AIの活用によるHPCの産業応用の飛躍的な拡大と次世代計算基盤の構築

課題代表者 長谷川洋介 東京大学生産技術研究所革新的シミュレーション研究センター 教授

概要

AIを活用することによってHPCの適用範囲を飛躍的に拡大するための研究開発を実施し、強力な産学連携体制の下、その効果を実証します。さらに、大規模な産学連携コンソーシアム組織等と連携することによって、実証研究の成果を幅広い産業分野に展開します。また、研究成果の社会実装、すなわち、研究成果の実用化を加速するために次世代計算基盤を構築します。

本課題は、HPCの産業応用を飛躍的に拡大し、産業界におけるHPCの実用化を加速するための基盤的な研究、基盤研究の産業上の効果を検証するための、カーボンニュートラル時代のものづくりを代表する実証研究、および、実証された基盤研究の成果を幅広い産業分野に展開するための次世代計算基盤の構築に係る6つの研究テーマを実施することによって補助事業の目的を達成することとしています。

実施機関：東京大学、神戸大学、豊橋技術科学大学、日本大学、明治大学、理化学研究所、(一財)日本造船技術センター、(株)本田技術研究所

実施内容

研究テーマ① AIを活用した実機スケール乱流の予測モデルの開発

実施機関：東京大学、日本大学、明治大学、豊橋技術科学大学、神戸大学

データの中に潜在する特徴量やパターンを抽出することによって、計算コストを飛躍的に軽減できる壁面挙動予測モデルを開発します。さらに、多数の計算結果を集約することにより設計空間を短時間に探索できる高精度なサロゲートモデルを構築します。

開発する壁乱流予測モデルの概念図

研究テーマ② スマートin-situ可視化基盤の構築

実施機関：神戸大学、理化学研究所

自動車などの輸送機器の空力・騒音問題を主たる対象として実証研究に用いられてきた複雑現象統合シミュレーションフレームワークCUBEの機能を拡充してHPCの適用分野を飛躍的に拡大するために、スマートin-situ可視化基盤の構築に係る研究開発を実施します。

スマートin-situ可視化

研究テーマ③ 実船の推進性能の予測

実施機関：(一財)日本造船技術センター、東京大学、日本大学

研究テーマ①で開発する壁面挙動予測モデルを活用して、模型試験スケールの流れ場と模型船の推進性能を予測する技術を研究開発します。さらに、実船スケールの流れ場と実船の推進性能を予測し、試験結果等と比較することによって、予測精度を検証します。

FrontFlow/blueによる船体抵抗の予測結果

研究テーマ④ 自動車の空力騒音予測と空力騒音低減手法の確立

実施機関：(株)本田技術研究所、神戸大学、理化学研究所、豊橋技術科学大学、東京大学

研究テーマ①で開発する壁面挙動予測モデルを活用して、自動車の開発現場で実施可能な空力騒音を精度良く予測する技術を構築します。さらに、研究テーマ②で開発する研究成果を活用して、車両まわりの主要な空力音源を高精度に特定する技術を研究開発します。

車両まわりの音場

研究テーマ⑤ ヒートポンプ用ファンの性能向上

実施機関：日本大学、東京大学

研究テーマ①で開発する、高速かつ高精度な性能・騒音予測のためのサロゲートモデルを活用して、従来は検討されていなかった広範な設計パラメータを探索することによって、従来性能を大幅に上回るプロペラファンを設計する技術を研究開発します。

軸流ファン

研究テーマ⑥ 次世代計算基盤の構築

実施機関：東京大学

HPCアプリケーションを、GPGPUに移植し、HPCシミュレーションを幅広い産業分野に展開します。また、アプリケーションの実効性能がメモリー性能律速にならない解析アルゴリズムを研究開発するとともに、「富岳」の実効通信性能を向上させるための基盤研究を実施します。

高F/B比アルゴリズムの効果の検証例

通信テーブルの最適化例

AIの活用によるHPCの産業応用の飛躍的な拡大と次世代計算基盤の構築

課題代表者 長谷川洋介 東京大学生産技術研究所革新的シミュレーション研究センター 教授

利用するアプリケーション

FrontFlow/blue (FFB)

成果の詳細は以下を参照ください
 "Toward Realization of Numerical Towing-Tank Tests by Wall-Resolved Large Eddy Simulation based on 32 billion grid Finite-Element Computation", C. Kato, et al., Proceedings of the International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis, November 2020, Article No. 3

- 乱流の微細な渦まで計算する有限要素法ソフトウェア
- 大規模な流体シミュレーションを実現するための計算格子の自動分割機能を具備

翼まわりのキャピテーション流れのシミュレーション

船舶のプロペラまわりの流れのシミュレーション

CUBE

- 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

「富岳」チューニング状況 (単体ノード性能)

1CMG及び1ノードの実行時間の比較

「富岳」チューニング状況 (並列性能)

ウィークスケーリング (経過時間)

ウィークスケーリング (FLOPS)

「富岳」単体234.6 GFLOPS を実現

FFBのメモリー転送速度を向上させるための工夫

・メモリー内のデータ配置の最適化

・有限要素法の新しい計算方法を考案

従来の有限要素法の計算方法

本研究で考案した計算方法

さまざまなCPU上での計算速度

「富岳」の全系を用いた計算速度

「富岳」を用いて、22.6 ペタ・フロップスという、実際のアプリケーションとしては驚異的な計算速度を実現

FFX

- Lattice Boltzmann法 (LBM) による超大規模乱流/空力音解析
- 階層直交格子法 (BCM: Building Cube Method) による計算格子の自動生成
- メモリ使用量約1/20, 計算速度約20倍でFFBと同程度の解析精度

FFXの解析精度の検証例

球周りの流れ: 臨界レイノルズ数評価

一様等方性乱流

チャンネル乱流

自動車空力騒音

回転角柱周りの流れと音場

ファン空力騒音解析

計算速度評価

「富岳」単体 200.0GFLOPS を実現

階層格子生成時間

CASE	格子数 [億点]	格子寸法/代表寸法 [mm]	LEVEL	STL処理	プリ処理	合計
角柱 (Re 150)	33	0.31 / 20	1	4秒	17秒	21秒
角柱 (Re 4×10 ⁴)	213	0.04 / 20	4	1分31秒	1時間46分25秒	1時間47分56秒
フロントグリル	3	0.47/30	4	2分40秒	8分26秒	11分6秒
自転車	42	1.56 / 1600	1	4分59秒	9分20秒	14分19秒
自転車 (CFD用)	1432	0.12 / 1600	3	9分05秒	16分59秒	26分04秒
自動車 (CFD用)	35	2.5 / 5000	5	3分52秒	23分40秒	27分32秒
自動車 (CFD用)	1553	0.78 / 5000	3	6分50秒	1時間18分13秒	1時間25分03秒
自動車 (詳細)	1513	0.78 / 5000	3	9分44秒	4時間38分18秒	4時間48分02秒

AIの活用によるHPCの産業応用の飛躍的な拡大と次世代計算基盤の構築

課題代表者 長谷川洋介 東京大学生産技術研究所革新的シミュレーション研究センター 教授

これまでに得られた成果概要 (その1)

研究テーマ① AIを活用した実機スケール乱流の予測モデルの開発

- ✓ 壁乱流予測モデルの開発については、高解像度計算と低解像度計算の違いを判別する判別器の開発、判別器が判別できないような流れを修正する生成器を開発、平板乱流へ適用し、1/64程度の格子点数で高解像計算と同程度の予測性能を実現した。
- ✓ サロゲートモデルの開発については、予測された流れの特徴量を用いることにより、高精度CFDを実行せずに未知の設計変数における高精度に性能予測が可能であることを確認した。

壁乱流予測モデルの開発

流れ場を考慮したサロゲートモデルの開発

研究テーマ② スマートin-situ可視化基盤の構築

- ✓ 多くのin-situ可視化システムで採用されている可視化データベース仕様であるCINEMAに対応した画像出力機能を開発し、スマートin-situ可視化基盤より出力される多視点可視化画像のデータベース化を行なった。
- ✓ スマートin-situ可視化機能のひとつである多視点可視化機能を利用し、指定する可視化パラメータに対して、対話的に任意の視点での可視化映像を生成することが可能な機械学習モデル(可視化サロゲートモデル)を開発し、正常に動作していることを確認した。

スマートin-situ可視化基盤より出力される多視点可視化画像のデータベース化

多視点可視化画像データを活用した可視化サロゲートモデルの開発

研究テーマ③ 実船の推進性能の予測

- ✓ 判別器について、壁乱流予測モデルの入っていない粗い計算格子を使った計算結果とFully-resolved LESの結果について99.8%以上の正答率で判別でき、複数の船型に対し、同一のネットワークパラメータで高精度な判別ができることがわかった。
- ✓ 壁から十分離れた $y^+=100$ の流場情報から壁面挙動の予測ができることがわかった。予測値の時系列は高周波の振動が多い結果となったが、入力値を $y^+=100, 200, 300$ の3断面に増やすことによって改善された。

生成器のテスト結果

壁面挙動の時系列予測結果

AIの活用によるHPCの産業応用の飛躍的な拡大と次世代計算基盤の構築

課題代表者 長谷川洋介 東京大学生産技術研究所革新的シミュレーション研究センター 教授

これまでに得られた成果概要 (その2)

研究テーマ④ 自動車の空力騒音予測と空力騒音低減手法の確立

- ✓ CUBEを用いた自動車の空力騒音の予測として、Aピラー形状の変更によるバサバサ音低減効果を検討し、Aピラーを改修することで、1 Hz以下の変調周波数において1~2 kHz周辺の変調パワーのピークが抑えられることを明らかにした。
- ✓ FFXを用いた自動車の空力騒音の予測として、実車の複雑形状に対する実レイノルズ数に対する解析が可能になり、45億格子点、最小格子サイズ2 mmの実車のウィンドスロップ(空力共鳴音)の計算を実施し、実測とほぼ一致する共鳴周波数が得られた。

CUBEを用いた空力騒音予測

FFXを用いた空力騒音予測

研究テーマ⑤ ヒートポンプ用ファンの性能向上

- ✓ 翼のスタッキングについて、NACA65系列をベースとしてハブで強制渦、チップで負荷を落とす自由渦をあわせた混合渦形式を仮定し、カーペット線図から断面形状を決定し、この動翼形状に対して翼間流れ解析により高静圧・高効率となる形状の最適化を実施した。
- ✓ 得られた動翼の正負圧面の負荷分布の2次元画像を学習データとして用い、静圧上昇と静圧効率を目的関数としてサロゲートモデルによるさらなる形状の最適化を進めている。

翼端部とディフューザ部形状が性能に与える影響

現行プロペラファンのV字カットの流れ場への影響

研究テーマ⑥ 次世代計算基盤の構築

- ✓ 課題内の代表的なアプリケーションCUBEにランクマップ最適化アルゴリズムを適用し、最適化の効果を評価した。
- ✓ FFXをAurora-TSUBASA 30A (理論演算性能4.91 TFLOPS、メモリー容量96 GB、メモリーバンド幅2.45 TB/s) に移植し、VE単体実効性能17.01%を達成した。さらに、東北大Aoba-sを利用し、最大2,048 VEの並列性能のベンチマーク計算と最適化を実施し、並列化効率を17%向上させ、61.8%を達成した。

CUBEによるランクマップ最適化効果の検証

FFXのAurora-TSUBASA30A 上でのVE単体実効性能

キューブ分割	格子数	VE単体性能 (GFLOPS)	ピーク性能比 (%)
16 × 16 × 16	32,768	137.8	2.81
32 × 32 × 32	262,144	306.6	6.24
64 × 64 × 64	2,097,152	444.4	9.05
128 × 128 × 128	16,777,216	528.7	10.77
256 × 256 × 256	134,217,728	835.4	17.01