

AI技術セミナー 「CAE分野におけるAI技術適用可能性」

2019 年10月 15日(火) 開催

プログラム

13:30~13:40 (10 分)	主催者あいさつ アドバンスソフト株式会社のご紹介..... 1 営業部 富塚 孝之
13:40~14:50 (70 分)	招待講演 「AI とデータ解析を始める前に」 5 国立情報学研究所 情報学プリンシプル研究系 教授 宇野 毅明 様
14:50~15:00 (10 分)	(休憩)
15:00~15:40 (40 分)	自己組織化写像 (SOM) を用いた地震・火山現象の解析 31 研究顧問 井田喜明 (東京大学名誉教授)
15:40~16:20 (40 分)	深層学習用ツール Advance/iMacle のご紹介 49 主事研究員 山下 貴志
16:20~16:40 (20 分)	AI 事業および関連サービスご紹介、質疑応答 77 代表取締役社長 松原 聖 主管研究員 松澤 邦裕



アドバンスソフト株式会社のご紹介

営業部 富塚 孝之

AI技術セミナー「CAE 分野における AI 技術適用可能性」
2019年 10 月 15 日 (火)
アドバンスソフト株式会社

会社概要

名 称 アドバンスソフト株式会社
(AdvanceSoft Corporation)

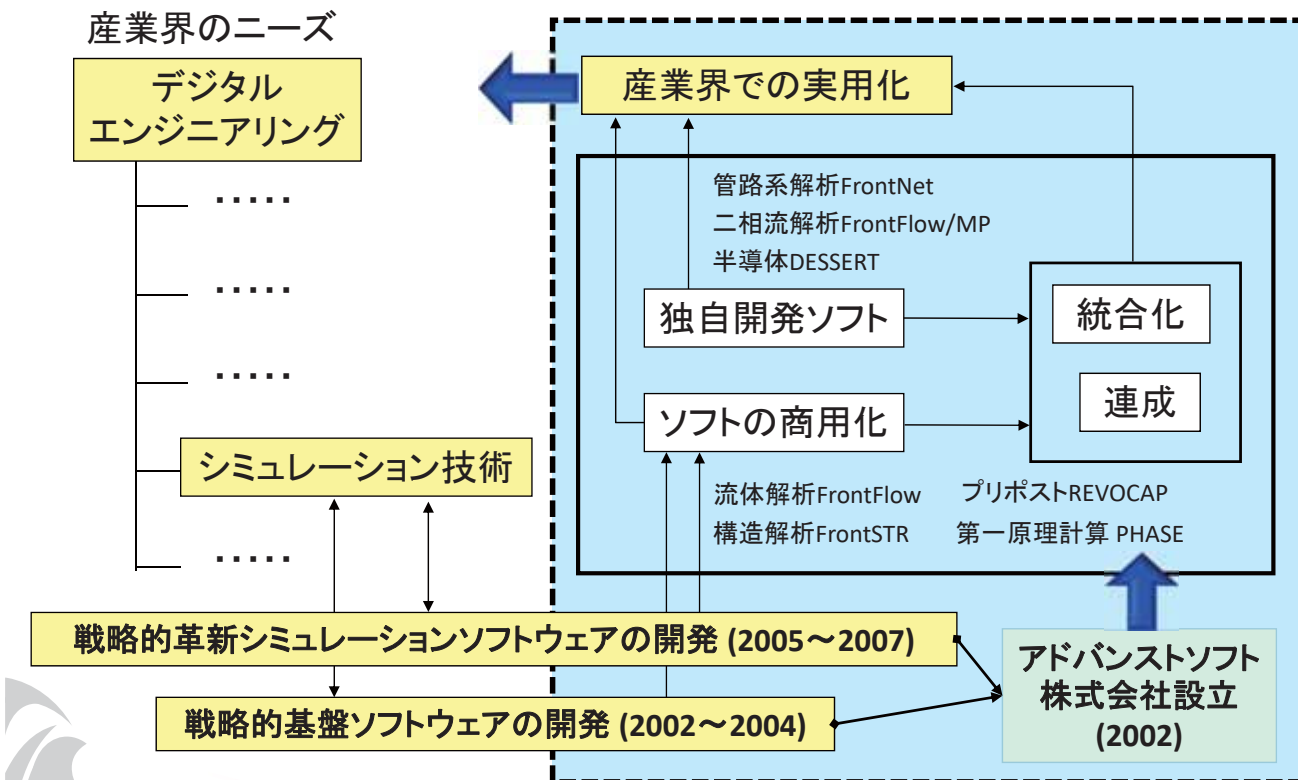
本 社 〒101-0062
東京都千代田区神田駿河台4-3
新お茶の水ビル17階
TEL: 03-6826-3970
FAX: 03-5283-6580

設 立 2002年(平成14年)4月24日

資本金 3,724万円

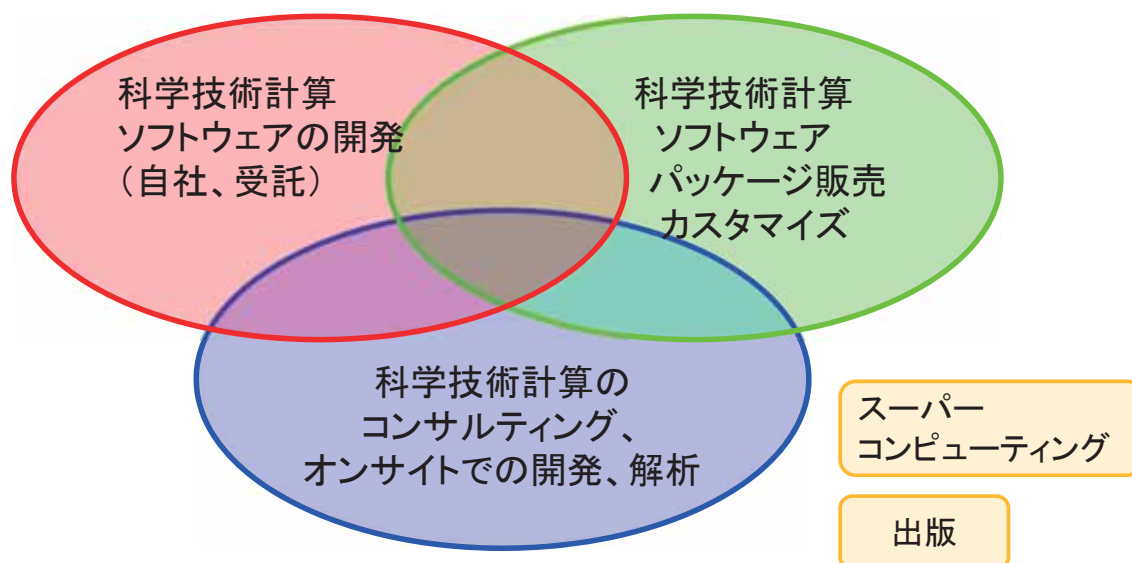
社員数 102名(2019年10月1日時点)

事業部	部	事業内容
第1 事業部	ナノシミュレーション 研究開発センター	先端的なナノシミュレーション事業および関連する国プロを企画・推進
	技術第1部	ナノ材料の第一原理計算ソルバー開発、分子動力学計算・量子化学計算の受託
	技術第2部	プリポストシステム開発、連成システム開発、構造・音響解析などのエンジニアリング、構造解析ソルバーの開発など
	技術第6部	次世代TCADシステムの開発、および半導体解析を中心とした電磁分野
	技術第8部	材料設計統合システムの開発、および、関連する先端的なナノ分野の事業を企画推進
第2 事業部	技術第4部	燃焼・爆轟に係る流体解析ソルバー開発、混相流に係る次世代流体解析システム開発、流体解析ソルバーの受託開発
第3 事業部	技術第3部	乱流、燃焼、化学反応等に係る次世代流体システム開発など
	技術第7部	J-PARCIに係わるプロジェクトの実施、中性子に関する実験支援サービス、AI、制御システム開発およびモデルベース設計に関する事業
第4 事業部	技術第5部	シビアアクシデントおよびPRAを中心とした原子力安全解析
	技術第9部	原子力・エネルギー利用に係る安全性解析など
関西支店		西日本地区での活動拠点。ナノシミュレーションを中心としたサービスを提供
研究 開発 部門	研究開発センター	地球科学を中心とした事業を企画・推進します。
	熱流動エンジニア リングセンター	原子力、管路系、気液二相流等の熱流動エンジニアリング事業
	リスク研究開発 センター	原子力分野に関するPRAを中心としてリスク研究開発に係る事業
総合企画部		コンサルティングサービスの提供 解析サービス、実験支援サービスの提供
営業本部	営業部	お客様窓口

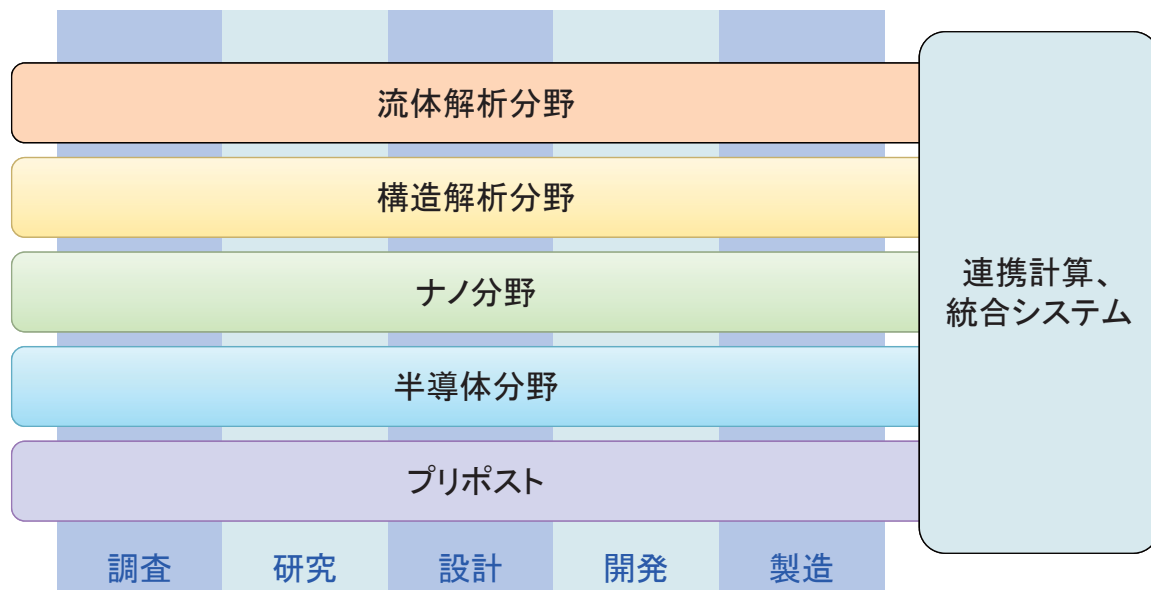


事業内容

アドバンスソフトがご提供するサービス

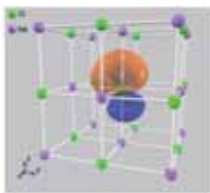
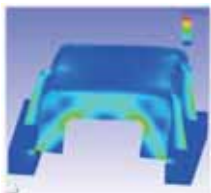
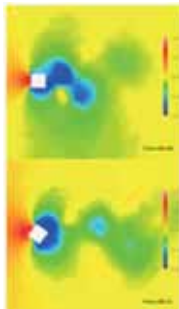
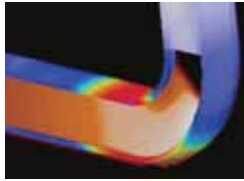
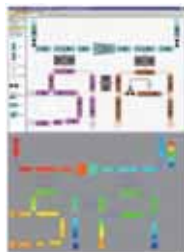
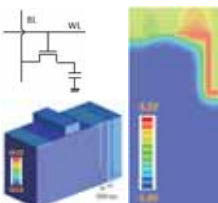
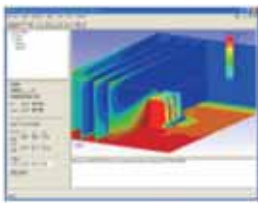


科学技術計算ソフトウェアの開発を基礎とした、
科学技術計算に関する様々なソリューションをご提供します。



産業の主要な分野のあらゆるフェーズで直面する課題に対し、
科学技術計算によるソリューションをご提供します。

アドバンスソフトのパッケージソフトウェア

ナノ Advance/PHASE Advance/NanoLabo 	構造・音響 Advance/FrontSTR Advance/FrontNoise 	流体 Advance/FrontFlow/red Advance/FrontFlow/FOCUS   Advance/FrontFlow/MP Advance/FrontNetシリーズ  
半導体・光／電磁波 Advance/TCAD Advance/ParallelWave 	プリポスト Advance/REVOCAP 	

※上記は主要パッケージを掲載しています。詳細は弊社HP(www.advancesoft.jp)をご参照ください。

パッケージソフトウェアの解析事例



解析事例Webページをリニューアルしました。

アドバンスソフト 事例集

検索

<http://case.advancesoft.jp>

- ソフトウェア名からだけでなく、産業分野別、解析分野別の検索が可能となりました。
- 最新の事例を掲載しました。今後も逐次最新事例を紹介します。

産業分野別

解析分野別

自動車・運輸

流体

材料・化学

爆発・燃焼

産業機械

構造

航空宇宙

振動音響

エレクトロニクス

ナノ・バイオ

建設土木

プリポスト

原子力

半導体デバイス

エネルギー

光・電磁波

環境・防災

Copyright ©2019 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

7

facebook、YouTubeでも関連記事を掲載中



<http://www.facebook.com/advancesoft.jp>

<http://www.youtube.com/user/advancesoft>



Copyright ©2019 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

8

AIとデータ解析を始める前に

宇野 毅明 (国立情報学研究所
&総合研究大学院大学)

<http://research.nii.ac.jp/~uno/index-j.html>
e-mail: uno@nii.ac.jp

2019年10月15日 CAE分野におけるAI技術の適応可能性

国立情報学研究所 宇野 毅明

東工大、情報科学卒: 東工大経営工学 → 現職

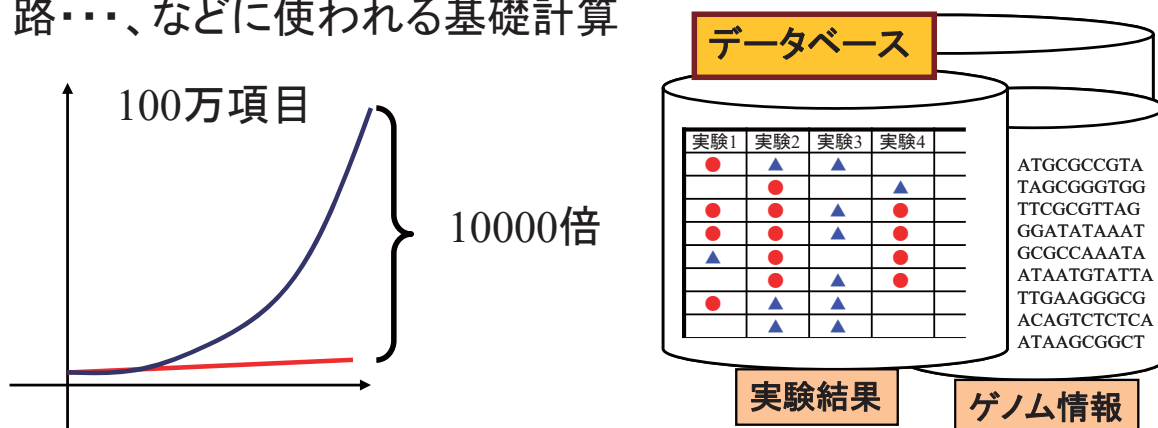
専門分野: アルゴリズム理論 (計算量 & 実利用)

計算方法の改良による高速化の研究。

データ規模増加に対する計算時間の増加カーブを改善

大規模データに対する、基礎的な情報処理に取り組む

頻出パターン、類似性解析、クラスタリング、可視化、最短
路...、などに使われる基礎計算



近年のA I

AIと意味理解

世はAI花盛り

AIへの投資はどんどん伸びて、人間の活動は全部
ロボットとAIに置き換わってしまうのでは、という意見も



https://kabu.com/item/fund/feature/theme_ai_pickup.html

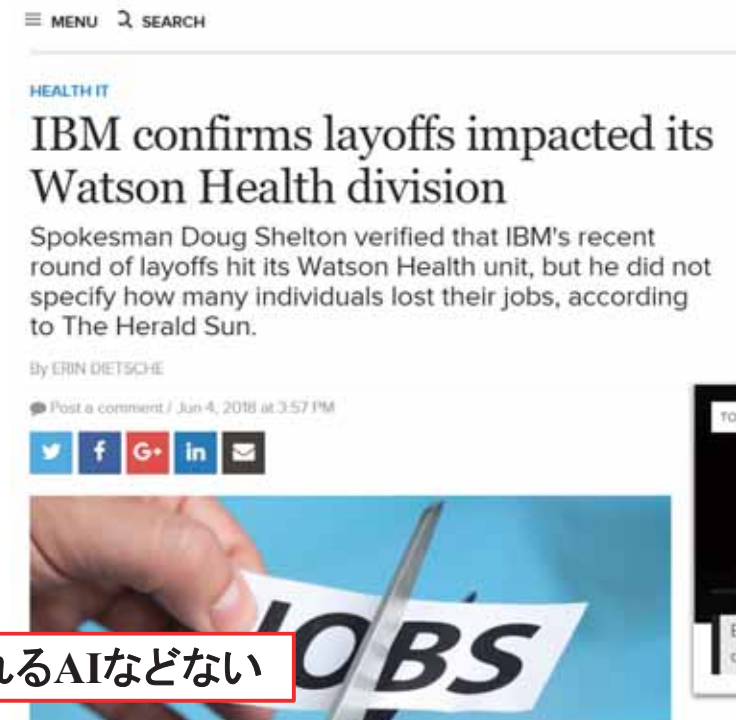
IBMワトソンチームの解散

IBMのワトソンチームが解散

論文を10万本入れて、
そこから知見を得る、
という方向は、無理らしい

テキストマイニングができる！
という面はあったのだが、
人の知識となるレベルまで
深い理解は、まだまだ難しい

何もせず自動的に考えてくれるAIなどない



AIと意味理解

- そもそも、人間の知能を分類してみると

記憶、計算、整理、、、

推理、推論、関連づけ、判断、、、

認知、認識、類別、判別、、、

理解、読解、想像、経験、状況理解、説明、、

感情、創造性、愛、感覚、直感、笑い、、、

- AIは、意味理解なんてできない

シンギュラリティは来そうですか？

最近のAIでの技術革新

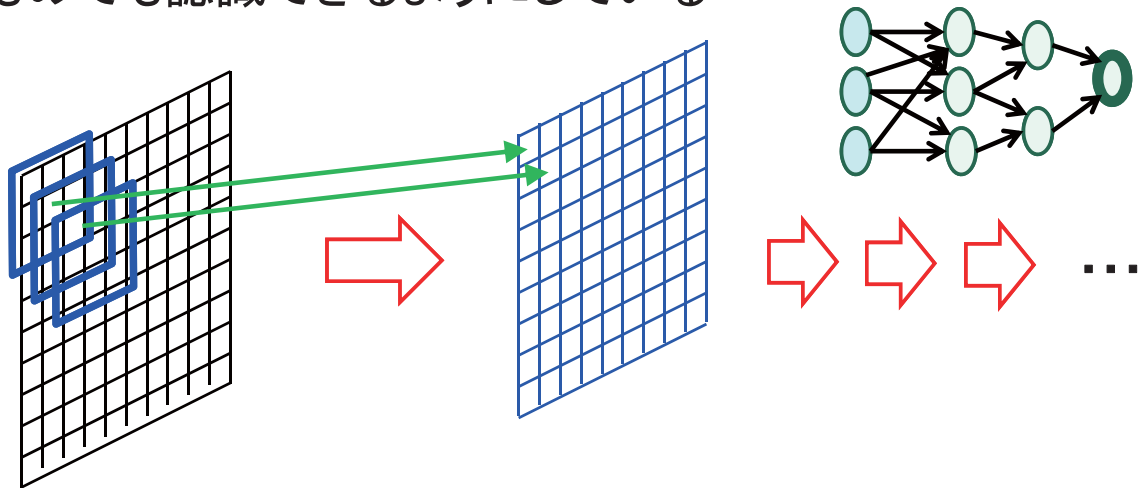
- 最近AI注目されているのは、技術革新があったから
 - + ディープラーニングの登場
 - + 統計モデルの利用
 - ↑ ビッグデータの登場、利用
- 画像や音声の認識と、翻訳などの自然言語処理が上達した

モデル演繹型とデータ帰納型

- 今までの計算は、**メカニズム**がわかっているときに、**結果**を求めている
 - + 流体シミュレーション、津波シミュレーション
 - + 星の運行、暦の計算
 - + 買った物の合計
- データを用いた学習は、**結果**から**メカニズム**を予測
 - + 画像認識、音声認識
 - + 売り上げ予測、渋滞予測
 - + データ同化（津波など）

ディープラーニング

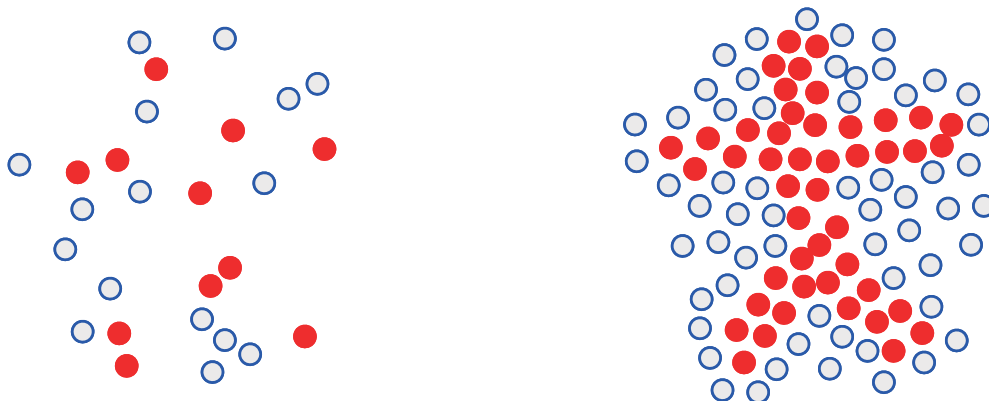
- シナプスの働きをまね、ネットワークを信号が伝わり、その結果で判別する仕組みを、自動的にデザインする
- ディープラーニングは、大量のデータを使って、複雑なものでも認識できるようにしている



境目をあててください

赤と青の境目が作る形はなんでしょう？

データが増えれば、ものごとはわかりやすくなるんです



迷子の方々

宇野はAI部門、現場部門の方など、いろいろと話を聞いている

「先生、うちの会社はAIで何をしたらいいんでしょう」

「AIでどれくらいもうかるんですかねえ」

「どういうデータが使えるんですか？」

技術の使い方は、こうではない

- + 目的にあわせた技術を探す
- + 技術を理解した上で、上手な使い方を考える
- + 両者を総合的に考えて、ブレインストーミングする

実際のところは

ほとんどは、顧客理解と業務改善

「なるほど。でも、それって紙のほうが早いですね」

「情報の共有ですね。話し合う機会を持てばどうですか」

「まずはちょっとでもデータを見たらどうですか」

コンピュータに会社の舵取り、させていいんですか？

東大口ボに見るA I の力

東口ボ君、現在の学力

● 大学入試センター試験の模試(マーク式)

	得点	全国平均	偏差値
英語(筆記)	95(80)	92.9	50.5(48.4)
英語(リスニング)	14(16)	26.3	36.2(40.5)
国語(現代文+古文)	96(90)	96.8	49.7(45.1)
数学IA	70(75)	54.4	57.8(64)
数学ⅡB	59(77)	46.5	55.5(65.8)
世界史B	77(76)	44.8	66.3(66.5)
日本史B	52(55)	47.3	52.9(54.8)
物理	62(42)	45.8	59.0(46.5)
合計=950点満点	525(511)	437.8	57.1(57.8)

● 2次試験の模試(論述式)

	得点	全国平均	偏差値
地理歴史(世界史)	16	14.5	51.8
数学(文系)	46	19.9	68.1
数学(理系)	80	30.8	76.2

社会の問題

- AはBである、というような、事実を答える問題が多い
 - + 徳川幕府7代目の将軍の名前を答えよ
 - + 日本一りんごの収穫量が多い市はどこか
- 「ファクトアンサー」と呼ばれる問題
基本的に、自然言語解析＋データベース技術に収まる問題
 - ← 「何を聞かれているか」を自然言語解析で取得
それを、データベースで検索し、最も近いものを出力
- 歴史は時間、地理は地域を数量的に扱うので、その獲得も必要
- 「ワトソン」は、いくつかの種類の問題に対して、ファクトアンサーを解いている

社会の難しい問題

- 写真から読み解く問題
 - + 図の中で、北国の暮らしに典型的なものを述べよ
 - + 図のAのエリアではどのような作物を育てると良いか

英語の問題

- 用例を問う問題は、Web検索で十分

例) arrive □ Tokyo university

→ □ のところに at や on や to を入れて検索して、一番多かったものを選ぶ

- 言語はそもそもそういうものなので、これが正しいアプローチ
- 翻訳は、google 翻訳にお任せ
→ 実は、上記のことを、英語対日本語で行っているだけ
対訳コーパスの文章たちに 当てはまりが良くなるよう
単語のならびの尤度を最大化
- 文章題は、含意関係なので社会と同じアプローチ

英語の難しい問題

- 絵の中身を読み解く問題

● 以下の文章は、スミスさん一家のある一日を表している。この文章が表している絵は次のどれか

- + 弟は野球に行って、試合に勝った
- + 母はカーペットを買ってきた
- + 父は家で夕食を食べた

数学：基本のアプローチ

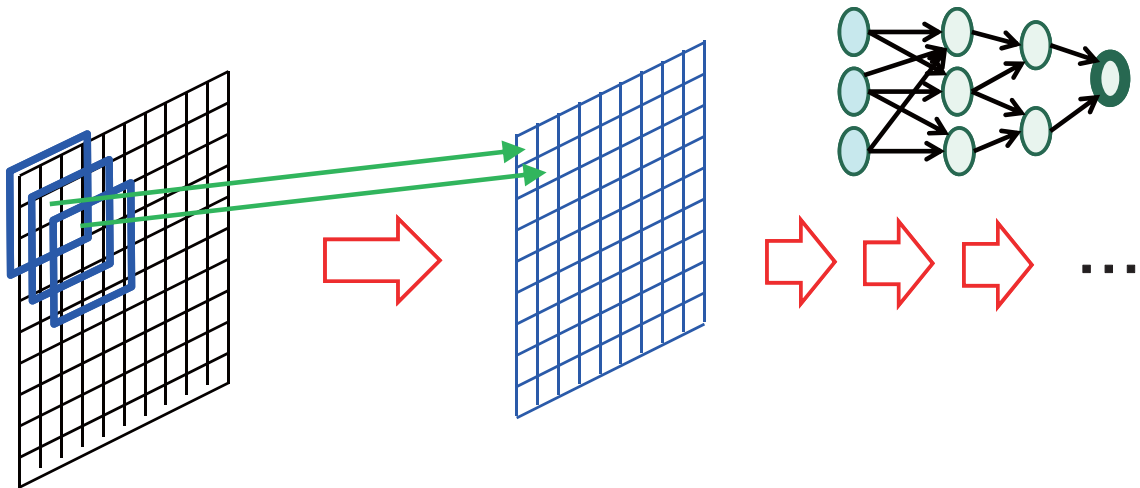
- 数学の証明は、与えられた条件から、ゴールとなる条件を導けるかどうかの問題
- 自動定理証明システムに突っ込むと、意外と上手に解いてくれる
- 文章を読み解いて、数式に変換するところが一番大変
- 数式になってしまえば、あとはソルバーがけっこう解いてくれる
← 自動証明技術の研究開発は長く、そこそこ優秀

（数式OCR、なんてのも最近あります。けっこう良くできてる！）

A I の理解の仕方

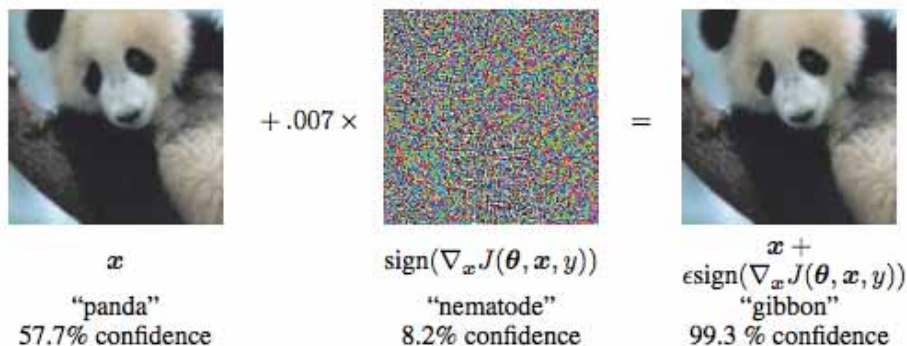
ディープラーニングが持つ知識

- ディープラーニングの「知識」は、ネットワーク上のノードの重み、計算式の集合
- 人間とはまったく理解のしかたが違う



仕組みが違うAI

- コンピュータは、人間とは異なるルールで認識する



右のパンダ、機械には「テナガザルそのもの」に見える

運転できる？

© <http://karpathy.github.io/2015/03/30/breaking-convnets/>

学習結果から知識を得たい

- ディープラーニングの学習結果から、物事を識別したり、予測したりするときの特徴をつかみたい

← 数式のかたまりなので、基本筋が悪い

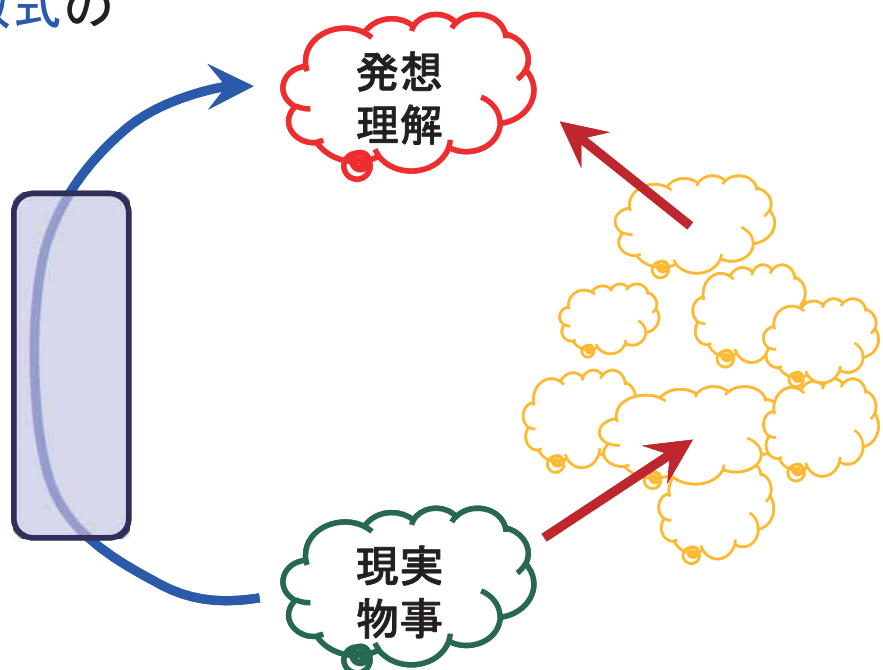
- 画像認識などは、画像のどのあたりを識別に使ったか、を可視化できる

人間がほしいようなものとは限らない
背景や、関係ない物が重要だったりする

AIの理解、人の理解

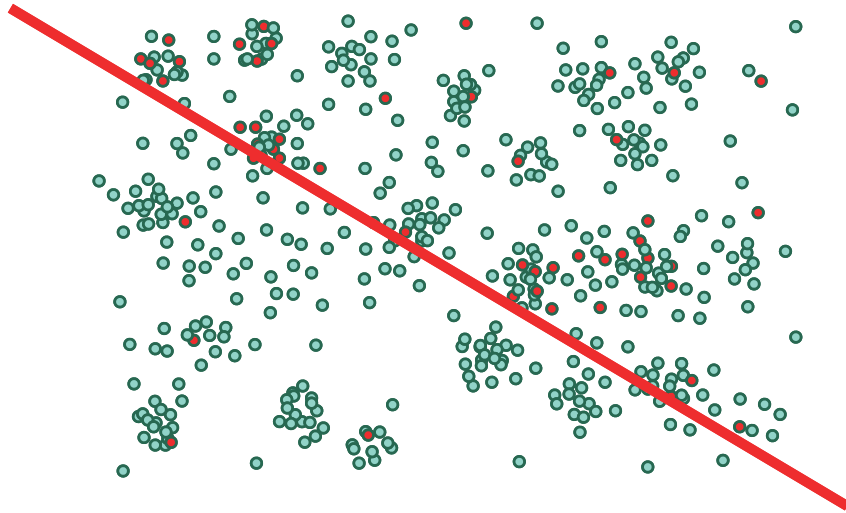
- 人間は、物事を**見て考えて**、そして「**わかった！**」となる
- 機械は**大量の数式**の
組合せで理解

お互いに**理解**
しあえるのは
難しい



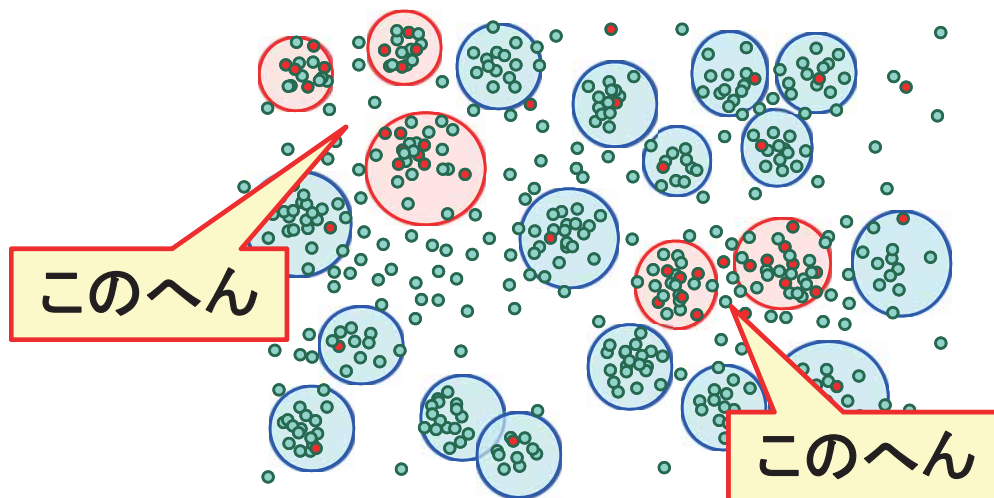
機械学習

- ○と×を分けるルールを、データから見つける手法
- 分け方／切り方により多くの方法がある
- 解(切り方)は、基本的に「理解しがたい」



人間：抽象化

人がデータを理解するときは、まず抽象化する



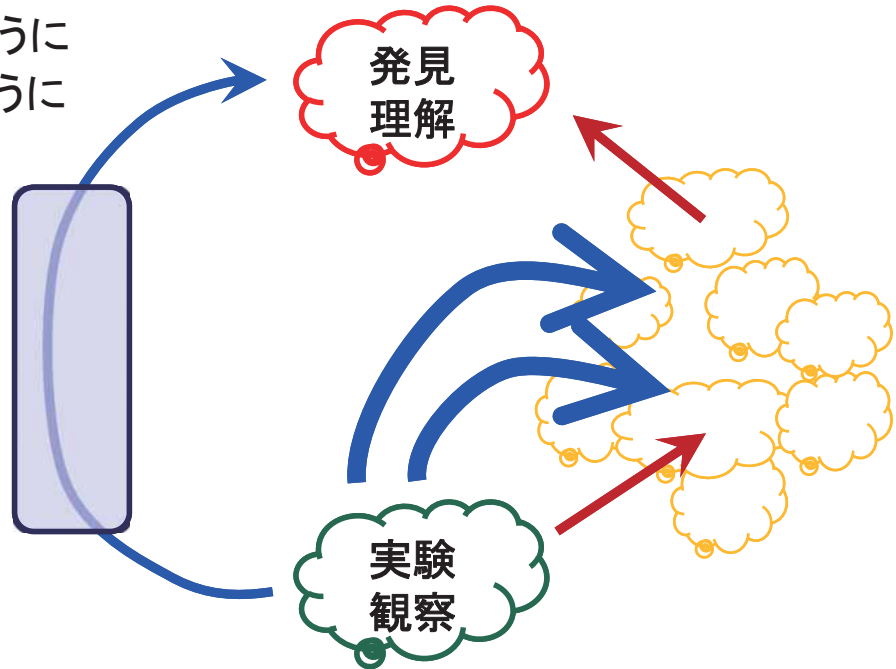
例えば、まとまりを取り出して怪しいところを見る

人間の思考のサポート

- AIを使うなら、人間の観察を助ける作業が良いだろう

- 仮説を上手に見つけられるように
妥当に検証できるように
全体を俯瞰できるように

整理して、スムーズ
にブラウジング
できるように

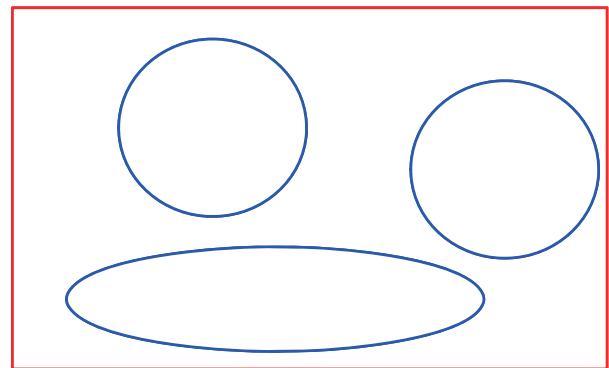


精度の落とし穴

手法：クラスタリング粒度

データを、まとまりや境目に従って分割する方法

平均分散的でないデータ解析では、非常に著名
生物学、社会学、マーケティング、、、



トピックマイニング

新聞の、似た記事の集まりはトピックに対応

← どれとも関係ない記事が浮く、
通常は、これを無理矢理他に入れ込む

← 境目を見つけるタイプは、巨大クラスタを見つける

← マイニング
は大量の
解を出す

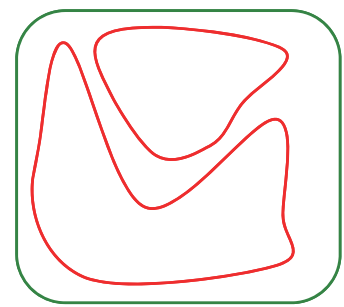
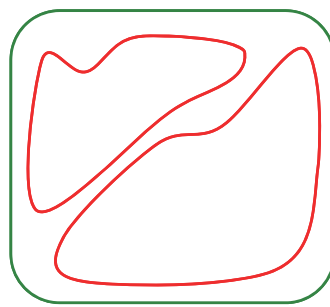
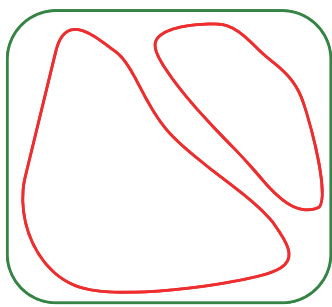
小型機が着陸失敗、日本人女性重傷か...ネパール
東京株、午前終値は152円高 8カ月ぶり9700円台回復
オセロ松嶋が体調不良、笑福亭鶴瓶のみ出演へ
トヨタの前3月期、豊田社長ら首脳3氏が報酬1億円超
タケノコ採り4人無事 秋田・仙北で一時不明

...

手法：クラスタリングは不安定

世の中で、よく、非常によく使われている k-means や、Girvan-Newman, Metis などのクラスタリング手法は、
初期解の乱数や変数の順序で解が大きく変わる

それぞれの異なる解が、異なる意味に対応していたりするとかっこいいのだが、どうも、そうではないらしい



解釈の難しさ

データ解析の現場では、教師無し学習(ほとんどクラスタリング)に意味付けを行う作業がとても大変

解釈できる解が見つかるまで、クラスタリングをやり直したりする

・・・ということをして、たとえそれなりの解が見つかったとしても、解が不安定であると、「これよりいいものがあるかも」という不安を払拭できない → **どの解を選ぶかで、どの店閉めるか決まる**

気にしなくても、、、同じ分析すると、**翌年は結果が全然違う**

結局、**すごく労力と時間をかけました、が、質の保証**だったりする

都市伝説

「学習回数を増やせば、真実の解が見つかる！」

「評価値が高いものを見つければ、真実の解が見つかる！」

← 1000回クラスタリングして、ベストの解と2番目の解が大きく違う。。。 (T_T)

k-mans や k++ は特にそう。PLSAもまたしかり

最適化では、評価値が最適に近い、大きく異なる解が大量に存在するのは、ごく普通の認識

データの解釈

データは、あればいいというものではない

- データを使うのはとても良い
- でも、単に統計の数字だけではだめ
- 数字や変化の意味をとらえないと、おかしくなる

データの正しい見方

スマホの利用時間、
勉強時間、成績の関係

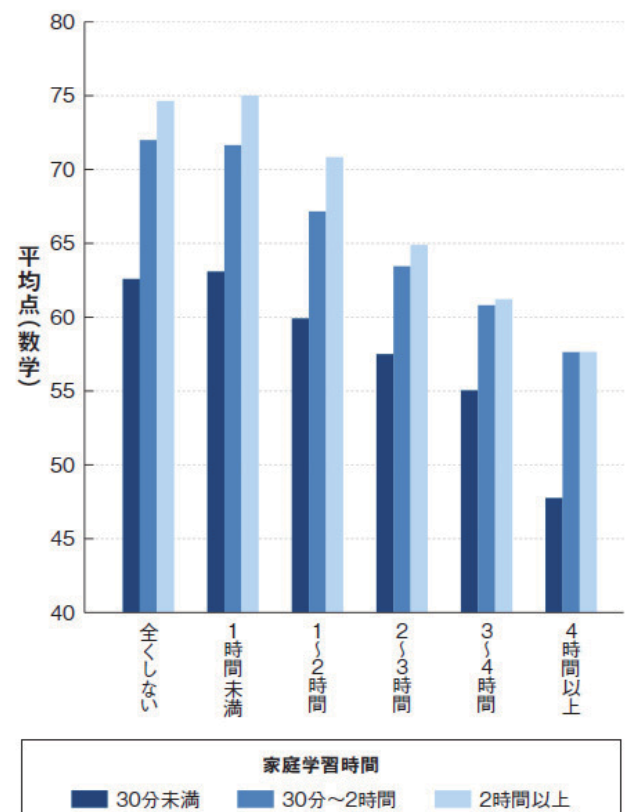
「スマホすると、
勉強できなくなる」

けっこう、とんでもない曲解

© プレジデント

<https://president.jp/articles/-/24764>

グラフ1-1 平日の携帯・スマホ使用時間 (平成25年度)



データの正しい見方

1. 勉強なしの子供

家ですることは、成績に関係ない
スマホで遊ぶか、他で遊ぶか

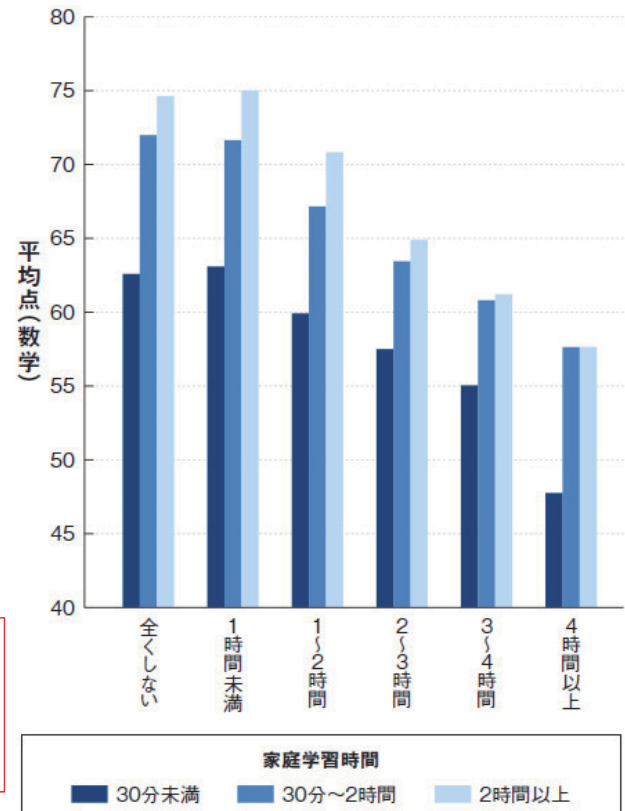
数学が**もともと**できない子は、
スマホをたくさん使う
1時間くらいが一番デキる

2. 勉強時間

家で勉強すれば成績は伸びる
では、どれくらい伸びてるのか

スマホと関係なく、
1時間勉強すれば、数学は伸びる
2時間に増やしても、伸びは少し

グラフ1-1 平日の携帯・スマホ使用時間 (平成25年度)



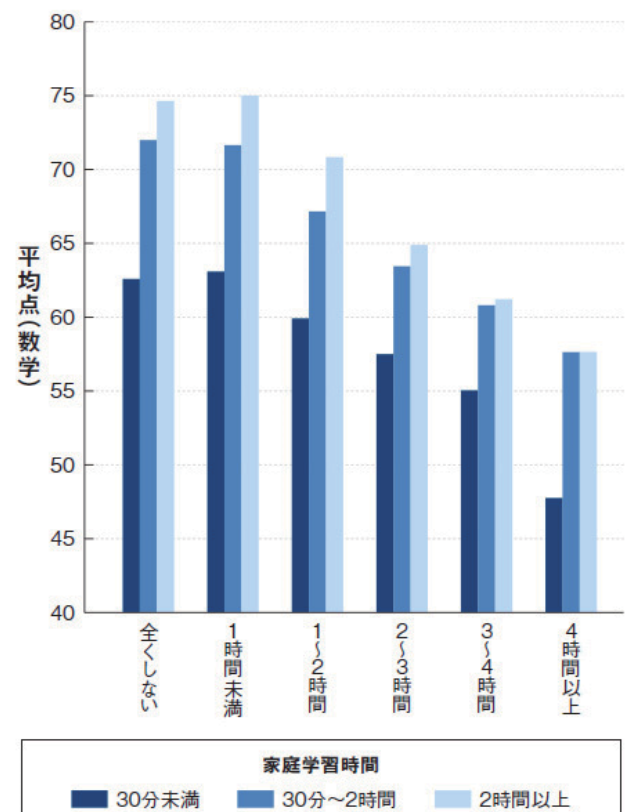
他に、わかること

家でスマホをしすぎると、
学校での効率が下がる？
他の遊びでは下がらない？

← 1時間勉強しても
成績は伸びないはず

- 勉強がもともと苦手
→ スマホが好き、か？

グラフ1-1 平日の携帯・スマホ使用時間 (平成25年度)



統計の落とし穴

数字は簡単。難しいのは、意味解釈。因果関係

間違えると、とんでもなくなる

どうデータを集めてどう集計するか

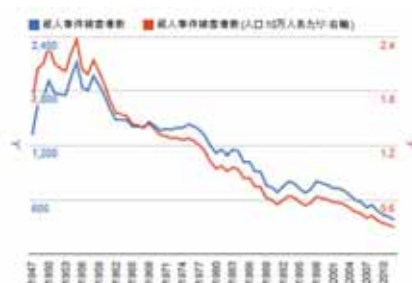
自分の仮説が強いと間違いやすい

自分の言うことを聞かないから、できない

自分の仮説は、自分の環境にだけ最適化されてる

思い込み

最近、物騒になった。危険になった



殺人数／10万人



交通事故死者数



強姦被害者数

データは逆。昔のことは忘れていくのだろうか

メディアの功罪

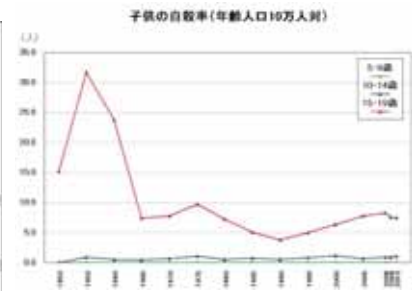
最近の親は虐待が多い



虐待相談件数



幼児の他殺数



子供の自殺者数

行政サービスが整備され、メディアで報道されると認知される。それが増えているという感覚を生む

最後に

- ・ 安易に結論を出すことは快樂である
- ・ 考え続ける意思を持ち続けることは進歩につながる

A I と未来

未来予測

- 我々は、未来予測が **「とても苦手」**

この10年で、社会を大きく変えたものは、

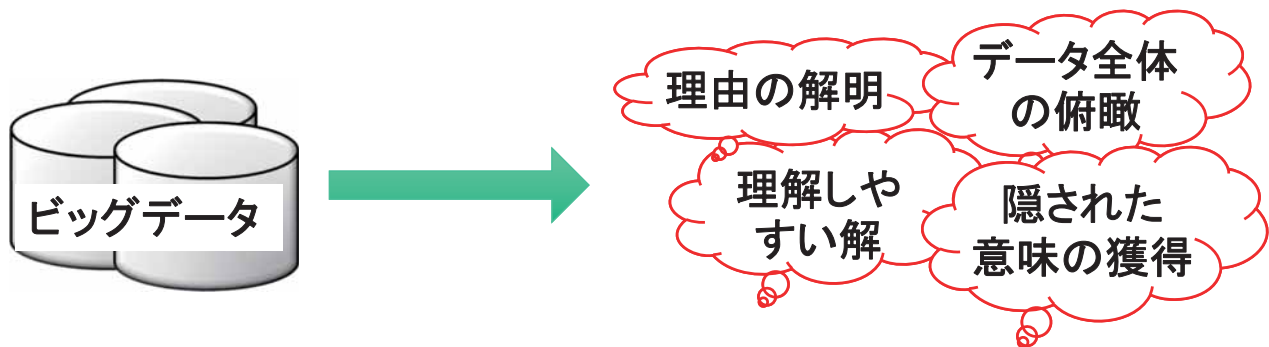
スマホとか LINE とか Youtube とかの **使い方**

20年前は、ケータイとかインターネットとかの **使い方**

全然予測できてません！

データ解析2.0

- データから物事と現象を深く理解できるようになる
- 箱物とブラックボックス技術に皮をかぶせる仕事から、データの意味を知り、価値を創造する仕事へ
- 小さな活動をする個人事業主やNPOもデータ解析
- 個人が自身の主観に基づく理解と解析結果を発信し、その集合知として社会が持つ「データに対する認識」が決まる時代



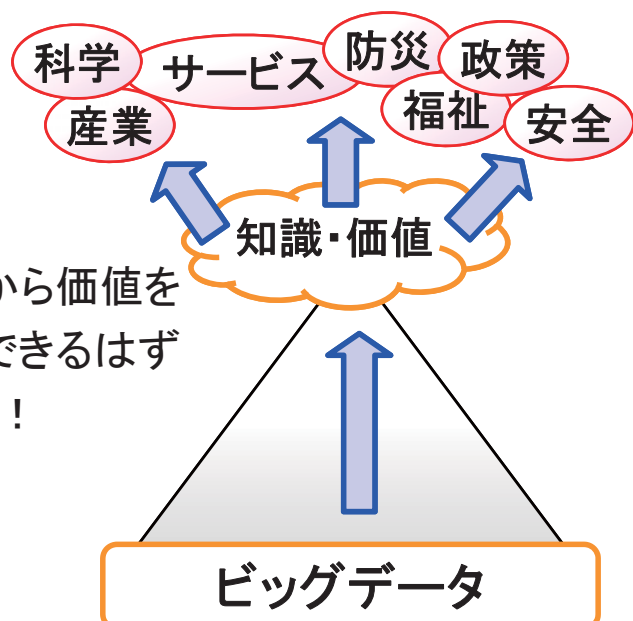
今、足りないもの

- データ解析をする、そして最終的には、価値を生み出したい
← 価値は**主観**によって定義される！

- 自分事として主観的に価値を創出する人が不足している

- 当事者なら、素人でも、データから価値を生み出す「**プロセス**」の設計はできるはず
→ 1つのデータから100の価値！

- データサイエンティスト不足が原因とは、とても思えない



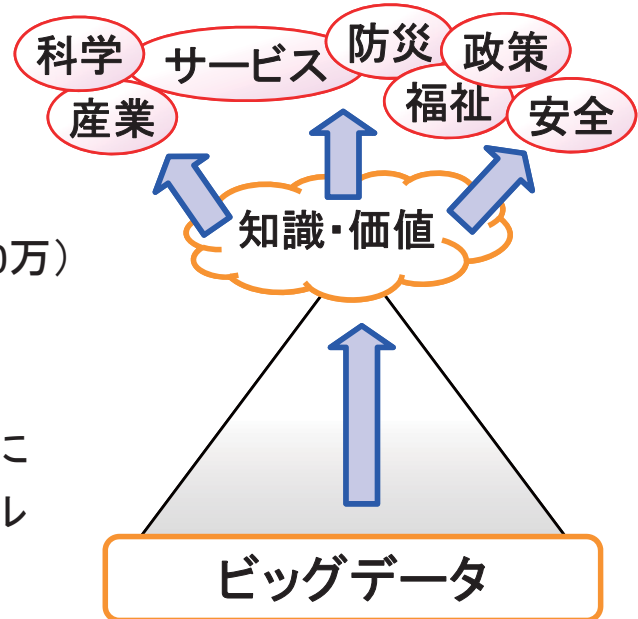
世界の中の日本

- 世界を見ても、1つのデータから100の価値が生まれているとは思えない ← やはり主観不足

- ただ、欧米は市場のサイズに大きな有利さがある
(資金: 日本500万、アメリカ5000万)

- ただし、主観を生む現場の強さにおいては、日本は世界トップレベル

- 本来は、世界を牛耳っていてもいいはず。それを助ける技術開発がとても重要



まとめ

AIとは: 今のAIは、はやり言葉。認識ができるようになった

AIでできること: 意味理解せずに答えがわかるもの

データ研磨: 案データの揺らぎを消すことで、意味のとりやすいクスタを明確にする

クラスタリング安定化: クラスタの実利用における重要な課題に、十分な質と速度の手法を提供

データ解析における課題: 現場では極めて重要で、大きな需要を持つが、科学が見逃してきた問題を発掘し、現実的に解決

参考文献

AI、データ社会をどう考えればいいか、知りたい人

情報研シリーズ しっかり知りたいビッグデータとAI

今どきの深層学習などの技術解説でなく、学者の研究でもなく、一般の人が、今出現しつつあるAIを、どう見ればいいのか、という解説



自己組織化写像(SOM)を用いた 地震・火山現象の解析

井田喜明

アドバンスソフト株式会社研究顧問

東大名誉教授

自己組織化写像SOMの応用事例を
地震・火山現象を題材に紹介する

Copyright ©2019 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

取り上げるテーマ

(1) 火山性地震の分類

+++藤田英輔氏(防災科学研究所)との共同研究+++

- ・火山性地震の分類にANNが用いられた研究事例を紹介。
- ・分類にSOMを用いる利点について、桜島の観測データを用いて検証。

(2) 地震発生の時空間分布の解析

+++石田瑞穂氏(産業総合研究所)との共同研究+++

- ・地震予知は実用化に悲観的な見方が現在主流である。
- ・東北地方と関東地方の震源データを使って、「小さな地震の分布は大きな地震の発生を事前に知っているか」を診断し、地震予知実用化の可能性を探る。

Copyright ©2019 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

(0)自己組織化写像について

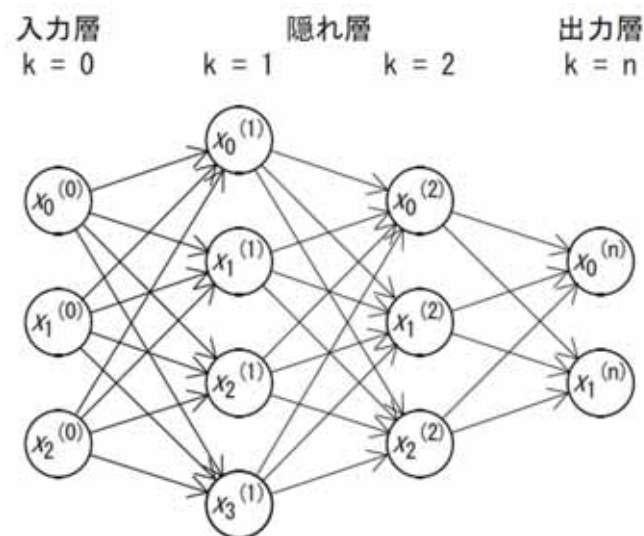
自己組織化写像SOMは1990年に提唱された
教師なし学習の手法

(Kohonen, *Proceed. IEEE*, **78**, 1464-1480, 1990)

Copyright ©2019 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

AI技術の基礎は人工ニューラルネットワーク (Artificial Neural Network; ANN)

- ANNは入力層を段階的に変換して、目的とする情報を出力層として取り出す
- 各段階では、線形変換の結果を活性化関数 h で修正
- 変換は、多数の未定定数（重み w とバイアス b ）を含む
- 未定定数を決める操作が**学習**
- **教師あり学習**
出力層の正解例を教師データとして準備し、それに合うように未定定数を決める
- **教師なし学習**
入力層を相互に比較して、分類、診断、可視化などをする



$$x_i^{(k+1)} = h^{(k)}(b_i^{(k)} + \sum_j w_{ij}^{(k)} x_j^{(k)})$$

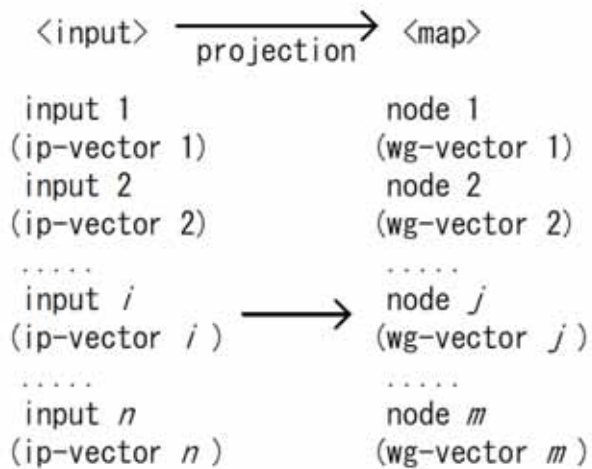
(個々の変数 $x_i^{(k)}$ をニューロンとよぶ)

Copyright ©2019 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

自己組織化写像は教師なし学習 (self-organizing map; SOM)



scheme of SOM



*The node j has the wg-vector closest to the ip-vector i .

- ・入力層は複数の成分をもつベクトル。
- ・出力層は入力層を**投影**する写像空間。
- ・写像空間には2次元の平面が好まれる。
- ・投影先は不連続な格子点(ノード)で、それぞれが重みベクトルをもつ。
- ・ノードは外側に周期的に反復すると仮定して、境界の影響をなくす。
- ・学習で**類似な入力層が近くに投影**されるように重みベクトルを調整。
- ・類似度は成分間の差の二乗和など。
- ・重みベクトルはランダムに初期化。
- ・**学習**は、入力層を1つずつ取り出して、入力ベクトルに最も近いノードとその周辺で、重みベクトルをさらに近づける。
- ・学習は入力ベクトルと重みベクトルの近い組み合わせから順に行う。
- ・学習のステップとともに、修正幅を大きくし、修正範囲を狭める。

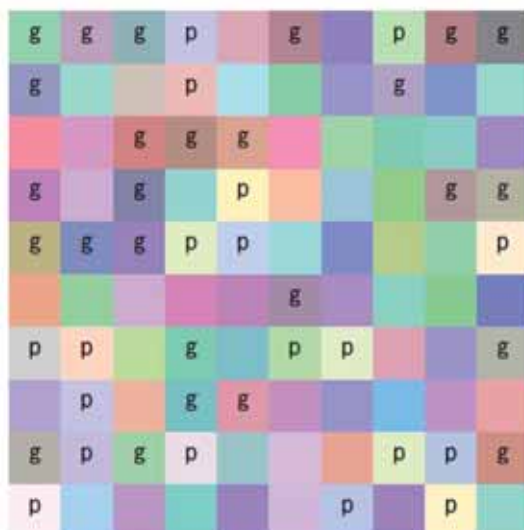
Copyright ©2019 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

SOMの簡単な例題

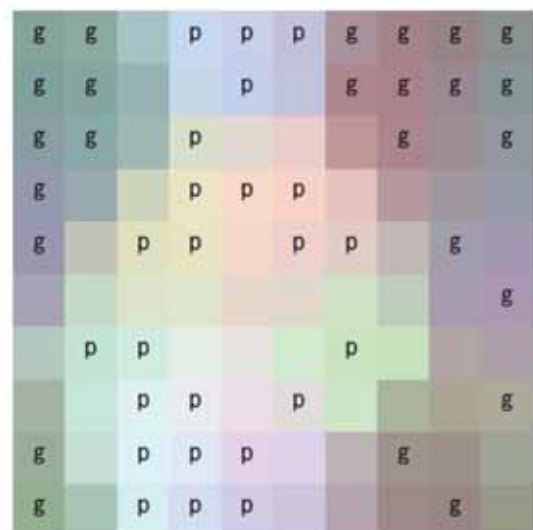


- ・入力ベクトルは色(赤、緑、青)を表す3成分。
- ・入力層は、緑のグループをg、紫のグループをpとして、全体で50個つくる。
- ・投影は2次元平面の10x10個のノードに。同じ分布が周期的にくりかえす。
- ・重みベクトルはランダムに初期化 (a)、学習により似たものを近くに集める(b)。

(a) 初期投影



(b) 自己組織化投影



Copyright ©2019 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

(1)火山性地震の分類

分類の自動化にはANNやSOMが使われる
桜島火山の火山性地震をSOMで分類

Copyright ©2019 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

Soufrie`re Hill 火山(Montserrat)の事例

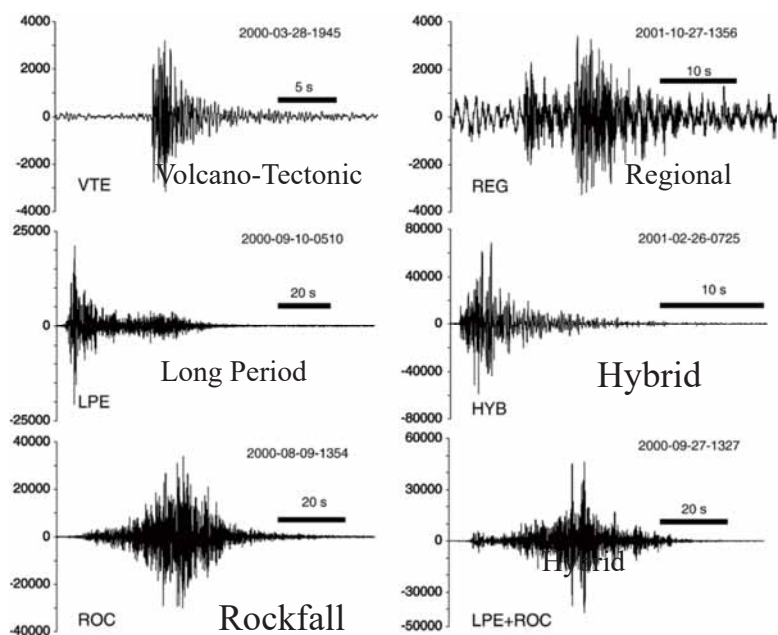
Langer et al., J. Volcanol. Geotherm. Res. 153, 1 –10, 2006.

9観測点 (broadband) のデータ
から1観測点の上下動

ANN 3層
隠れ層、6ニューロン

入力層; 波形の特徴量
スペクトルの自己相関係数
振幅の和
振幅比 (filteredとunfiltered)
最大振幅 / 平均振幅

出力層 6ニューロン
値は分類の6タイプ (右図)
の各々になる確率



180セットを使って学習、150セットでテストすると、70%を正しく分類

Copyright ©2019 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

桜島火山の火山性地震をSOMで解析



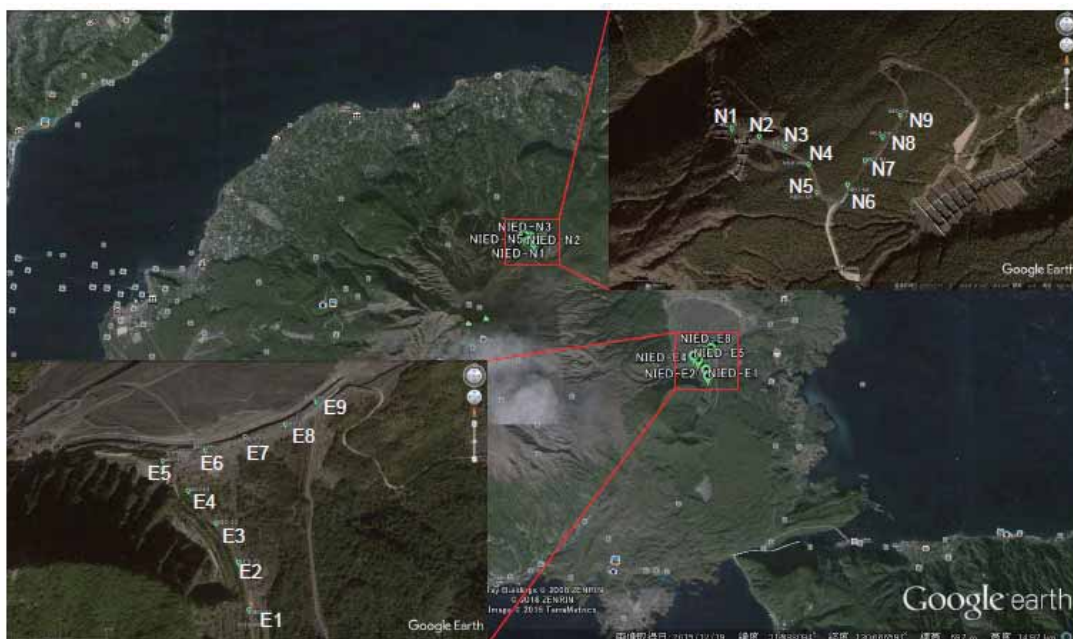
- ・ 桜島火山、防災科研のSKN5観測点の上下動
2015年8月15日の数時間分のデータ
連続データから振幅の大きさに火山性地震を切り出す
- ・ SOMの入力層:5成分のベクトル
 - ①継続時間 ②平均振幅 ③最大振幅
 - ④2Hzのlow-path filterをかけたときの平均振幅
 - ⑤0.5Hzのlow-path filterをかけたときの平均振幅
- ・ 解析手順
 - (1) 9～12時の100個の入力層で学習して、SOMを作成
 - (2) 投影結果に波形を参照して、火山性地震をS, T, Lの3タイプに分類する(タイプの境界も設定)
 - (3) 同じ投影図を用いて、6～16時の入力層を分類し、マグマ貫入現象との関係を調べる

Copyright ©2019 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

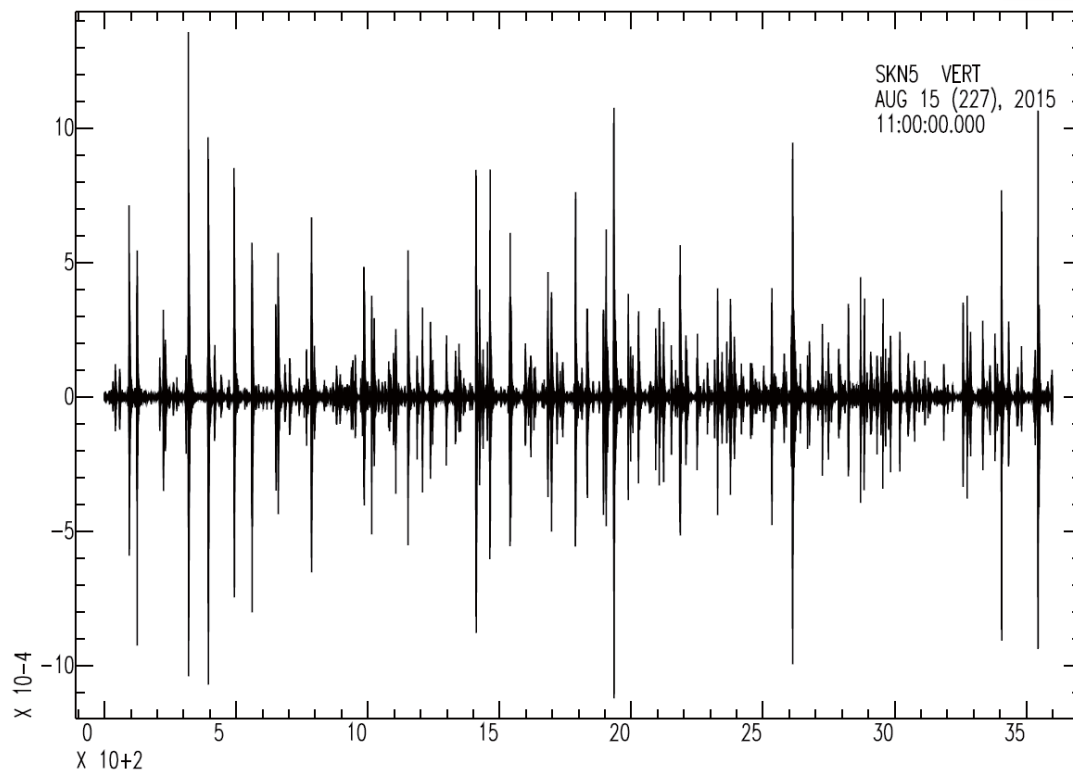
観測データ



観測点:桜島北岳北観測アレーのSKN5観測点(点N5)
地震計:1 Hzの速度型。成分:上下動。1秒間に200個のデータ
現地収録のデータをもちかえて再生



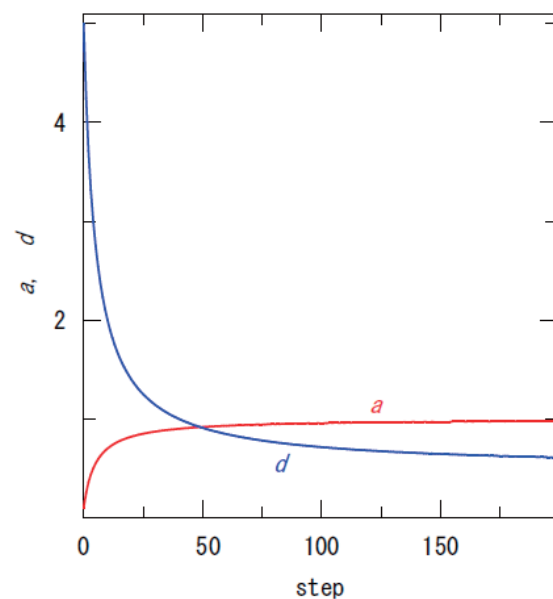
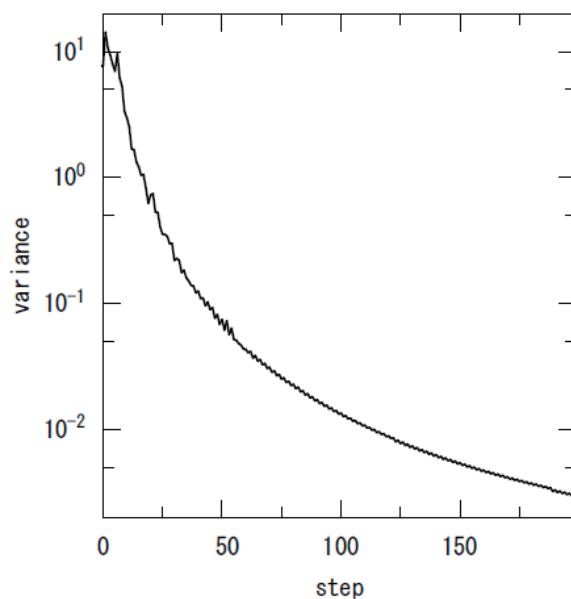
Copyright ©2019 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.



Copyright ©2019 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

11

SOMの学習経過

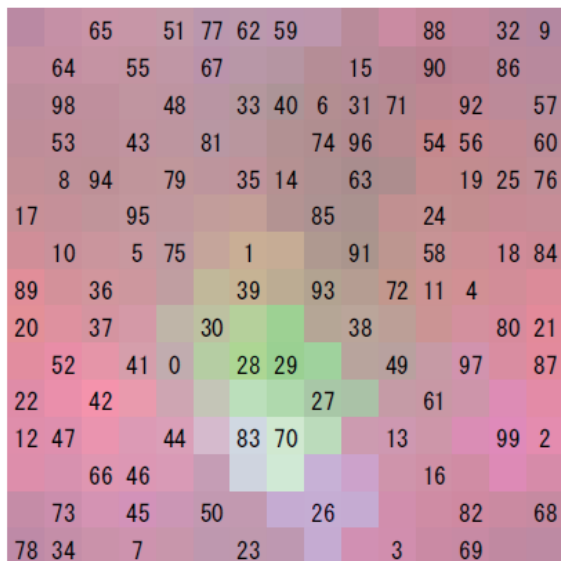


- ・1 stepは、学習に用いる全入力データに対して重みベクトルを修正する過程
- ・varianceは、入力ベクトルと投影先の重みベクトルの差の二乗和をすべて加算
- ・ a は重みベクトルを修正する割合、 d は修正の範囲(単位は格子間隔)

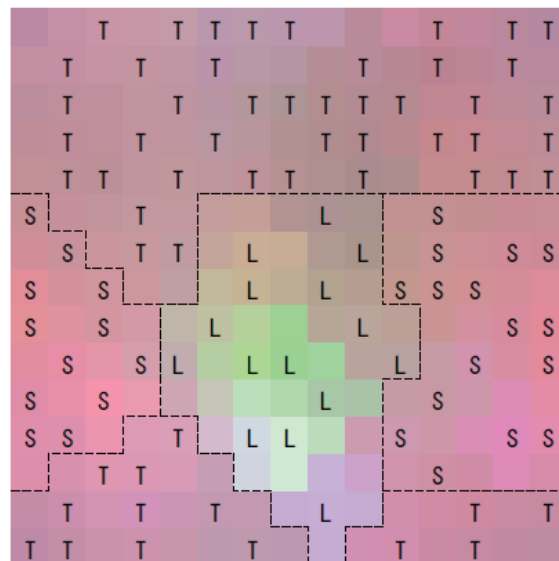
Copyright ©2019 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

12

(a) event number



(b) event type



- ・2015年8月15日9～12時の100個の入力層で学習した投影図(ノードは15x15点)
- ・投影先: 左は火山性地震の番号、右はS, T, Lに分類した火山性地震のタイプ
- ・重みベクトルの色や波形データも考慮して、領域を点線で区画

Copyright ©2019 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

13

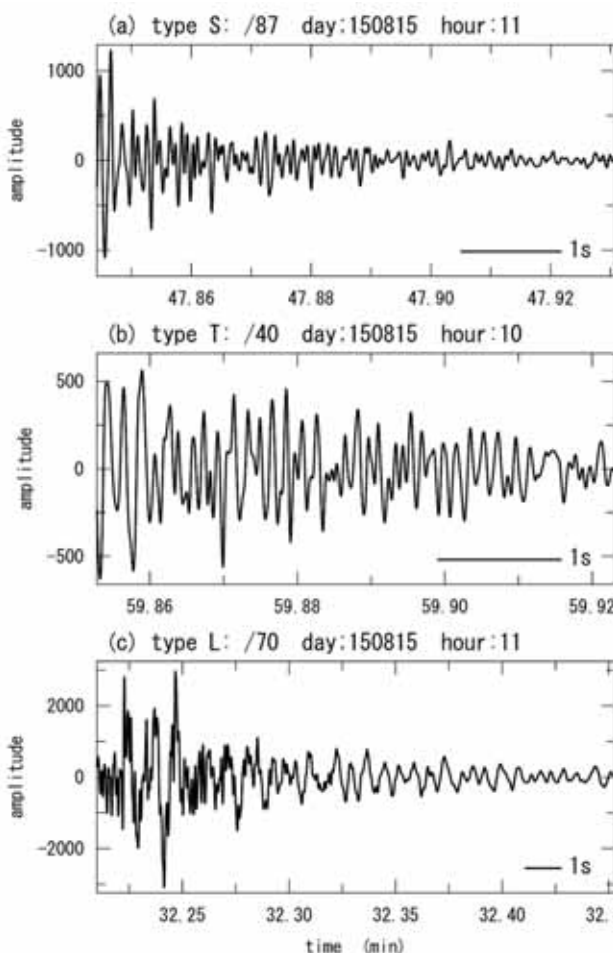
典型的な波形

タイプS:
大きな振動で始まり
次第に減衰

タイプT:
類似な振動が繰り返す

タイプL:
長周期の振動が卓越

* 中間的な波形も多い



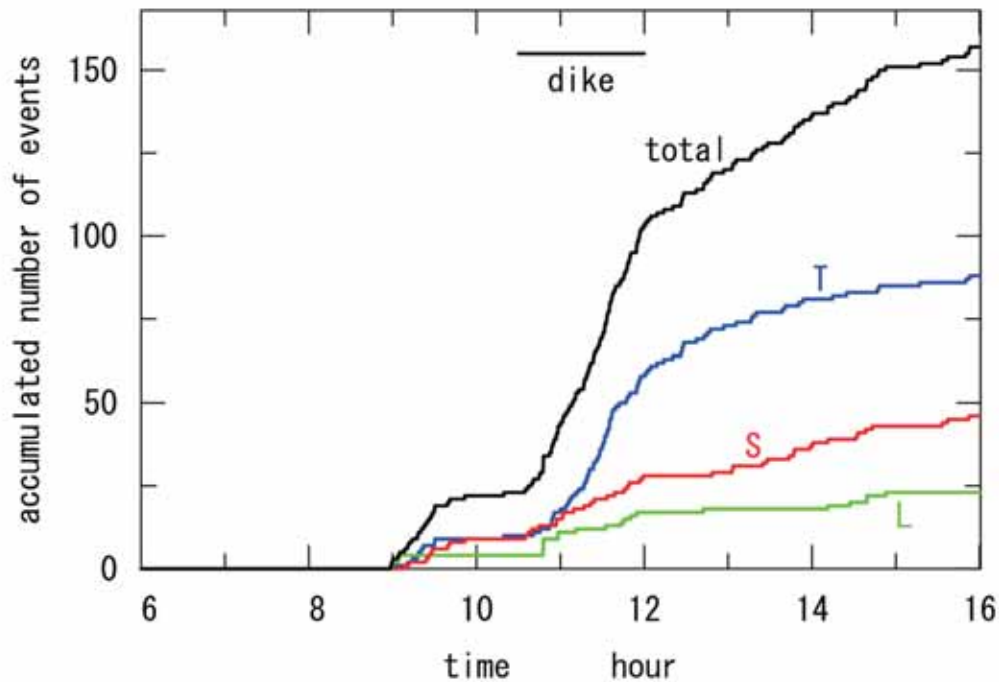
Copyright ©2019 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

14

火山性地震の発生数の累積



10時半～12時ころに、マグマが割れ目をつくって地殻浅部に貫入(dike)
タイプSは岩脈の貫入に同期して、Lはその前に、Tはその後に起こる傾向



Copyright ©2019 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

15

(1)のまとめ



- 従来人間が実行してきた火山性地震の分類は、人工ニューラルネットワークANNや自己組織化写像SOMを用いて自動化する動きが進んでいる。
- 桜島の防災科研の1観測点の上下動を用いて、貫入現象が起きたと思える時間前後の数時間分のデータをSOMで解析した。
- 2次元平面へのSOMの投影結果に、波形の特徴を考慮して、火山性地震をS, T, Lの3タイプに分けた。
- 学習に用いなかったデータも含めて、タイプの時間的な変化を調べ、マグマ貫入現象との関連を見出した。
- SOMによる分類は、あらかじめ分類項目を決めておくことも、教師データをつくっておくことも必要でなく、投影結果をみて分類方法を決めればよい。

Copyright ©2019 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

(2)地震発生の時空間分布の解析

AI技術は地震予知に対処できるか？
震源のリストをSOMで解析

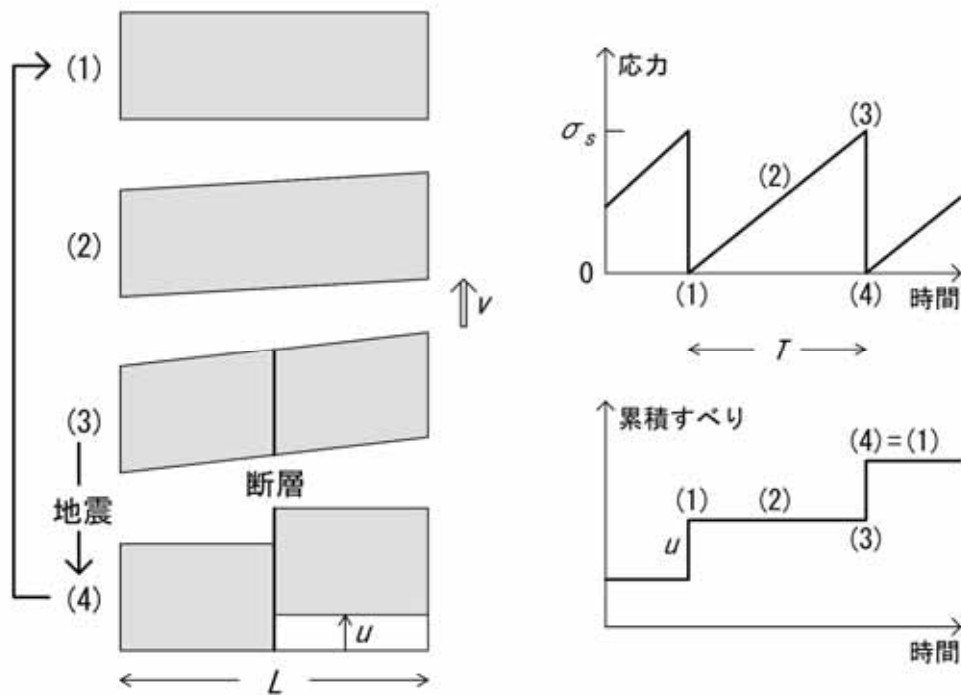
Copyright ©2019 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

地震予知の変遷

- ・日本など、深刻な地震災害を受ける国々では、地震予知は住民の悲願であり、研究や事業の長い歴史がある。
- ・日本では1965年に地震予知計画が始まった。
- ・1970年代には、ダイラタンシー理論の出現や、中国での海城地震(1975)の予知の成功で、実用化が楽観視された。
- ・1980年代に米国でパークフィールドの予知実験が失敗し、地震予知への悲観論が急速に広がる。
- ・日本では、阪神淡路大震災(1995年)が予知できなかったのを契機に、確率予測の採用など、予知体制が見直された。
- ・東日本大震災(2011年)では巨大地震の発生が想定外だった。
- ・地震予知へのAIの活用が試行され、IBMは汎用的な人工知能Watsonを用いる計画を表明し(2015年)、NASAは上空の地球電磁気観測で地震を予知するGeoCosmoシステムを進めている。

Copyright ©2019 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

地震発生過程の弾性反発モデル



Copyright ©2019 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

19

AI技術ですべりが発生する時刻を予測

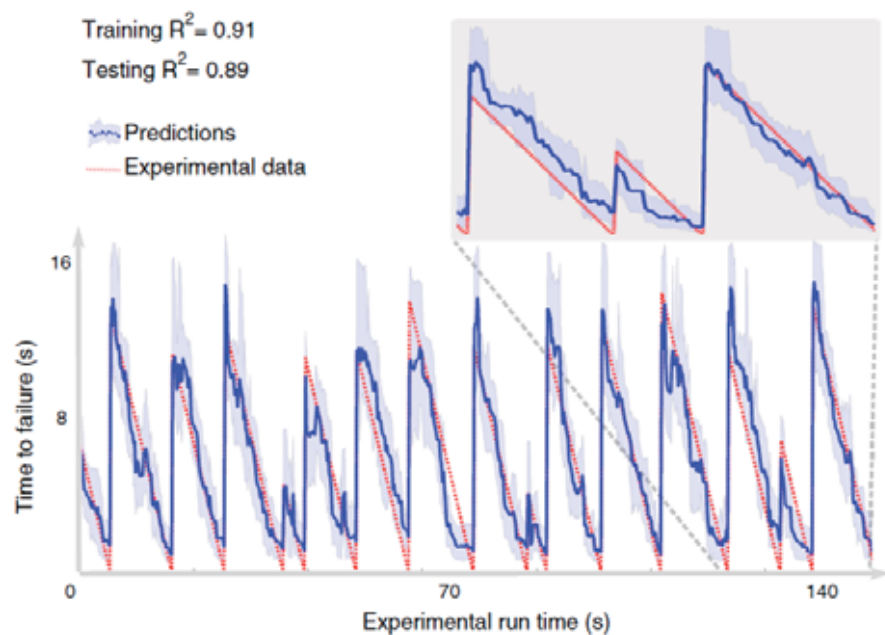
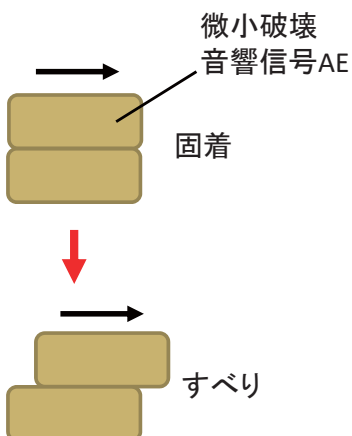


Rouet-Leduc et al., Geophys. Res. Lett, 10.1002/2017GL074677, 2017.

入力: 各時間区画のAEの統計量
(平均、分散、高次のモーメント)
出力: 次にすべる時刻

解析はランダムフォレスト法
すべった時刻の実測で学習

摩擦実験



Copyright ©2019 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

20

地震活動度の時空間分布の解析



解析の目的

「大きな地震の発生は小地震の時空間分布から予測できるか？」
実際の震源データを自己組織化写像SOMを用いて診断する。

解析方法と手順

- ①時空間を適当な区画に分けて、区画毎に地震の数を数える。
- ②時間区画の各期間をSOMの入力層、地震数の空間分布を入力ベクトルとし、入力層に大きな地震との関連でラベルをつける。
ラベルE: 大きな地震が発生、B: 1つ前、b: 2つ前、a: 1つ後、o: それ以外
- ③SOMの投影でBやbが系統的にまとまるかどうかを診断する。

データは地震発生リスト; 東北と関東について別々に解析

2003年以降の地震発生数を3ヶ月毎に数える。

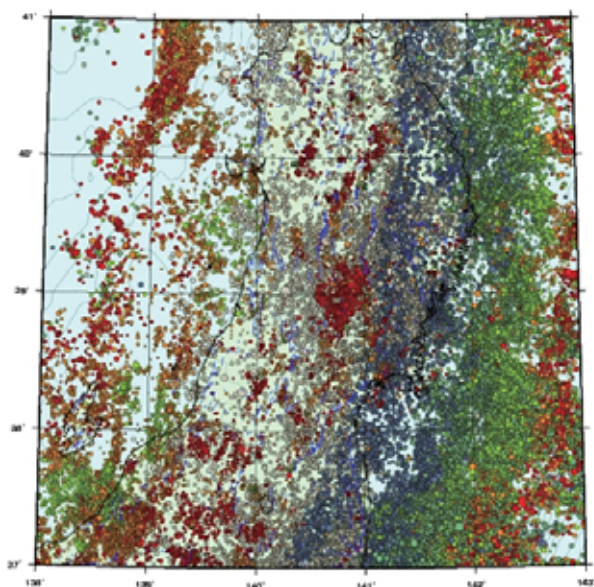
地震はマグニチュードMが1以上、深さが30km以浅を対象に。

Copyright ©2019 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

使用するデータは震源のリスト

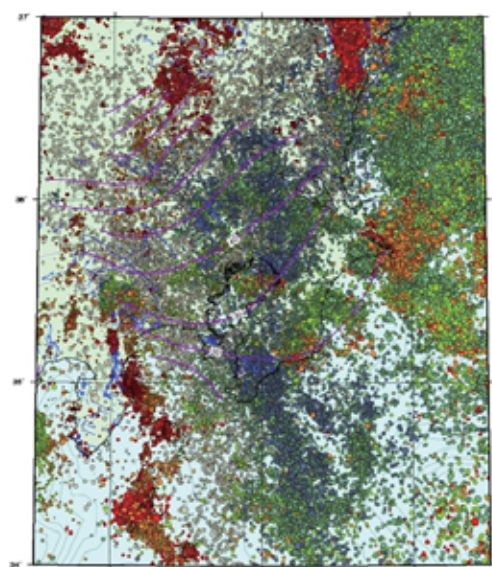


東北



<Data Sources>
Net: -
<Parameters>
Longitude: 136.0 ~ 143.0
Latitude: 37.0 ~ 41.0
Depth: 0 ~ 300 km
Magnitude: 1 ~ 5.0
Date: 2003/03/01 ~ 2011/03/28
Name of Data: 1005224
Name of Stations: -
Measure Kind: 10
(only for H-net)
Depth [km]
0 10 20 30 50 100 200
Magnitude
2.0 3.0 4.0 5.0

関東

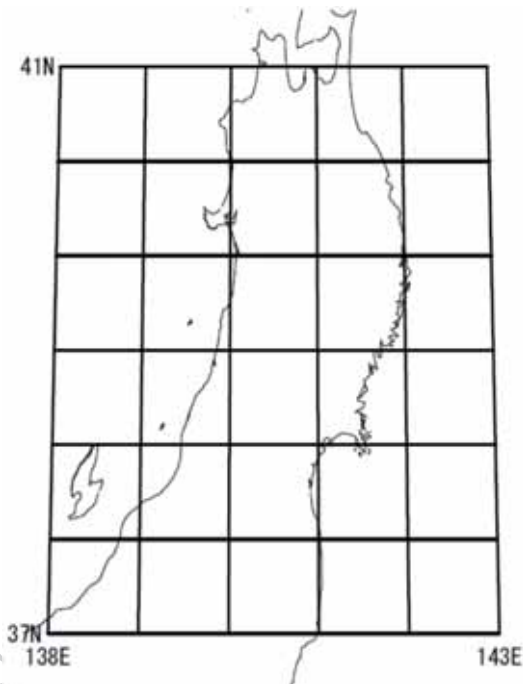


<Data Sources>
Net: -
<Parameters>
Longitude: 136.0 ~ 141.0
Latitude: 35.0 ~ 37.0
Depth: 0 ~ 300 km
Magnitude: 1 ~ 5.0
Date: 2003/03/01 ~ 2011/03/28
Name of Data: 172620
Name of Stations: -
Measure Kind: 10
(only for H-net)
Depth [km]
0 10 20 30 50 100 200
Magnitude
2.0 3.0 4.0 5.0

Copyright ©2019 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

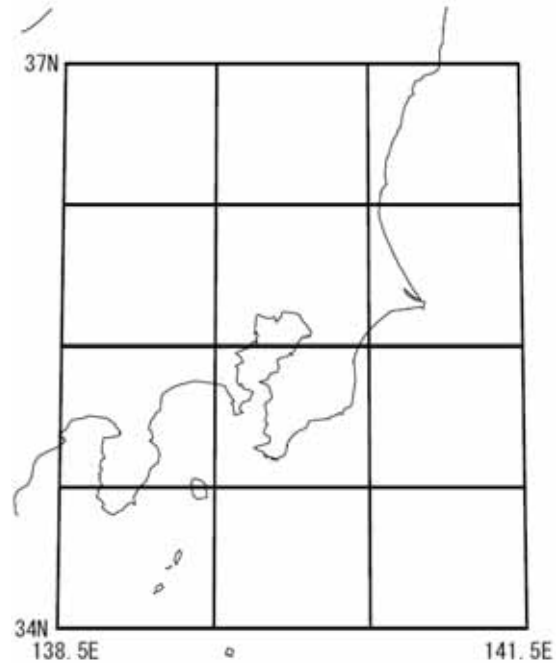
東北:

2003年3月～2018年8月
大きな地震はMが6.8以上
空間は30 (5x6)区画に分割



関東:

2003年1月～2019年6月
大きな地震はMが5.8以上
空間は12 (3x4)区画に分割



Copyright ©2019 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

地震数の時空間分布(東北)



/0 2003.1620 0

62	68	16	125	87
46	60	56	22	115
15	22	36	30	95
8	14	33	19	68
7	22	62	11	71
2	66	6	2	22

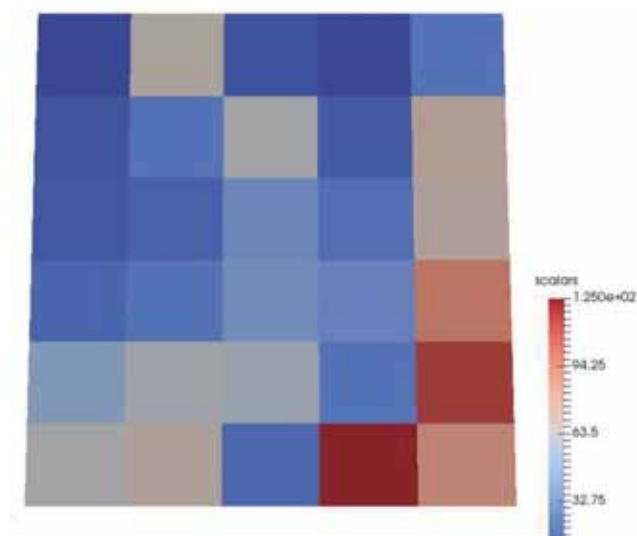
/期間番号 年 大地震の数
各空間区画で数えた地震の数
(右にいくほど東、下にいくほど北)

/1 2003.4120 0

82	98	15	119	77
33	47	79	19	84
17	18	184	2373	95
3	20	68	17	99
6	48	25	22	48
4	157	17	6	49

/2 2003.6620 1

77	75	55	119	101
34	84	85	10	329
14	21	68	408	74
4	10	33	12	70
9	40	67	29	63
7	224	31	8	80



/0について ParaViewで描いた個数分布

Copyright ©2019 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

大きな地震のリスト(東北)



/0 2003.1620 b /期間番号 年 ラベル
/1 2003.4120 B
/2 2003.6620 E
4 1 6.8 2003-10-31 10:06:30 142.796830 37.810550 24.610000 6.800000
/3 2003.9120 a (空間区画の位置 マグニチュード 元データ)
/4 2004.1620 o 大きな地震のマグニチュードは6.8以上
/5 2004.4120 o
/6 2004.6620 o
/7 2004.9120 b
/8 2005.1620 B
/9 2005.4120 E
4 1 7.4 2005-08-16 11:46:26 142.291770 38.146070 27.338000 7.400000
/10 2005.6620 a
/11 2005.9120 o
/12 2006.1620 o
/13 2006.4120 o
/14 2006.6620 o

Copyright ©2019 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

SOMの入出力



入力層

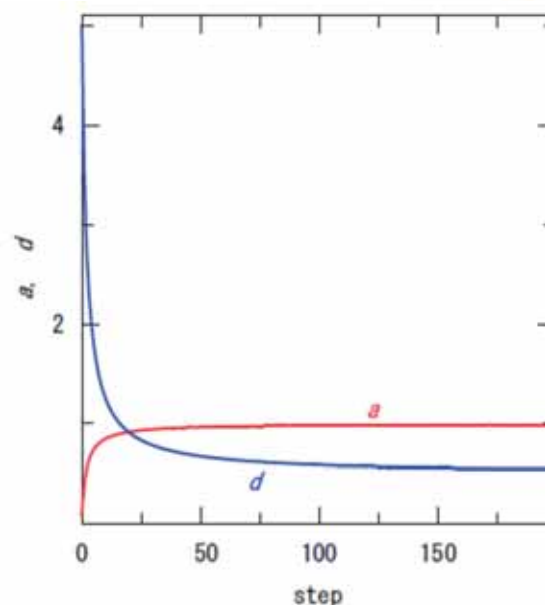
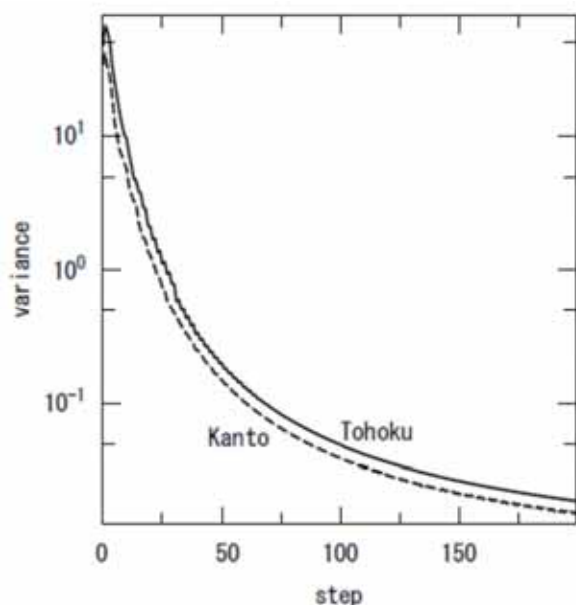
- ・3カ月毎に分割した各期間を入力層とする。
入力層の数は東北では61個、関東では66個。
- ・入力ベクトルは、各空間区画で期間内に起きた地震の数
成分数は区画の数、東北で30成分、関東で12成分
- ・入力ベクトルの各成分は、最大値で規格化して、
成分間の寄与に差が出ないようにする。
- ・入力層には、大地震との関係でラベルをつける。
ラベルEはその期間に大きな地震が発生、Bはその1つ前、
bはその2つ前、aは地震の1つ後、oはそれ以外の期間。

出力層(投影空間)

- ・投影空間は2次元の平面とし、11x11個のノードをおいて、
その各々に重みベクトルをもたせる。
- ・各ノードは重みベクトルに対応して色づけ。
南側、中間、北側の重みベクトルがr(赤)、g(緑)、b(青)を決める。
- ・投影図で「Bやbの入力層にまとまる傾向がみえたら、大地震発生
の情報をもち、分布がばらばらだったら、情報をもたない」と診断。

Copyright ©2019 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

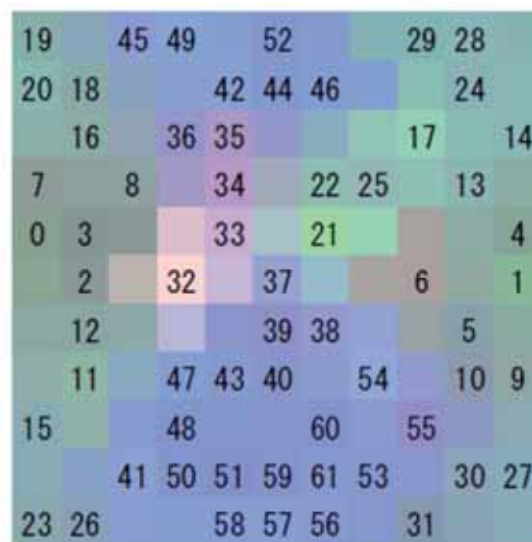
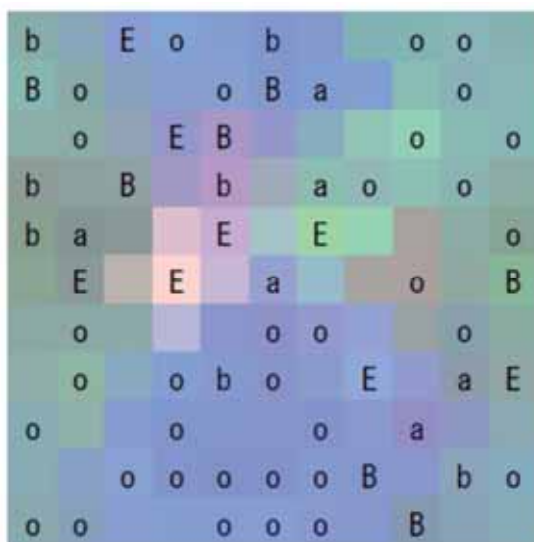
SOMの学習経過



- ・varianceは、入力ベクトルと投影先の重みベクトルの差の2乗和を、全ての入力データについて加え合わせた総和。
- ・ a と d は、各ステップで設定される重みベクトルの修正幅(倍率)と、修正の範囲（単位は格子間隔）。

Copyright ©2019 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

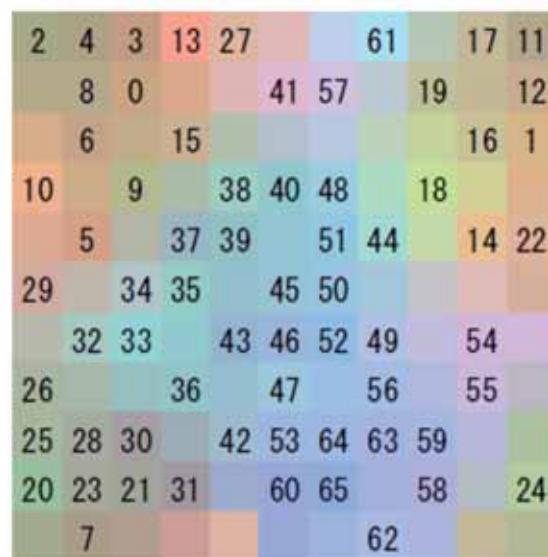
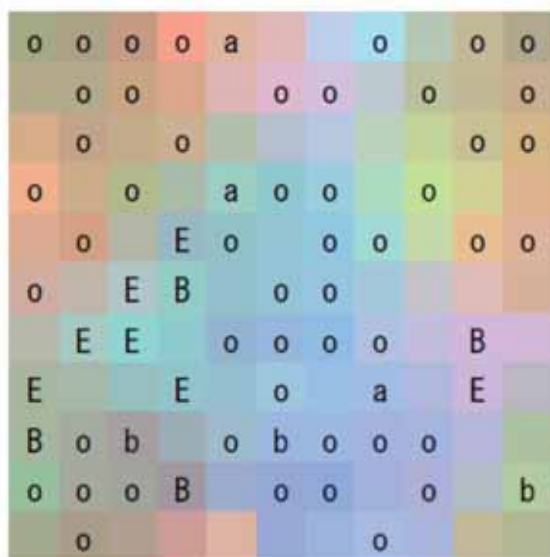
入力データのSOMによる投影: 東北



- ・11x11個の格子点への投影。左は入力層につけたラベルで、右は期間番号(時間順)で投影先を示す。
- ・ラベルは、Eは大きな地震が発生、Bはその1つ前、bはその2つ前、aは地震の1つ後、oはそれ以外の期間。

Copyright ©2019 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

入力データのSOMによる投影: 関東



- ・11x11個の格子点への投影。左は入力層につけたラベルで、右は期間番号(時間順)で投影先を示す。
- ・ラベルは、Eは大きな地震が発生、Bはその1つ前、bはその2つ前、aは地震の1つ後、oはそれ以外の期間。

Copyright ©2019 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

SOMの投影結果の特徴



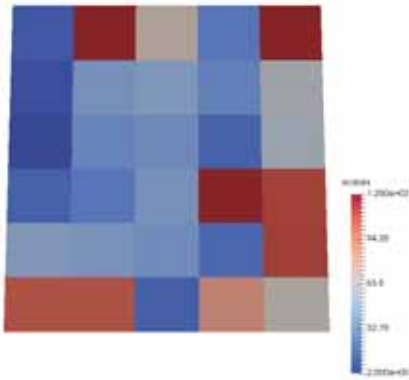
- ・大きな地震が発生した期間Eや、直後の期間aは、投影図上で活動期としてまとめられ、oで示される静穏期と分離する傾向にある。
- ・大きな地震が発生する前の期間Bやbも、投影図上でEやaの集まる活動期の範囲に入る傾向が強く、静穏期と区別できる。
- ・そこで、「大きな地震は一連の活動期の一環として起こり、活動期は大きな地震が発生する前から始まっている」と理解できる。
- ・すなわち、「小さな地震の分布は大きな地震の発生を事前に知っている」と診断できる。
- ・過去の事例を使ってSOM投影図を作っておけば、現在の状態を同じ図に投影することで、現在が地震の活動期にあるかどうか判定でき、今後大きな地震が起こる可能性が予測できる。
- ・SOMはこのように地震予知に役立つ。予測には誤差が伴うが、地震の発生確率を上げるなどの措置には使える。

Copyright ©2019 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

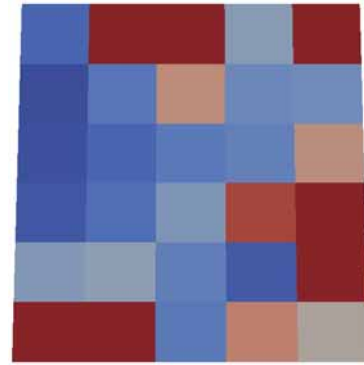
地震発生数の変化事例：東北(1)



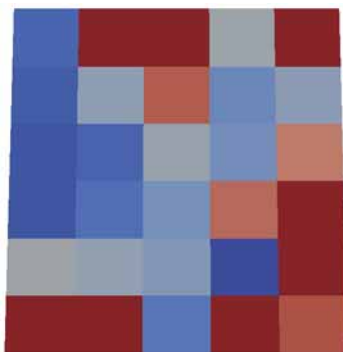
/4 o



/7 b

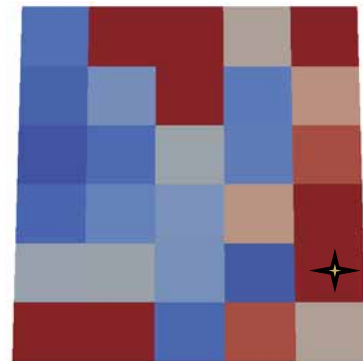


/8 B



/9 E

2005.41-2005.66
2005:8:16; M7.4

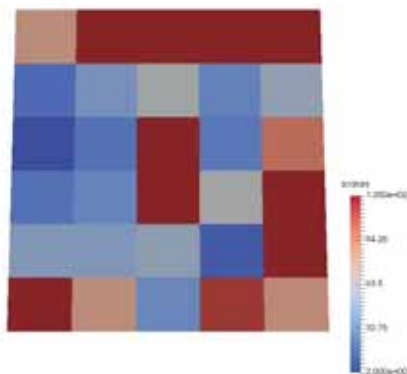


Copyright ©2019 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

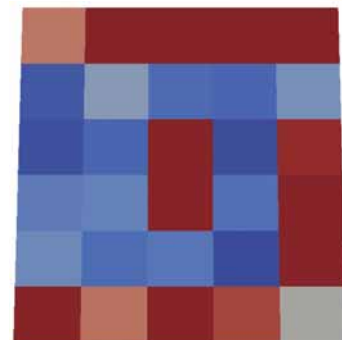
地震発生数の変化事例：東北(2)



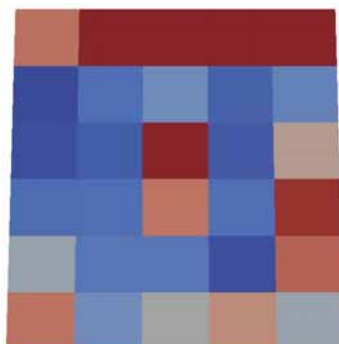
/27 o



/30 b

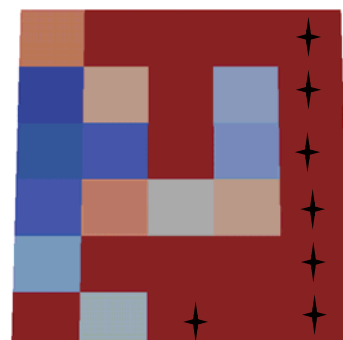


/31 B



/32 E

2011.16-2011.68
2011:3:11 many

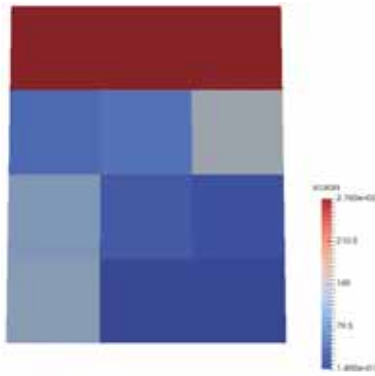


Copyright ©2019 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

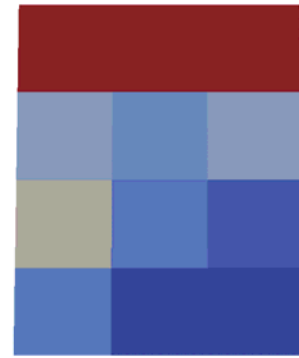
地震発生数の変化事例: 関東



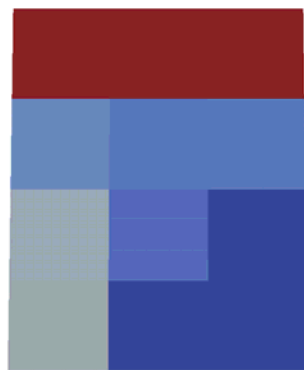
/21 o



/24 b

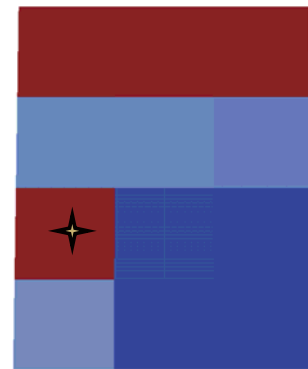


/25 B



/26 E

2009.50-2009.75
2009:08:11 M6.9



Copyright ©2019 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

(2)のまとめ



- ・東北、関東の地震分布とも、SOMは同様の学習ステップを経て、類似な性質をもつ投影図に収束。
- ・大きな地震が発生した期間Eの手前の期間Bやbは、Eや直後の期間aと隣接してまとまる傾向があり、平常時の期間oが投影される範囲とは隔たる。
- ・このことから、小さな地震の発生分布は、直後に大きな地震が起こることを「知っている」と判断できる。
- ・過去の地震発生分布からSOMを作り、Bやbのしめる範囲を決めておけば、地震数の分布がその範囲に入ったときに、近い将来大きな地震が起こる恐れが強まったと予測できる。
- ・小さな地震と大きな地震の関係は、地震の分布から直接導くことはできないが、SOMで投影することで抽出できる。

Copyright ©2019 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

- 自己組織化写像SOMは、入力層を幾何学的な空間に投影して、類似な入力層を近くに集める技術である。
- SOMの投影を用いて、入力層の分類、性質の抽出、相互の関係の可視化などを行うことができる。
- 火山性地震の問題では、SOMが分類に有効に活用できることをみた。
- 地震の時空間分布を解析する問題では、SOMの投影によって地震の活動期に入ったかどうかを判定でき、地震予知の手段になりうることをみた。
- SOMは簡単な技術なので、様々な分野で分類、診断、可視化などの目的で気軽に適用を試みることができる。



Copyright ©2019 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

深層学習用ツール Advance/iMacleのご紹介

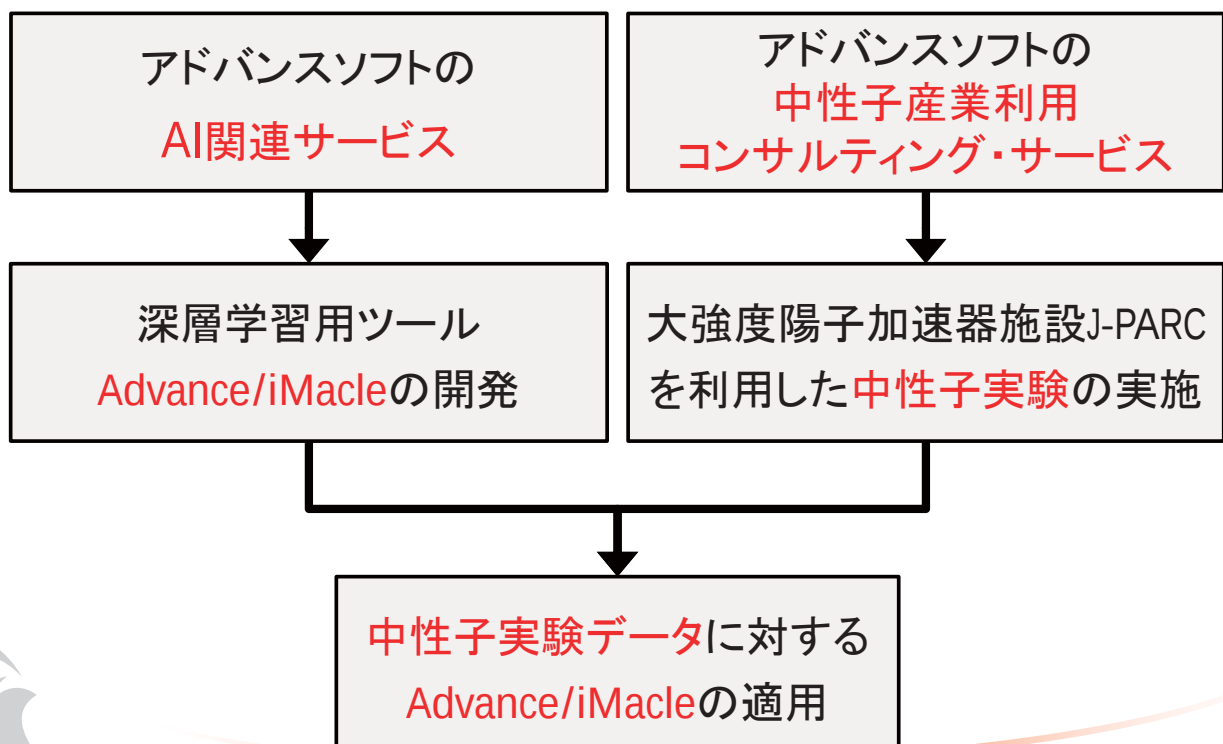
第3事業部 主事研究員 山下 貴志

AI 技術セミナー
「CAE分野におけるAI技術適用可能性」
2019年10月15日（火）
アドバンスソフト株式会社

Copyright ©2019 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

1

本講演の概要



Copyright ©2019 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

2

Table of Contents

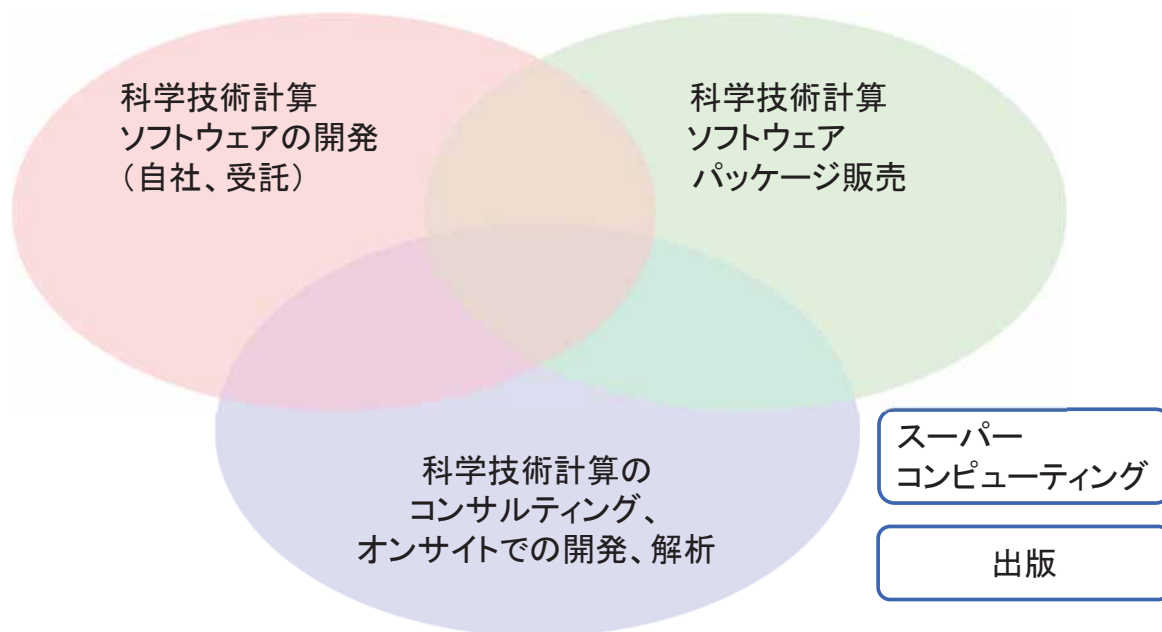
- Advance/iMacleの概要
 - 開発背景
 - 基本機能
- 中性子実験の概要
 - 大強度陽子加速器施設 J-PARC
 - 物質・生命科学実験施設 MLF
 - 工学材料回折装置「匠」を用いた中性子実験
- Advance/iMacleの適用事例
 - 多クラス分類による測定条件の判定
 - 回帰分析による物理量の予測
- まとめ

Table of Contents

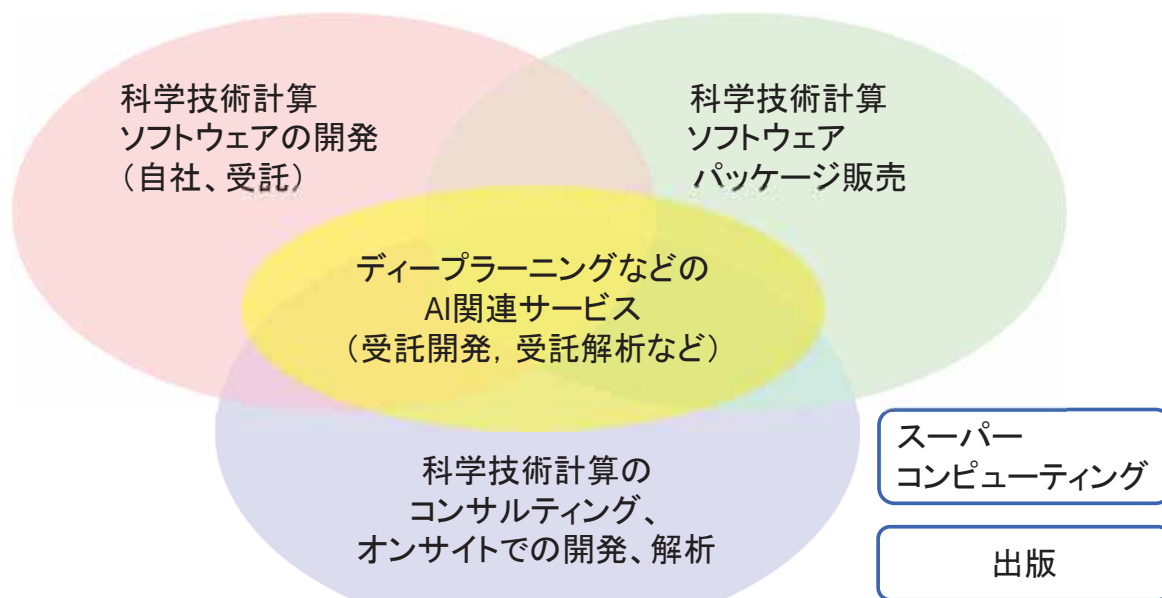


- Advance/iMacleの概要
 - 開発背景
 - 基本機能
- 中性子実験の概要
 - 大強度陽子加速器施設 J-PARC
 - 物質・生命科学実験施設 MLF
 - 工学材料回折装置「匠」を用いた中性子実験
- Advance/iMacleの適用事例
 - 多クラス分類による測定条件の判定
 - 回帰分析による物理量の予測
- まとめ

アドバンスソフトのソリューション(従来)



アドバンスソフトのソリューション(現在)



従来からの科学技術計算ソフトウェアの開発を基礎とした
科学技術計算に関する様々なソリューションとともに、
ディープラーニングなどのAI関連サービスを展開中。

アドバンスソフトの AI関連への取り組み(一部)

- シミュレーションによる学習(教師)データ生成
 - 第一原理計算ソフトウェア Advance/PHASE,
 - 流体解析ソフトウェア Advance/FrontFlow/red,
 - 管路系流体解析ソフトウェア Advance/FrontNet,
 - ナノ材料解析統合GUI Advance/NanoLabo, 等々
- マテリアルズ・インフォマティクスへの展開
 - 第一原理計算ソフトウェア Advance/PHASE における
マテリアルズ・インフォマティクス機能 ※ 次期バージョン(ver.4)以降
- アドバンスソフト独自のAIツール整備
 - 深層学習ツール Advance/iMacle の開発

アドバンスソフトの AI関連への取り組み(一部)

- シミュレーションによる学習(教師)データ生成
 - 第一原理計算ソフトウェア Advance/PHASE,
 - 流体解析ソフトウェア Advance/FrontFlow/red,
 - 管路系流体解析ソフトウェア Advance/FrontNet,
 - ナノ材料解析統合GUI Advance/NanoLabo, 等々
- マテリアルズ・インフォマティクスへの展開
 - 第一原理計算ソフトウェア Advance/PHASE における
マテリアルズ・インフォマティクス機能 ※ 次期バージョン(ver.4)以降
- アドバンスソフト独自のAIツール整備
 - 深層学習ツール Advance/iMacle の開発

本講演

深層学習用ツール Advance/iMacle

- Advance/iMacle: アドバンス／アイマークル
 - 語源: **MACH**ine **LE**arning から命名 (Macle = 空晶石).
- アドバンスソフトのAI関連ソリューションのひとつとして,
ニューラル・ネットワークによる深層学習に特化した
AIツールとして開発.



[https://fr.wikipedia.org/wiki/Macle_\(cristallographie\)](https://fr.wikipedia.org/wiki/Macle_(cristallographie))

Copyright ©2019 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

9

深層学習用ツール Advance/iMacle

- 最小限度の機能に絞り込んだ, 比較的軽いツール.
- Pythonの基本的な機能のみを用いて開発.
 - 行列計算のため, 外部ライブラリとして Numpy を使用.
- Windows, Linux, Mac等のマルチプラットフォームで動作.
- 当社で著作権を持つソフトウェア.
 - お客様のニーズに応じたカスタマイズが可能
 - 必要に応じて, ソースプログラムの公開(提供)が可能.

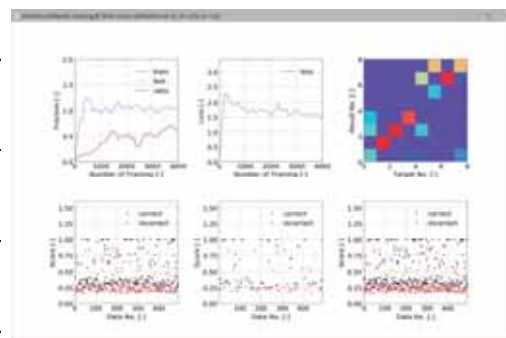
Copyright ©2019 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

10

深層学習用ツール Advance/iMacle

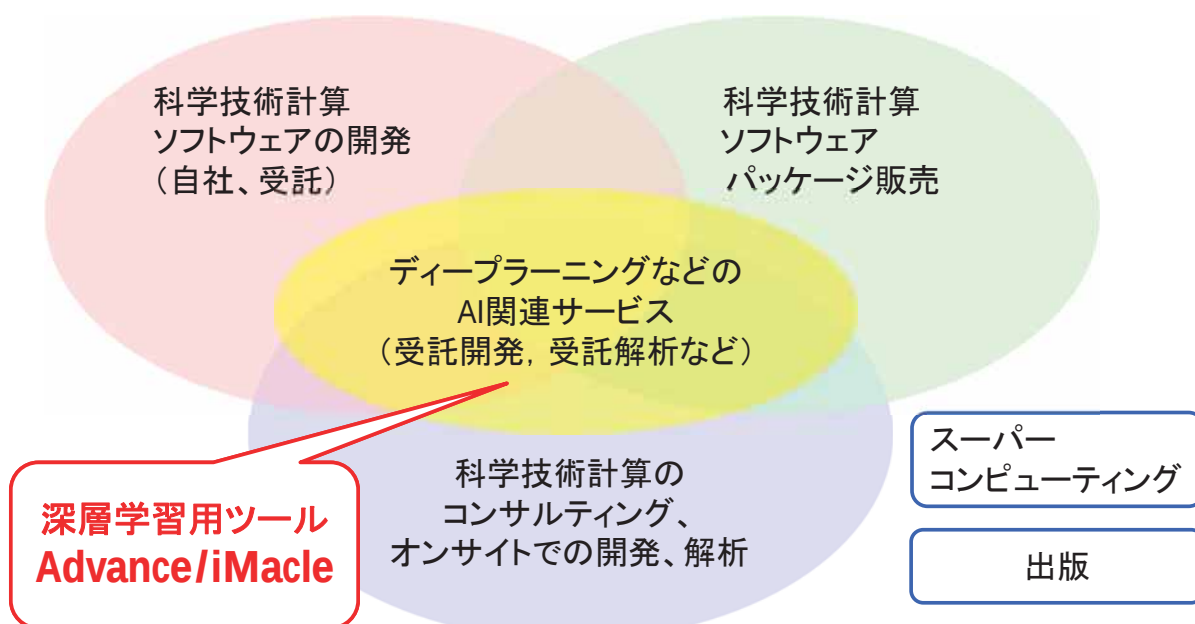
Advance/iMacleの主な機能

項目	内容	
ニューラルネットワーク	機能(層)	全結合層, 畳み込み層, プーリング層, ドロップアウト層, 正規化層, 活性化層
	活性化関数	Step関数, Sigmoid関数, SoftMax関数, ReLU関数
	最適化	SGD法, Momentum法, AdaGrad法, Adam法
	検証	Hold-out, Leave-one-out, k-fold cross validation
	その他	アンサンブル学習, データ拡張, 加重減衰, 学習率減衰
実行環境	使用言語	Python
	OS	Windows, Linux, Mac



Advance/iMacle実行例

アドバンスソフトのソリューション(現在)



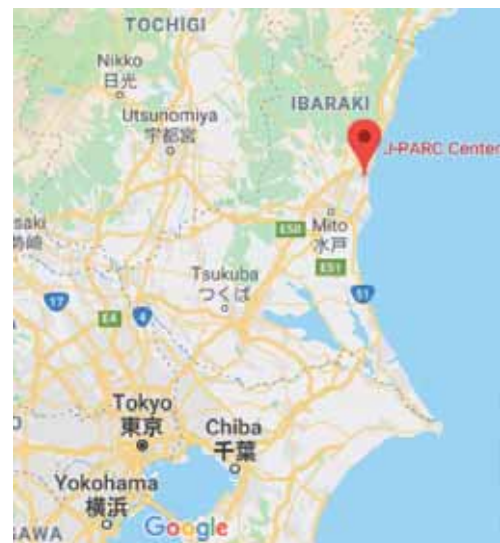
従来からの科学技術計算ソフトウェアの開発を基礎とした科学技術計算に関する様々なソリューションとともに、**ディープラーニングなどのAI関連サービスを展開中。**

Table of Contents

- Advance/iMacleの概要
 - 開発背景
 - 基本機能
- ➡ • 中性子実験の概要
 - 大強度陽子加速器施設 J-PARC
 - 物質・生命科学実験施設 MLF
 - 工学材料回折装置「匠」を用いた中性子実験
- Advance/iMacleの適用事例
 - 多クラス分類による測定条件の判定
 - 回帰分析による物理量の予測
- まとめ

大強度陽子加速器施設J-PARC

- J-PARC: **J**apan **P**roton **A**ccelerator **R**esearch **C**omplex
- 場所: 茨城県東海村
- 日本原子力研究開発機構と高エネルギー加速器研究機構が共同で建設・運営している
世界最高レベルの大強度陽子加速器施設.
- 多彩な粒子ビームが利用可能.
 - 中性子, ミュオン, K中間子, ニュートリノ, など



<https://www.google.com/maps>

大強度陽子加速器施設J-PARC

- J-PARC: Japan Proton Accelerator Research Complex



引用:パンフレット“宇宙・物質・生命の起源に迫る“

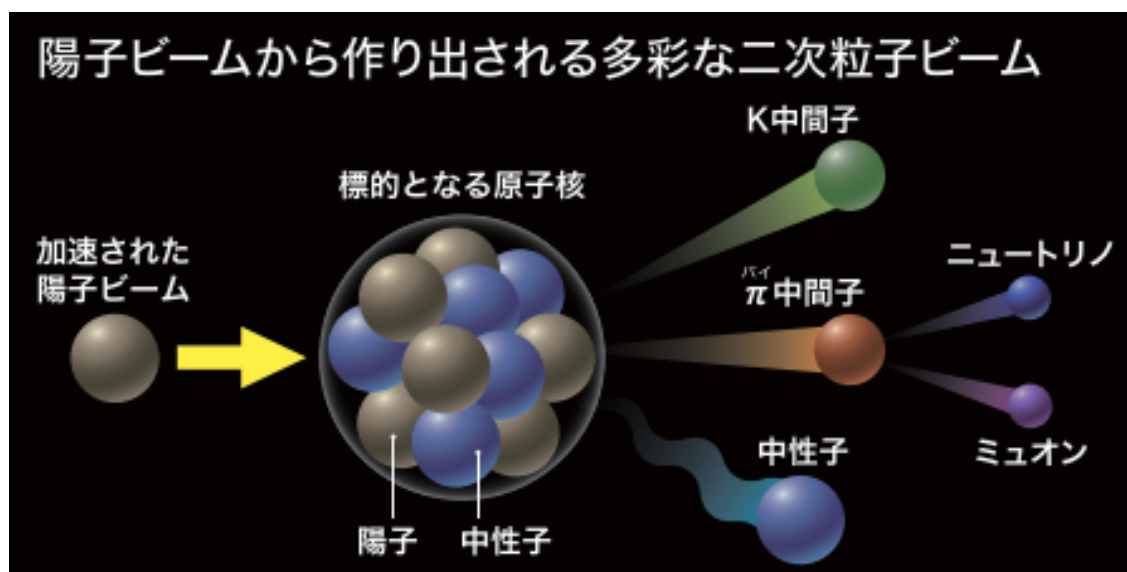
画像提供:J-PARCセンター (<https://j-parc.jp/public/database/publication/index.html>)

Copyright ©2019 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

15

大強度陽子加速器施設J-PARC

- J-PARC: Japan Proton Accelerator Research Complex



引用:パンフレット“宇宙・物質・生命の起源に迫る“

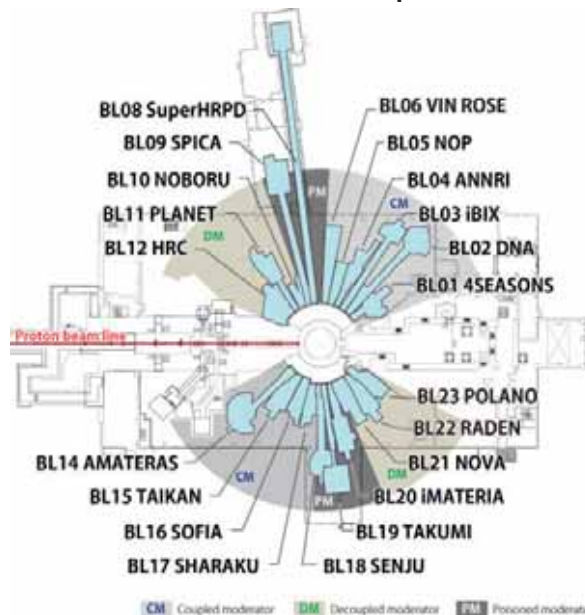
画像提供:J-PARCセンター (<https://j-parc.jp/public/database/publication/index.html>)

Copyright ©2019 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

16

物質・生命科学実験施設 MLF

- MLF: **M**aterials and **L**ife Science Experimental **F**acility



引用: “Materials and Life Science Experimental Facility / Neutron Instruments”

画像提供: J-PARCセンター (<http://j-parc.jp/researcher/MatLife/ja/instrumentation/ns.html>)

アドバンスソフトの 中性子産業利用コンサルティング・サービス

- アドバンスソフトでは、**J-PARC/MLFの中性子ビーム**を利用した**実験のトータルサポート**を承ります。
 - 実験の計画立案や課題申請書の作成などのサポート
 - 実験準備や実施のサポート・代行
 - 実験データの解析
 - 各種シミュレーション・ソフトウェアを用いた実験結果の評価
 - その他、施設利用手続きなどに関する事務的なご相談全般、など
- **中性子だけではなく、放射光施設を利用した実験**のサポートなど、**実験に関する広範なコンサルティング・サービス**をご提供します。

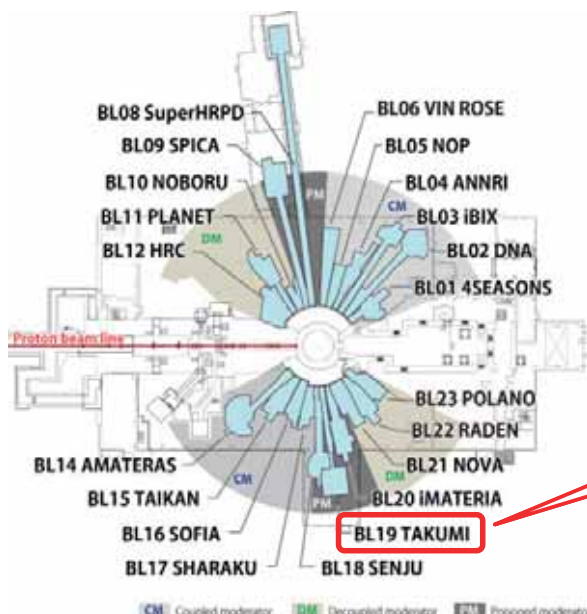
アドバンスソフトの 中性子産業利用コンサルティング・サービス

- アドバンスソフトでは、**J-PARC/MLFの中性子ビーム**を利用した**実験のトータルサポート**を承ります。
 - 実験の計画立案や課題申請書の作成などのサポート
 - 実験準備や実施のサポート・代行
 - 実験データの解析
 - 各種シミュレーション・ソフトウェアを用いた実験結果の評価
 - その他、施設利用手続きなどに関する事務的なご相談全般、など
- 中性子だけではなく、放射光施設を利用した実験のサポートなど、**実験に関する広範なコンサルティング・サービス**をご提供します。

ご興味がございましたら、是非お問い合わせください

物質・生命科学実験施設 MLF

- MLF: **M**aterials and **L**ife Science Experimental **F**acility



BL19
工学材料回折装置
「匠」

引用: “Materials and Life Science Experimental Facility / Neutron Instruments”
画像提供: J-PARCセンター (<http://j-parc.jp/researcher/MatLife/ja/instrumentation/ns.html>)

工学材料回折装置「匠」

- J-PARC/MLFの中性子ビームライン19番 (BL19) に設置された **飛行時間型** 中性子回折装置.
- 工学材料等の **ひずみ** や構造などの解析が可能.



引用: "Engineering Materials Diffractometer(BL19) for MLF (June 15, 2009)"

画像提供: J-PARCセンター(<http://j-parc.jp/researcher/en/database/portfolio/construction-e0904.html>)

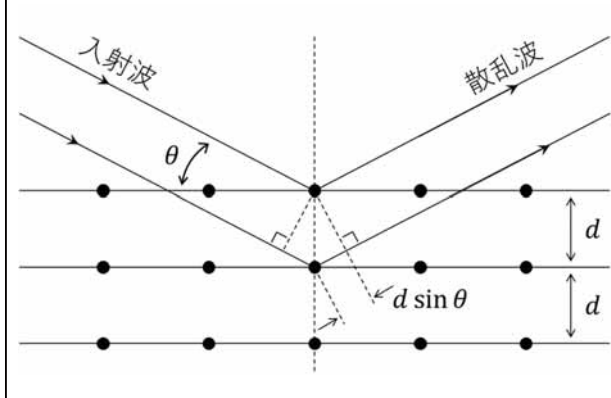
Copyright ©2019 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

21

中性子回折法

Bragg's Law:

$$n\lambda = 2d \sin \theta$$

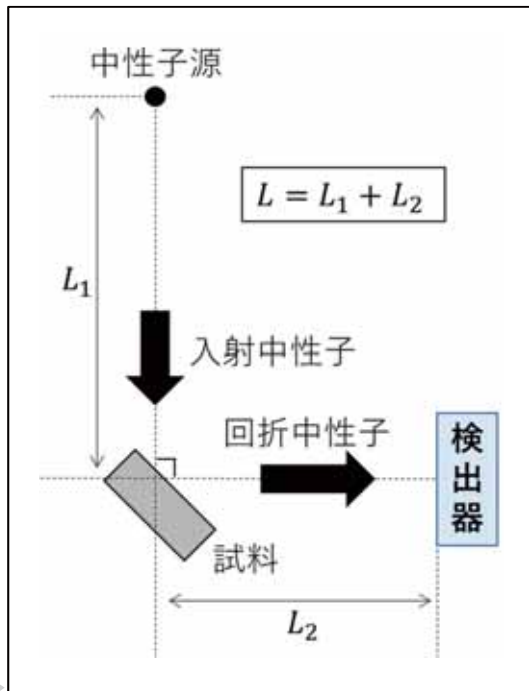


- X線と同様に, 中性子も Bragg条件に従って回折.
- 回折パターンを観測することで, 試料の結晶構造などに関する情報が得られる.
- X線と比較して物質内部への侵入深さが深いため, 試料内部の測定が可能.

Copyright ©2019 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

22

中性子飛行時間法



飛行時間 TOF と飛行距離 L から波長 λ が求まる。

$$\lambda = \frac{h}{mv} = \frac{hTOF}{mL}$$

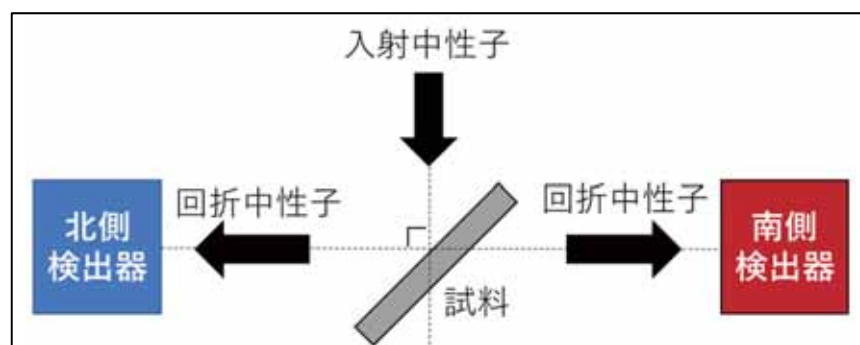


飛行時間 TOF (波長 λ) の変化からひずみ ε が求まる。

$$\varepsilon = \frac{d - d_0}{d_0} = \frac{\lambda - \lambda_0}{\lambda_0} = \frac{\Delta TOF}{TOF}$$

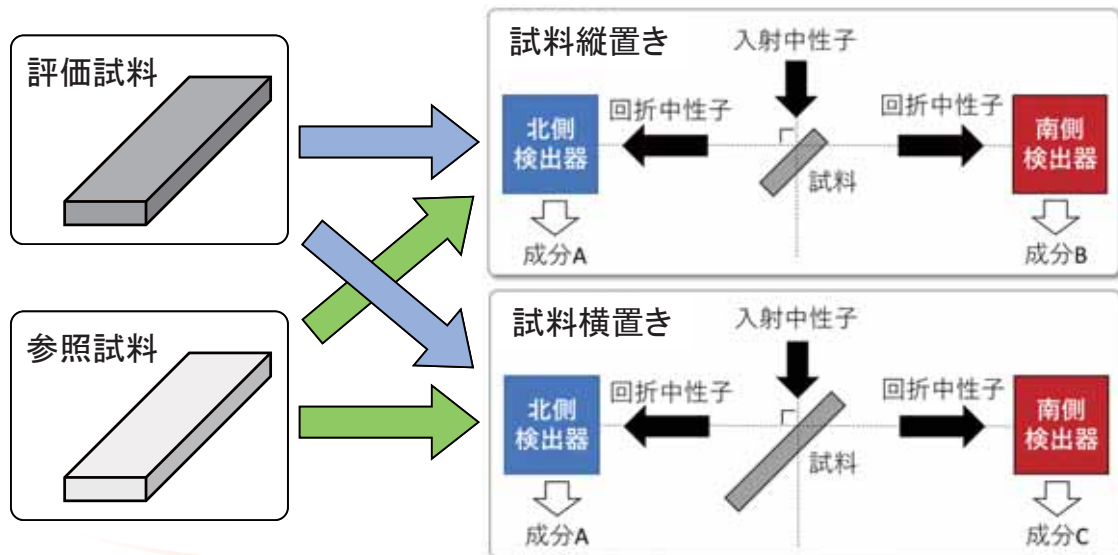
「匠」における“ひずみ”測定

- J-PARC/MLFの **高強度パルス型中性子ビーム** を利用した **飛行時間型** 中性子回折装置。
 - 複数の格子面からの中性子回折ピークを同時に測定可能。
- 中性子入射軸に対して **$\pm 90^\circ$** の方向に **2台の検出器** を配置。
 - 直交する2方向のひずみ成分を同時に測定可能。



実験内容

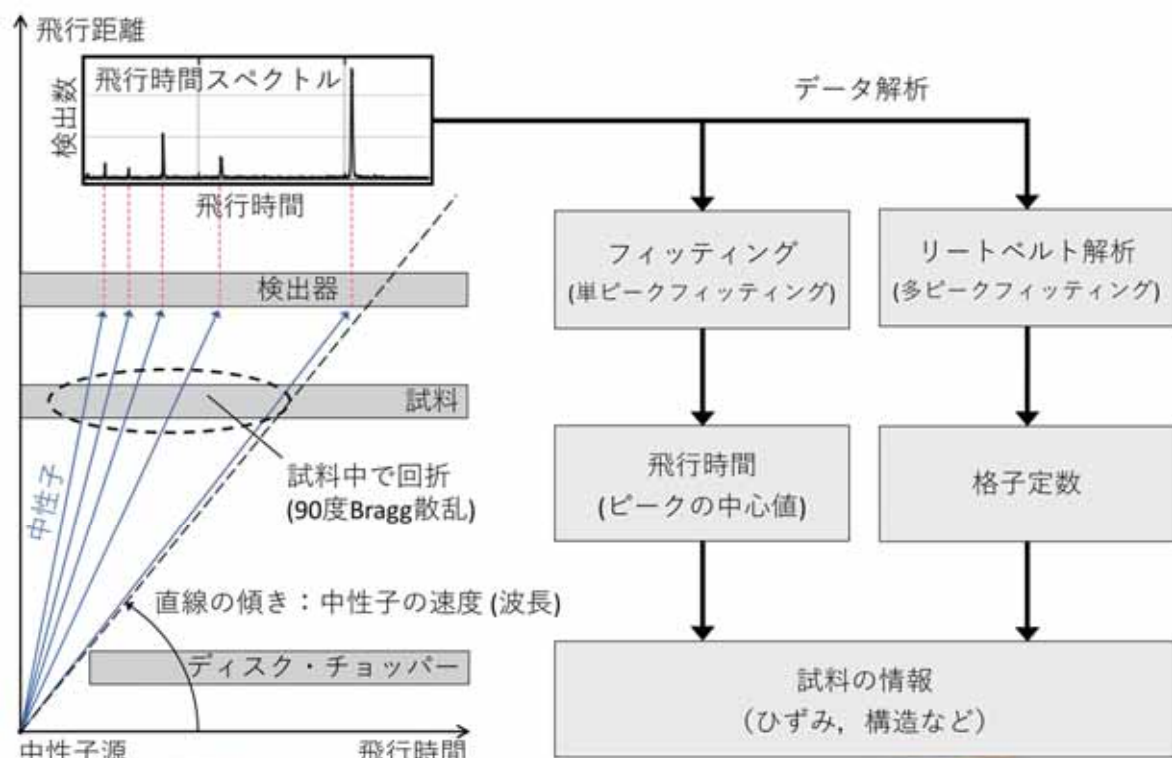
- 工学材料回折装置「匠」を用いて実験.
- 評価試料と参照試料の飛行時間スペクトル(回折パターン)を測定し, その比較から試料の“ひずみ”を求めた.



Copyright ©2019 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

25

測定・データ解析フロー



Copyright ©2019 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

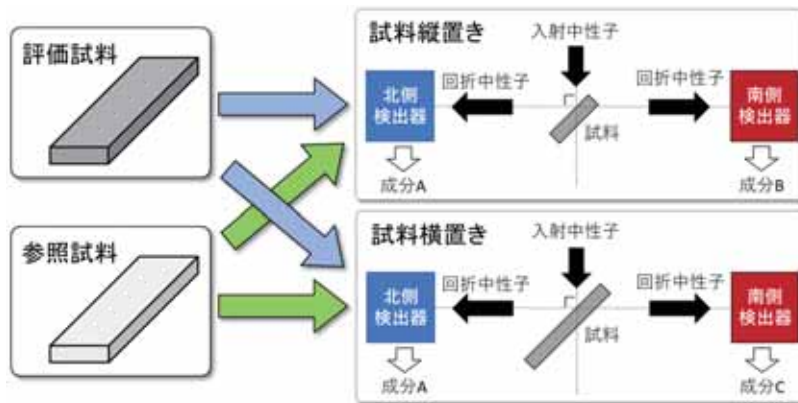
26

省 略

Table of Contents

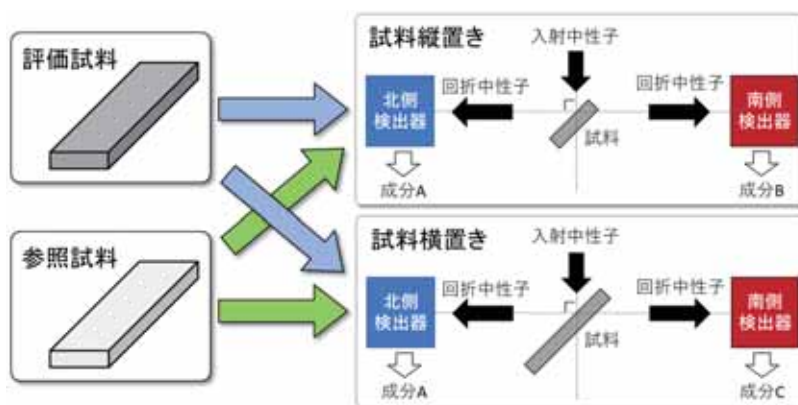
- Advance/iMacleの概要
 - 開発背景
 - 基本機能
- 中性子実験の概要
 - 大強度陽子加速器施設 J-PARC
 - 物質・生命科学実験施設 MLF
 - 工学材料回折装置「匠」を用いた中性子実験
- ➡ • Advance/iMacleの適用事例
 - 多クラス分類による測定条件の判定
 - 回帰分析による物理量の予測
- まとめ

中性子実験の測定条件



- ☑ 測定試料: 2 種類
- ☑ 試料設置: 2 種類
- ☑ 検出器: 2 種類
- ☑ 測定部位: ~10 点
- ☑ 測定深さ: ~10 点

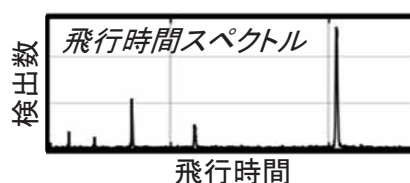
中性子実験の測定条件



- ☑ 測定試料: 2 種類
- ☑ 試料設置: 2 種類
- ☑ 検出器: 2 種類
- ☑ 測定部位: ~10 点
- ☑ 測定深さ: ~10 点



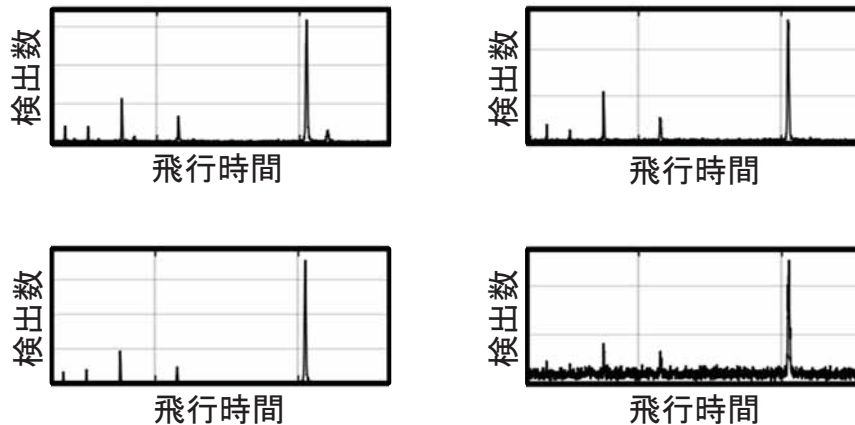
測定データ:



× 10²⁻³ 個

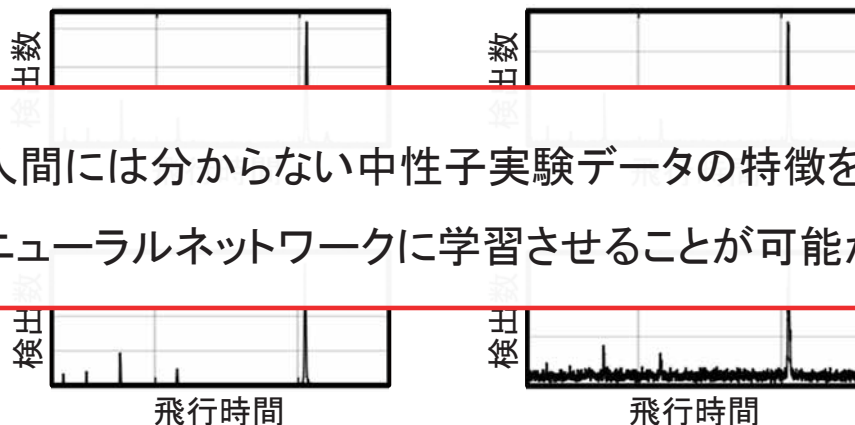
測定データの例

- 本実験で測定データは、測定条件や測定時間がバラバラ.
- 人間の目では、データを見ただけで**測定条件を判別**したり、評価したい**物理量を予測**することは難しい.



測定データの例

- 本実験で測定データは、測定条件や測定時間がバラバラ.
- 人間の目では、データを見ただけで**測定条件を判別**したり、評価したい**物理量を予測**することは難しい.



人間には分からない中性子実験データの特徴を
ニューラルネットワークに学習させることが可能か？

解析内容

- 中性子飛行時間スペクトルに対してAdvance/iMacleを適用

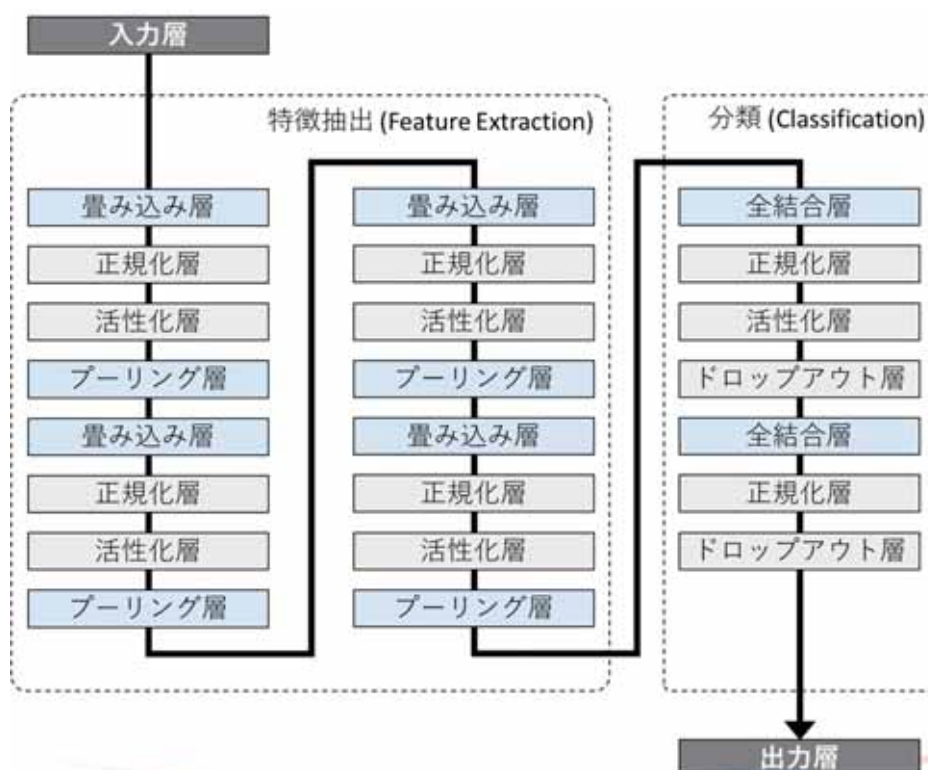
多クラス分類（教師あり学習）

- | | |
|---------------|-------------------------|
| (a) 測定試料の種別 | (2パターン: 評価試料 or 参照試料) |
| (b) 測定検出器 | (2パターン: 北側検出器 or 南側検出器) |
| (c) 測定試料の設置方法 | (2パターン: 縦置き or 横置き) |

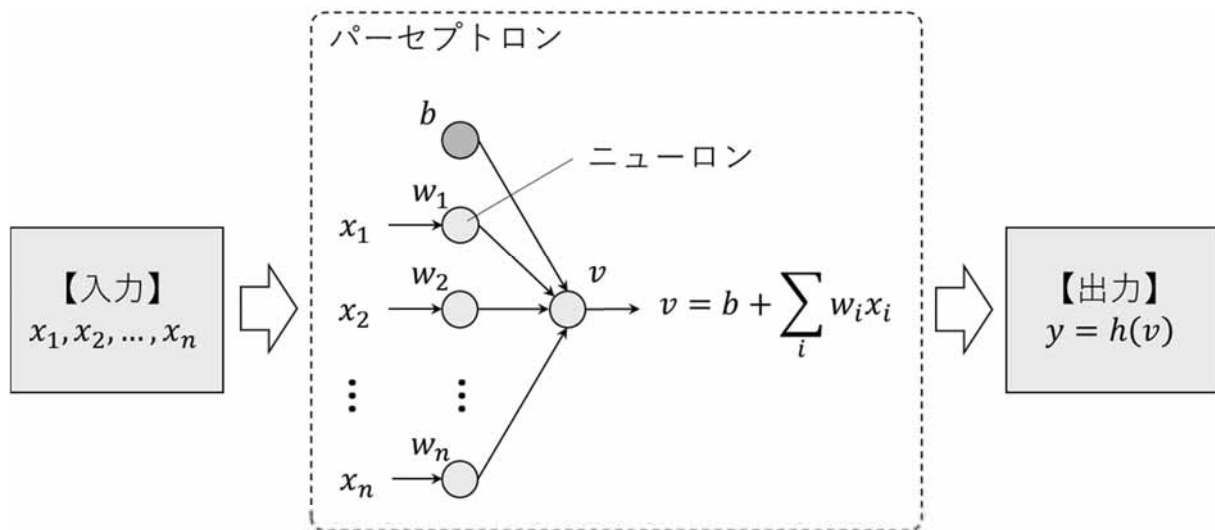
回帰分析（教師あり学習）

- ① 飛行時間（ピーク中心値）（フィッティングの結果）
- ② 測定試料の格子定数（リートベルト解析の結果）
- ③ ひずみ（評価試料と測定試料の格子定数から算出）

使用ニューラルネットワーク構成（一例）



補足：パーセプトロン

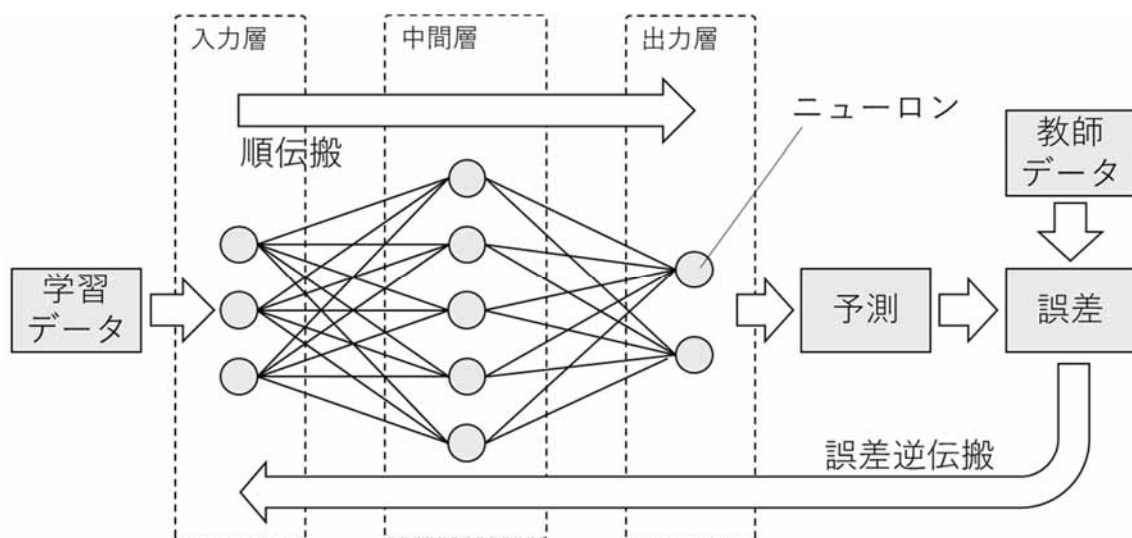


x_i = 入力, y = 出力,
 w_i = 重み, b = バイアス,
 $h(v)$ = 活性化関数

重み(w_i)とバイアス(b)を調整することで
同じ入力($x_1, x_2, \dots, x_n$)から
異なる出力(y)が得られる

補足：ニューラルネットワーク

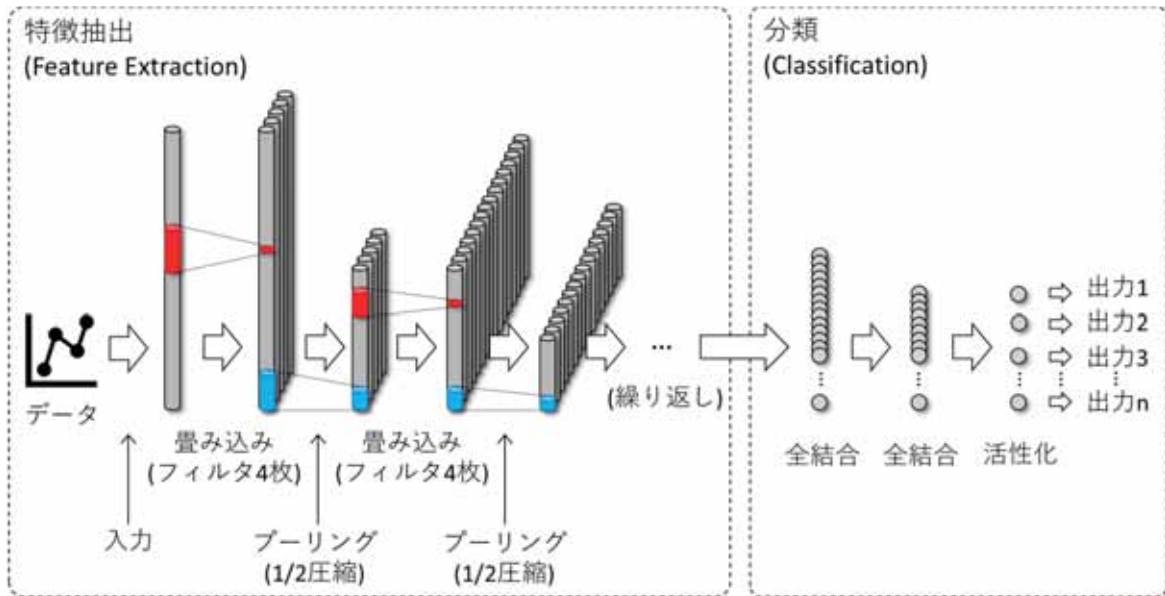
- 教師あり学習の場合の学習フロー概要.



学習の過程で各層が持つ重み(w_i)とバイアス(b)が更新され、
正しい予測結果を導けるように学習器が自動的に調整されていく。

補足：畳み込みニューラルネットワーク

- 多クラス分類(n個)の場合のデータフロー

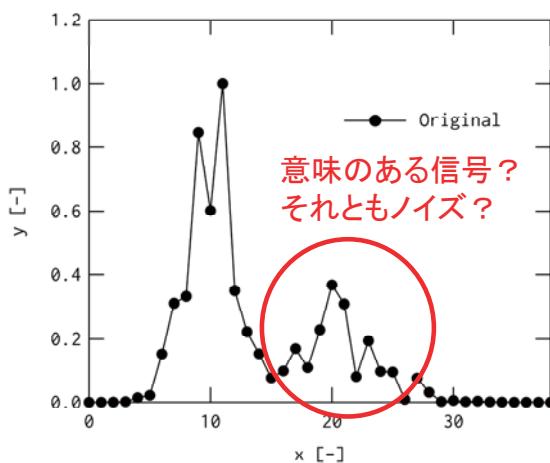


Copyright ©2019 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

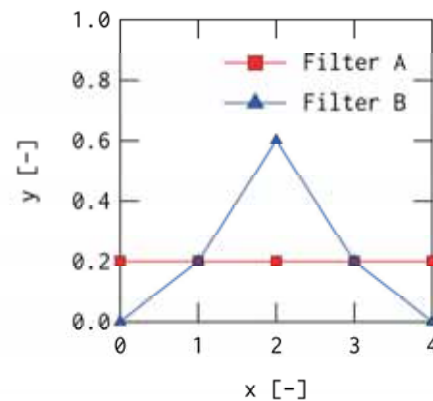
37

補足：畳み込みニューラルネットワーク

- 畳み込み(フィルタ処理) + 最大プーリングの効果



処理データ



畳み込みフィルタ

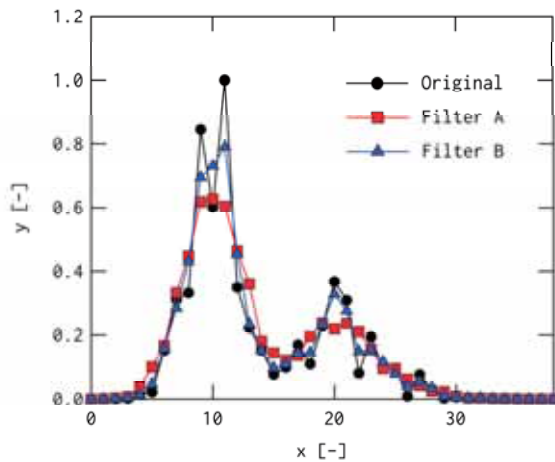
⇒ サイズ5のフィルタをスライドさせながら波形全体に適用

Copyright ©2019 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

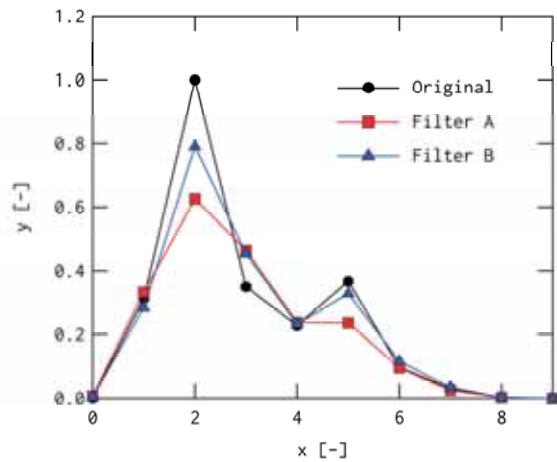
38

補足：畳み込みニューラルネットワーク

- 畳み込み(フィルタ処理) + 最大プーリングの効果



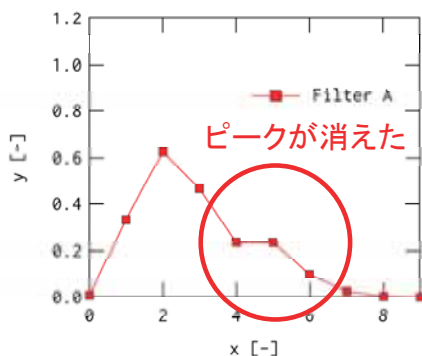
畳み込み処理後
(フィルタサイズ = 5)



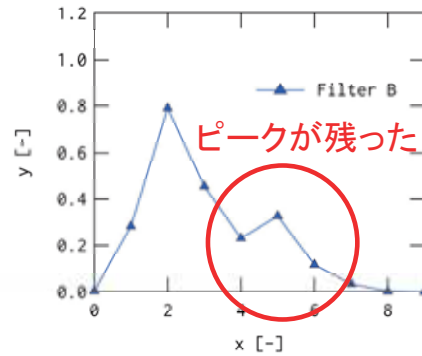
最大プーリング処理後
(1/4圧縮)

補足：畳み込みニューラルネットワーク

- 畳み込み(フィルタ処理) + 最大プーリングの効果



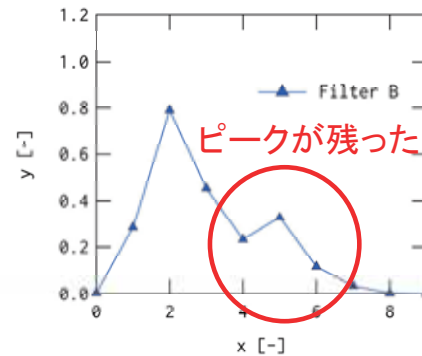
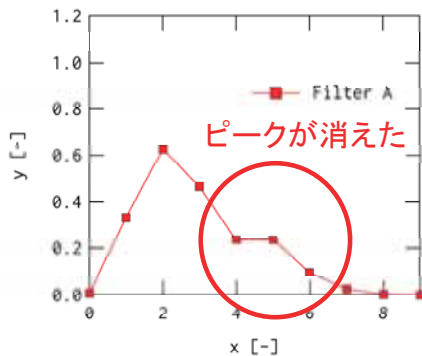
- ☐ ノイズを除去できた？
- ☐ 特徴を除去してしまった？



- ☐ 特徴を残せた？
- ☐ ノイズを除去できなかった？

補足：畳み込みニューラルネットワーク

- 畳み込み(フィルタ処理) + 最大プーリングの効果



□ ノイズを除去できた？

□ 特徴を残せた？

□ 特徴を除去してしまった？

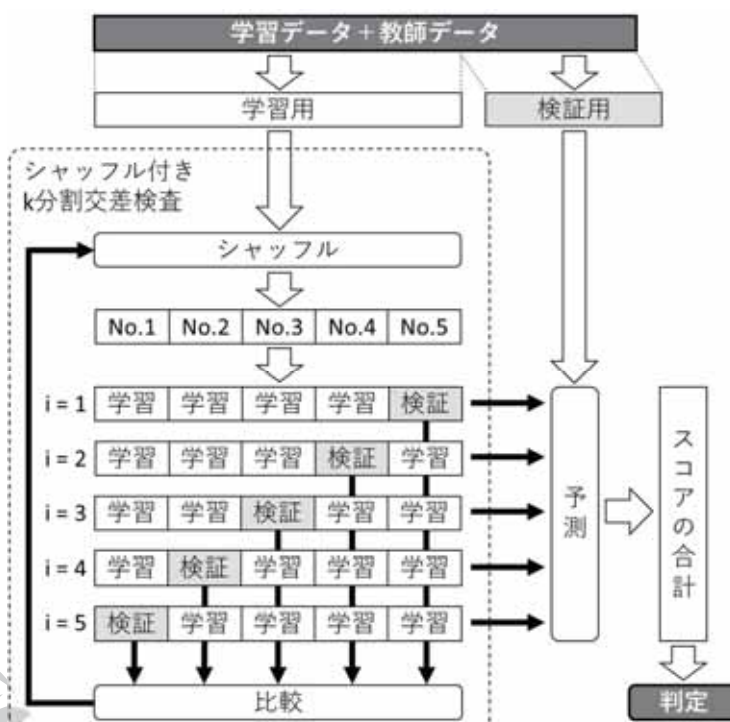
□ ノイズを除去できなかった？



機械学習的アプローチ：人間が適切なフィルタを作成する

深層学習的アプローチ：適切なフィルタが自動的に作成される

本事例の学習・検証フロー(一例)



1. 測定データを学習用データと検証用データに分割
2. シャッフル付きk分割交差検証で学習・検証
3. 各学習器に検証用データを適用し、物理量等を予測
4. 各学習器の予測スコアの合計で結果を判定

解析内容

多クラス分類（教師あり学習）

- (a) 測定試料の種別 (2パターン: 評価試料 or 参照試料)
- (b) 測定検出器 (2パターン: 北側検出器 or 南側検出器)
- (c) 測定試料の設置方法 (2パターン: 縦置き or 横置き)

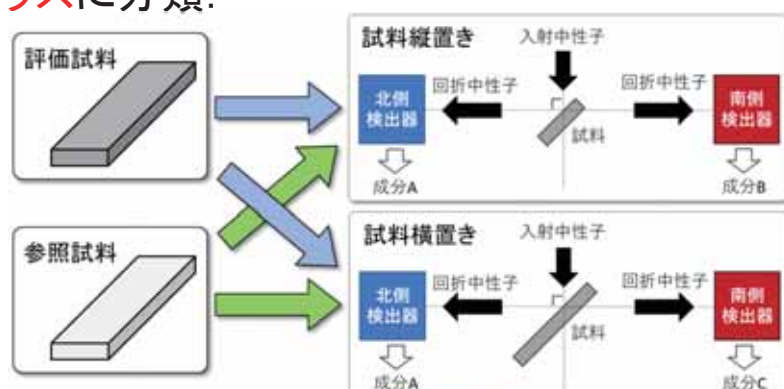
回帰分析（教師あり学習）

- ① 飛行時間（ピーク中心値）（フィッティングの結果）
- ② 測定試料の格子定数（リートベルト解析の結果）
- ③ ひずみ（評価試料と測定試料の格子定数から算出）

注：以降のスライドでは、ネットワーク構成や学習の最適化を十分に行っていない段階の解析結果を示す。

多クラス分類

- 測定データを
 - (a) 評価試料 or 参照試料,
 - (b) 北側検出器 or 南側検出器,
 - (c) 試料縦置き or 試料横置き,
 の測定条件で **8 クラス** に分類.

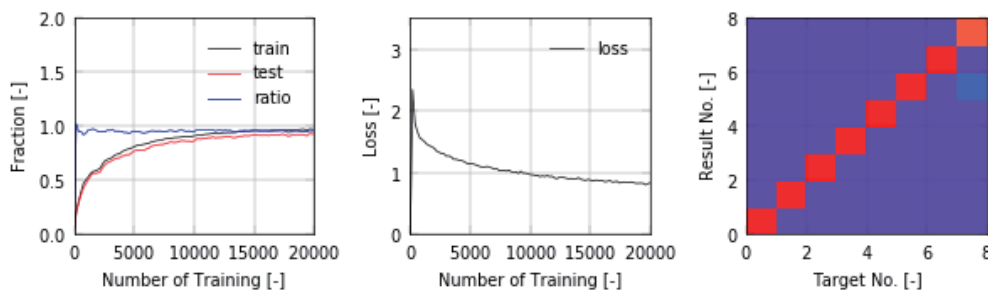


多クラス分類

測定データを

- (a) 評価試料 or 参照試料,
 - (b) 北側検出器 or 南側検出器,
 - (c) 試料縦置き or 試料横置き,
- の測定条件で **8 クラス** に分類.

番号	測定条件		
	試料	検出器	設置
0	参照試料	北側検出器	縦置き
1	評価試料	北側検出器	縦置き
2	参照試料	南側検出器	縦置き
3	評価試料	南側検出器	縦置き
4	参照試料	北側検出器	横置き
5	評価試料	北側検出器	横置き
6	参照試料	南側検出器	横置き
7	評価試料	南側検出器	横置き

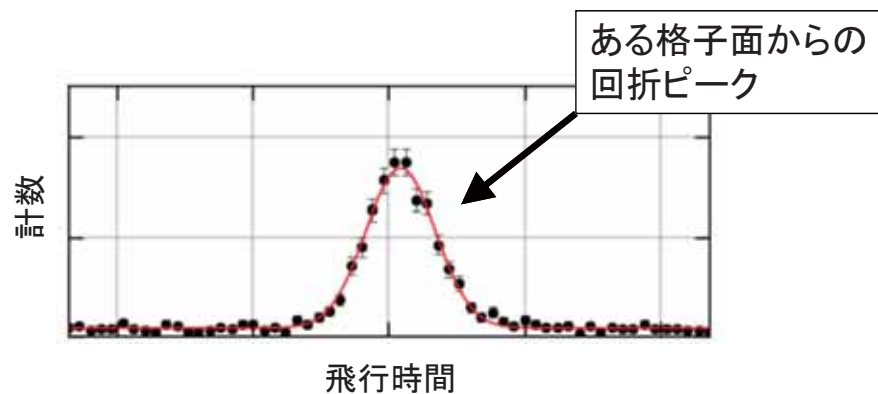


Copyright ©2019 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

45

回帰分析①：飛行時間

- **フィッティングで求めた飛行時間(ピーク中心値)**を教師データとして学習.
- 未知のデータに対して適用し, **飛行時間の値を予測**.



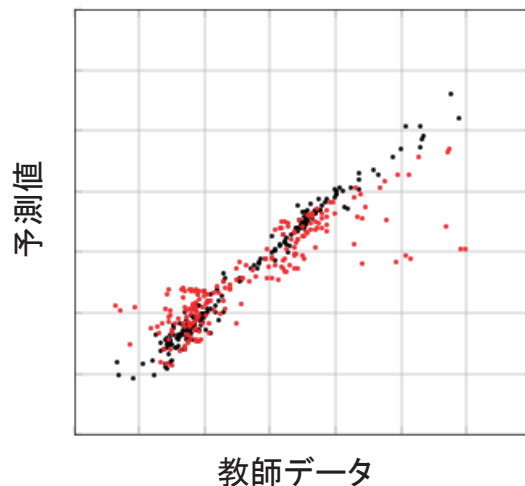
フィッティング例

Copyright ©2019 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

46

回帰分析①：飛行時間

- **フィッティングで求めた飛行時間(ピーク中心値)**を教師データとして学習.
- 未知のデータに対して適用し, **飛行時間の値を予測**.



黒：学習データに対する予測値
赤：未知のデータに対する予測値

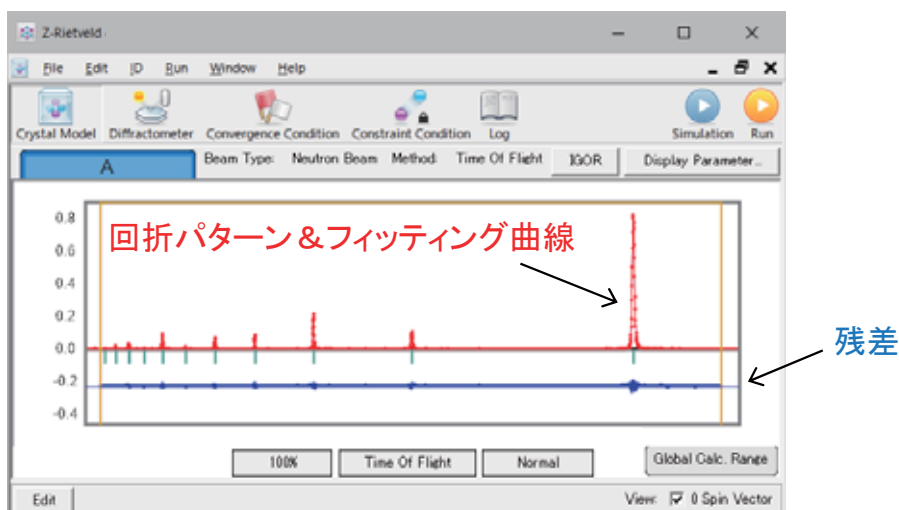
回帰分析②：格子定数

- リートベルト法
 - リートベルト法またはリートベルト解析は、オランダの結晶学者ヒューゴ・リートベルト (Hugo Rietveld) により考案された**結晶構造の解析方法**の1つである。
 - 粉末X線回折実験や**粉末中性子回折実験**により得られる**回折パターン**を結晶構造やピーク形状などに関するパラメーターから計算される回折パターンで最小二乗法を用いてフィッティングすることにより、**結晶構造やピーク形状などに関するパラメーターを精密化する**。

引用: <https://ja.wikipedia.org/wiki/リートベルト法>

回帰分析②：格子定数

- リートベルト解析ソフトウェア “Z-Rietveld”
 - 高エネルギー加速器研究機構が中心となって開発している結晶学的解析支援パッケージ “Z-Code” を構成するソフトウェアのひとつ。



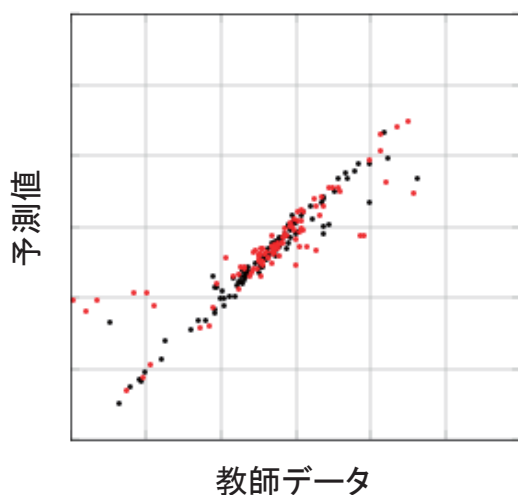
<https://z-code.kek.jp/zrg/>

Copyright ©2019 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

49

回帰分析②：格子定数

- リートベルト解析で求めた格子定数を教師データとして学習。
- 未知のデータに対して適用し、格子定数の値を予測。



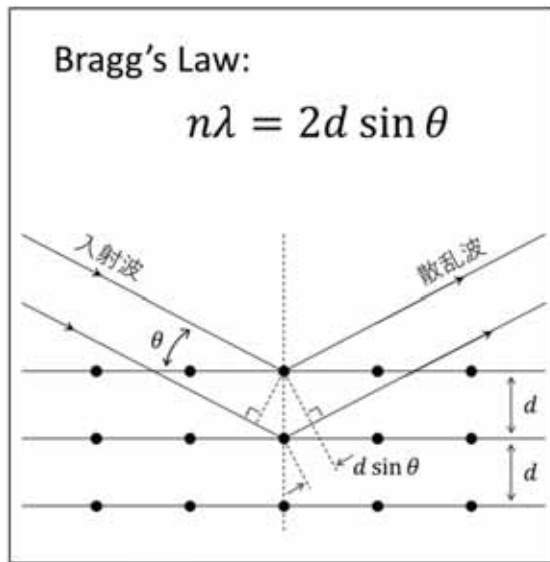
黒：学習データに対する予測値
赤：未知のデータに対する予測値

Copyright ©2019 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

50

回帰分析③：ひずみ

- 評価試料と参照試料の測定結果から求めた**ひずみ**を学習.
- 未知のデータに対して適用し, **ひずみの値を予測**.

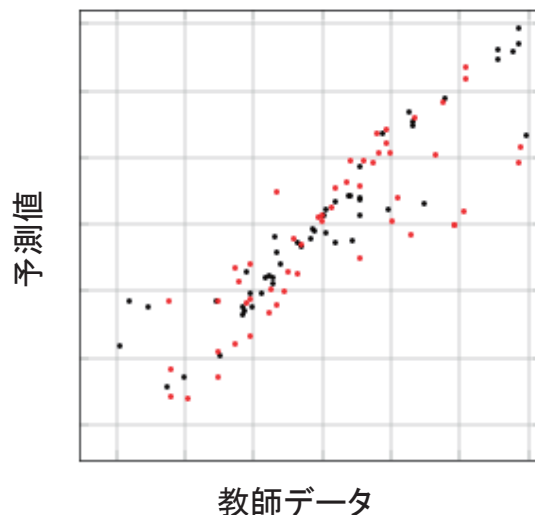


飛行時間 TOF (波長 λ) の変化から**ひずみ ε** を算出.

$$\varepsilon = \frac{d - d_0}{d_0} = \frac{\lambda - \lambda_0}{\lambda_0} = \frac{\Delta TOF}{TOF}$$

回帰分析③：ひずみ

- 評価試料と参照試料の測定結果から求めた**ひずみ**を学習.
- 未知のデータに対して適用し, **ひずみの値を予測**.



黒: 学習データに対する予測値
赤: 未知のデータに対する予測値

Table of Contents

- Advance/iMacleの概要
 - 開発背景
 - 基本機能
- 中性子実験の概要
 - 大強度陽子加速器施設 J-PARC
 - 物質・生命科学実験施設 MLF
 - 工学材料回折装置「匠」を用いた中性子実験
- Advance/iMacleの適用事例
 - 多クラス分類による測定条件の判定
 - 回帰分析による物理量の予測



• まとめ

まとめ

- アドバンスソフト独自のAIツールとして、
深層学習用ツール Advance/iMacle を開発
- Advance/iMacleを中性子実験データに適用
 - 多クラス分類により、人間では分からない測定条件の違いを判別
 - 回帰分析により、解析しなければ分からない物理量を予測
- アドバンスソフトの「AIサービス・メニュー」
 - AI技術のコンサルテーション,
 - 深層学習用ツール Advance/iMacleを適用した解析,
 - 深層学習用ツール Advance/iMacleのカスタマイズ,
 - オープンソースのAIツール(TensorFlow等)を利用した解析,
 - ナノ・シミュレーション・ソフトウェアによるマテリアルズ・インフォマティクス,
 - シミュレーションを利用した学習データの大量作成,
 - 当社の科学技術計算に関する様々なソリューションとの連携, 等々

まとめ

- アドバンスソフト独自のAIツールとして、
深層学習用ツール Advance/iMacle を開発
- Advance/iMacleを中性子実験データに適用
 - 多クラス分類により、人間では分からない測定条件の違いを判別
 - 回帰分析により、解析しなければ分からない物理量を予測
- アドバンスソフトの「AIサービス・メニュー」
 - AI技術のコンサルテーション,
 - 深層学習用ツール Advance/iMacleを適用した解析,
 - 深層学習用ツール Advance/iMacleのカスタマイズ,
 - オープンソースのAIツール (TensorFlow等)を利用した解析,
 - ナノ・シミュレーション・ソフトウェアによるマテリアルズ・インフォマティクス,
 - シミュレーションを利用した学習データの大量作成,
 - 当社の科学技術計算に関する様々なソリューションとの連携, 等々

詳細: 次の講演

AI事業および関連サービスのご紹介、質疑応答

代表取締役社長 松原 聖

第3事業部 主管研究員 松澤 邦裕

AI 技術セミナー

「CAE分野におけるAI技術適用可能性」

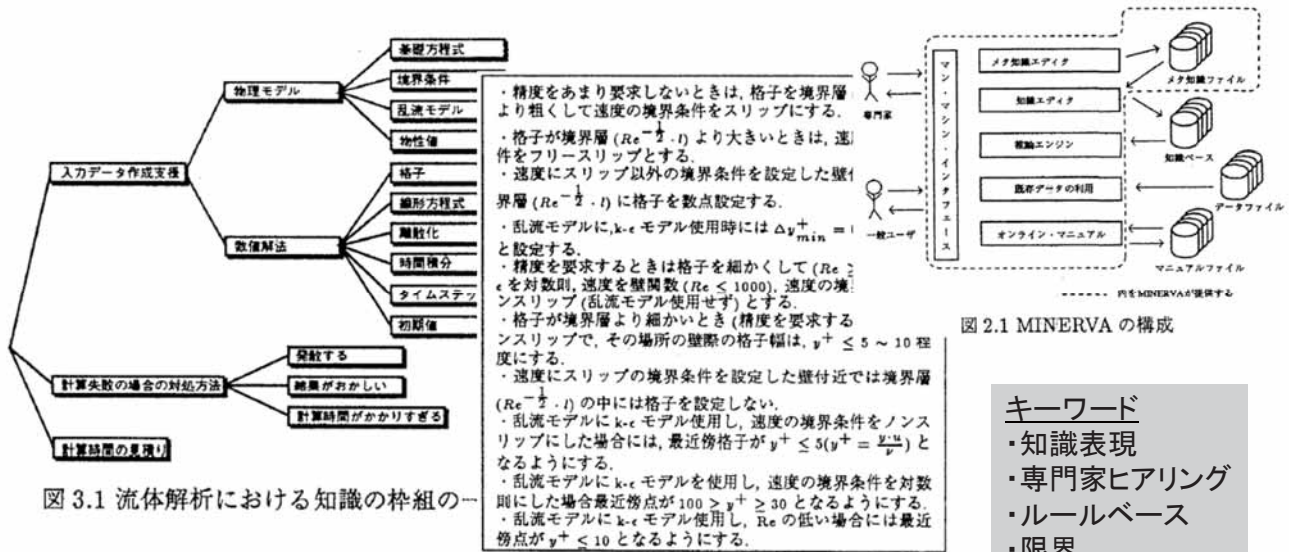
2019年10月15日（火）

アドバンスソフト株式会社

AI事業および関連サービスのご紹介

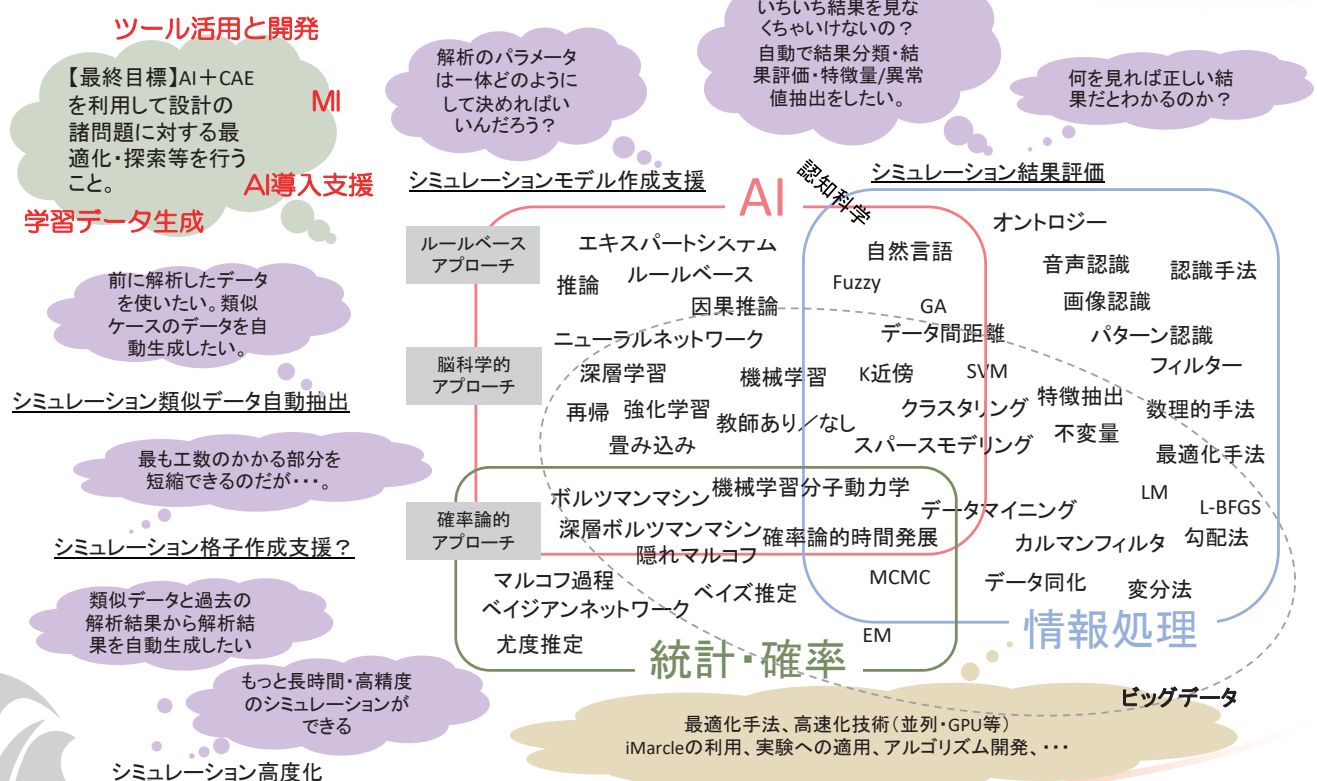
- CAEへのAIの応用について
- AIサービス・メニュー
 - AI導入のコンサルテーション
 - 深層学習用ツール Advance/iMacleの活用と開発
 - 精密な3Dモデル・シミュレーションによる学習（教師）データ生成
 - マテリアルズ・インフォマティクスへの対応
- 質疑応答

CAEへのAIの応用について 30年前に考えていたこと（第二次 AIブーム）



- [1] 松原聖, "AIモジュールの検証," 第4回計算流体力学シンポジウム (1992), pp.61
 [2] 富士総合研究所編, "汎用流体解析システム-FUJI-RIC/α-FLOW(5章 AIモジュール)," 丸善 (1993)
 [3] R.Takahashi, K.Matsubara, K.Kato, H.Koike, "Implementation of a Consultative Expert System for Advanced Fluid Dynamic Analysis Code: α-FLOW," ICHMT 2nd International Forum on Expert Systems and Computer Simulation in Engineering, Uni. of Erlangen 4.L (1992)

AI、CAE、...（現在）



AIサービス・メニュー

• AI導入のコンサルテーション

– 要望

- 実験データを持っているが、AIで新しい知見を得られないか。
- 監視のために測定データを取っているが、危険予知でAIが使えないか。
- 必要なスペックを持った材料を探索するために、多くのパターンで実験やシミュレーションを行っている。AIで新しい知見を得られないか。

– 導入支援

- 初期段階の試行錯誤は、時間消費が膨大（ツールへの習熟度による）
- 「現象の理解や説明、解釈＝研究」「AIツールの試行錯誤＝単なる作業」
- 適切な予測に到達するためには、段階を踏んだAI適用が重要

⇒ お客様のデータを使ったプロトタイプモデルを作成し、実現可能性を調査します。

(深層学習用ツールAdvance/iMacleの他、一般的なAIツールでも対応可能)

AIサービス・メニュー

• 深層学習用ツール Advance/iMacleの活用と開発

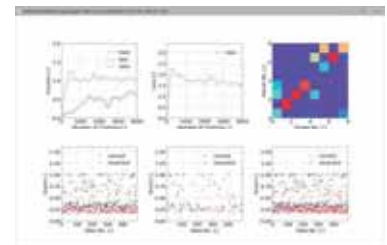
– 最小限度の機能に絞り込んだ、比較的軽いツール

– Python言語の基本的な機能のみを用いて開発

- 行列計算のため、外部ライブラリとして Numpy を使用
- マルチプラットフォーム対応（Win、Linux、Mac）

– 自社開発の強み

- 環境に合わせた改良や、柔軟なライセンス形態
 - 装置等に組み込んで公開（販売）が可能
 - GUIアプリケーションの開発や、環境に合わせた高速化(GPU等)や並列化
 - 必要に応じて、ソースコードの提供が可能



– 他のAIツールを利用した受託開発

- TensorFlowやChainer等を利用したGUI作成や機能拡張も可能

AIサービス・メニュー

- 精密な3Dモデル・シミュレーションによる学習（教師）データ生成

- 弊社のナノ・バイオ系やCAEパッケージ・ソフトウェアの活用

- | | |
|----------------------|--------------------------------|
| • 第一原理計算ソフトウェア | Advance/PHASE |
| • ナノ材料解析統合GUI | Advance/NanoLabo |
| • 半導体デバイス3次元TCADシステム | Advance/TCAD |
| • 流体解析ソフトウェア | Advance/FrontFlow/red |
| • 高速流解析ソフトウェア | Advance/FrontFlow/FOCUS |
| • 構造解析ソフトウェア | Advance/FrontSTR |
| • 音響解析ソフトウェア | Advance/FrontNoise |
| • 気液二相流解析ソフトウェア | Advance/FrontFlow/MP |
| • 管路系流体解析ソフトウェア | Advance/FrontNet |

- スパコン環境を利用した学習データの大量作成も可能
(アドバンスソフトのスーパーコンピュータ・サービス)

AIサービス・メニュー

- マテリアルズ・インフォマティクス（MI）への対応

- MIとは、計算機科学(第一原理計算など)と材料の物性に関する膨大なデータベースを駆使して、材料に関する問題を解決する手法。

- **Advance/PHASE Ver.4.0の新機能(最新)**

- **データベース検索**・・・結晶構造やバンド構造といった材料に関するデータの掘り出し
- **データマイニング**・・・2次元材料や弾性材料、磁性材料といった材料に関するデータの掘り出し
- **整合界面の作成**・・・指定した膜材料に整合する基板材料の候補、面方位を探索や整合する界面の作成
- **バッチモデリング**・・・指定した表面での原子・分子吸着構造の一括作成
- **類似性分析**・・・指定した2つのグループに関する類似度の統計を解析
- **構造予測**・・・指定した元素を含む構造の予測
- **機械学習**・・・既存学習済みモデルを用いた第一原理計算結果の予測

- 第一原理計算とは
 - 実験結果などの経験的なパラメータを用いない第一原理（first principles）による計算法。
 - 電子間、原子核間、および電子-原子核間のクーロン相互作用から、量子力学の基本法則である電子状態理論を使って電子分布を計算する。
- 計算ソルバー
 - phase：SCF計算などを行うメインエンジン
 - ekcal：任意のk点での計算を行うエンジン
SCF計算で求めた価電子密度を利用
 - epsmain：光学応答を計算するエンジン
SCF計算で求めた価電子密度を利用
- グラフィカル・ユーザー・インターフェイス (GUI)
 - Phaseviewer付属



Copyright ©2019 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

9

Advance/PHASEの適用範囲

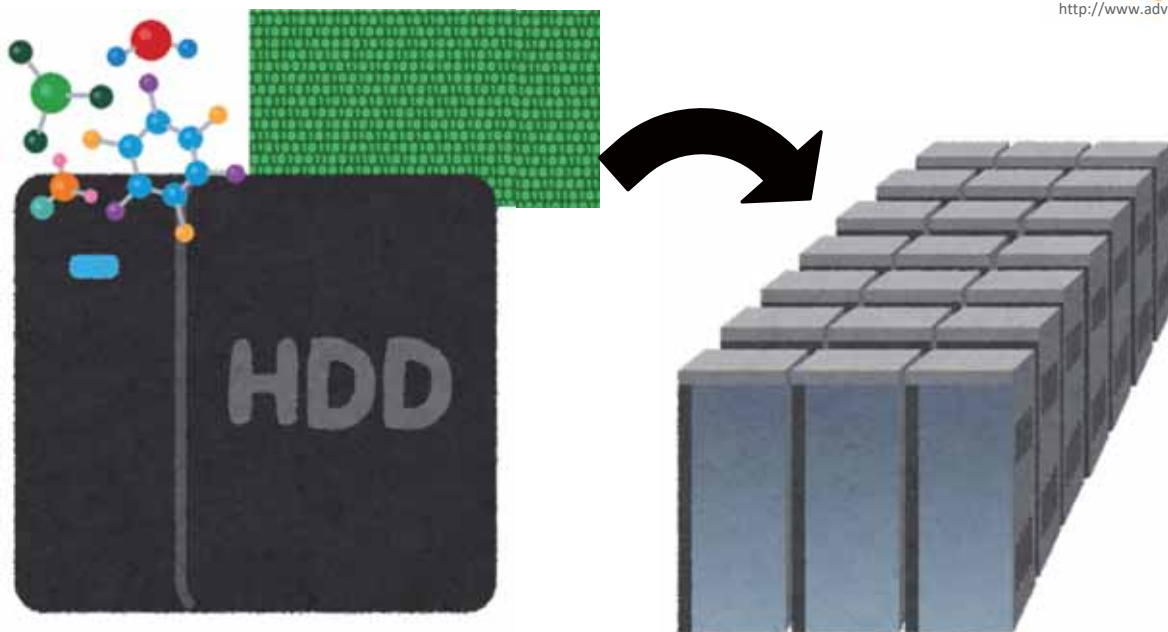
- 適用範囲
 - 固体からソフトマテリアルまで
 - 固体
 - バルク（半導体、金属、磁性体など）
 - 表面（触媒、デバイスなど）
 - 界面（金属/半導体、分子/金属、有機物/金属など）
 - ソフトマテリアル
 - 高分子（エポキシ樹脂など）
 - 金属錯体（Metal-Organic Frameworkなど）
 - 周期境界条件の制約がある
 - 表面は真空を挟んだ周期スラブ
 - 界面も周期的に表れる
 - 孤立分子も一定距離だけ離れた周期性を持っている



Copyright ©2019 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

10

Materials Informatics(MI)とは



計算機科学(第一原理計算など)と材料の物性に関する膨大なデータベースを駆使して、材料に関する問題を解決する手法。

MI対応(データベース検索)

指定した材料に関する以下のデータの取得

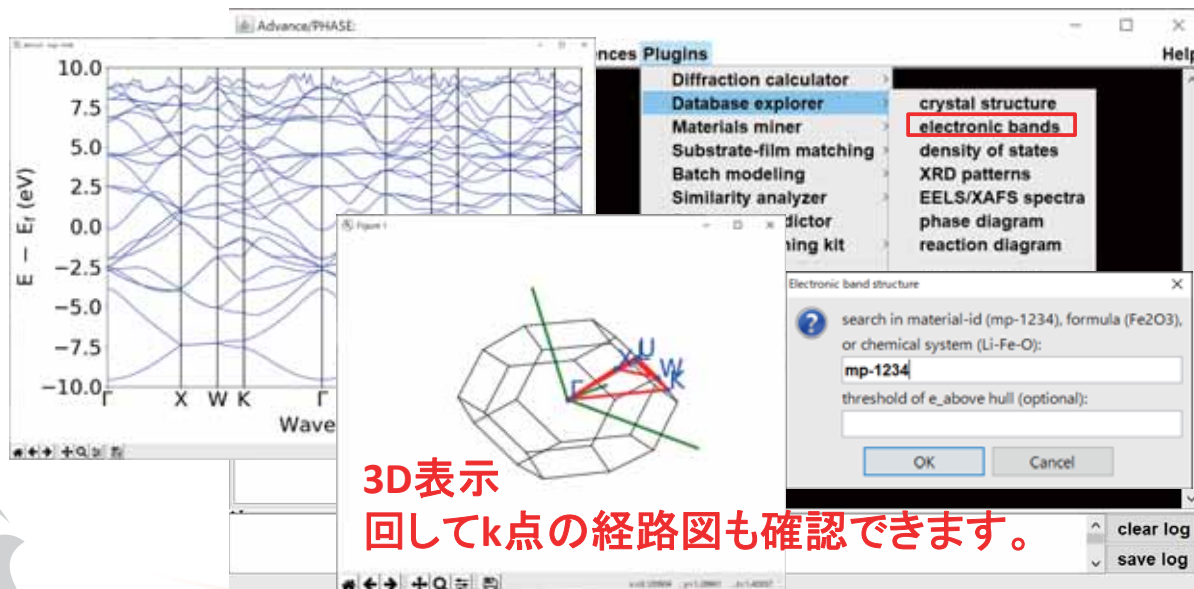
結晶構造	バンド構造	DOS
XRDスペクトル	EELS/XAFSスペクトル	相図・反応相関図

マッシュした構造は全て
見るができます。

MI対応(データベース検索)

指定した材料に関する以下のデータの取得

結晶構造	バンド構造	DOS
XRDスペクトル	EELS/XAFSスペクトル	相図・反応相関図



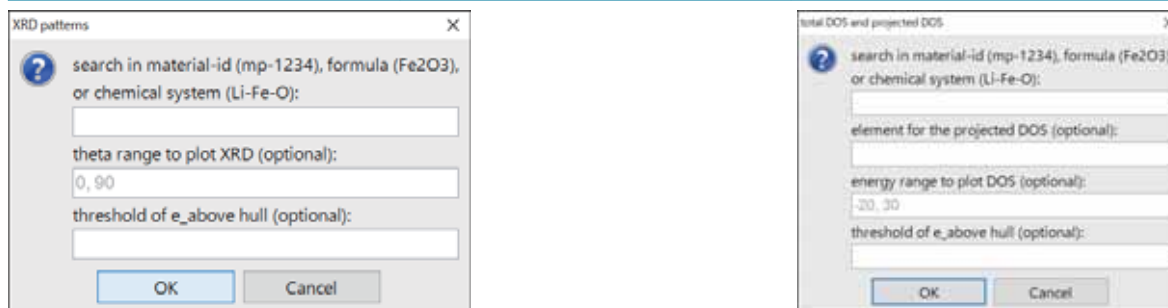
Copyright ©2019 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

13

MI対応(データベース検索)

指定した材料に関する以下のデータの取得

結晶構造	バンド構造	DOS
XRDスペクトル	EELS/XAFSスペクトル	相図・反応相関図



- ①何の情報を取得するか決める。
 - ②どの材料か指定する。
 - ③OKボタンを押す。
- 基本的にこれだけ！EELS/XAFSも相図も大体同じ！

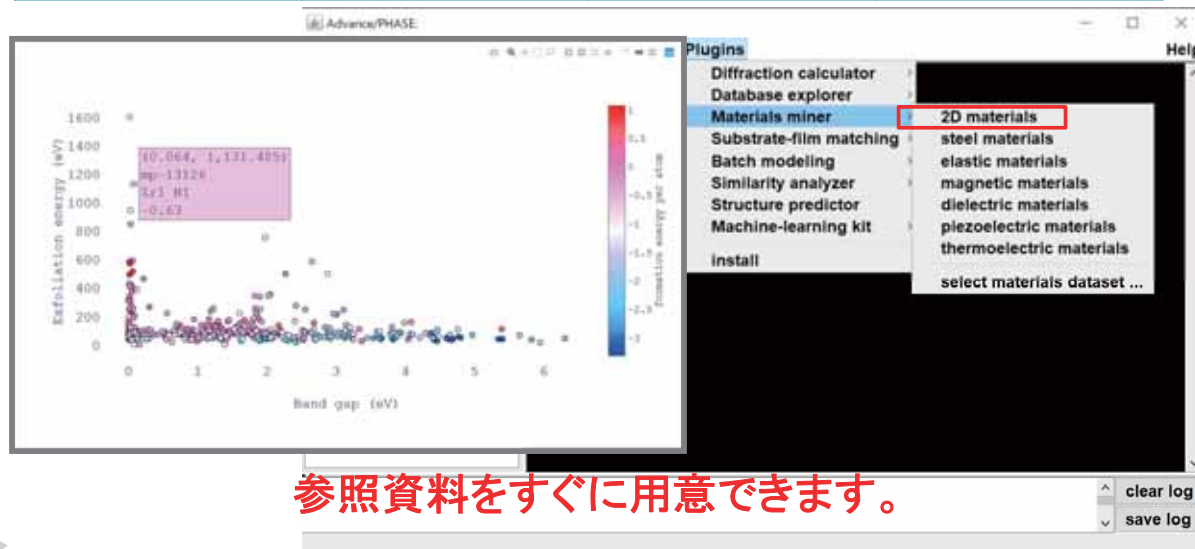
Copyright ©2019 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

14

MI対応(データマイニング)

以下の材料に関するデータの掘り出し

2次元材料	鉄鋼材料	弾性材料	磁性材料
誘電材料	圧電材料	熱電材料	ユーザー定義

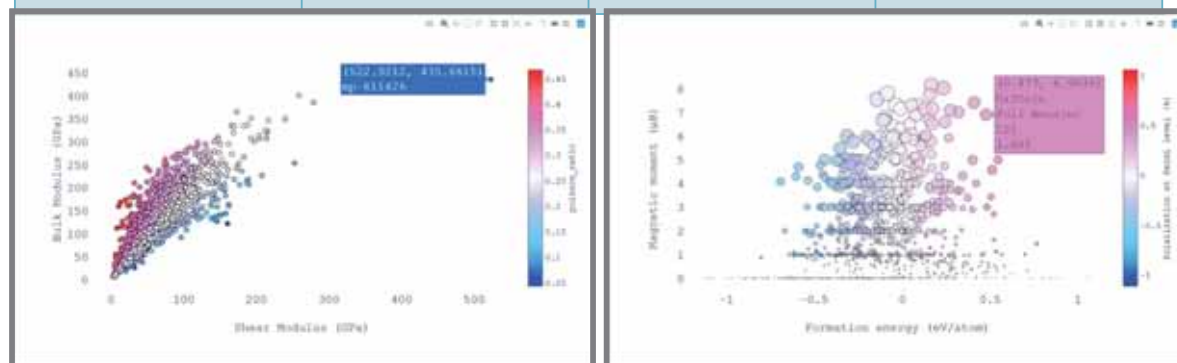


参照資料をすぐに用意できます。

MI対応(データマイニング)

以下の材料に関するデータの掘り出し

2次元材料	鉄鋼材料	弾性材料	磁性材料
誘電材料	圧電材料	熱電材料	ユーザー定義

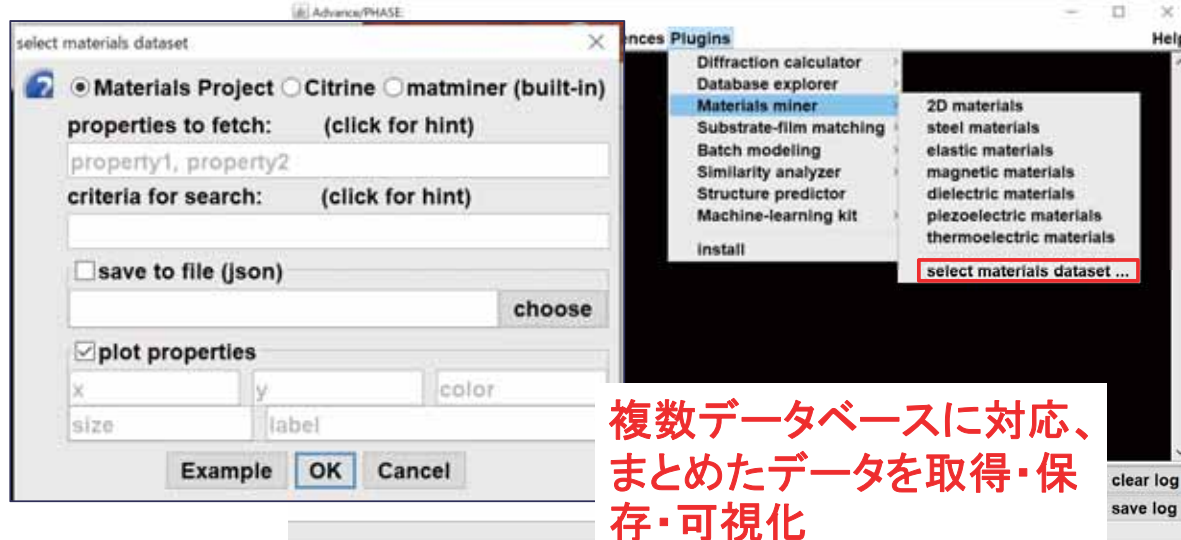


材料のデータを見られるようにするだけでなく、
第一原理計算に転用しやすいよう機能拡充予定

MI対応(データマイニング)

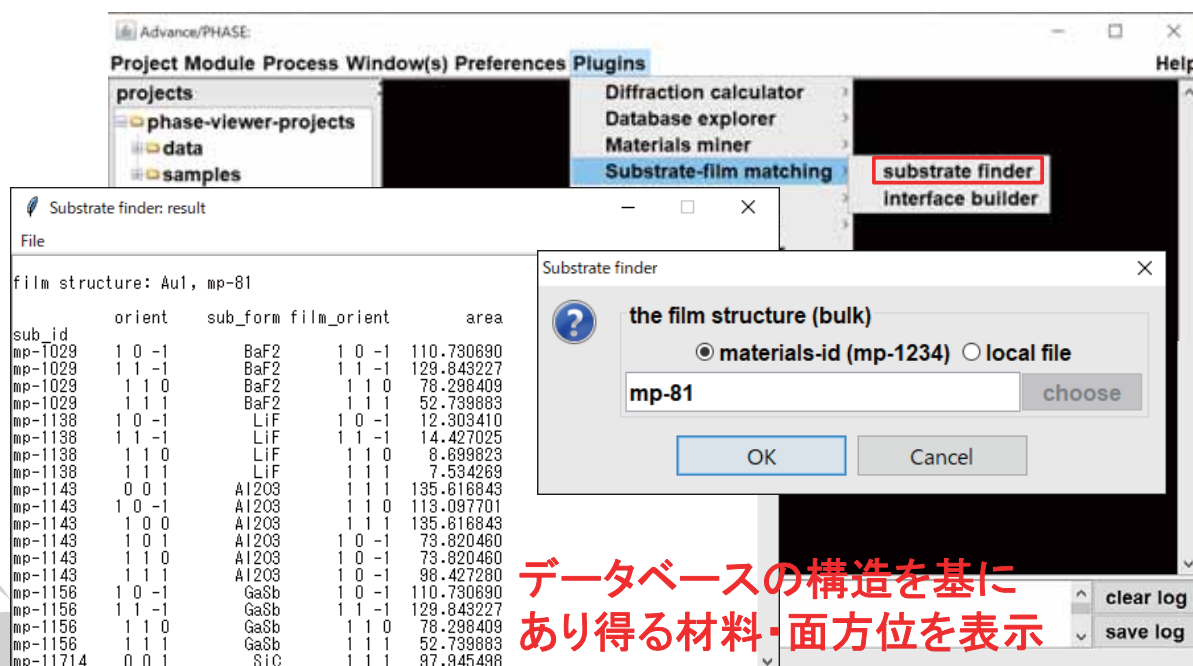
以下の材料に関するデータの掘り出し

2次元材料	鉄鋼材料	弾性材料	磁性材料
誘電材料	圧電材料	熱電材料	ユーザー定義



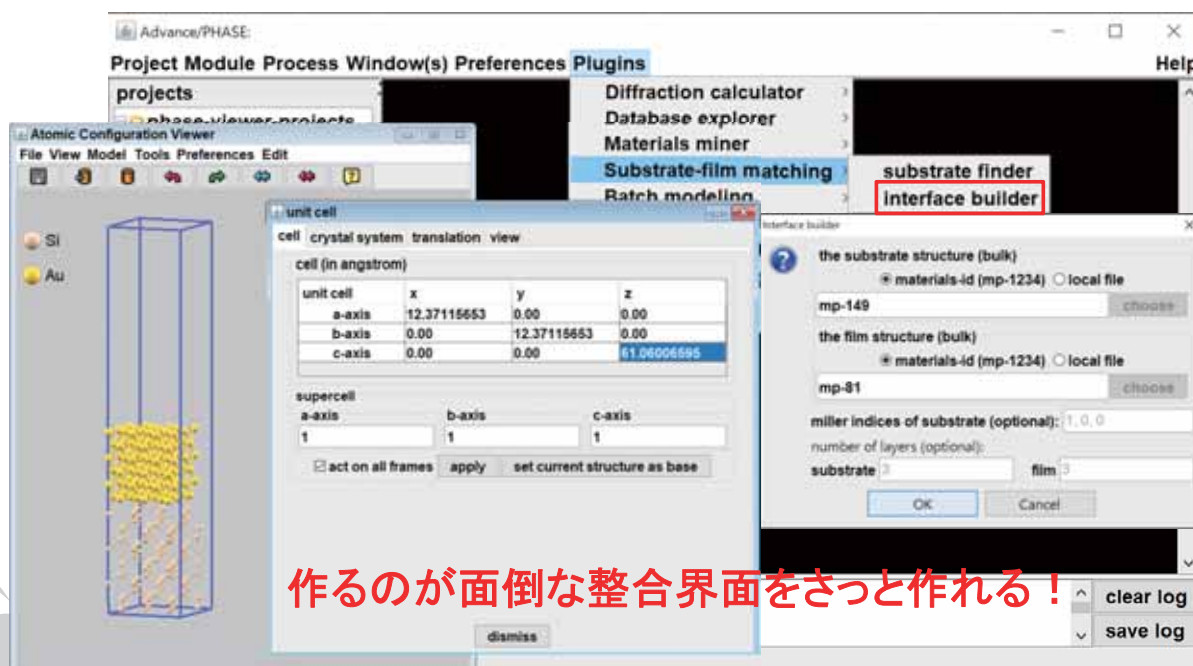
MI対応(整合界面の作成)

- 指定した膜材料に整合する基板材料の候補、面方位を探索
- 指定した膜・基板材料で整合する界面の作成



MI対応(整合界面の作成)

- 指定した膜材料に整合する基板材料の候補、面方位を探索
- 指定した膜・基板材料で整合する界面の作成



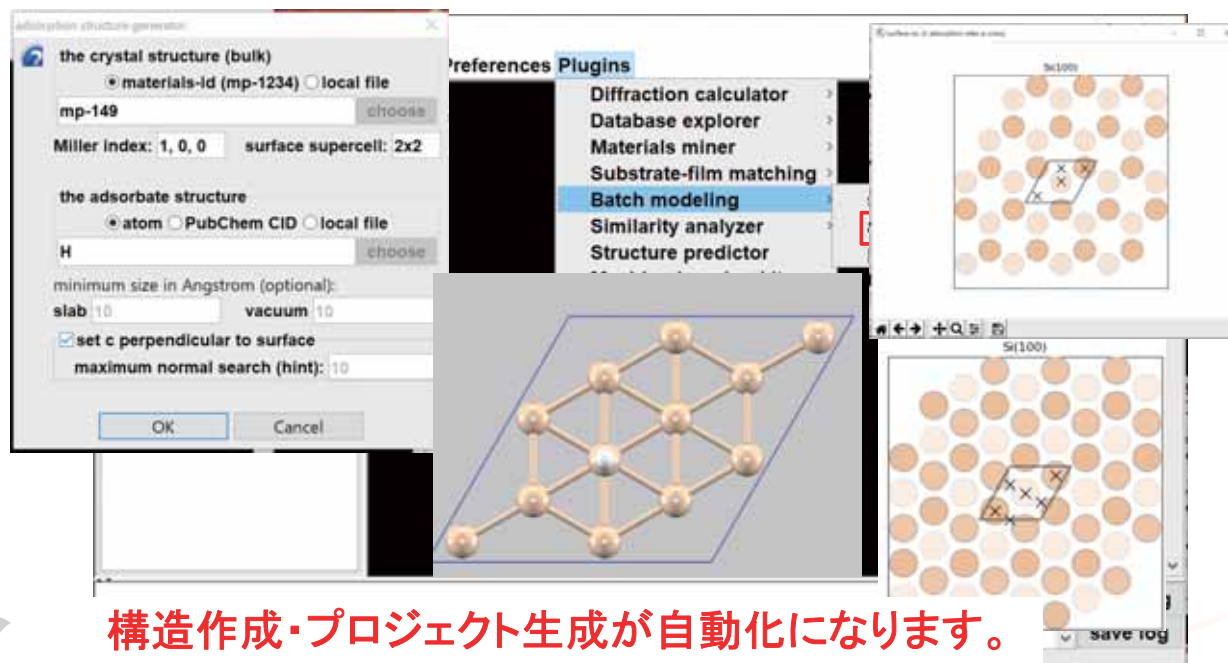
作るのが面倒な整合界面をさっと作れる！

Copyright ©2019 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

19

MI対応(バッチ・モデリング)

- 指定した指数以下の面方位を持つ表面モデルの一括作成
- 指定した表面での原子・分子吸着構造の一括作成
- 指定した構造での点欠陥(空孔・アンチサイトなど)の一括作成



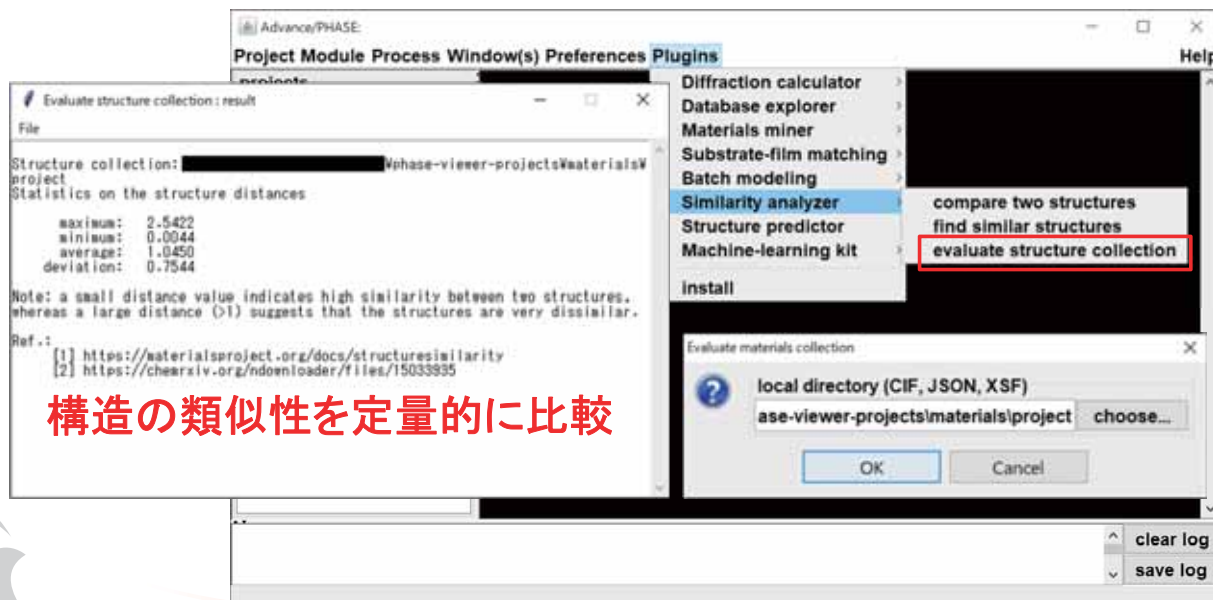
構造作成・プロジェクト生成が自動化になります。

Copyright ©2019 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

20

MI対応(類似性分析)

- 2つの構造の類似度を評価
- 指定した材料と類似した構造の検索
- 指定した2つのグループに関する類似度の統計を解析

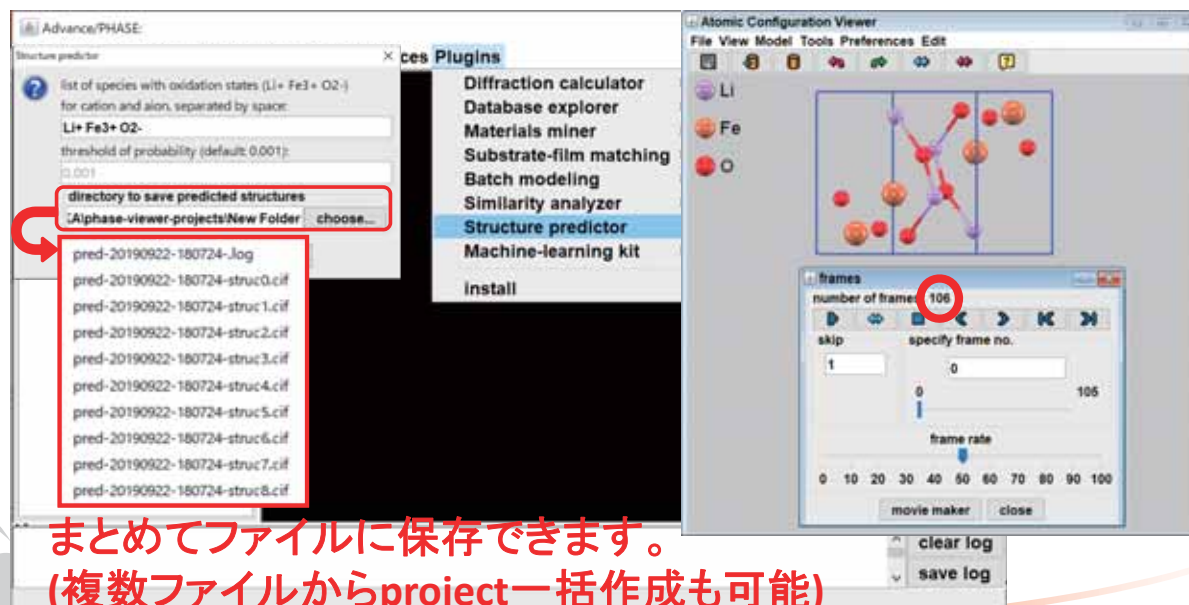


構造の類似性を定量的に比較

MI対応(構造予測)

指定した元素を含む構造の予測

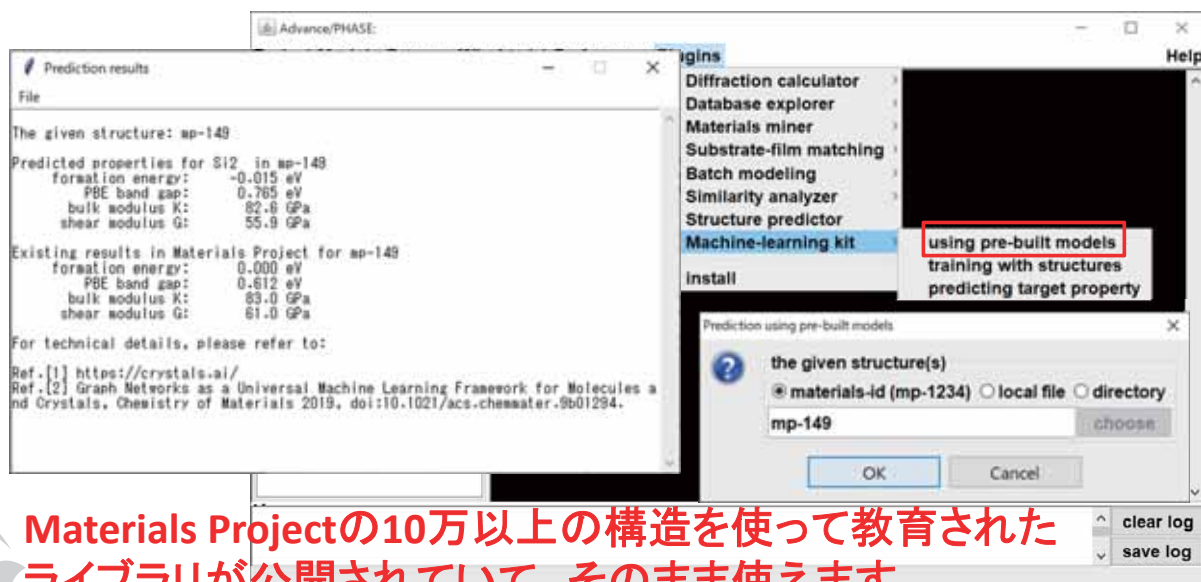
(※)データベースの構造を取得するだけでなく、
それ以外のあり得る構造の予測も行う。



まとめてファイルに保存できます。
(複数ファイルからproject一括作成も可能)

MI対応(機械学習)

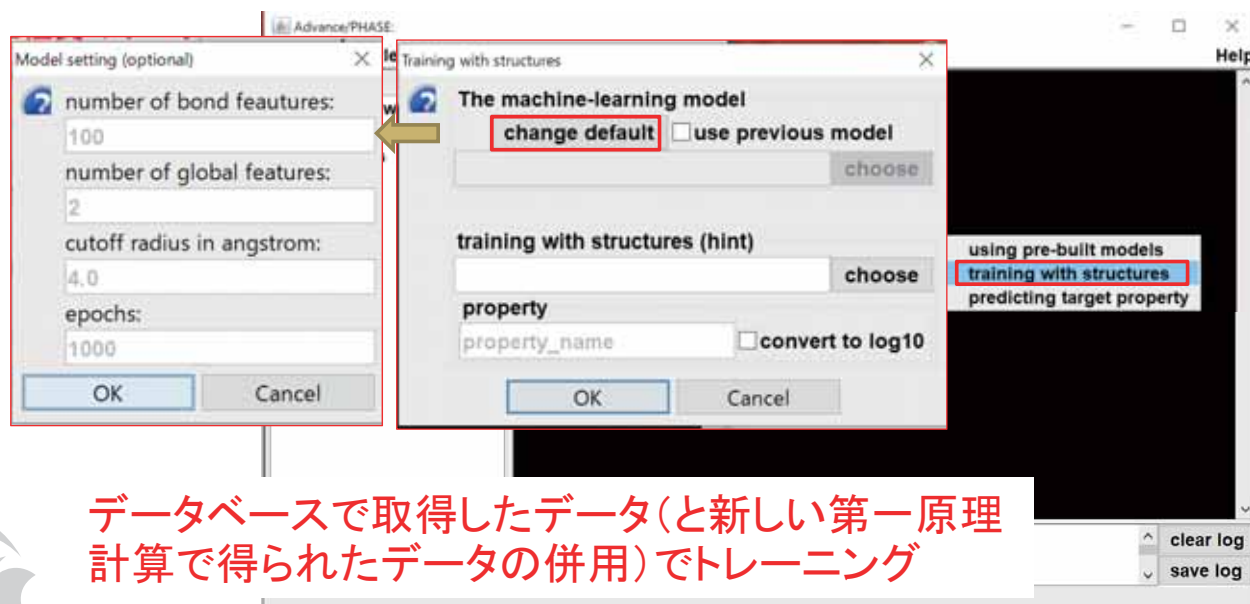
- 既存の学習済みモデルを用いた第一原理計算結果の予測
- 構造と性質のデータによる機械学習モデルのトレーニング
- 学習済みのモデルを用いた物性値の予測



Materials Projectの10万以上の構造を使って教育されたライブラリが公開されていて、そのまま使えます。

MI対応(機械学習)

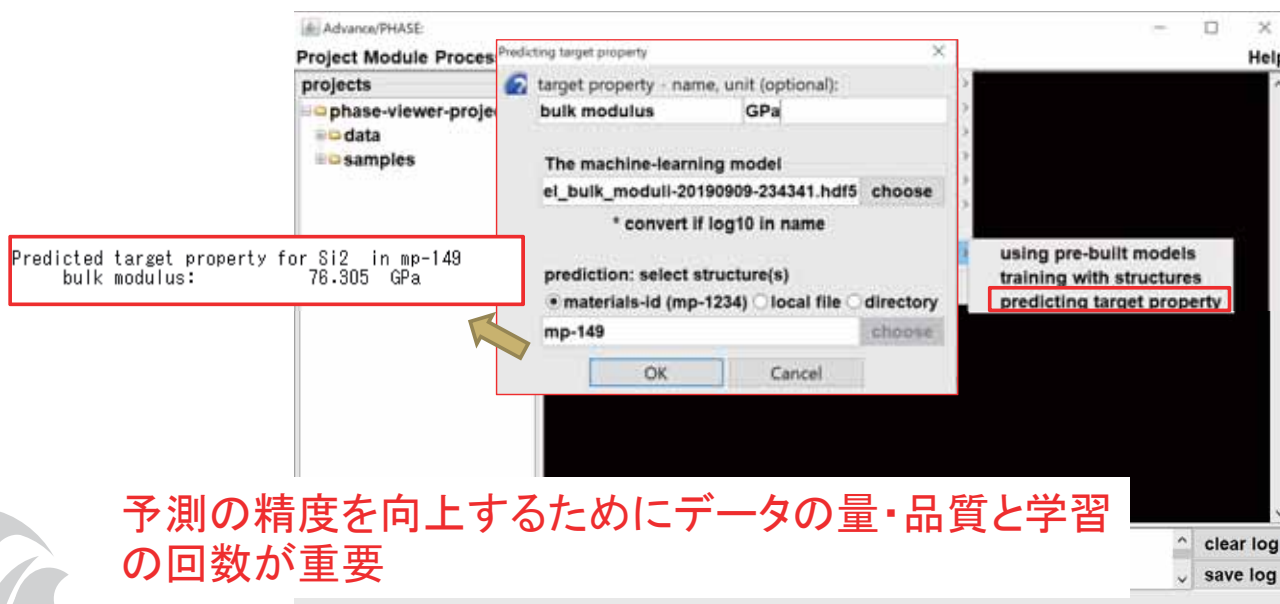
- 既存の学習済みモデルを用いた第一原理計算結果の予測
- 構造と性質のデータによる機械学習モデルのトレーニング
- 学習済みのモデルを用いた物性値の予測



データベースで取得したデータ(と新しい第一原理計算で得られたデータの併用)でトレーニング

MI対応(機械学習)

- 既存の学習済みモデルを用いた第一原理計算結果の予測
- 構造と性質のデータによる機械学習モデルのトレーニング
- **学習済みのモデルを用いた物性値の予測**



予測の精度を向上するためにデータの量・品質と学習の回数が重要

質疑応答

本日の講演

- 主催者あいさつ アドバンスソフト株式会社のご紹介
営業部 富塚 孝之
- 招待講演
「AIとデータ解析を始める前に」
国立情報学研究所 情報学原理研究系
教授 宇野 毅明 様
- 自己組織化写像 (SOM) を用いた地震・火山現象の解析
研究顧問 井田 喜明 (東京大学名誉教授)
- 深層学習用ツール Advance/iMacle のご紹介
主事研究員 山下 貴志
- AI事業および関連サービスご紹介、質疑応答
代表取締役社長 松原 聖
主管研究員 松澤 邦裕



警告

このレポートに収録されている文章および内容については、ご自身のために役立てる用途に限定して無料配布しています。
このレポートを、販売、オークション、その他の目的で利用するには、著作権者の許諾が必要になります。
このレポートに含まれている内容を、その一部でも著作権者の許諾なしに、複製、改変、配布を行うことおよびインターネット上で提供する等により、一般へ送ることは法律によって固く禁止されています。