

科学研究費助成事業 研究成果報告書

令和 2 年 6 月 4 日現在

機関番号：12601

研究種目：研究活動スタート支援

研究期間：2018～2019

課題番号：18H06459・19K21528

研究課題名(和文)ヘテロ型スパコンにおけるマルチスケール群衆行動解析のフレームワーク構築

研究課題名(英文)A parallel computing framework for multi-scale evacuation simulations using particle-based models on heterogeneous computing platforms

研究代表者

都築 怜理(Tsuzuki, Satori)

東京大学・先端科学技術研究センター・特任助教

研究者番号：60822153

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 2,300,000円

研究成果の概要(和文)：演算加速器とスカラー型プロセッサが混合するヘテロ型の計算機において、セルオートマトン(CA)の一種であるフロアフィールド法と粒子法を用いた混雑・避難行動のマルチスケール解析を効率的に実行する計算フレームワークを開発した。巨視的な集団ダイナミクスをCAにより計算し、粒子間の微視的相互作用をラグランジュ粒子法により再現する。ヘテロ型の計算機に搭載されたスカラー型プロセッサ上でCAを実行し、演算加速器上で粒子法計算を実施する。空間充填曲線を用いたコア間の負荷分散や各粒子が保持するローカルリストによりシステム全体で実行性能の最適化を図り、実問題に対するシミュレーションによりフレームワークを実証した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

フロア・フィールド法は、距離関数場や足跡数などから算出される移動確率が最大となる方向に格子上で粒子を移動させるセル・オートマトンであり、群衆行動の本質的な振る舞いを再現できる反面、粒子間の微視的相互作用の効果を厳密に捉えることは難しい。一方、粒子間の相互作用を精緻にモデル化できる粒子法は計算負荷が極端に高い。本研究課題は2種類の異なる計算手法を連成させることで群衆のマルチスケール解析の実現を試みる挑戦的な研究であり、計算力学や計算工学的な観点から学術的な意義は大きい。また、粒子法における粒子間相互作用のモデルを変更することで様々な応用問題に適用でき、実社会に有益なツールを構築できる。

研究成果の概要(英文)：We developed a new computing framework designed to be compatible with heterogeneous computing platforms, to realise multi-scale evacuation simulations with high computational efficiencies. A floor field model, which is a stochastic cellular automaton (CA) model, is combined with the Lagrangian particle methods. The CA simulates macroscopic collective dynamics, and the Lagrangian particle methods reproduce the microscopic interactions among particles composing the system. We perform the CA calculations using multiple cores on a scalar processor and carry out particle-based simulations on a single GPU. To improve computational performance, a load balancing technique among CPU cores using space-filling curves, and a local neighbour-particle list held by particles on the accelerator, are implemented. Consequently, we have successfully demonstrated several practical simulations using our framework.

研究分野：大規模多粒子系力学、粒子法、粒子シミュレーション、粒子-流体連成、数理モデリング、大規模GPU計算

キーワード：群衆シミュレーション セル・オートマトン 粒子法 フロア・フィールドモデル ヘテロジニアス型
計算機 並列計算

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属されます。

1. 研究開始当初の背景

「フロア・フィールド法」は、2001年にドイツのケルン大学の研究グループにより提案されたセル・オートマトンによる群衆行動のシミュレーション手法であり、交通工学分野を中心に盛んに研究されている。一粒子で一人を表し、計算対象を格子に区切り、目的地(例えば、災害発生時においては、出口)からの距離に応じたポテンシャル場と足跡数から計算される移動確率が最大になる方向に粒子を移動させる(図1左側参照)。このような簡単な計算モデルにも関わらず、フロア・フィールド法は、群衆行動の本質的な振る舞いを再現できる利点を有している。その反面、粒子の移動が格子上に限られるため、粒子間の相互作用の効果を厳密に捉えることはできず、群衆なだれや将棋倒し現象などミクロスケールの作用が波及して生じるイベントを再現することは不得意である。

「粒子法」は、高性能計算の分野では3次元空間を自由に移動できる粒子間で相互作用を計算して全体の挙動を表現する数値シミュレーション手法全般を指す。粒子間で導入する相互作用モデルの種類によって再現できる物理現象は異なる。例えば、代表的な粒子法の一つである離散要素法(DEM)は、図1右側に示すように粒子間の接触相互作用をバネとダッシュポットにより近似的に表現する粘弾性体のシミュレーション手法である。粒子間に連続体力学に従う拘束条件を課すことで体積を有する粘弾性体を構成することもできる。SPH法などの流体計算の粒子法では、粒子は連続体をラグランジュ流体力学の観点から離散近似した離散化点となる。この場合、通常の圧縮・非圧縮性流体計算はもちろん、散逸動力学的な挙動(ブラウン運動)などを考慮すれば熱流体的な扱いが可能になる。このように、粒子法は(1)粒子間の相互作用を精緻にモデル化できる点、(2)相互作用モデルを変更することで多様な応用問題に適用できる点といった実用的な利点を有している。しかし、計算負荷が極端に高いデメリットがあり、スーパーコンピュータを用いた場合にも大規模な問題に対して短時間で答えを得ることは容易ではない。

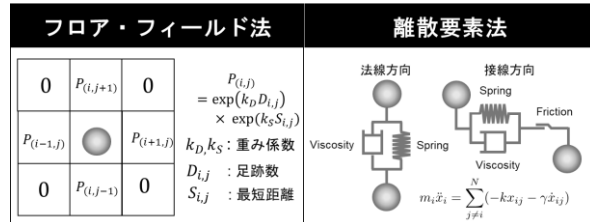


図1. フロア・フィールド法と離散要素法

近年、AIの急速な発達やディープラーニングの需要の拡大によって計算機システムに求められる用途は多様化している。現在普及している汎用計算を目的とする計算機サーバーの多くは、マルチコア・プロセッサを搭載したマザーボード上にGPU(Graphics Processing Units)や、MIC(Many Integrated Core)などの演算加速器(アクセラレータ)を接続したヘテロジニアス型計算機が主流となっている。そのため、同一計算機システム上に搭載された複数の種類の異なるアーキテクチャを効率的に利用して課題解決を図るヘテロジニアス・コンピューティングの重要性は一段と高まっている。研究代表者らは、このようなヘテロジニアス型計算機の特性を生かしつつ、性質の大きく異なる前述の2種類の計算手法、(1)群衆行動の本質的な振る舞いを再現できる反面、粒子間の微視的な相互作用の効果を厳密に捉えることが難しい「フロア・フィールド法」と、(2)粒子間の相互作用を精緻にモデル化できる一方、計算負荷が極端に高い手法である「粒子法」を連成させることで、応用度の高い群衆のマルチスケール解析を効率的に実現できるようになると考えている。すなわち、フロア・フィールド法による計算において粒子法を局所的に併用することで、計算負荷を抑えつつ、粒子間の接触相互作用(ミクロスケールの作用)の効果を捉えることのできる高精度な群衆行動シミュレーションの実現が期待できる。

2. 研究の目的

ヘテロジニアス型スパコン(以下、ヘテロ型スパコン)において高効率な混雑・避難行動のマルチスケール・シミュレーションが実行可能な計算フレームワークを構築することを研究目的とする。短時間での処理を可能にするために、ヘテロ型スパコンに適した群衆シミュレーションの計算アルゴリズムを開発する。

3. 研究の方法

水平方向に広がる平地を避難する場合だけでなく、建物内部の避難など立体的方向への移動を伴う群衆行動を再現するため、2次元動的フロア・フィールドモデル(Yanagisawa, et.al., 2008)を参考に3次元の計算コードを開発する。粒子法と比較すると3次元フロア・フィールド法の計算コストは低いため、ヘテロ型スパコンのホスト・ノードに搭載されたスカラー型プロセッサ上で実装し、マルチコア環境における計算効率の最適化について検討する。一方、計算負荷の高い粒子法計算はアクセラレータ側で実行するよう実装する。本研

究の目的はフレームワークの構築であることを考え、広範なアプリケーションに対応できるように、粒子の種類を離散要素法 (DEM)、平滑化散逸動力学法 (SDPD 法) の相互作用モデルを粒子毎に切り替えられるよう実装する。

ヘテロジニアス型の計算環境として 20 コアを搭載したインテル社製の Xeon Gold 6148 と NEC 社製のベクトル演算装置をアクセラレータとして搭載したスーパーコンピュータ (SX Aurora TSUBASA A300-2)、及び 8 コアを搭載した Core i9-9900K と NVIDIA 社製の GeForce RTX 2080 の GPU を搭載した PC (LEVEL-17FG102-i9K-VOPVI-D) の 2 種類の実行環境で動作するよう開発する。GPU 上で汎用計算を行うために NVIDIA 社の統合開発環境である CUDA を用いたプログラミングを実施する。アプリケーションのクロスプラットフォーム性を確保するため、コンパイル時のプリプロセッサの指定によって実行アーキテクチャの種類や実行環境を切り替えるよう計算コードを開発する。

4. 研究成果

はじめに、SX Aurora TSUBASA のホスト・ノードに搭載された CPU 上で動的フロア・フィールド法の計算コードを開発した。マルチコア環境における最適な並列計算アルゴリズムを検討するため、(a) 各コアの粒子数が均一になるようヒルベルト空間充填曲線を用いて計算領域を動的に空間分割し、各分割領域にコアを割り当てた場合、(b) 水平、垂直、及び 3 次元計算の場合は高さ方向からなる多重ループのうち最外ループを OpenMP によって並列化した場合の 2 種類について計算時間を比較した。動的フロア・フィールド法の計算過程の概要は次のとおりである。まず、①目的地からの距離と足跡数に応じて算出される確率値に応じて各粒子において移動先セルの候補を決定し、移動先となる各セルでは自身のセルに移動する粒子の候補リストを生成する (=移動粒子候補リストの生成)。次に、同一のセルに複数の粒子が同時に移動して衝突するのを防ぐため、各セルにおいて①で生成した粒子探索リストの中から自身のセルに移動する粒子をランダムに選択する (=衝突過程)。続いて、③移動が許可された粒子をパラレル・アップデート法に基づいて一斉に移動させる (=移流過程)。加えて、④出口から流出した粒子を削除し、最後に⑤足跡数の確率モデルにおける減衰・拡散項を計算して反復計算の単位計算ステップにおける全過程が完了する。

本研究において研究代表者らが実施した、正方形領域内に複数の建物と出口を有する 2 次元ベンチマーク問題に対する計算では、総計算時間に対して①が約 75%、②が 16% を占める結果となった。図 2 は (a) のヒルベルト空間充填曲線を用いた場合における実行時間の内訳とそのスレッド数 (並列コア数) への依存性を参考を示している。同様の強スケーリングによる性能評価では、(a) を用いた場合、(b)と比較して 10%~20% 程度の実行性能の向上が確認され、粒子数を均一にするよう動的な領域分割を用いた場合に実行効率が向上することが分かった。

①から⑤の各計算項目のうち、①では計算コストが各コアに割り当てられた粒子数に比例する一方、②~⑤では格子数に比例する。今回のベンチマーク計算において (a) が効果的であった理由は、総計算時間に対して①が主要部分を占めたためと考えられる。図 3a は階段を模擬した立体方向に群衆が避難する 3 次元シミュレーションのスナップショットを示している。この計算の場合、高さ方向が加わったことで②~⑤の格子数に依存する計算負荷が相対的に増加して①と同程度となり、(a) と (b)で実行性能に違いがみられなかった。今回の結果によって、動的フロア・フィールド法の並列計算は粒子シミュレーションと格子計算のハイブリッド型の負荷分散となることが判明した。

図 3b は群衆シミュレーションの結果を入力とした場合に対応する GPU 上での粒子法に

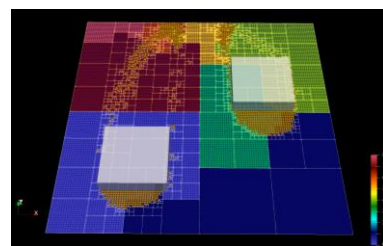


図 1. ヒルベルト空間充填曲線を用いた領域分割の例

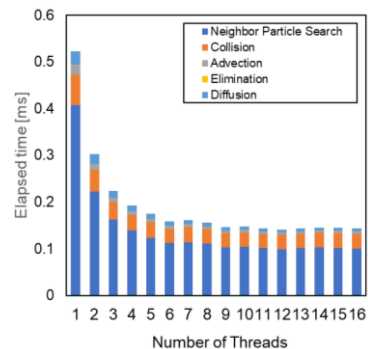


図 2. (a)空間充填曲線を用いた場合の実行時間のスレッド数(並列コア数)への依存性

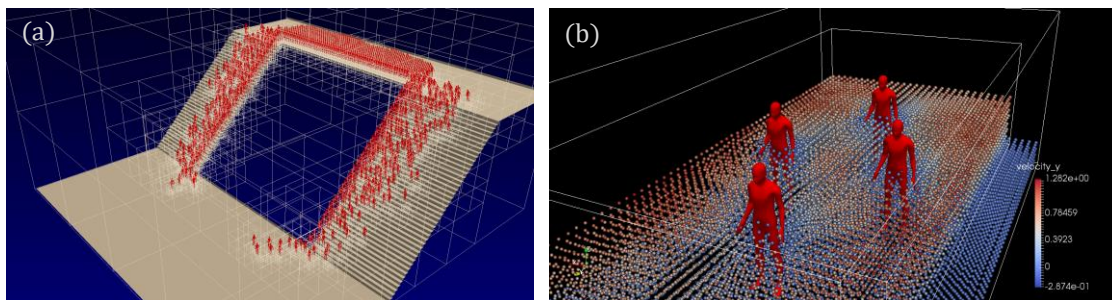


図 3. (a) 立体方向も考慮した 3 次元フロア・フィールドシミュレーション、及び(b)人体配置に対する粒子法計算

よる流体計算の様子を表している。これにより、群衆のミクロスケールの解析が実現可能になった。GPUを用いた粒子法の流体シミュレーションでは、通常、計算領域を覆う背面格子のセル毎に同一セル内に存在する粒子を数珠つなぎに参照するリンクリスト（近傍粒子探索リスト）を反復計算の各計算ステップのはじめに作成しておき、密度や圧力勾配項の計算ではそのつどリンクリストを辿って粒子間の相互作用を計算する。本研究ではCPU側で実施されたセル・オートマトンの結果やCPU側に配置された距離関数などのポテンシャル場をアクセラレータ側から効率よく参照できるようにするため、前述のリンクリストの作成後、粒子ごとに自身の相互作用の相手となる近傍粒子のリスト（ローカルリスト）を保持するよう実装した。これにより、全体としての計算時間はそのままに計算負荷の高いプロセスを各計算ステップの初期段階に集約して実行できるようになり、CPU側との通信プロセスが必要な場合はこの間に隠蔽（オーバーラップ）することが可能になった。

今後の課題について、現在の実装では、フロア・フィールド法のシミュレーション結果から群衆の分布（人体の座標）のみを粒子法計算コード側に渡す仕様になっている。また、人体モデルは粒子法の粒子群で再構築しており、流体と人体モデルの間には機械力学的な連成モデルが導入されている。今後、粒子状物質の拡散計算、人体を熱源とした熱流体解析、人体が将棋倒し状に折り重なった場合の応力解析など、様々な用途への応用が期待できる。さらに、フロア・フィールド法と粒子法の連結部分については土木工学や交通工学的な見地から詳細なモデル化が期待される。

当初の予定ではアクセラレータとしてSX-Aurora TSUBASAに搭載されたベクトル機を利用する予定であったが、計算資源の継続的な確保が難しく、この点が未実施となった。しかしながら、フロア・フィールド法と粒子法の連成をヘテロ型スパコンにおいて高効率に実現する当初の目的は達成することができた。また、粒子法の計算コードはコンパイル時のオプションによって、計算のタイプ（単精度/倍精度）、実行プロセッサ（CPU/CPU）、及び実行環境（Windows/Linux）を切り替えて利用できるよう実装されていて、ベクトル機においても動作することを別途、SX-ACE等を用いて確認している。これにより、アプリケーションのクロスプラットフォーム性や実行効率の向上については、第一段階としては本研究において達成されたと考えている。

本研究はフロア・フィールド法と粒子法という全く異なる領域の計算手法を連成しようとする萌芽的な研究であった。粒子法の数値計算モデルの検証、セル・オートマトンと粒子法の連成方法を模索する過程で関連分野においても有用な知見が多数得られ、研究業績にあるように各分野で評価の高い査読付き論文誌に掲載されたことは当初の予想を上回る成果であった。今後はさらに大規模な問題にも本フレームワークを適用できるように大型計算機における本フレームワークの実装や、複数アクセラレータへの拡張、及び高度化に向けた更なる機能拡充などに取り組んでいく。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計4件（うち査読付論文 4件 / うち国際共著 0件 / うちオープンアクセス 2件）

1. 著者名 Tsuzuki Satori, Yanagisawa Daichi, Nishinari Katsuhiro	4. 巻 4
2. 論文標題 Throughput reduction on an air-ground transport system by the simultaneous effect of multiple traveling routes equipped with parking sites	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of Physics Communications	6. 最初と最後の頁 055009 ~ 055009
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) https://doi.org/10.1088/2399-6528/ab90c3	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -
1. 著者名 Tsuzuki Satori	4. 巻 3
2. 論文標題 Entropy stability analysis of smoothed dissipative particle dynamics	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of Physics Communications	6. 最初と最後の頁 115009 ~ 115009
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) https://doi.org/10.1088/2399-6528/ab5421	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -
1. 著者名 Tsuzuki Satori, Yanagisawa Daichi, Nishinari Katsuhiro	4. 巻 504
2. 論文標題 Auto-generation of centerline graphs from geometrically complex roadmaps of real-world traffic systems using hierarchical quadtrees for cellular automata simulations	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Information Sciences	6. 最初と最後の頁 161 ~ 177
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) https://doi.org/10.1016/j.ins.2019.07.049	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Tsuzuki Satori, Yanagisawa Daichi, Nishinari Katsuhiro	4. 巻 98
2. 論文標題 Effect of walking distance on a queuing system of a totally asymmetric simple exclusion process equipped with functions of site assignments	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Physical Review E	6. 最初と最後の頁 42102
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) https://doi.org/10.1103/PhysRevE.98.042102	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計1件（うち招待講演 0件 / うち国際学会 1件）

1. 発表者名 Tsunami Satori, Yanagisawa Daichi, Nishinari Katsuhiko
2. 発表標題 Development of an Effective Computing Framework for Stochastic Multi-body Systems on Parallel Computing Platforms
3. 学会等名 APCEAS: Asia-Pacific Conference on Engineering and Applied Sciences (国際学会)
4. 発表年 2019年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
--	---------------------------	-----------------------	----