

# HPCシミュレーションとAIの融合による Society 5.0時代のスマートデザイン

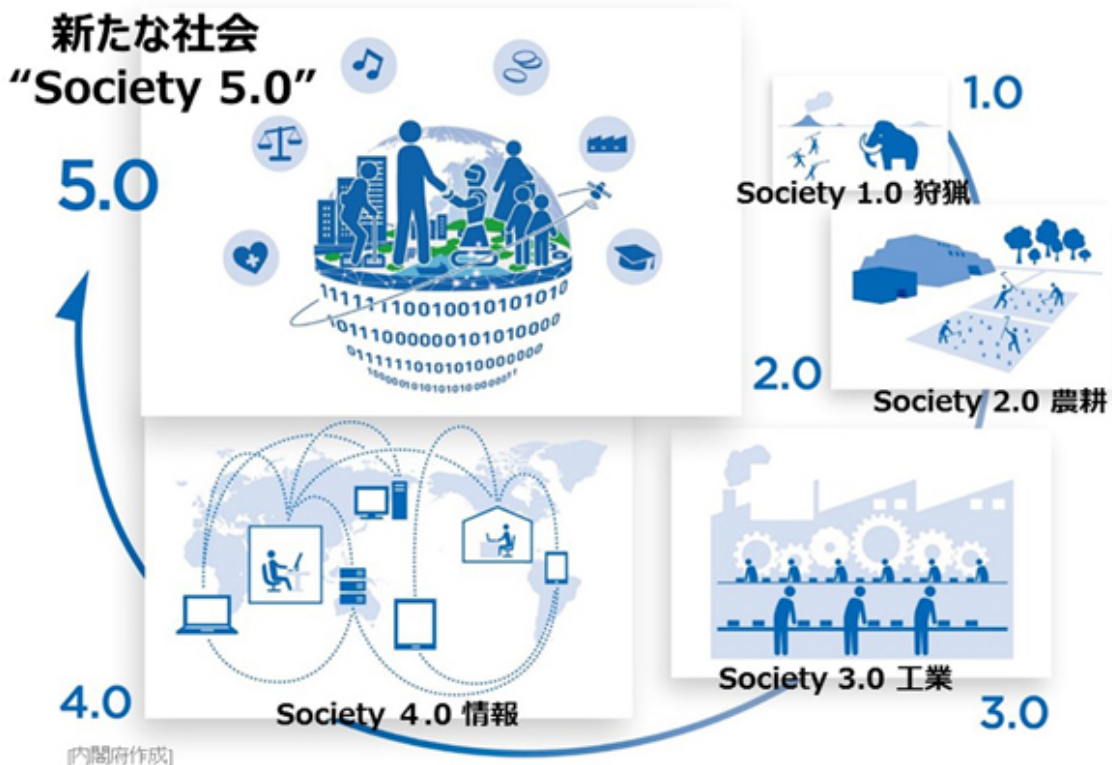
神戸大学大学院システム情報学研究科 計算科学専攻 教授  
理化学研究所 計算科学研究センター チームリーダー  
坪倉 誠

2021年9月7日

KOBE HPCサマースクール（初級）2021

12:40-13:40

- サイバー空間（仮想空間）とフィジカル空間（現実空間）を高度に融合させたシステムにより、経済発展と社会的課題の解決を両立する社会（Society）

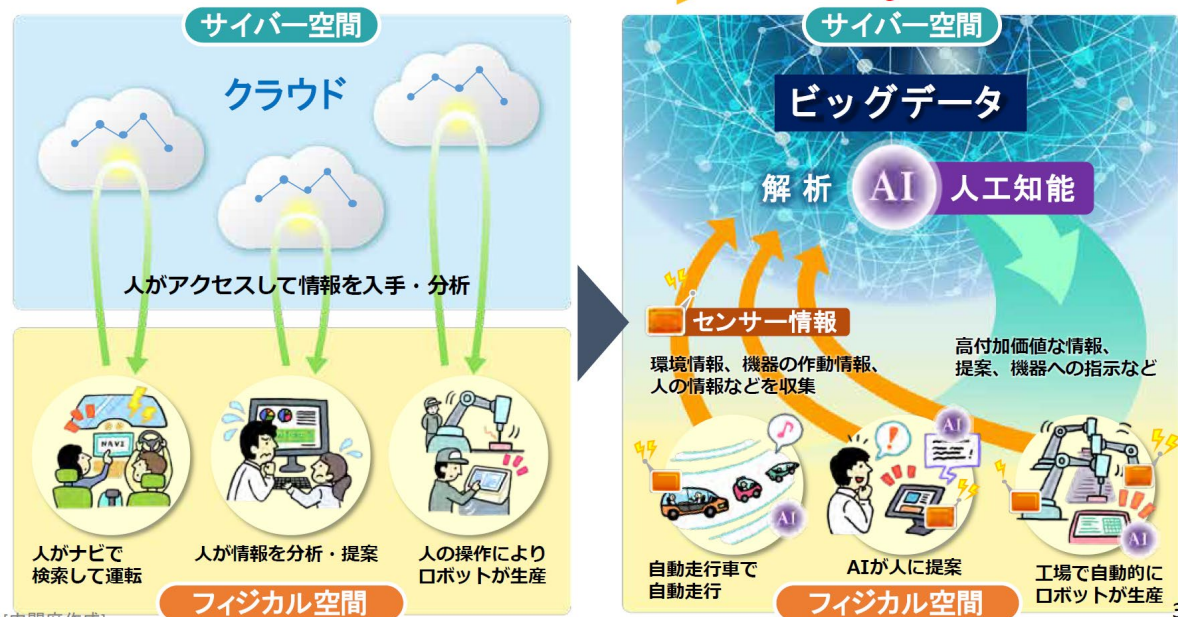


## サイバー空間とフィジカル空間の高度な融合

フィジカル（現実）空間から**センサー**と**IoT**を通じてあらゆる情報が集積（**ビッグデータ**）  
**人工知能（AI）**がビッグデータを解析し、高付加価値を**現実空間**に**フィードバック**

これまでの情報社会(4.0)

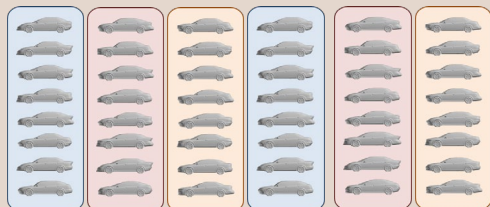
Society 5.0



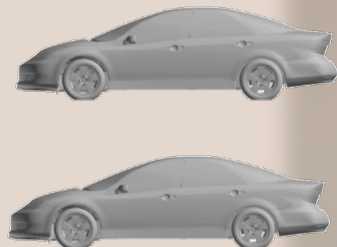


## サイバー空間（仮想空間）とフィジカル空間（現実空間）を高度に融合させたものづくり

Physical Space



膨大な形状候補の中から...



最適な形状を提案!



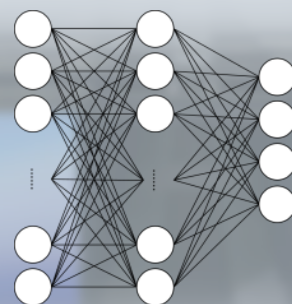
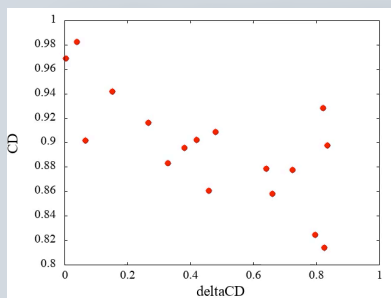
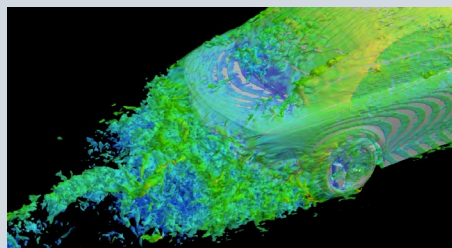
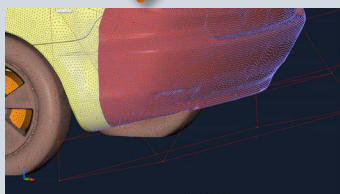
実走行する自動車や  
周囲環境の情報を入力すれば...



最適な運転条件の提案!  
自動運転のトレーニング!

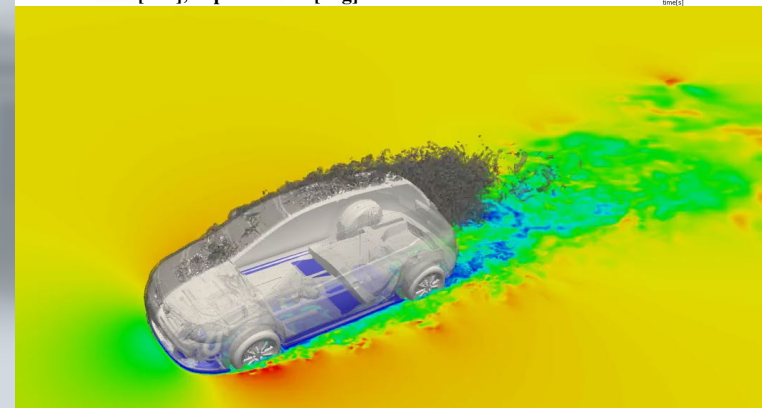
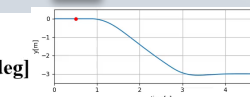


Cyber Space

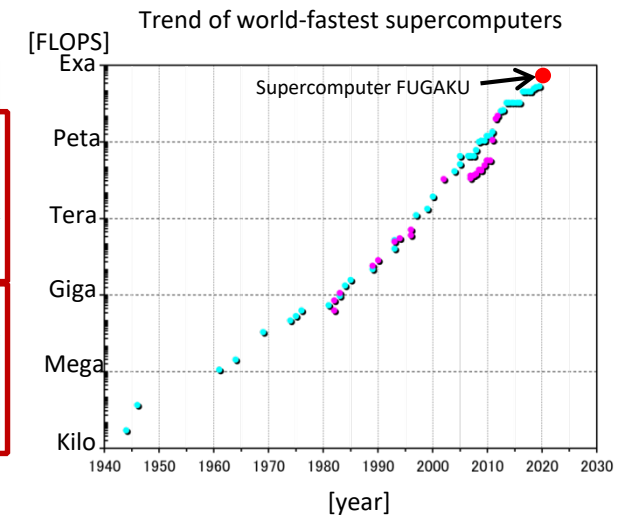
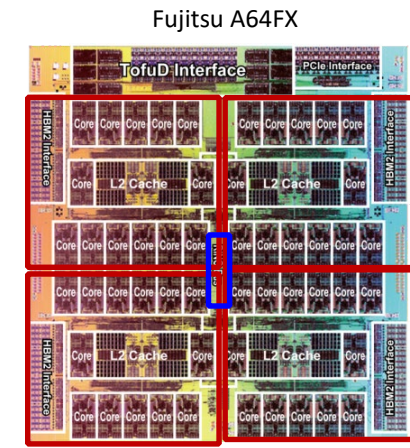


人工知能と高精度シミュレーションの融合

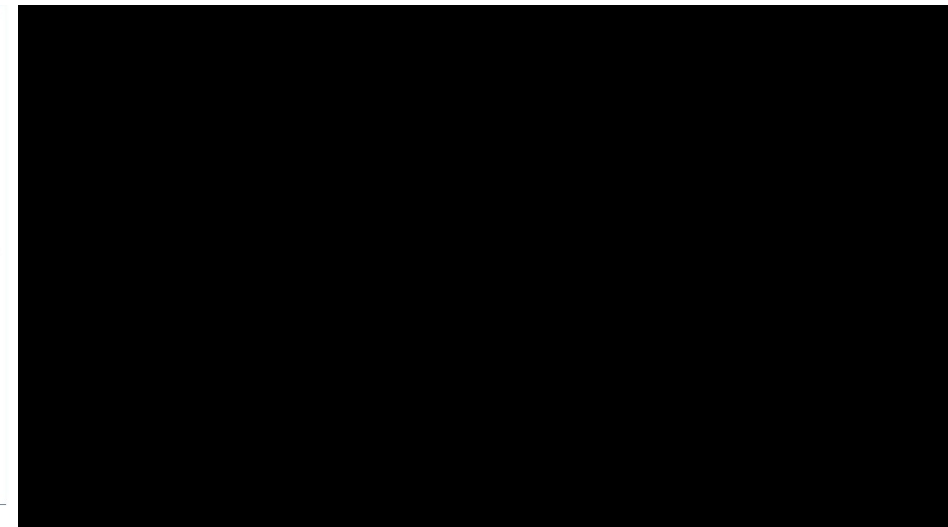
time = 0.5000[s]  
 x = 14.5995[m], y = -0.0038[m], z = 0.5509[m]  
 roll = 0.0458[deg], pitch = -0.3455[deg], yaw = 0.0029[deg]  
 vel = 27.8522[m/s], slip = -0.0031[deg]



- 相理論演算性能：488PFLOPS（倍精度）
- LINPACK実行性能：442.01PFLOPS（82.3%, 2020秋）
- 総ノード数：158,976個（京の約2倍）  
（384ノード×396ラック+192ノード×36ラック）
- ノード単体性能：3.072TF（京の約24倍）
  - 命令セットアーキテクチャ: ARMv8.2-A SVE 512bit
  - 計算コア数: 48 cores (+ 2 for OS)(京の6倍)
  - メモリとバンド幅: HBM2 32 GB(京の約2倍), 1024 GB/s(京の約16倍)
- インターコネク: Tofu Interconnect D
- 四冠達成(二期連続)：ISC(2020)とSC(2020)
  - Top500(442.01PFLOSP)
    - 密行列連立一次方程式
    - LU分解
  - HPCG(16.00PFLOSP)
    - 粗行列連立一次方程式
    - 共役勾配法
  - HPL-AI(2.00EFLOPS)
    - AI性能
  - Graph500(102.95TFLOPS)
    - グラフ探索性能（データ処理）



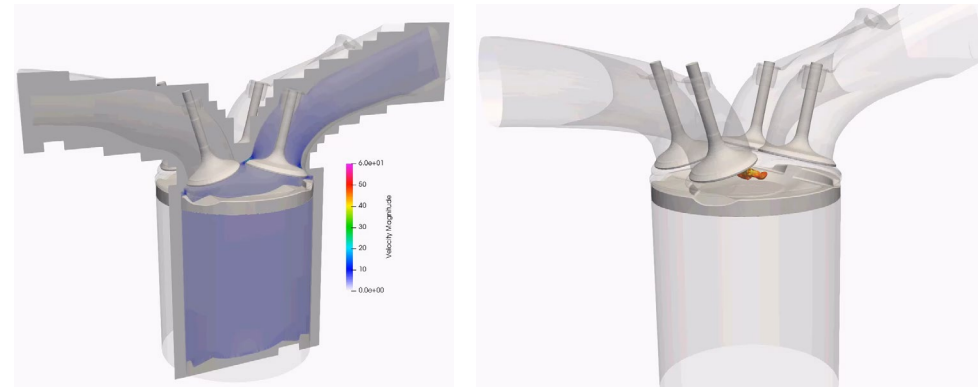
富岳ヴァーチャルツアー





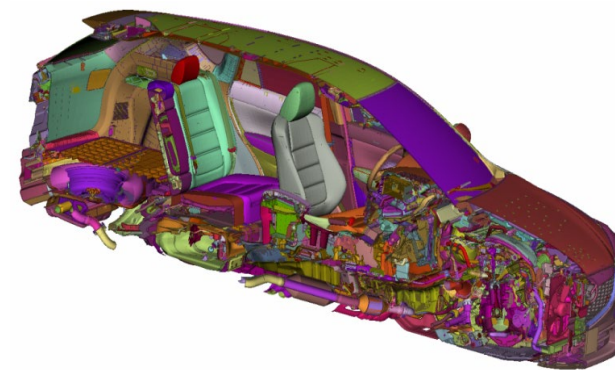
## ● 現象の複雑さ

- 熱・流体・構造…様々な現象が複合的に合わさった複雑・複合・連成問題
- 単なる性能評価のみではなく、性能向上を達成するために、現象のメカニズム解明も求められる（膨大な時空間データを扱う必要がある）



## ● 形状の複雑さ

- 数百～数千の部品が集まったデジタルデータ
- 部材間の隙間、重なり、厚み無し部材等、計算モデルの作成が困難

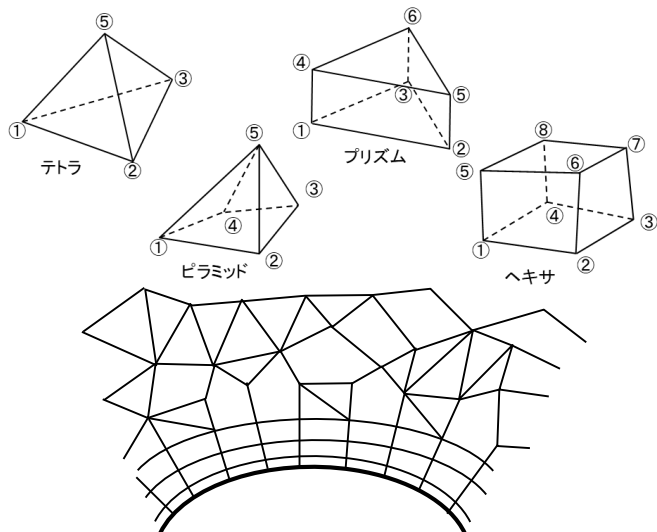


## ● 要求されるスピードの速さと膨大な対応ケース

- 実験計測以上のターンアラウンドタイムが求められる
- 実験では到底対応不可能な膨大なテストケースを扱うことが期待される

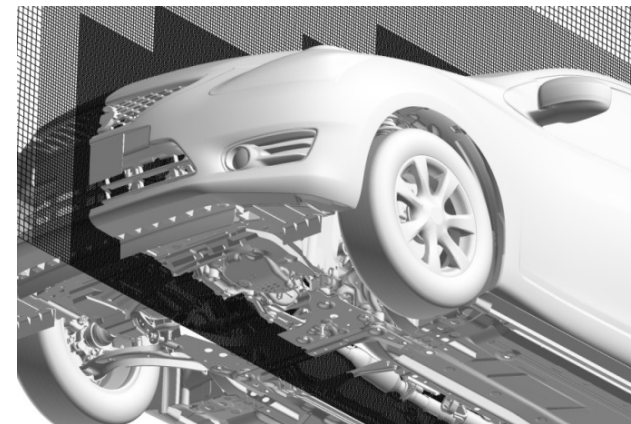
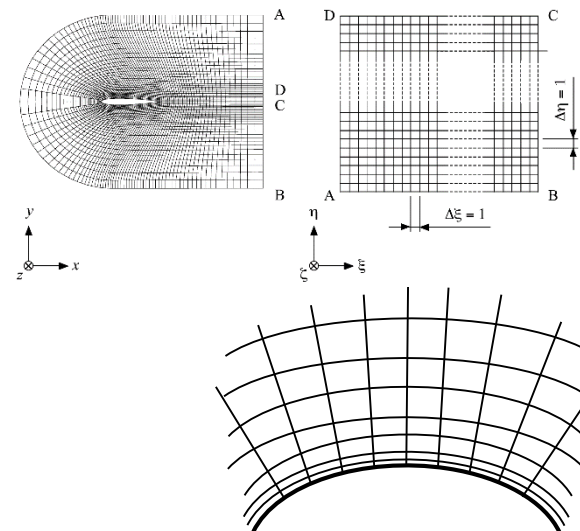
## ● 非構造データ

- 複雑形状の再現に有利
- データアクセスがランダムになる: **HPCに不利**



## ● 構造データ

- 規則的なデータ構造(x, y, z): **HPCに有利**
- 複雑形状の再現に不利



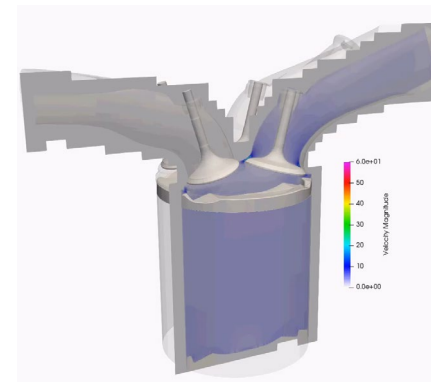
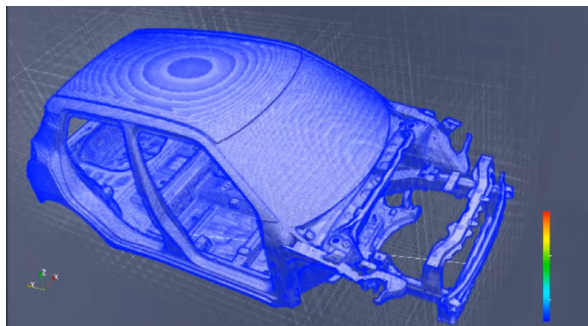
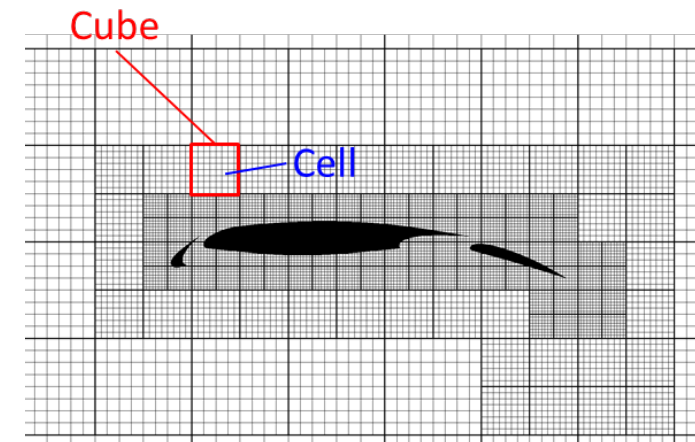


## 複雑流体・構造現象を大規模計算するための共通基盤シミュレーションフレームワーク

- 階層直交格子有限体積法
- 流体解析にはLESを採用した高精度解析
- 熱流体運動・構造変形・化学反応が共存する複雑現象場に対してスケーラブルな連成アルゴリズム
  - トップダウンに全体構造が見渡せる統一的数据による偏微分方程式解法
  - 流体と構造を連続体として統一的に扱える基礎方程式

## プログラムの特徴

- Building Cube Method (Nakahashi et al., 2003)
  - プロセッサ単体性能の向上と超並列環境に適したデータ構造
- Immersed Boundary Method (Fadlun et al., 2002, Rahul et al., 2020)
  - 複雑形状や移動境界に適した境界処理
- Dirty CAD treatment (Onishi et al., 2013)
  - 産業界で用いられているCADデータ（部材間ギャップ, 重なり, 厚み無し等）に対応した高速なメッシュ作成



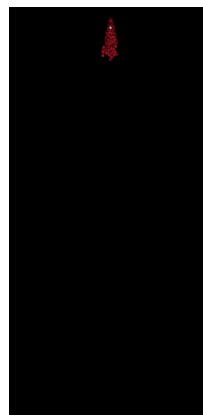
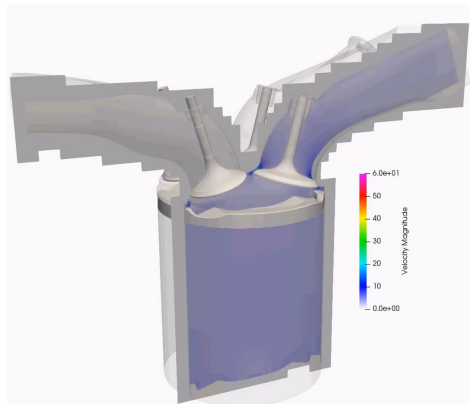
# 複雑現象統一的解法CUBEの開発

高速かつ大量にシミュレーションモデルを作成し、スパコン性能を最大限に活用できるソフトウェア

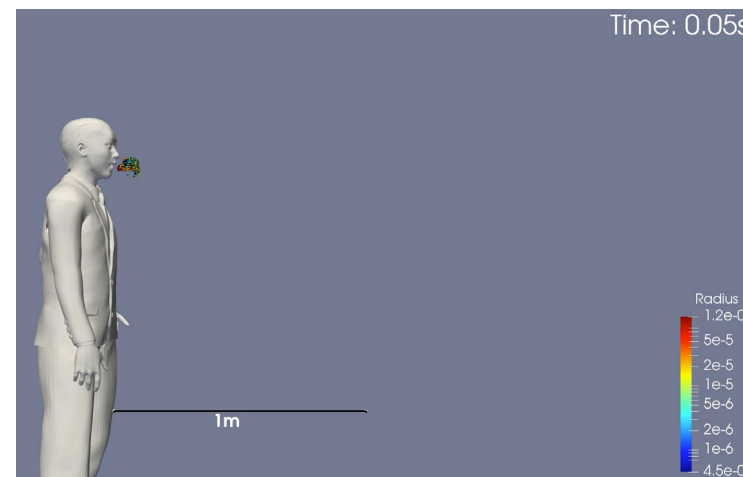
- 2012年より理化学研究所で産学連携で開発.
- スパコン「京」を活用して、自動車、燃烧システム、建築耐風設計で多くの実績.
- 2020年初頭、Society5.0時代のものづくりへ向けて富岳でチューニング中に、新型コロナパンデミックが発生.



「京」による自動車エンジンシミュレーションと燃料噴霧噴射の様子



「富岳」による飛沫シミュレーション





## 背景

- 我が国の産業界では、少子高齢化する社会での国際競争力の強化や、予期せぬ新興ウイルスの蔓延、カーボンニュートラル社会の実現、自然災害とその後の社会変容へ対応するために、新たなデジタルエンジニアリング技術を活用したものづくりが求められている。
- そのためには、既存の性能評価実験の代替としてのシミュレーションに留まらず、サイバー空間とフィジカル空間をより高度に融合させたSociety5.0時代のスマートデザインシステムの構築が不可欠である。

## 目的

- 計算科学と情報科学を融合させた新たなデジタルエンジニアリングシステムを創生し、製品デザイン・設計に活用する。
- 4つの具体的設計：(1)自動車空力設計、(2)都市・建築設計、(3)室内環境設計、(4)燃焼システム設計、に適用し、産学連携でその有用性を実証、産業界への実装を目指す。

## 優位性

- スパコン「京」や「富岳」において、産業問題に対してその有用性が既実証されているソフトウェア（CUBE, FFR）を基盤技術とする点。
- 単なる技術開発に留まらず、それぞれの課題に応じた産学連携コンソーシアムを活用し、システム設計から実証、社会実装までを目指す点。
- 情報科学における従来のトップダウン式研究と異なり、ボトムアップ式に実際の設計現場で得られた知見を還元できる点。
- 「富岳」による機械学習やソフトウェアチューニング（DL4Fugaku）で、理研R-CCSの全面的な支援を得る点。

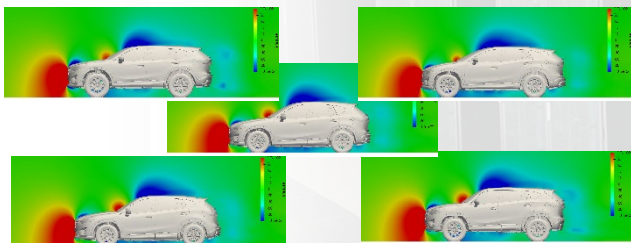
## 三位一体のR-CCS高度化利用研究の活用

計算科学      計算機科学      データ科学

利用ソフトウェア（CUBE, FrontFlow/red）やデータ科学技術（AI, データ同化）及びその「富岳」チューニング支援

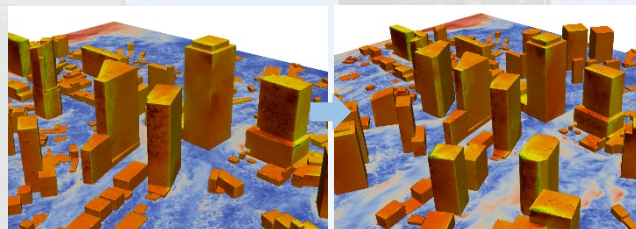
サブ課題A（神戸大）  
意匠空間を考慮したAI支援多目的  
最適化による自動車空力デザイン

CUBE



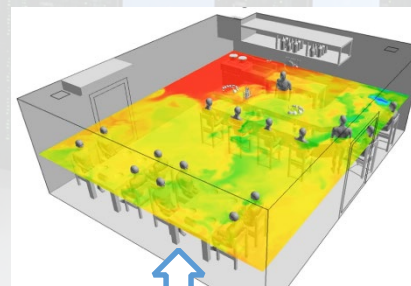
サブ課題B（東工大）  
変容する都市・建築の自然擾乱  
対応の性能設計

CUBE/FFR



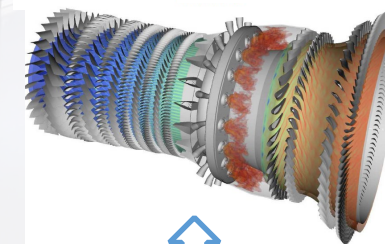
サブ課題C（九大）  
新興ウイルス感染症にロバストで  
健康・快適・サステイナブルなポ  
ストコロナ時代の室内環境設計

CUBE



サブ課題D（京大）  
マルチコンポーネント統合シ  
ミュレーションによるカーボ  
ンフリーガスタービン設計

FFR



産業界の強力なバックアップでニーズに対応したシステム開発と実証，社会実装を目指す



## 背景

- **カーボンニュートラル**実現に向けた新たな自動車の開発には、今までの長年の経験に基づく「ものづくり」では不十分。**AIを活用**して、より高速に複数の設計案件に対して**多目的最適化**する技術が必要。
- 自動車空力設計では、意匠担当の**デザイナーと協調した形状最適化**が不可欠であり、既存の空力性能設計空間のみでの最適化は実用化しない。

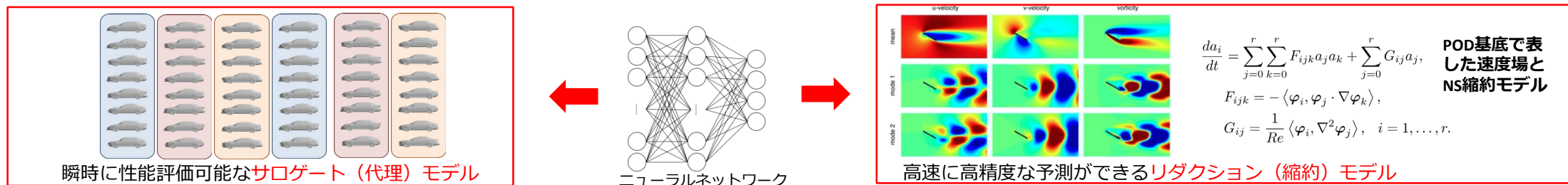
## 目的

- **性能設計空間と意匠デザイン空間を融合**させた新たな空力多目的最適化システムを構築し、実際の自動車空力設計に適用することで、その有用性を実証する。
- 多次元設計空間での最適化を実現するために、**遺伝的アルゴリズムに基づく多目的最適化**を、自動車設計で実用化するフレームワークを構築する。
- キャパシティコンピューティングによる多目的最適化で問題となる計算負荷低減技術として、機械学習により**サロゲート（代理）モデル**や**リダクション（縮約）モデル**を構築し、多目的設計の大幅な時間短縮を目指す。

## 優位性

- キャパシティコンピューティングによる多目的最適化で問題となる計算負荷低減技術として、機械学習により**サロゲート（代理）モデル**や**リダクション（縮約）モデル**を構築し、多目的設計の大幅な時間短縮を目指す。

## ● 機械学習によるサロゲートモデル・リダクションモデルの開発

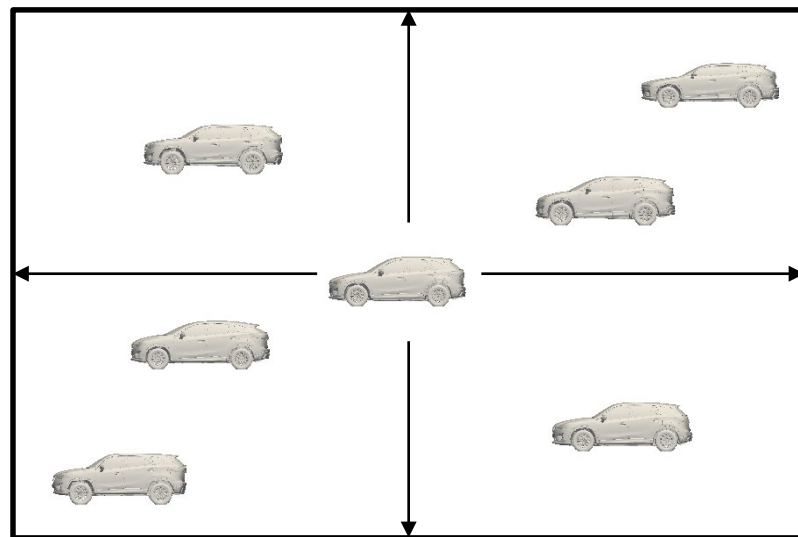
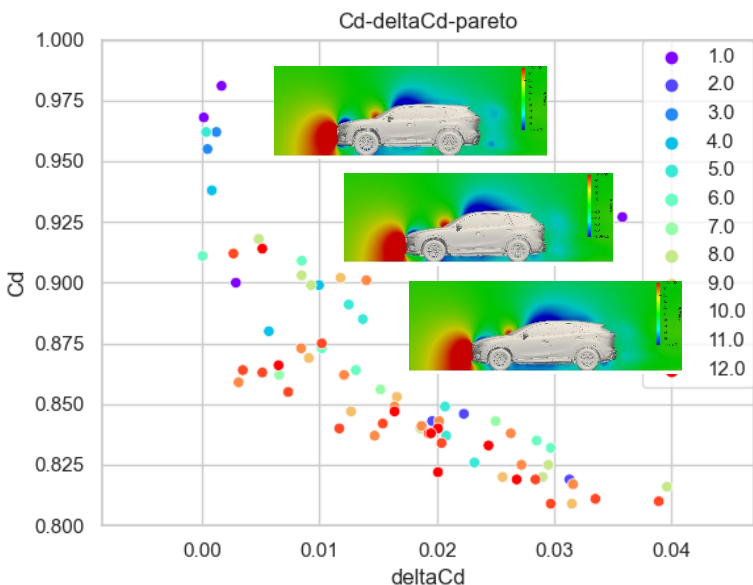


## ● サロゲートモデル・リダクションモデルとシミュレーションを併用したAI支援多目的最適化

性能設計空間  
(空気抵抗, 前後揚力バランス, 横風安定性...) +

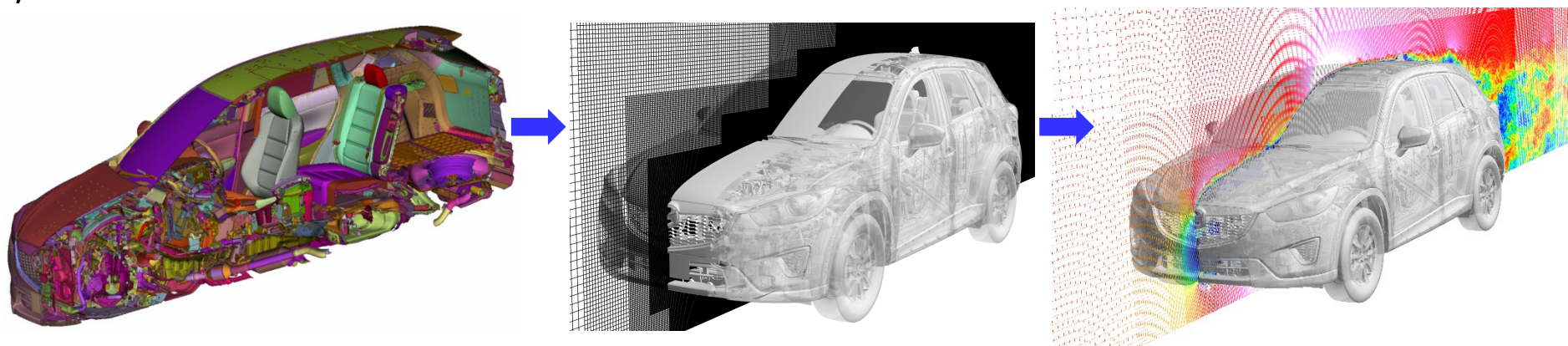
デザイン特性空間

= エンジニアとデザイナーの協調作業の実現!

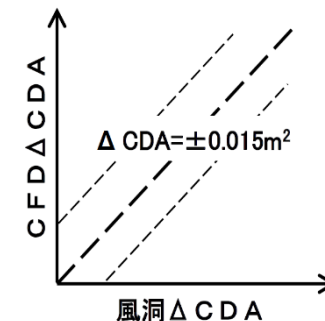
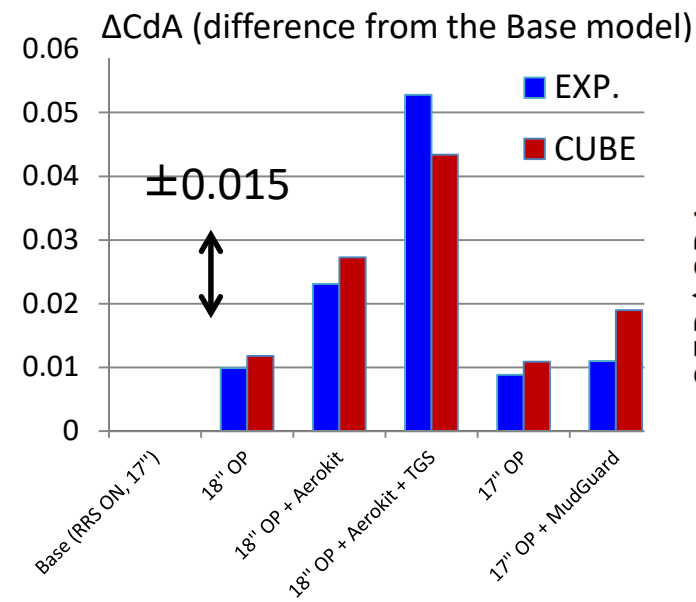
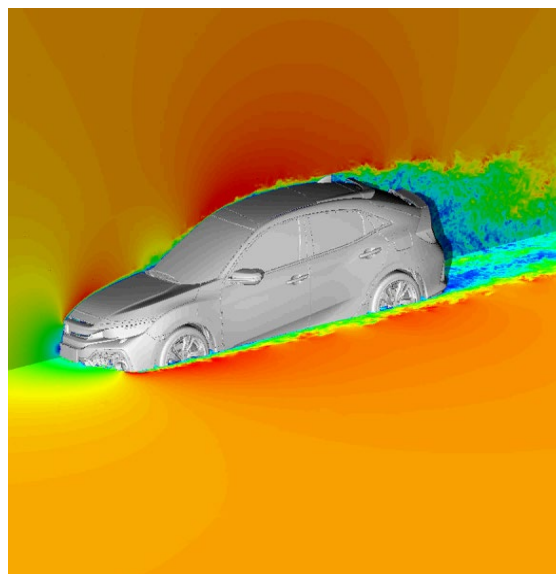
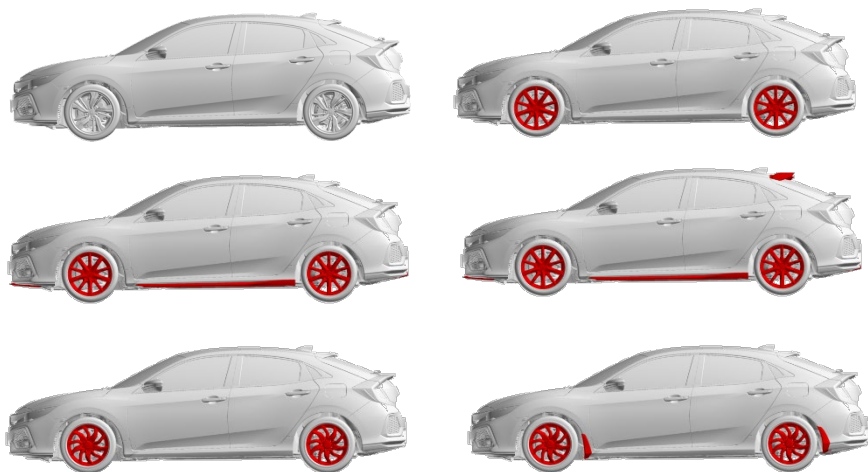


## Dirty CADからの直接メッシュ作成

- Dirty CADからの270億セルメッシュ作成を1時間以内で実現



## WLTP(Worldwide harmonized light vehicles test procedure)認証に要求される予測精度を実現





## サロゲートモデル併用多目的最適化フレームワーク

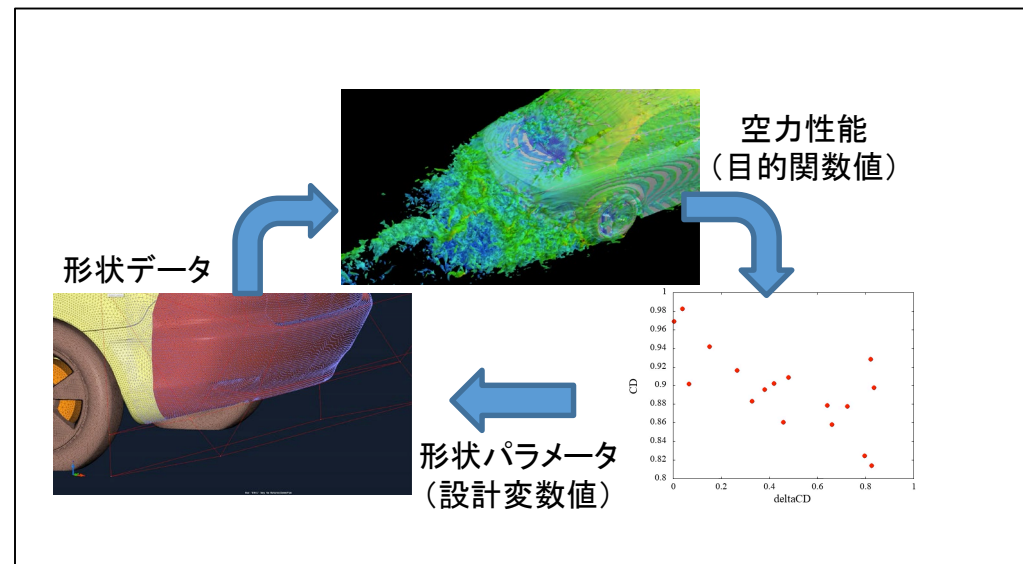
### 多目的進化アルゴリズム (Cheetah/R, JAXA)

- 多目的最適化問題のパレート最適化が一度に得られる
- 大域的最適解探索が可能
- HPCI戦略プログラム等で既に多くの実績

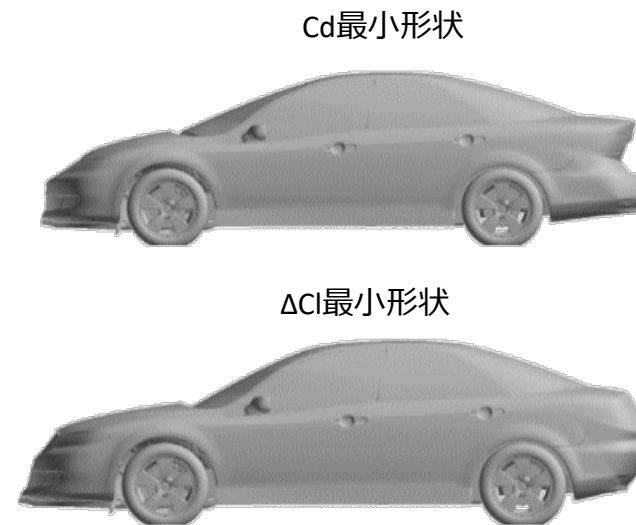
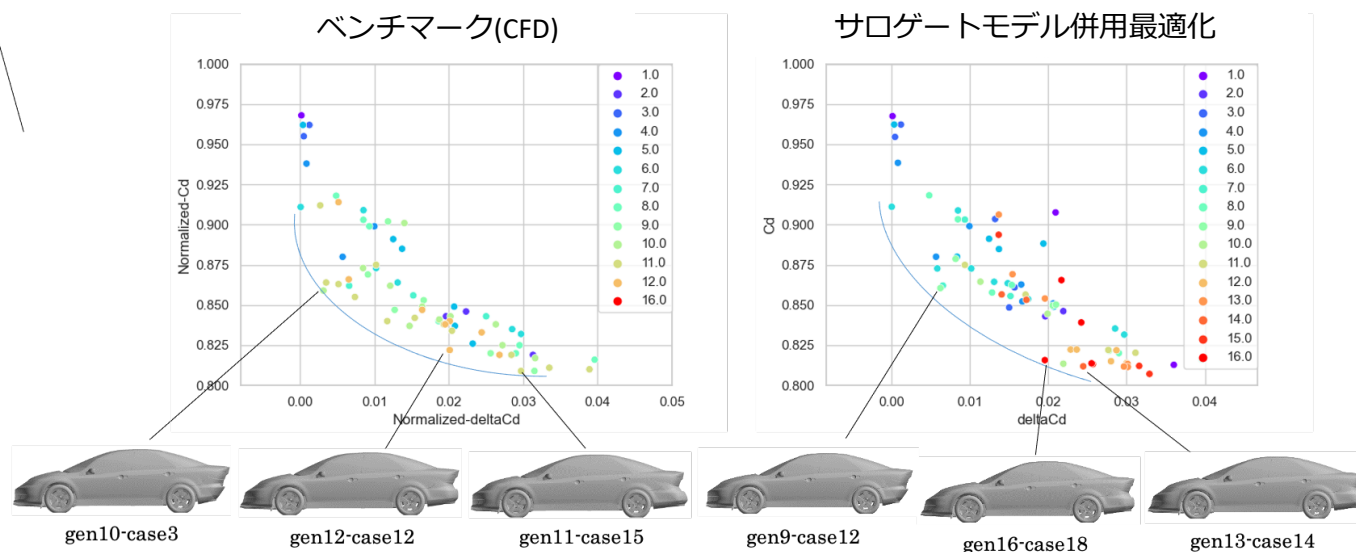
### サロゲートモデル

- ガウス過程回帰モデルによる機械学習
- 予測値の不確実性に基づくシミュレーション/サロゲート選択

フレームワークは「富岳」に実装済み



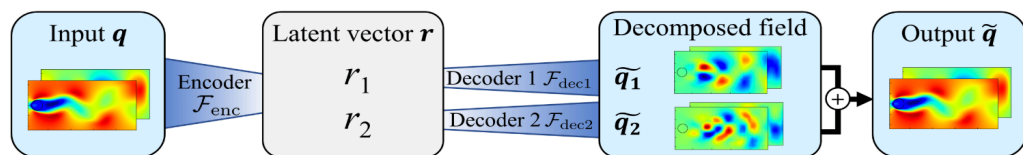
8設計変数, 4目的関数, 18集団サイズ, 16世代サロゲート併用多目的最適化の例



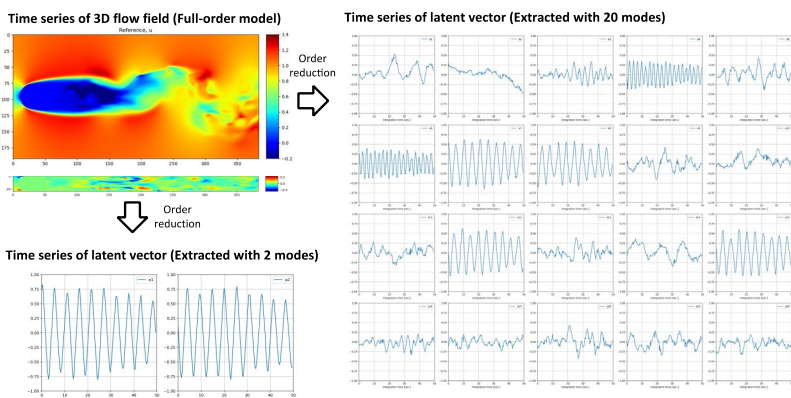
### 3次元円柱周り流れ場の縮約モデル

- 次元縮約のための非線形関数(Encoder)及びその逆関数(Decoder)をニューラルネットワークを使用した機械学習により構成する
- 縮約された空間での系の時間発展については、時系列データの学習に適したLSTM(Long-Short Term Memory)を使用して予測する

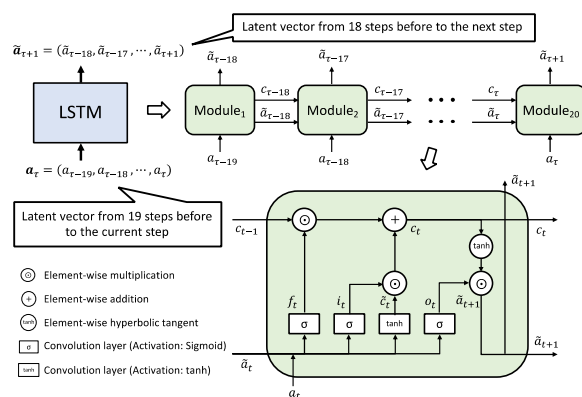
#### 次元縮約のためのニューラルネットワークの構成<sup>[1]</sup>



#### 次元縮約の例 (2変数または20変数)

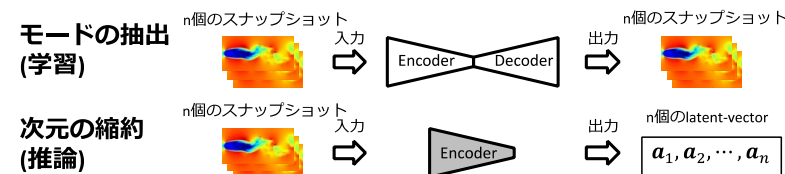


#### LSTMによる時間発展の予測

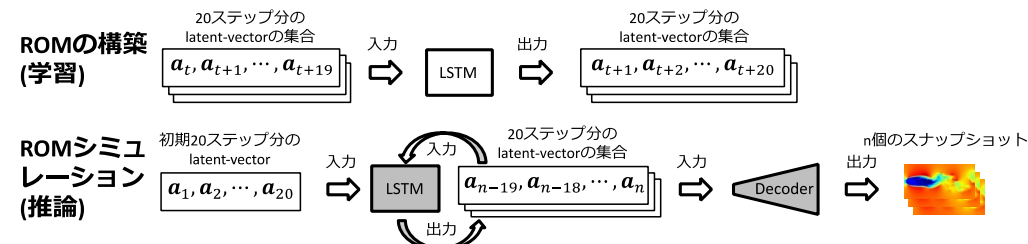


#### 縮約モデル構築の手順

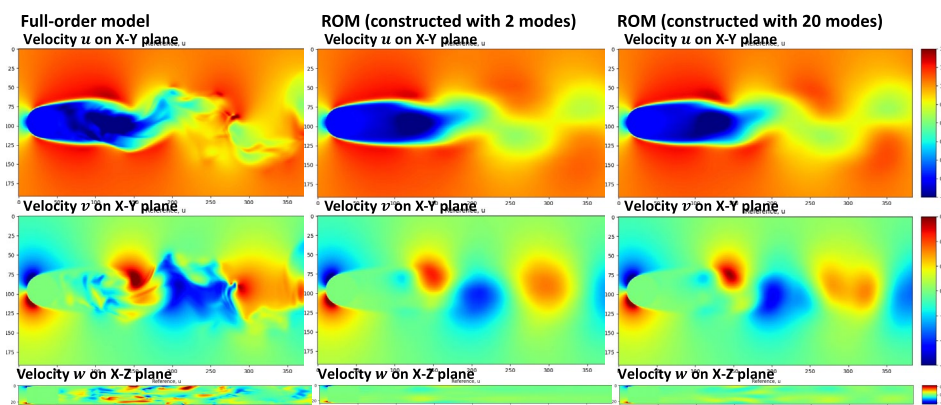
##### 1. 3次元流れ場からのモードの抽出



##### 2. 縮約空間における時間発展をシミュレート



#### 縮約シミュレーションの結果



[1] T. Murata, K. Fukami, and K. Fukagata, "Nonlinear mode decomposition with convolutional neural networks for fluid dynamics," *J. Fluid Mech.*, vol. 882, A13., 2020, doi:10.1017/jfm.2019.822.

## 背景

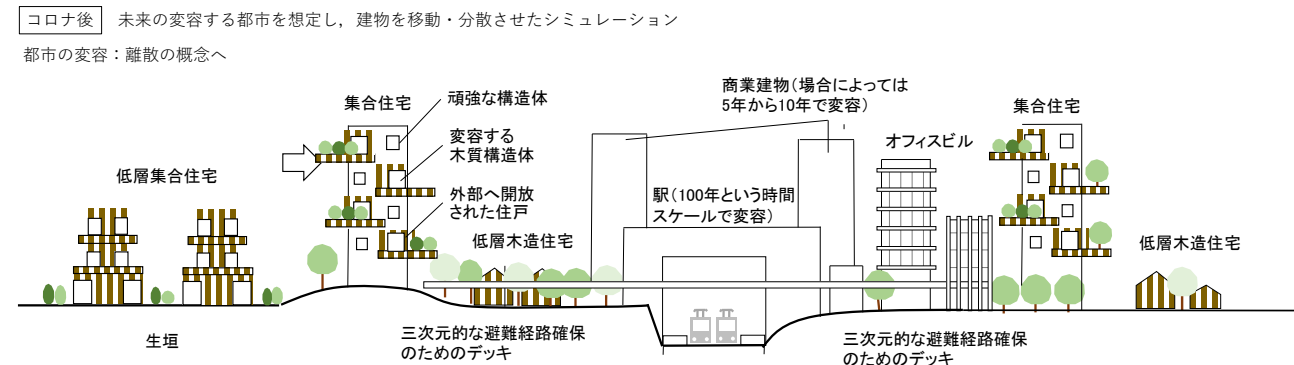
- コロナなど**感染症の蔓延**を起こさせない、あるいは将来の**気候変動**による温暖化を抑制するための**カーボンニュートラル**を  
実践する社会の構築が喫緊の課題であり、これまでの集中化する都市・建築の姿を見直すことが求められている。
- 地球温暖化がもたらす将来の顕著気象に対して未経験の気象インパクト下での**変容都市**の**安心安全**な生活の構築。

## 目的

- データサイエンスに基づきメタボリズム（新陳代謝）的に変容する都市・建築モデルをサイバー空間上に再現し、都市・  
建築の離散的空間での換気性能、グリーンインフラに基づく気温調整機能を定量化する
- **気象モデルと乱流シミュレーションを融合**した広範囲の周波数帯の乱流変動の再現し、**極端気象**（スーパータイフーン、  
竜巻、豪雨）下での都市・建築の挙動を把握することで**防災性能**を予測する
- Society 5.0の理念を踏襲しながら、**自然起源の擾乱の都市・建築へのインパクト推定技術**の社会貢献をめざし、コン  
ソーシアムを基本として、産業界を巻き込んで実務的展開と不確定性に基づく**性能設計の理念と方法を構築**する

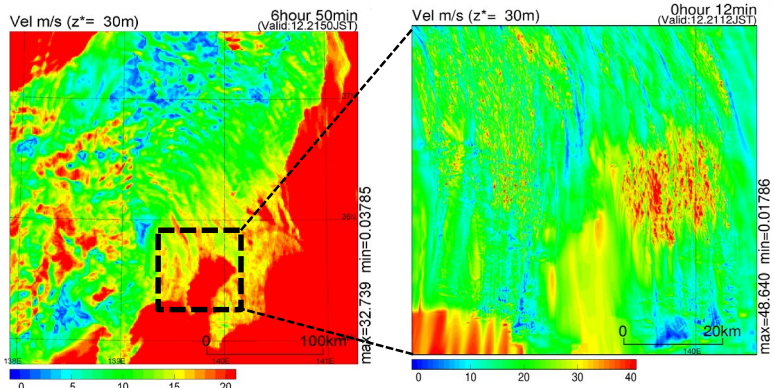
## 優位性

- 環境判定結果と被災推定結果のデータサイエンスに基づく分析により換気性能の確保、省エネ  
都市、リスク共生への道筋を創生するとともに、  
極端気象に対する減災と復旧の迅速化のため  
の設計法や規範などを**法体系にまで提案し、都  
市・建築のレジリエンス強化**を実現する

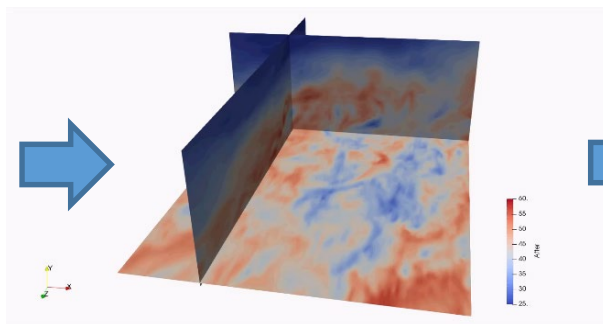




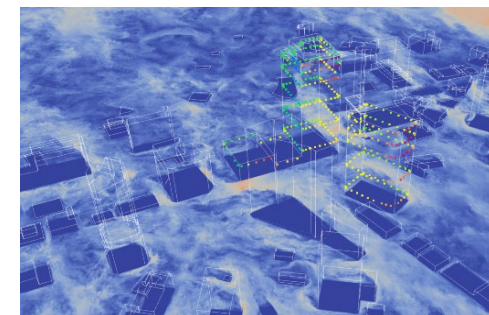
- 台風下の気象モデル・乱流シミュレーションによる広範囲周波数帯の乱流変動の再現と都心部でのピーク風速の推定



高解像度気象モデルによる極端気象の解析  
東京湾上・東京西の丘陵地の強風再現

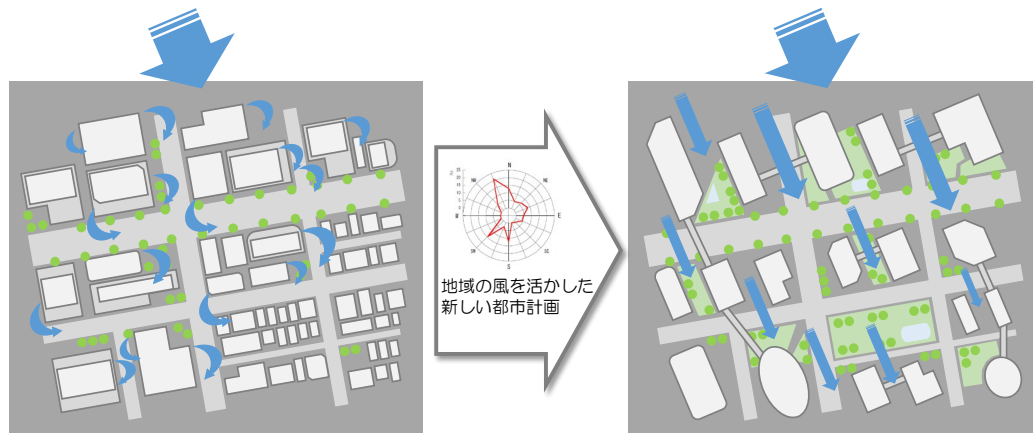


気象場高周波変動の再生  
気象モデル・工学LESの融合解析

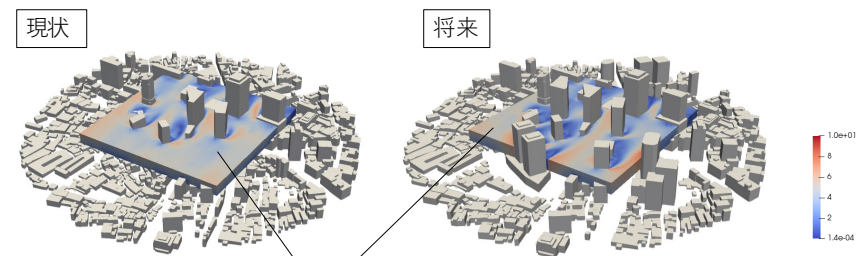


LES解析による建築構造物へのインパクト評価  
東京都心密集建物群での瞬間最大風の発生

- メタボリズム的に変容する都市・建築モデルをサイバー空間上に再現

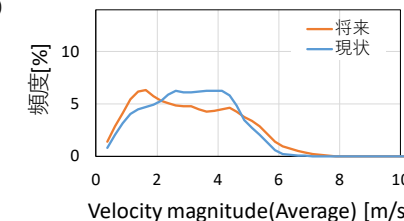


- ・ 換気性能向上のための通風計画
- ・ ビル風低減と熱環境向上のための植栽・環境計画
- ・ オープンスペースによる防災拠点，避難動線の確保



サンプリング領域：  
560m×560m×40m(実スケール)

サンプリング  
-0.7<x<0.7, -0.7<y<0.7, 0.1<z<0.2  
(単位m,実験スケール)  
の401x401x51の格子点から建物  
内部を除いたもの



換気性能・気温調整機能を定量化

# サブ課題C:新興ウイルス感染症にロバストで健康・快適・サステナブルな ポストコロナ時代の室内環境設計

## 背景

- 現在進行形の**新型コロナウイルス感染症**への迅速な対策技術の確立, 更に, 確実に来襲する新たな新興ウイルスへの準備と対策が求められている.
- 予測精度・信頼性, スピード, 対応ケース数の全てにおいて, 今までの実験計測やシミュレーションを凌駕する革新的な**感染リスク統合評価システム**の構築が必要不可欠である.

## 目的

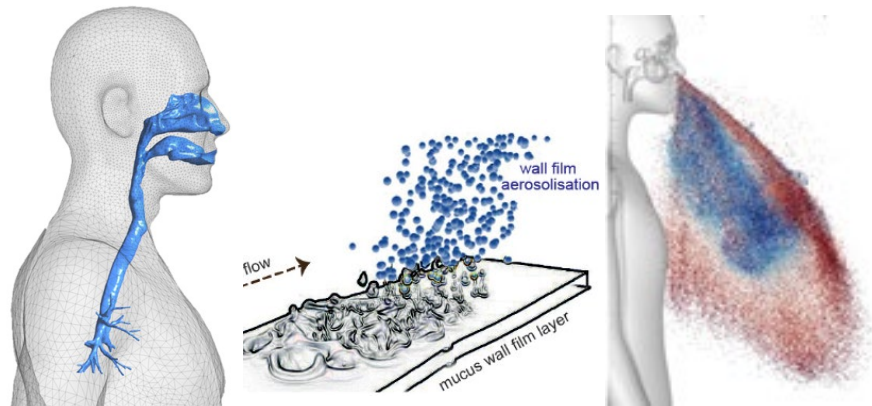
- 各種の空気感染性汚染物質の生成から室内空気中での輸送動態, さらに体内動態と免疫システム応答・生理反応までを**包括的に解析**し, 可視化する統合的システムを開発し, 「富岳」に実装する.
- 室内の快適性と感染症に対するロバストネスを両立させる**多目的最適化**による設計手法を提案する.

## 優位性

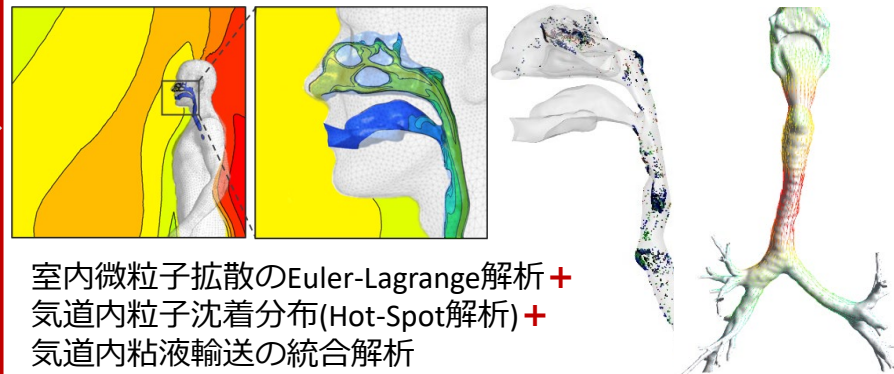
- システム開発の基盤技術として, 既にものづくり分野で実績を上げている理化学研究所等で開発された熱流体複雑現象統一的解法シミュレーションフレームワークCUBEを活用することで, 確実且つ迅速な研究開発が可能となる.
- 各段に精度の高い感染リスク評価により, 新たな新興ウイルス対策のための**政策立案に貢献**

# サブ課題C:新興ウイルス感染症にロバストで健康・快適・サステナブルな ポストコロナ時代の室内環境設計

① 人が放散源となる病原物質の呼出メカニズムを解明・モデル化

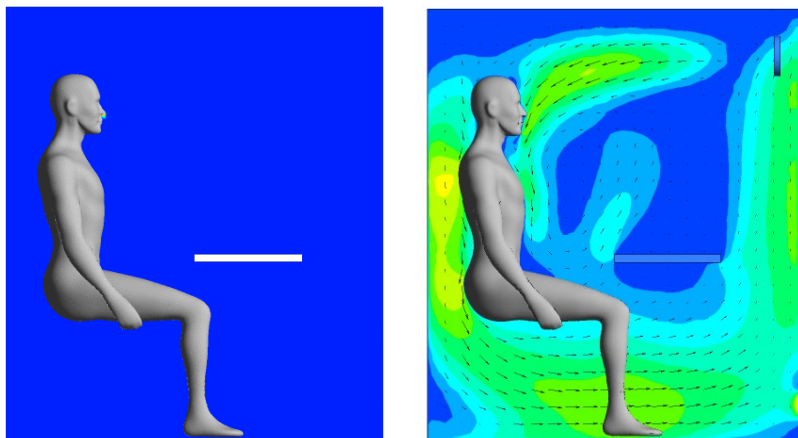


② 室内空気－呼吸を介して気道内粘膜上皮に到達する病原物質輸送動態解析技術の確立



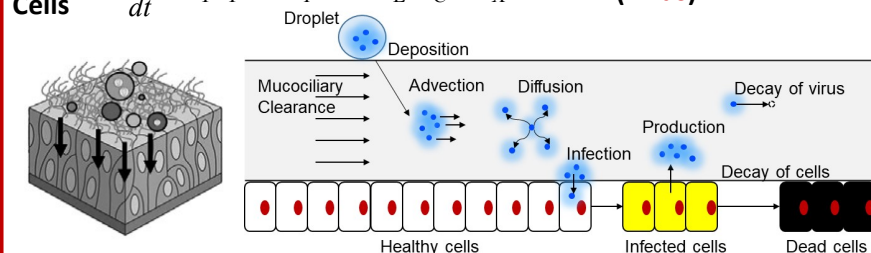
病原物質の室内動態から細胞レベルの防御反応機構の複雑現象と統一的に理解・解析し、  
定量的に可視化する**数値人体モデル**と**室内環境設計システム**の開発

④ 室内換気設計の実務へ展開・実装



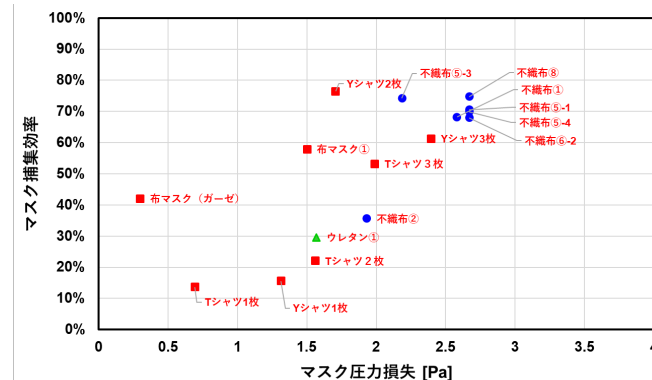
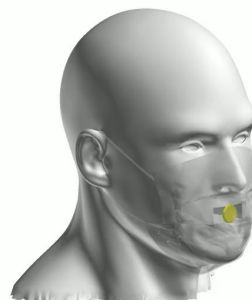
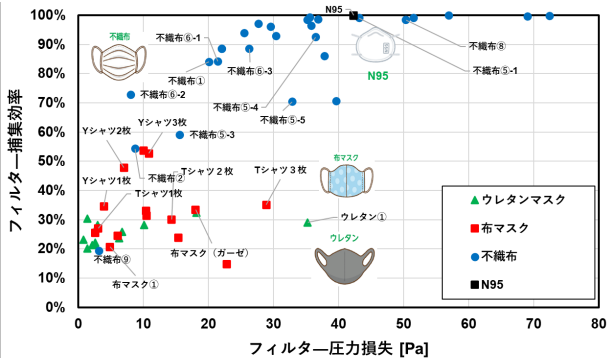
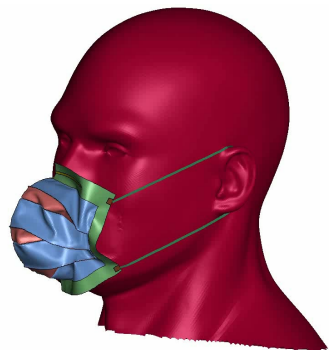
③ 経気道曝露に伴う病原物質宿主反応ダイナミクスを記述する生体防御反応モデル開発

$$\begin{aligned} \text{Target Cells} \quad \frac{dT_T}{dt} &= -\beta_T T_T V - \phi F T_T + \xi R \frac{dR}{dt} \\ \text{Infected Cells} \quad \frac{dI}{dt} &= \beta_T T_T V - \kappa_F I F - \kappa_E I T_C - \delta_X I \\ \text{(Virus)} \quad \frac{dV}{dt} &= \beta_E I - \delta_V V - \kappa_V V A \end{aligned}$$

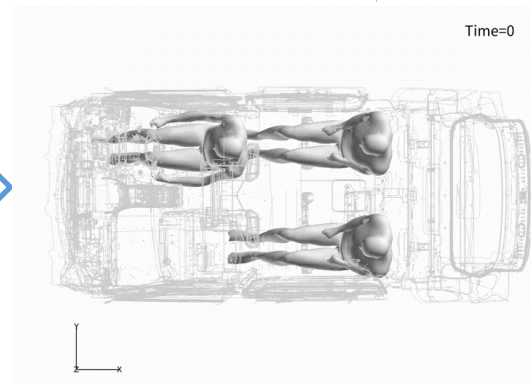
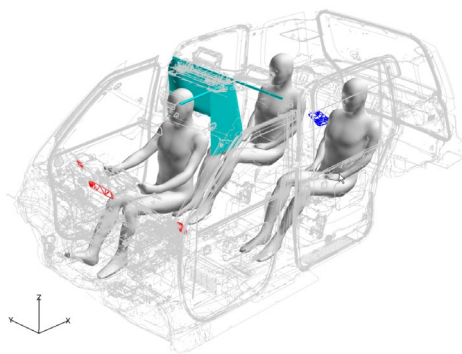
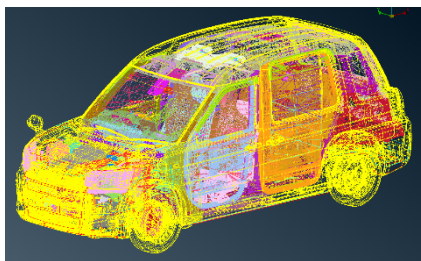




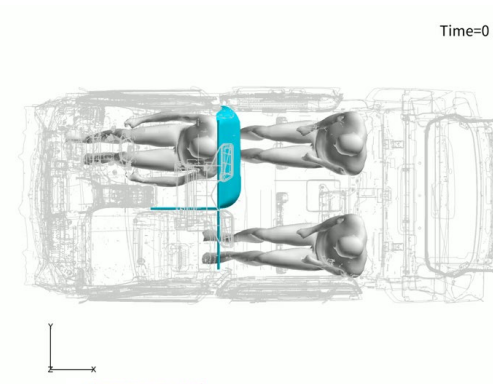
### ● マスクシミュレーション



### ● 公共交通機関での感染リスク評価

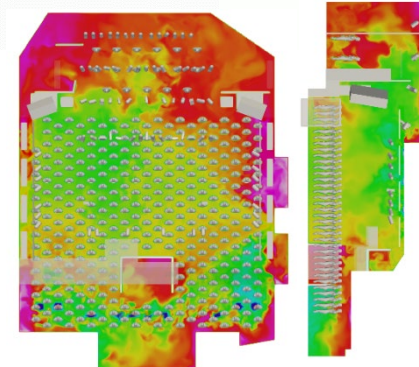
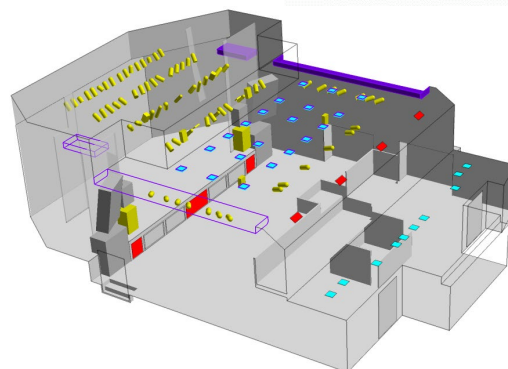
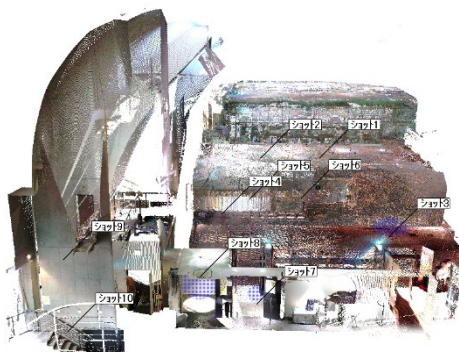


Time=0



Time=0

### ● 室内での感染リスク評価



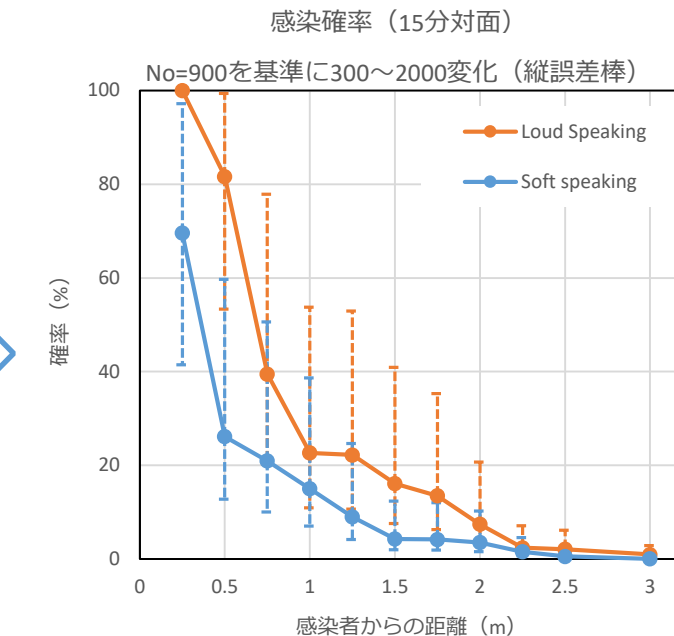
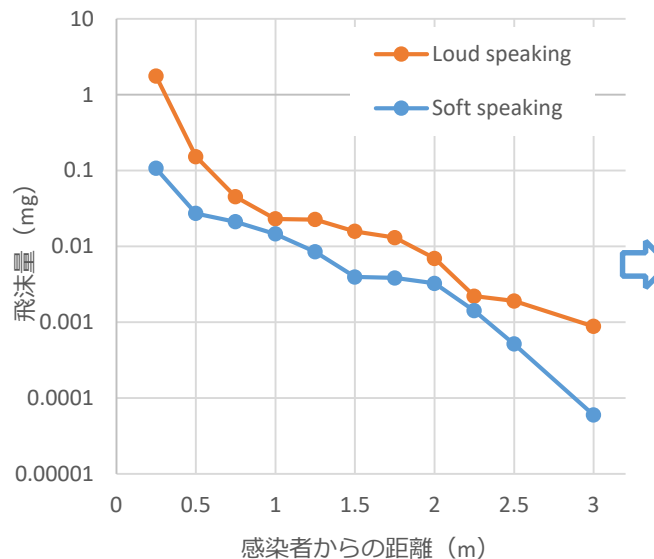
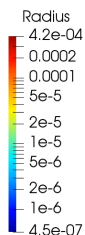
Time: 0.500000 sec



# サブ課題C:準備状況 飛沫・エアロゾル感染リスク評価

## ● 到達飛沫量の予測による感染リスク推定

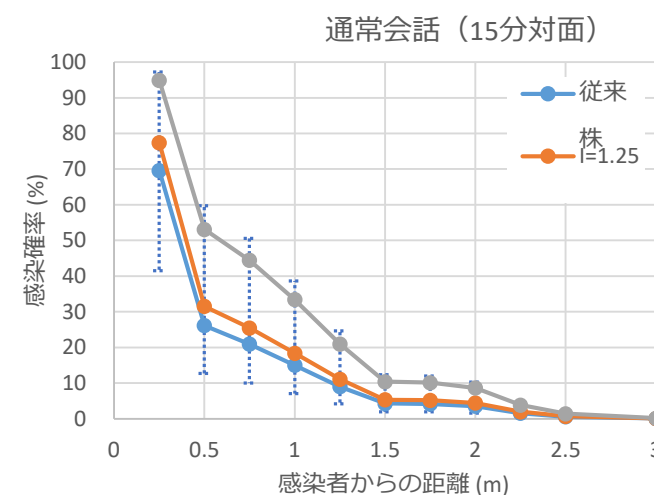
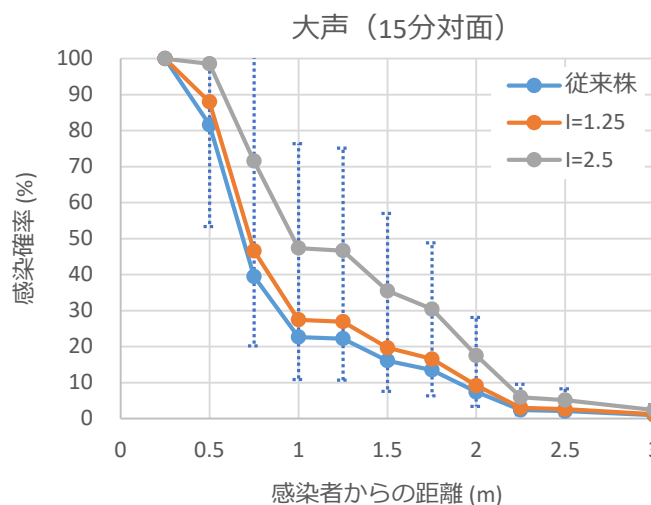
Time: 0.2 s



## ● 確率論に基づく感染リスク推定

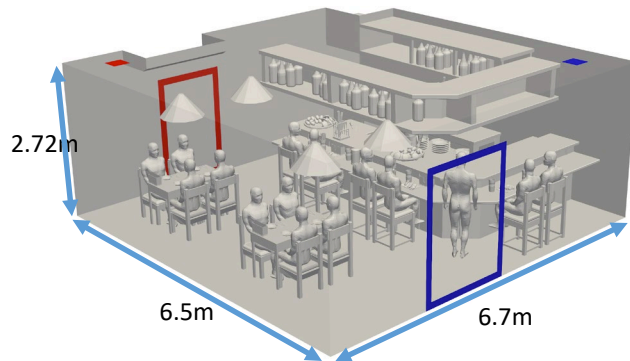
- $N_0$ : 感染に至るウイルス量
- $N$ : 体内に侵入したウイルス量
- 感染をポアソン過程として扱うと

$$P(N) = 1 - e^{-\frac{N}{N_0}}$$

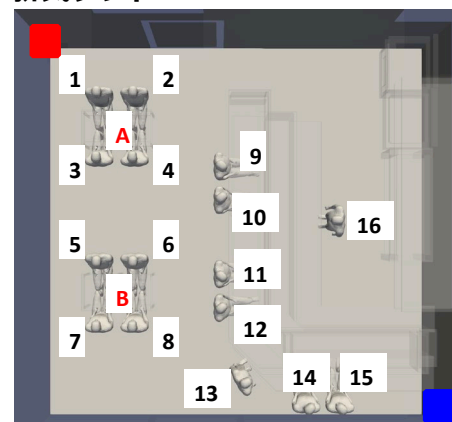


# サブ課題C:準備状況 室内感染リスクの定量評価

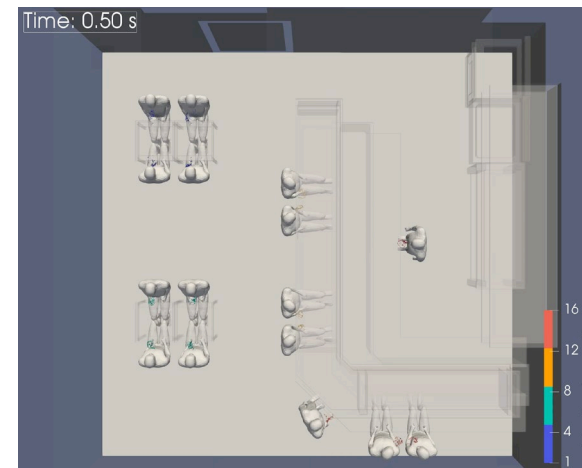
換気装置のみ



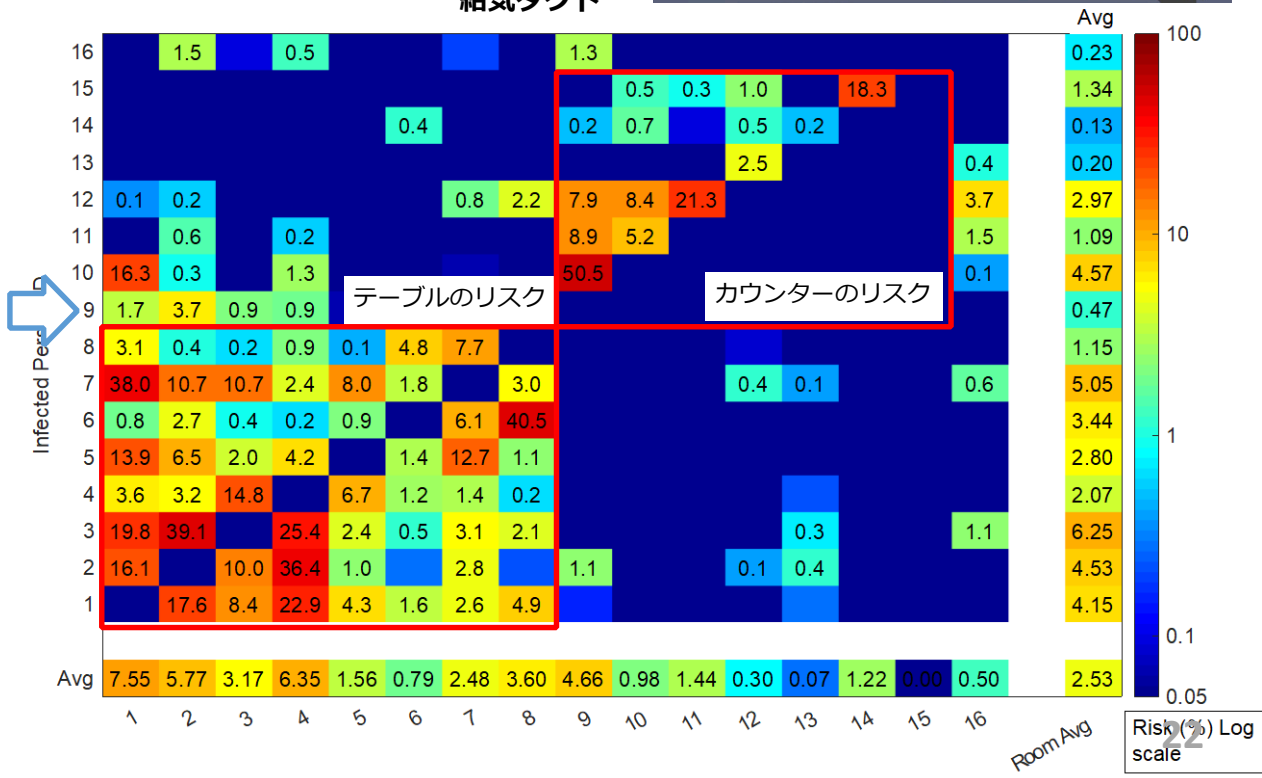
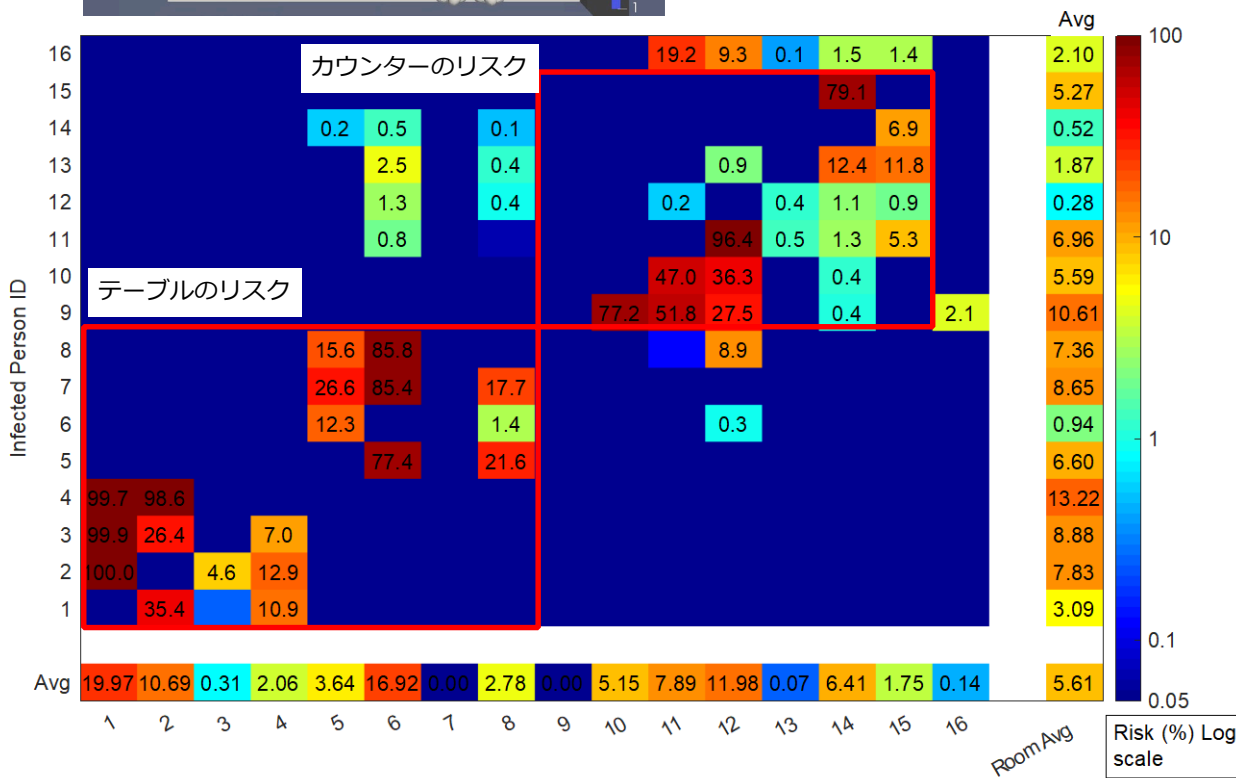
排気ダクト



換気装置にエアコンとキッチンダクトを併用



給気ダクト





## 背景

- 風力や太陽光などの再生可能エネルギーから製造する水素 ( $H_2$ ) やアンモニア ( $NH_3$ ) を燃料として燃焼させ、発電する手法 (究極のカーボンフリー発電システム) が注目されている。
- 水素やアンモニアの燃焼はフラッシュバック (逆火) , 燃焼振動, 失火等の異常燃焼が起こる危険性があるため, それらの燃料に順応したガスタービン (圧縮機, 燃焼器, タービン) の設計, 開発, 操作条件の選定が不可欠である。

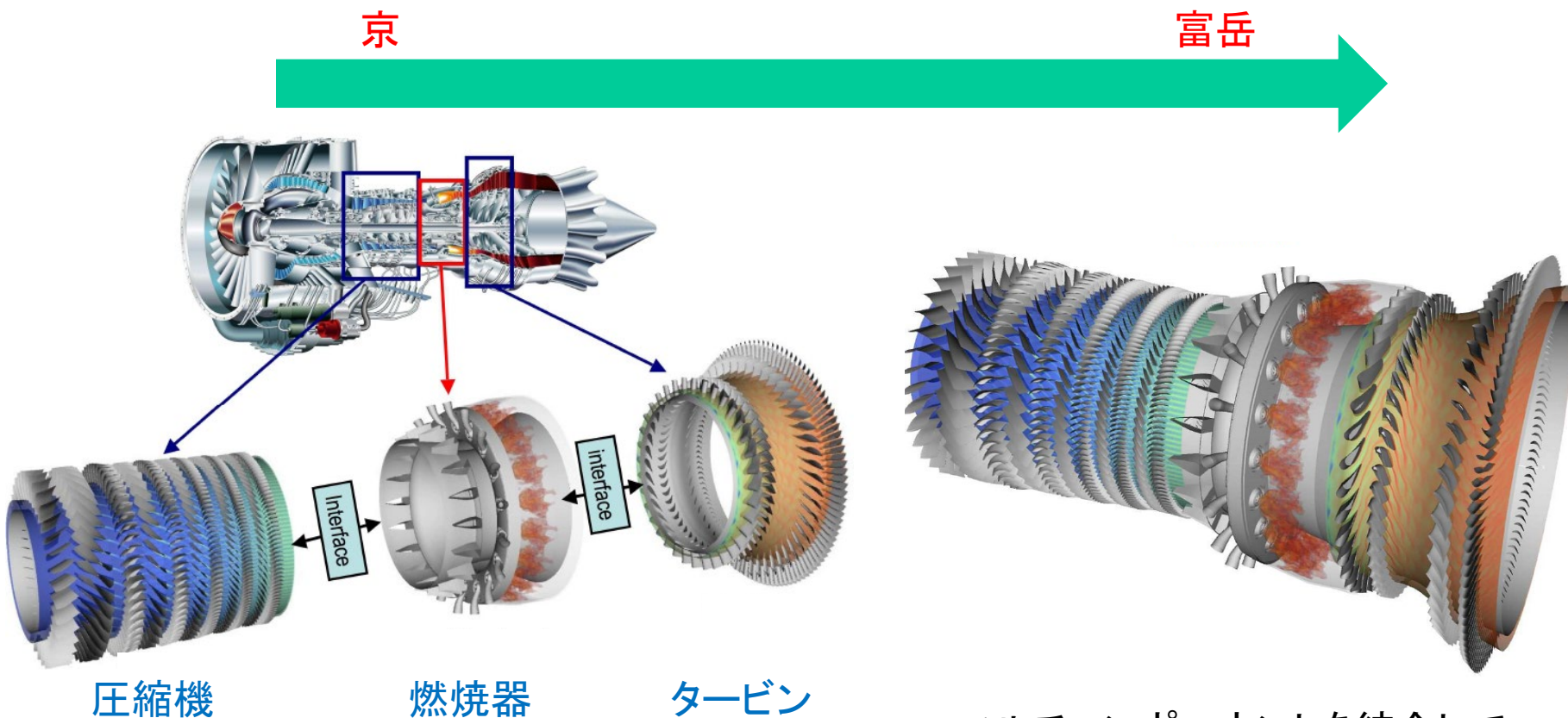
## 目的

- ガスタービンを構成する圧縮機, 燃焼器, タービンを完全に統合してLESで一気に解く, 世界初, 真のマルチコンポーネント統合シミュレーション技術の開発を行う。
- 本統合シミュレーションが, フラッシュバックや燃焼振動等の異常燃焼, さらに, 窒素酸化物 ( $NO_x$ ) , 一酸化炭素 ( $CO$ ) , およびすす等の様々なエミッションの正確な予測に有用であることを示す。
- 本統合シミュレーション (サイバー空間) 結果から, 異常燃焼発生時の物理メカニズムを解明し, さらに異常燃焼の兆候を自動で探知するための AI センシング技術を開発することによって, これらの知見, 技術が実機 (フィジカル空間) の設計や最適操作条件選定に貢献しうることを実証する

## 優位性

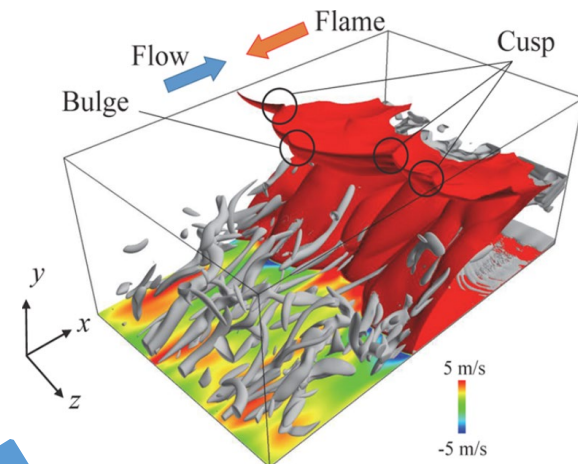
- 圧縮機, 燃焼器, タービンの数値解析は各々が計算負荷が高く, 「京」を用いてようやく実施可能なものであった。それらの統合シミュレーションは, 「富岳」の誕生によってはじめて実現可能な状況にある。従って, 本解析を実施できる環境にあるのは世界でも本研究グループのみである。

- マルチコンポーネント総合シミュレーションの概念

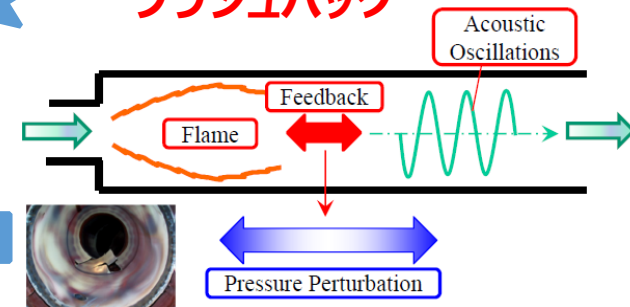


各コンポーネントを京で個別に解析

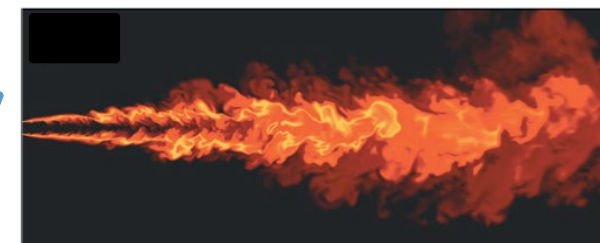
マルチコンポーネントを統合して  
富岳で一気に解析



フラッシュバック



燃焼振動



乱流特性

# 課題名：「富岳」が拓くSociety 5.0時代のスマートデザイン

坪倉誠（理研計算科学研究センター・チームリーダ）



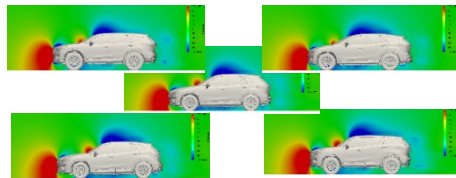
## 概要・目標

- ◆ 計算科学と情報科学を融合させた新たなデジタルエンジニアリングシステムを創出し、製品デザイン・設計に活用する
- ◆ 4つの具体的な設計・デザインに適用し、産学連携でその有用性を実証し、産業界での実装を目指す

## 実施体制・関係機関・詳細

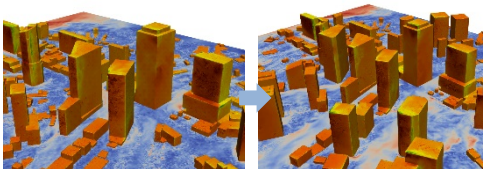
- ◆ 理研R-CCSが開発を進める基盤技術を活用し、全面支援のもと、サブ課題ごとに責任機関が中心となって研究開発する
- ◆ それぞれのサブ課題に応じて産学連携コンソーシアムを設立、システム設計から実証、社会実装までを目指す

**サブ課題A（神戸大）**  
意匠空間を考慮したAI支援多目的最適化による自動車空力デザイン



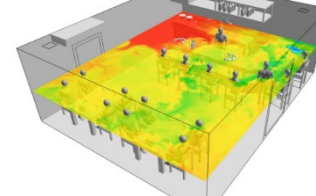
連携：成果創出

**サブ課題B（東工大）**  
変容する都市・建築の自然擾乱対応の性能設計



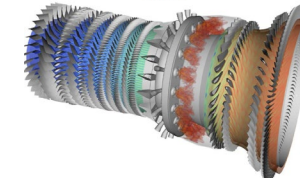
連携：成果創出

**サブ課題C（九大）**  
新興ウイルス感染症にロバストで健康・快適・サステナブルなポストコロナ時代の室内環境設計



連携：JST・CRESTコロナ課題

**サブ課題D（京大）**  
マルチコンポーネント統合シミュレーションによるカーボンフリーガスタービン設計



連携：成果創出・NEDO

共通基盤：三位一体のR-CCS高度化利用研究の活用

計算科学  
基盤ソフトウェア：CUBE, FrontFlow/red

計算機科学  
「富岳」利用支援

データ科学  
AI活用プロジェクト：DL4Fugaku

## 想定される具体的成果

- ◆ 性能試験の代替としてのシミュレーションを脱却し、サイバー空間とフィジカル空間の高度結合によるスマートデザインシステムの実現
- ◆ 自動車空力、都市・建築、室内環境、ガスタービンに対して、実設計や政策立案のためのシステムの社会実装