車の普及においては、同時に水素供給インフ

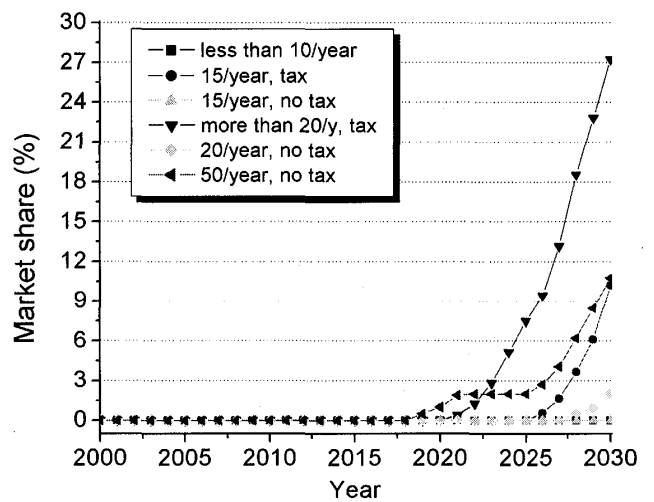


図3 FCV シェアの推移

ラの普及が必要不可欠である。ここでは水素供給ステーションが省エネ車の市場動向と政府の設備投資に応じて増加するものとし、その設備投資の規模が省エネ車および水素供給ステーションの普及に及ぼす影響をみた。加えて、ガソリン車とハイブリッド車の CO₂ 排出に対する課税の有無について感度解析を行った。本シミュレーションより予測された、FCV の普及率を図 3 に、全ステーション数に対する水素ステーション数の割合の推移を図 4 にそれぞれ示す。水素供給インフラの整備と省エネ車の普及はいわゆる Chicken-and-egg 問題である。図 3,4 より、水素ステーション比率は当初外生的にしか増えないが、FCV シェアがある点を越えると正のフィードバックが働き、水素ステーション比率、FCV シェアともに急激に増加し始めることが見て取れる。水素供給インフラへの外生的な増設補助 (ここでは、毎期 20 箇所以上の水素ステーション新設) と課税の同時適用無しには FCV の

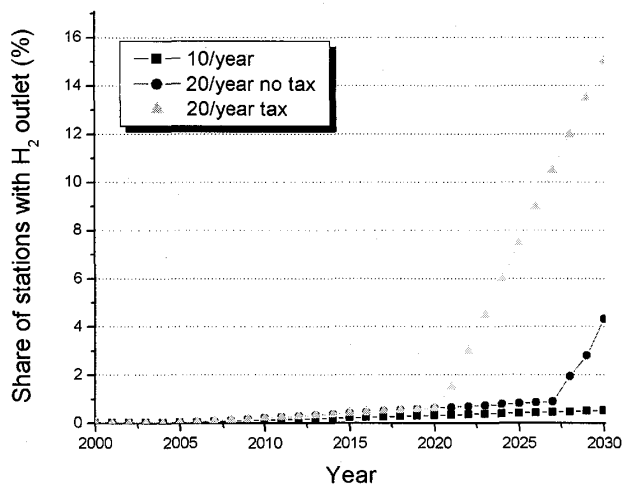


図4 水素供給ステーション比率の推移

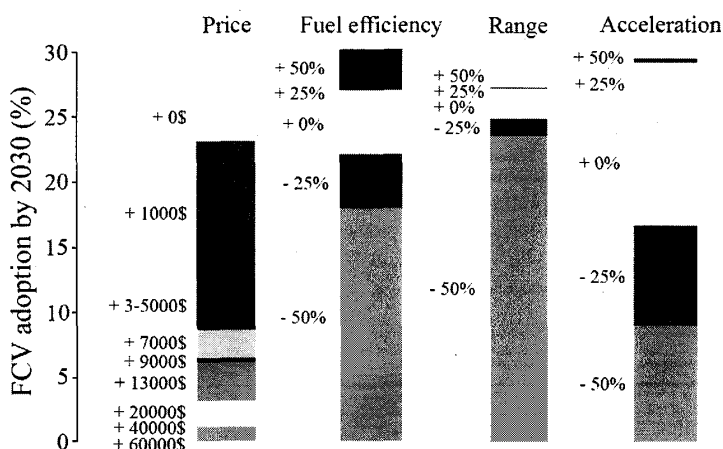


図5 車両特性に対する感度解析

速やかな普及はみられず、市場に対する政府の深い介入が必須であることが示されている。

次に、車両特性に対する感度解析の結果を図5に示す。本シミュレーションでは車両特性として価格、および燃費・航続距離・加速など五つの技術特性を考慮しており、それら水準の変化が2030年時点でのFCV普及率に及ぼす影響をみた。燃費および航続距離についてはさほど敏感ではない一方で、価格および加速に対する感度が高いことが示されている。

図6はシミュレーションの妥当性の検証として関連文献との比較を行ったものである。なお、FCVにおいては不確定要素が大きく検証にはそぐわないとして、ここではハイブリッド車の普及を比較に用いている。結果として、2005年までの実販売台数データとはほぼ完全に一致し、2006年～2010年においては他の予測の大勢と同様の傾向を示している。その後、2011年以降においては比較的悲観的な推移をたどることが示唆されている。

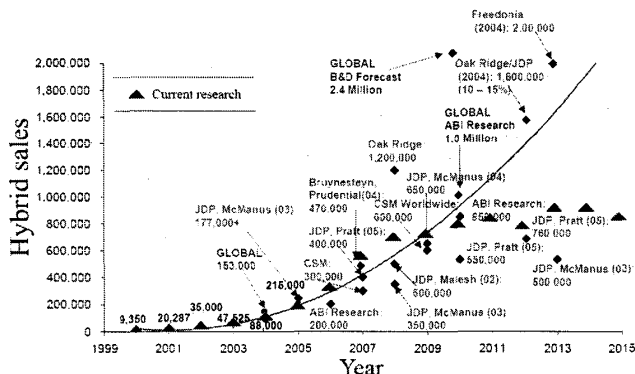


図6 関連研究との比較：ハイブリッド車の販売台数

3.3 応用事例：長期エネルギーミックスの多目的最適化

次に、多目的最適化計算とMADS援用技術普及解析の連成による、水素技術普及を考慮したエネルギー・ベストミックス分析への取り組みについて述べる。

化石燃料に依存した現代社会では、地球温暖化・化石燃料の枯渇・エネルギー安全保障などの問題が顕在化しており、持続可能なエネルギーシステムの在り方を検討することが急務である。社会の持続可能な発展のためには、トレードオフの関係にある三つの要素—経済成長/環境保全/エネルギー安定供給—を高い水準で同時達成していかねばならない。そのため今後の電源構造の最適構成の検討に際しては、経済コストのみならず環境への影響や供給リスクなどを取り入れた、多面的なシステム評価を行う必要があると考えられる。

ここではエネルギー・ベストミックス分析を多目的最適化として考える。様々な最適化の局面において、大域的最適解が得られなくとも、実用的な時間内に準最適解が得られることが望まれることは多く、そのためGAやSA (Simulated Annealing) に代表されるメタヒューリスティクスの利用が盛んである。特にGAのような多点探索型アルゴリズムは、パレート最適解を一度の計算により効率的に求めることが可能なため、多目的最適化に対し近年適用が進んでいる。以下にメタヒューリスティクスを用いた求解について示す。

本問題において、計算対象期間は m 期に分けられ、設計変数は各期 ($i=1, 2, \dots, m$) における各電源種 ($k=1, 2, \dots, n$) の発電電力量 x_k^i であり、 i 期におけるエネルギーミックスは $\mathbf{x}^i = \{x_1^i, x_2^i, \dots, x_n^i\}^T$ となる。最適化の対象となる一つひとつの解はある一つのエネルギーミックス時系列 $X = \{\mathbf{x}^1, \mathbf{x}^2, \dots, \mathbf{x}^m\}$ に相当する。目的関数には全期間にわたる総経済コスト F_{COST} や総

CO₂ 排出量 F_{CO_2} などが考えられる。また、制約条件としてはエネルギー需要の満足などが挙げられる。

簡単のため、まず単一目的の場合について述べる。解の生成にはメトロポリスモンテカルロ法を用いる。今、一つの解 X を得るために、部分解 x^i を $i=1, 2, \dots, m$ まで順に求めていく。以下に第 1 期 ($i=1$) を例に計算手順を示す。

- 1) 部分解候補 x^{old} を初期値とする。
- 2) 新しい部分解候補 x^{new} を x^{old} から生成する。
- 3) x^{new} と x^{old} を比較する。このとき、
 - ・ $F(x^{new}) < F(x^{old})$, すなわち改善があるとき、解候補 x^{new} を必ず受理して次の x^{old} とする。
 - ・ $F(x^{new}) \geq F(x^{old})$, すなわち改悪となるときは、以下の確率 P で受理して次の x^{old} とする。

$$P = \exp\left\{-\frac{F(x^{new}) - F(x^{old})}{T}\right\} \quad (1)$$

ここで T は一般に“温度”と呼ばれ、改悪を許容する度合いを示すパラメータである。“温度” T が高いほど、大きな改悪でも許容する確率が高くなる。 $T \rightarrow \infty$ で改悪許容確率 $P \rightarrow 1$ となりランダムサーチと等価に、 $T \rightarrow 0$ で改悪許容確率 $P \rightarrow 0$ となり改善のみを採用することになる。

- 4) ステップ 1) からステップ 3) を適当な回数反復する。

上記手順にて第 1 期の部分解 x^1 が求まったならば、次に第 2 期、第 3 期、と同様に繰り返す。そのようにして得られた解 X を、以下に述べるメタヒューリスティクス的一种であるレプリカ交換法に基づき最適化する。

目的関数が多峰性である場合に最適化アルゴリズムに求められる性質は「局所解探索能」と同時に「多様性の保持 (大域解探索能)」である。レプリカ交換法 (温度並列 SA と呼ばれる) [8][9] では、異なる温度をもち互いに相互作用することのないオリジナルの系のコピー (レプリカ) を複数用意する。それぞれのレプリカについて温度一定シミュレーションを独立かつ同時に進めながら途中で温度を交換することで、ある一つのレプリカに注目すれば温度が酔歩するため、準安定状態に捕らわれることなく広く解空間を探索することができる。図 7 にその概略図を示す。レプリカ交換法では低温レプリカにおけるシミュレーションが局所解探索に、高温レプリカにおけるシミュレーションが多様性の保持に相当し、かつ、それらが温度の交換

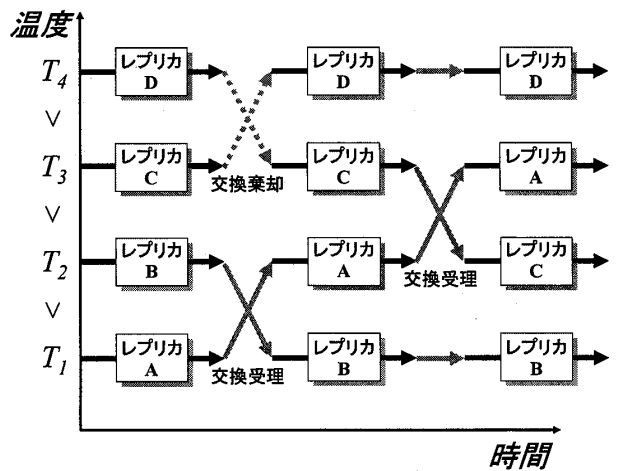


図 7 レプリカ交換法の概略図

を通じて繰り返されるため、多峰性をもつ問題の最適化アルゴリズムとしての性質を有しているといえる。

単一目的の場合には以下の二つのステップを繰り返す：

- 1) 各々のレプリカが各々の温度 T^l ($l=1, 2, \dots, n_{replica}$) において、部分解 x^i およびその集合たる解 X を独立かつ同時に計算する。
- 2) 隣り合った温度 (T^{low} および T^{high}) にあるレプリカペア間で、以下の交換確率 $w(X^{low}|X^{high})$ に基づき温度の交換を行う：

$$w(X^{low}|X^{high}) = \begin{cases} 1 & \text{for } \Delta \leq 0 \\ \exp(-\Delta) & \text{for } \Delta > 0 \end{cases} \quad (2)$$

$$\Delta \equiv \left(\frac{1}{T^{low}} - \frac{1}{T^{high}} \right) \{ F(X^{high}) - F(X^{low}) \} \quad (3)$$

二目的 (ここでは総経済コスト F_{cost} および総 CO₂ 排出量 F_{CO_2}) の場合には、あるレプリカ交換間隔ごとに、経済コスト方向に隣り合ったレプリカ間でのレプリカ交換試行と、CO₂ 排出量方向に隣り合ったレプリカ間でのレプリカ交換試行を交互に繰り返していく。図 8 に二目的の場合の最適化の概略図を示す。十分なレプリカ交換計算ののちには、図 8 左図のコスト-環境平面の下方に位置するレプリカの解は F_{CO_2} が強く最適化されたものに、左側に位置するレプリカの解は F_{cost} が強く最適化されたものに、そして左下に位置するレプリカの解はそれらがバランスしたものとなる。レプリカ交換法はレプリカ間で受け渡すデータ量が少ないため粗粒度の並列化が容易であり、大規模並列計算機環境においても高い実行性能の達成が可能な最適化アルゴリズムである。著者らは最適化問題の一種であるタンパク質最安定立体構造予測問題に対してレプリカ交換法を適用しており、地球シミュータ上で高い並列性能を実現している [10]。

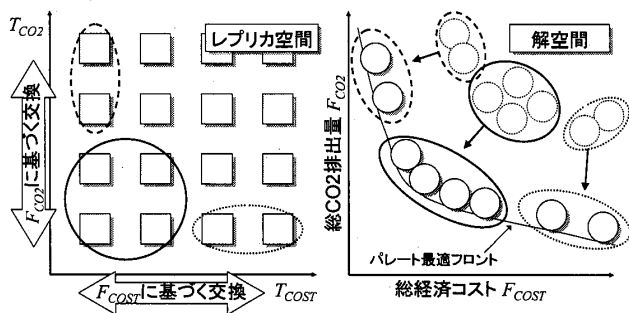


図8 レプリカ交換法による多目的最適化

一方、前述したような水素エネルギーに立脚した社会の実現可能性を論じるに当たっては、電力システムの構成と同時に、水素利用新技術の社会受容性について勘案することが必要となる。電力システムの構成と水素利用新技術の普及は相互に影響し合うものであり、例えば燃料電池自動車においては水素需給の観点で、また家庭用燃料電池においては分散型電源としてより直接的にカップルしている。そのため両者を連成した解析が必要となる。本事例では、メトロポリスモンテカルロ法による解の生成とMADS援用水素技術普及解析を交互に反復することで連成を実現する。それにより、例えば分散エネルギーシステムの規模・拡大時期などが電源構成に与える影響の評価、および最適な分散の度合いの検討などが可能となる。

MARKAL[11]をはじめとする代表的な最適化ベース長期エネルギーシステム分析モデルにおいては線形計画法などの決定論的な手法が用いられており、意思決定において有用な複数目的間のトレードオフ情報を得ることは至難である。前述したように多点探索型メタヒューリスティクスは有効な手段であるが、しかし多数の目的関数評価を要するためその計算コストは高い。本事例はそのような大規模最適化問題に対し、ハイエンド計算機環境を用いてアプローチするものである。

4. おわりに

社会シミュレーションにおけるハイエンド計算技術の応用について、高性能・高品質な並列アプリケーションの開発基盤としてのミドルウェアという考えを中心に言及し、並列分散エージェントシステムMADSの開発と応用について紹介した。国家の基幹技術たるハイエンド計算機環境は、純粋な科学技術の進展に対してのみでなく安全・安心で豊かな社会の実現に寄与し、広く国民がその恩恵を享受できるよう運用される

べきものである。その意味でオペレーションズ・リサーチは、時々刻々と変化していく社会情勢、経済状況、自然環境の中で膨大な施策可能性を探索するリアルタイム意思決定支援システムとして、ハイエンド計算機環境の大きな利用分野となり得るものと考えられる。

謝辞 本研究の実施にあたっては、文部科学省次世代IT基盤構築のための研究開発「革新的シミュレーションソフトウェアの研究開発」、地球シミュレータセンター、より支援を受けた。ここに記して謝意を表する。

参考文献

- [1] <http://www.nsc.riken.jp/>
- [2] 谷啓二, 奥田洋司, 福井義成, 上島豊, 編著, 「ベタフロップスコンピューティング」, 培風館, 2007.
- [3] <http://www.rss21.iis.u-tokyo.ac.jp/>
- [4] 奥田洋司, 荒川貴道, 「ハイエンド計算ミドルウェア援用構造解析システム」, 日本機械学会第19回計算力学講演会講演論文集, 553-554, 2006.
- [5] <http://nihonbashi.race.u-tokyo.ac.jp/mads/index.html>
- [6] S. Georgescu, W. Wu and H. Okuda, "A framework for simulating the diffusion of innovations and its applications in modeling the transition to the hydrogen society," in *Proceedings of the 6th International Workshop on Emergent Synthesis*, 43-52, 2006.
- [7] D. J. Santini and A. D. Vyas, "Suggestions for a new vehicle choice model simulating advanced vehicles introduction decisions (avid): Structure and coefficients," Technical Report, Argonne National Laboratory, 2005.
- [8] K. Hukushima and K. Nemoto, "Exchange Monte Carlo method and application to spin glass simulations," *Journal of the Physical Society of Japan*, 65 (1996), 1604-1608.
- [9] 小西健三, 瀧和男, 木村宏一, 「温度並列シミュレーテッド・アニーリング法とその評価」, 情報処理学会論文誌, 36 (1995), 797-807.
- [10] M. Suzuki and H. Okuda, "Acceleration of biomolecular dynamics simulations on the Earth Simulator," *International Journal of Computational Methods*. (accepted)
- [11] ETSAP, "Markal (market allocation)," Technical Report, International Energy Agency, 1998.