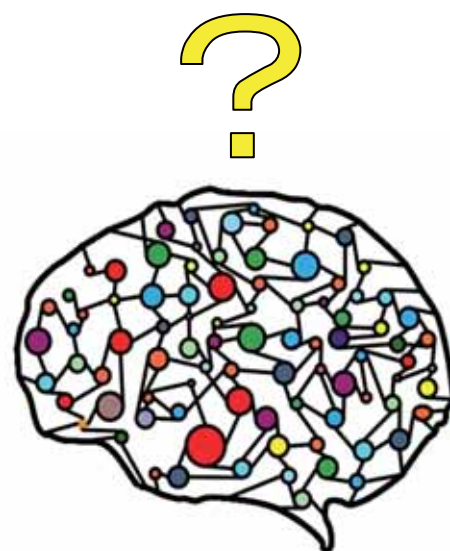


AI技術セミナー 「CAE分野におけるAI技術適用可能性」

2020年1月24日(金)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)	深層学習用ツール Advance/iMacle のご紹介 31	主管研究員	松澤 邦裕
15:40~16:20 (40分)	第一原理計算ソフトウェア Advance/PHASE のマテリアルズ・インフォマティクスへの展開 57	主管技師長	岡崎 一行
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 73	営業部	富塚 孝之



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」
2020年 1 月 24 日（金）
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)

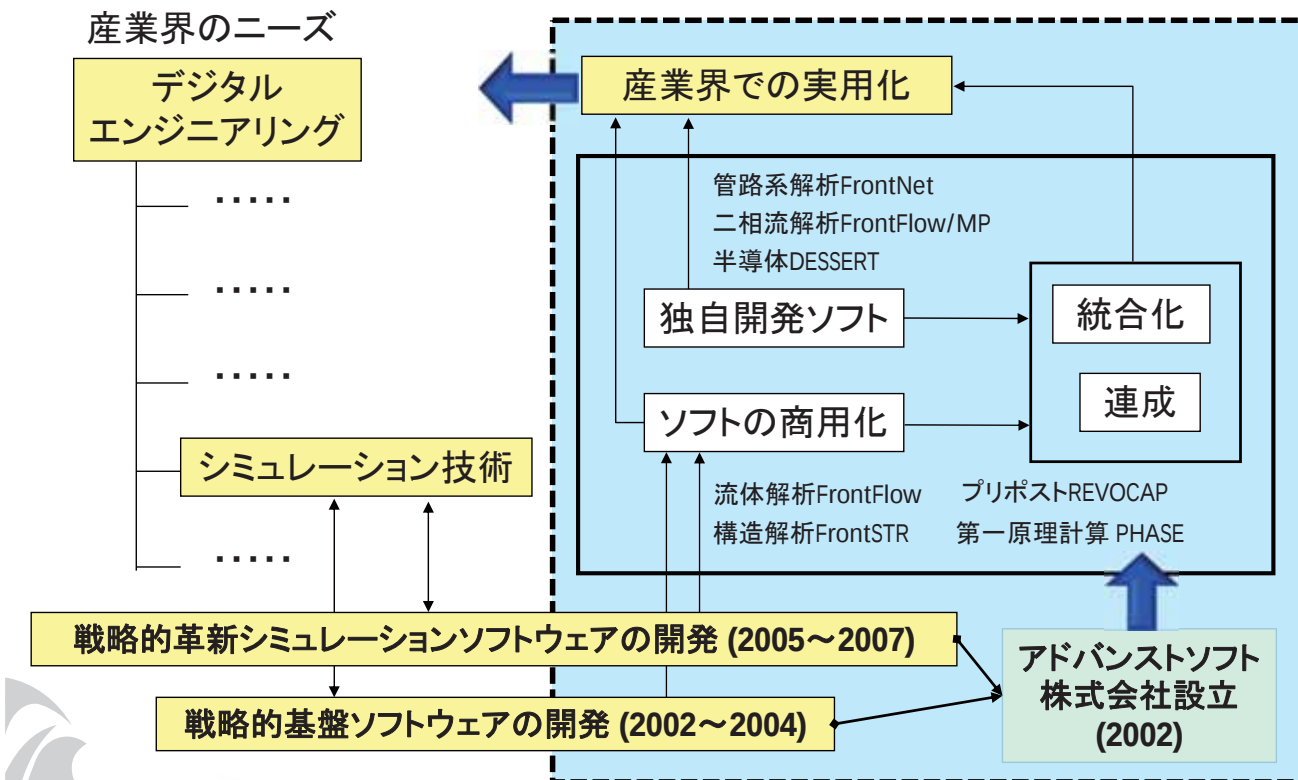
本 社 〒101-0062
東京都千代田区神田駿河台4-3
新お茶の水ビル17階
TEL: 03-6826-3970
FAX: 03-5283-6580

設 立 2002年(平成14年)4月24日

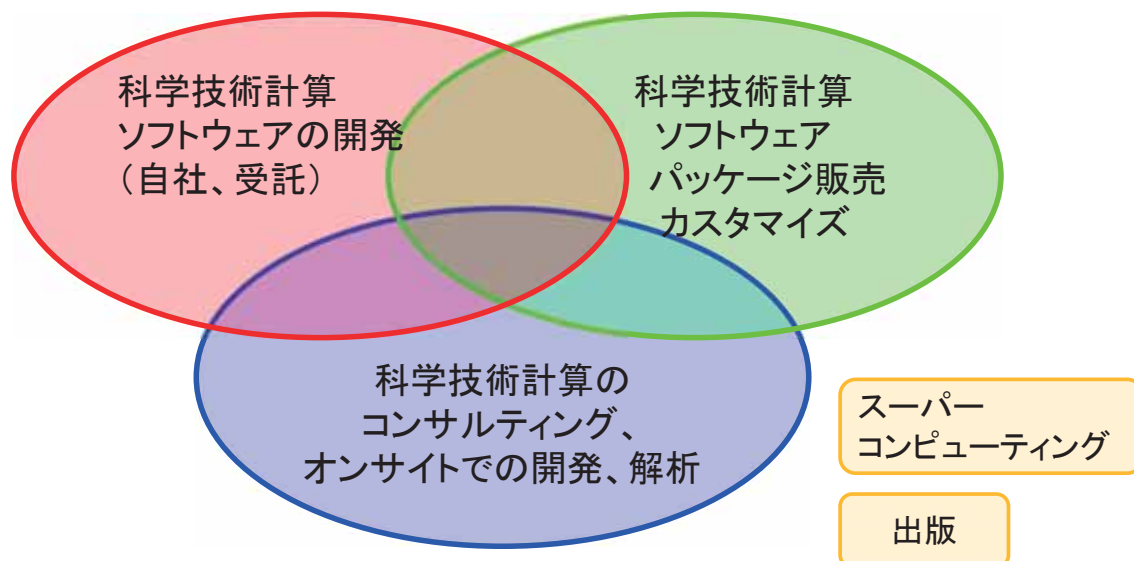
資本金 3,724万円

社員数 102名(2019年10月1日時点)

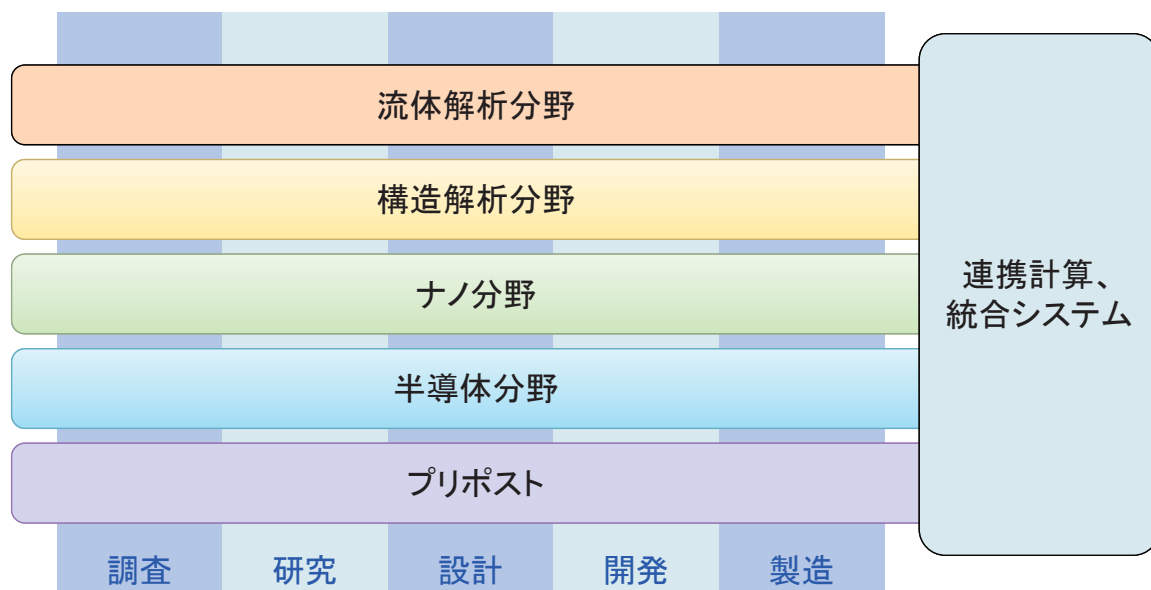
事業部	部	事業内容
第1 事業部	ナノシミュレーション 研究開発センター	先端的なナノシミュレーション事業および関連する国プロを企画・推進
	技術第1部	ナノ材料の第一原理計算ソルバー開発、分子動力学計算・量子化学計算の受託
	技術第2部	プリポストシステム開発、連成システム開発、構造・音響解析などのエンジニアリング、構造解析ソルバーの開発など
	技術第6部	次世代TCADシステムの開発、および半導体解析を中心とした電磁分野
	技術第8部	材料設計統合システムの開発、および、関連する先端的なナノ分野の事業を企画推進
第2 事業部	技術第4部	燃焼・爆轟に係る流体解析ソルバー開発、混相流に係る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



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。

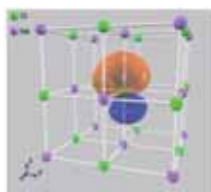


産業の主要な分野のあらゆるフェーズで直面する課題に対し、
科学技術計算によるソリューションをご提供します。

アドバンスソフトのパッケージソフトウェア

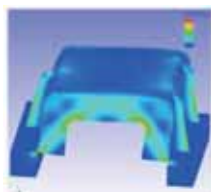
ナノ

Advance/PHASE
Advance/NanoLabo



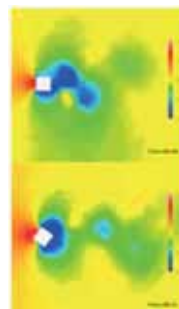
構造・音響

Advance/FrontSTR
Advance/FrontNoise

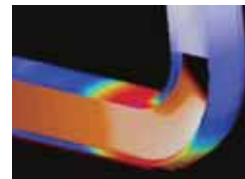


流体

Advance/FrontFlow/red



Advance/FrontFlow/FOCUS



Advance/FrontFlow/MP

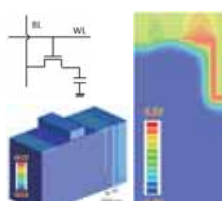


Advance/FrontNetシリーズ



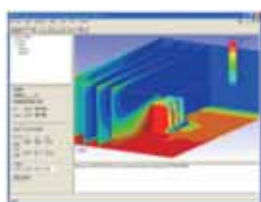
半導体・光／電磁波

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

自動車・運輸
材料・化学
産業機械
航空宇宙
エレクトロニクス
建設土木
原子力
エネルギー
環境・防災

解析分野別

流体
爆発・燃焼
構造
振動音響
ナノ・バイオ
プリポスト
半導体デバイス
光・電磁波

Copyright ©2020 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 ©2020 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

2020年1月24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

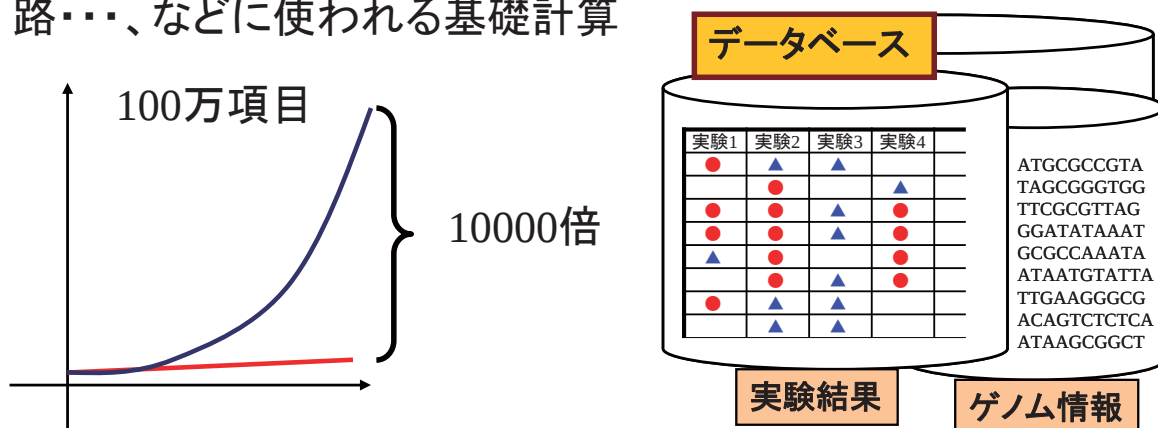
専門分野: アルゴリズム理論 (計算量&実利用)

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

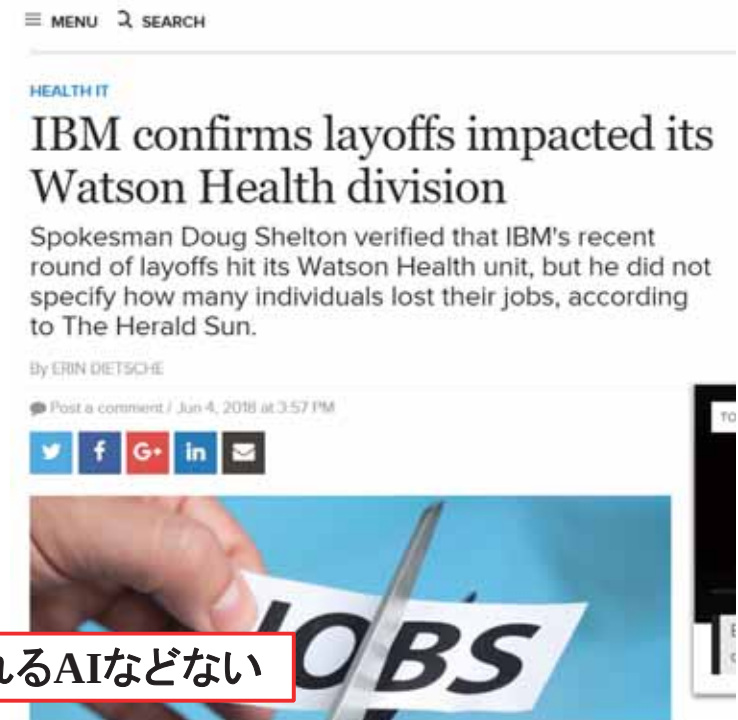
IBMワトソンチームの解散

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

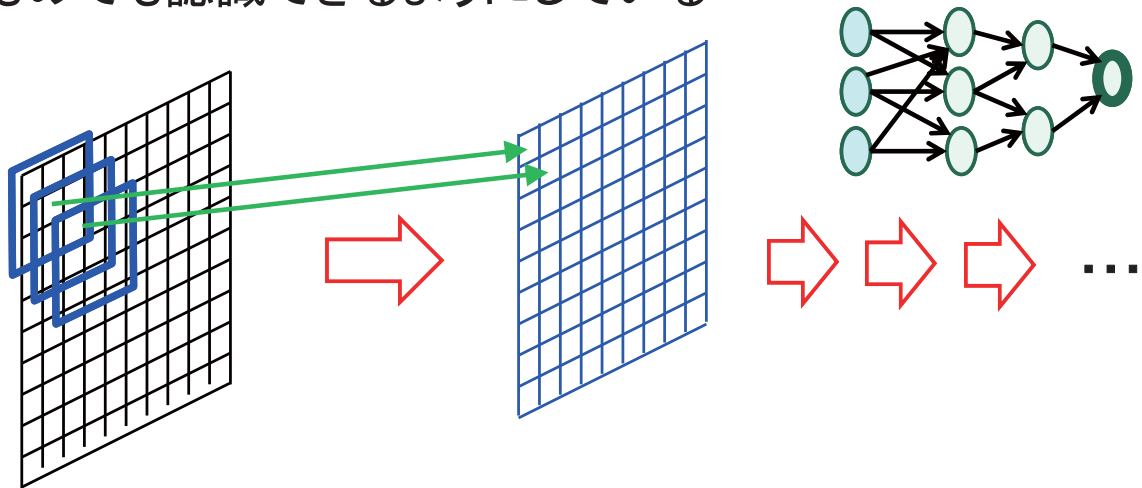
- 最近AI注目されているのは、技術革新があったから
 - + ディープラーニングの登場
 - + 統計モデルの利用
 - ↑ ビッグデータの登場、利用
- 画像や音声の認識と、翻訳などの自然言語処理が上達した

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

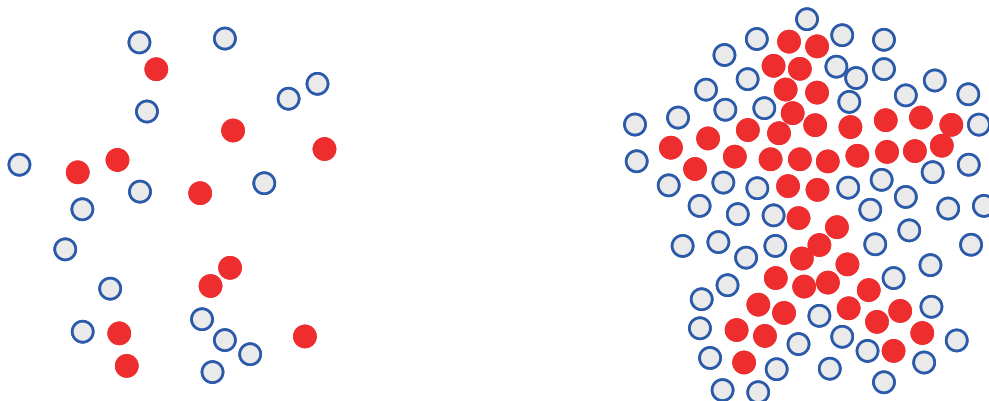
- シナプスの働きをまね、ネットワークを信号が伝わり、その結果で判別する仕組みを、自動的にデザインする
- ディープラーニングは、大量のデータを使って、複雑なものでも認識できるようにしている



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

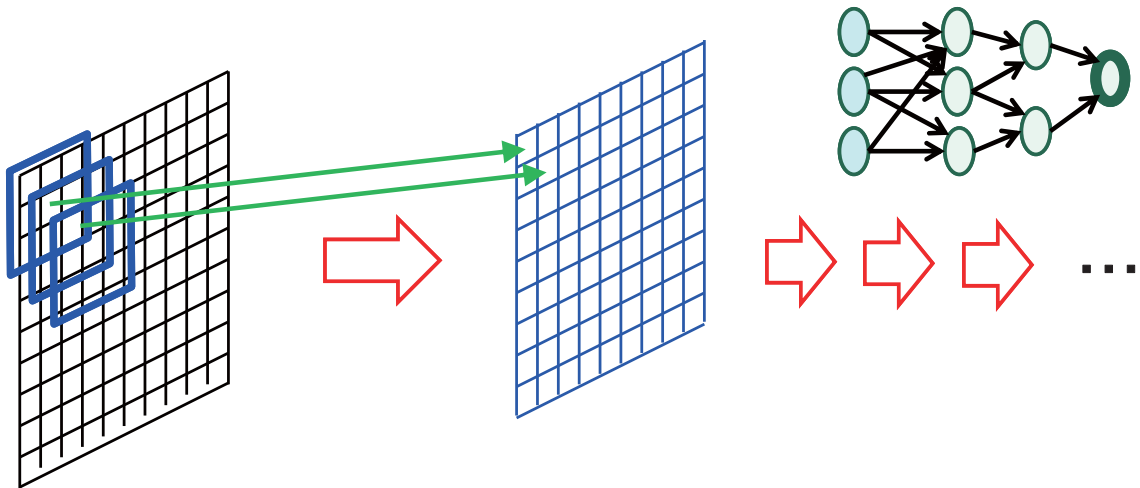
- 数学の証明は、与えられた条件から、ゴールとなる条件を導けるかどうかの問題
- 自動定理証明システムに突っ込むと、意外と上手に解いてくれる
- 文章を読み解いて、数式に変換するところが一番大変
- 数式になってしまえば、あとはソルバーがけっこう解いてくれる
← 自動証明技術の研究開発は長く、そこそこ優秀

（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

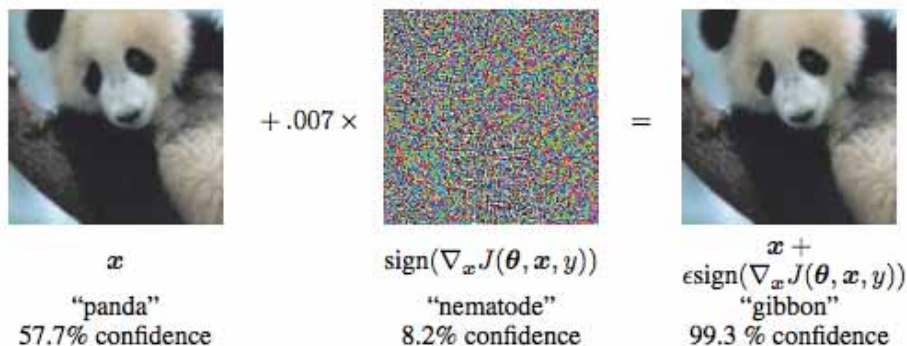
ディープラーニングが持つ知識

- 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

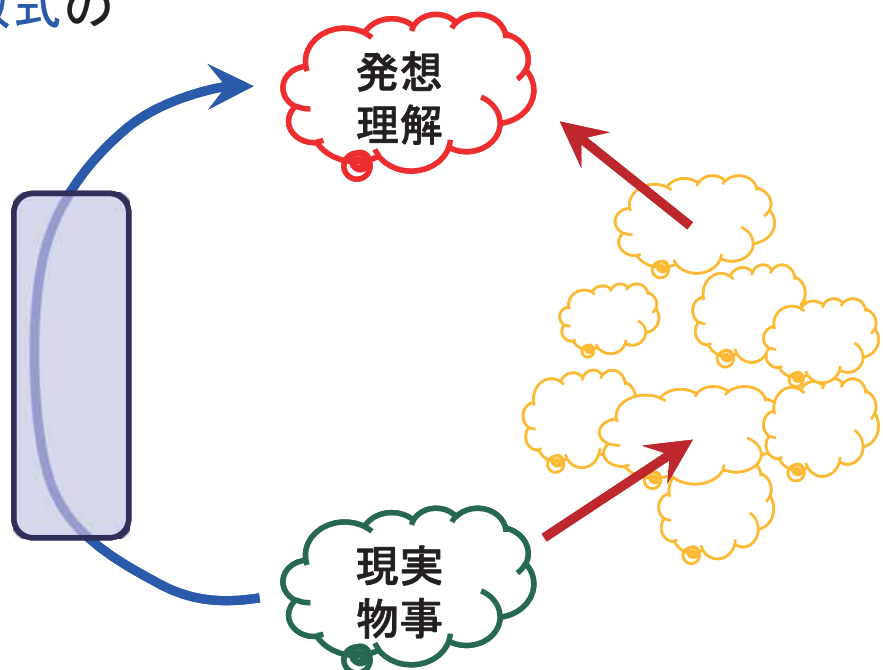
- 画像認識などは、画像のどのあたりを識別に使ったか、を可視化できる

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

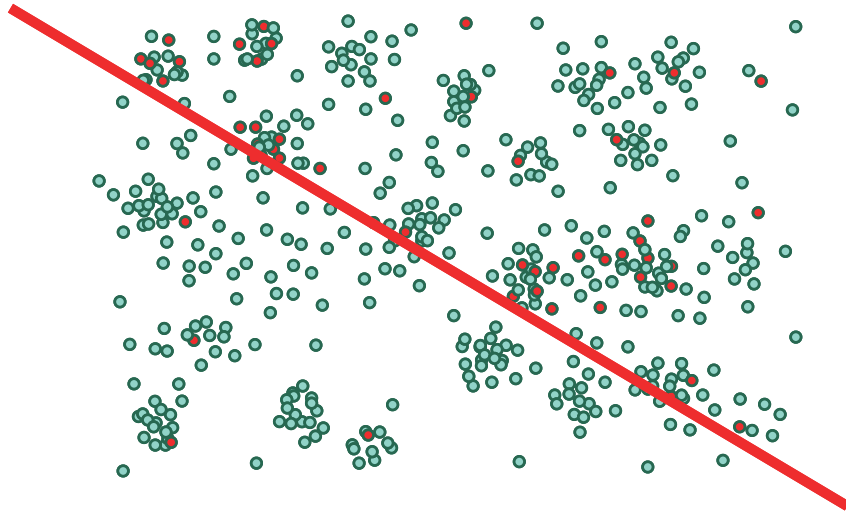
- 人間は、物事を**見て考えて**、そして「**わかった！**」となる
- 機械は**大量の数式**の
組合せで理解

お互いに**理解**
しあえるのは
難しい



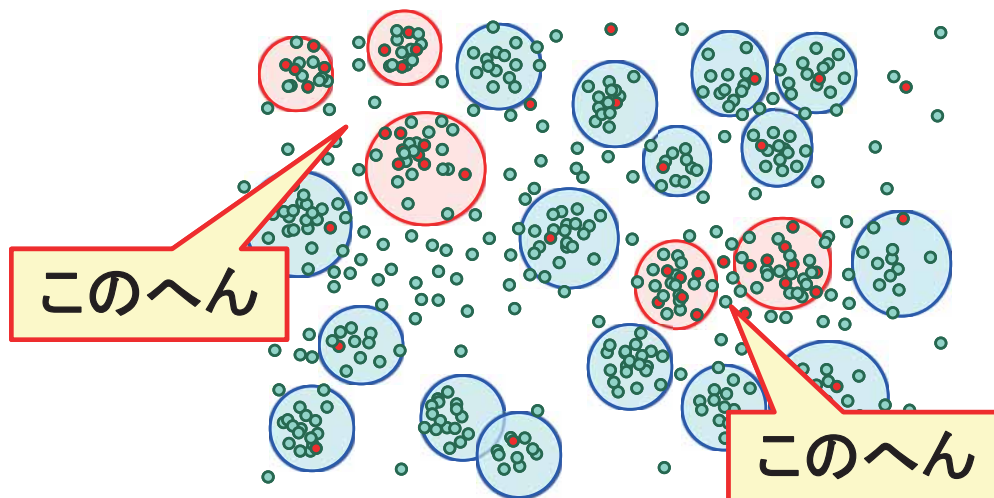
機械学習

- ○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



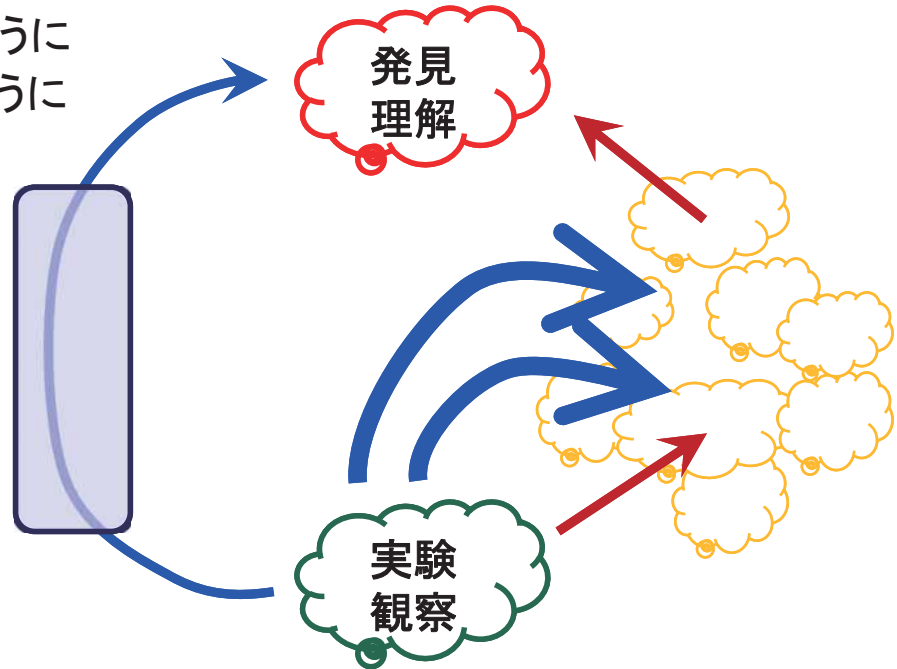
例えば、まとまりを取り出して怪しいところを見る

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

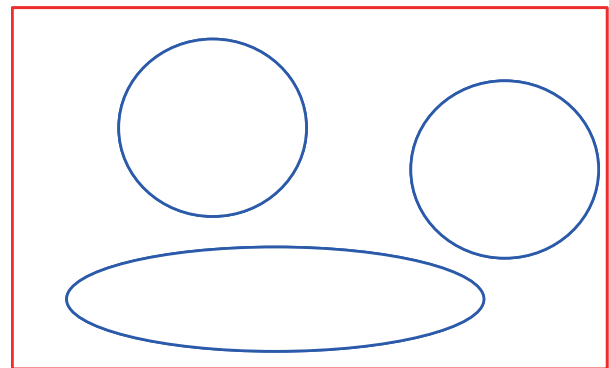


精度の落とし穴

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

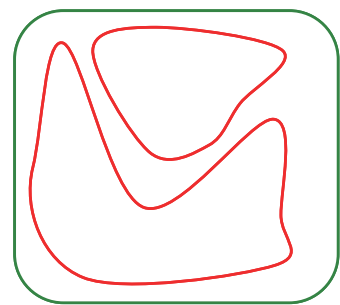
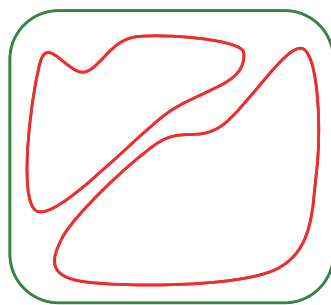
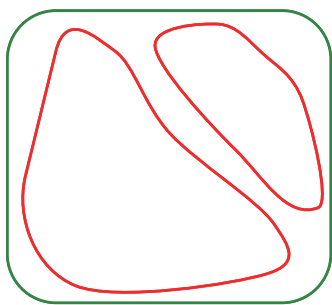
小型機が着陸失敗、日本人女性重傷か...ネパール
東京株、午前終値は152円高 8カ月ぶり9700円台回復
オセロ松嶋が体調不良、笑福亭鶴瓶のみ出演へ
トヨタの前3月期、豊田社長ら首脳3氏が報酬1億円超
タケノコ採り4人無事 秋田・仙北で一時不明

...

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

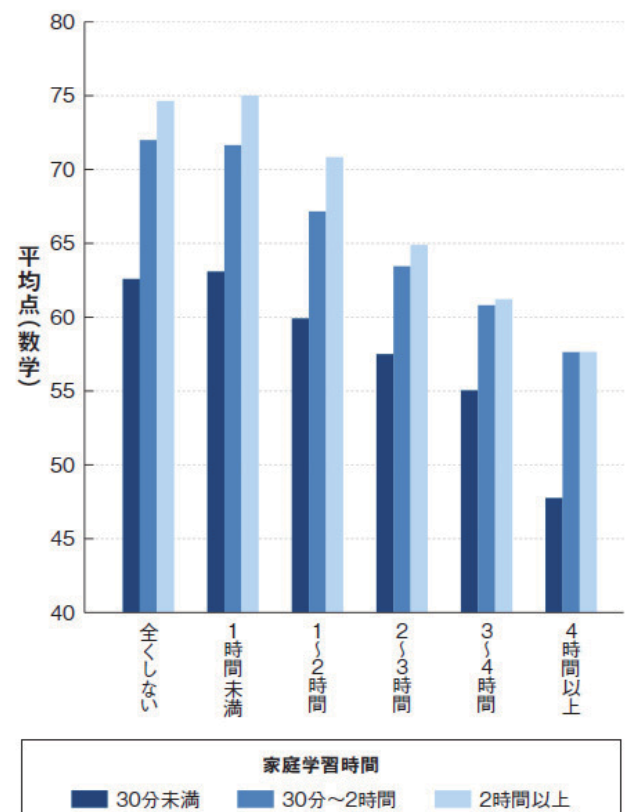
「スマホすると、
勉強できなくなる」

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

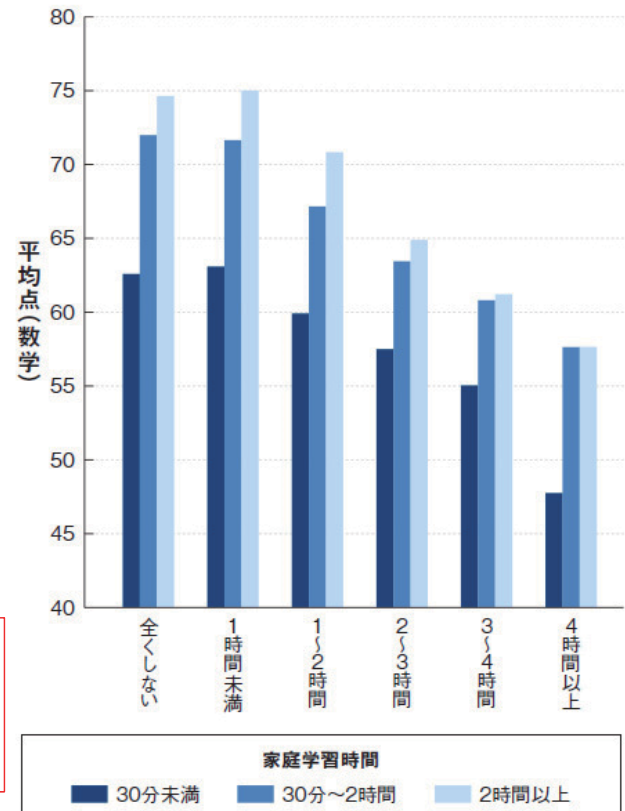
数学が**もともと**できない子は、
スマホをたくさん使う
1時間くらいが一番デキる

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)



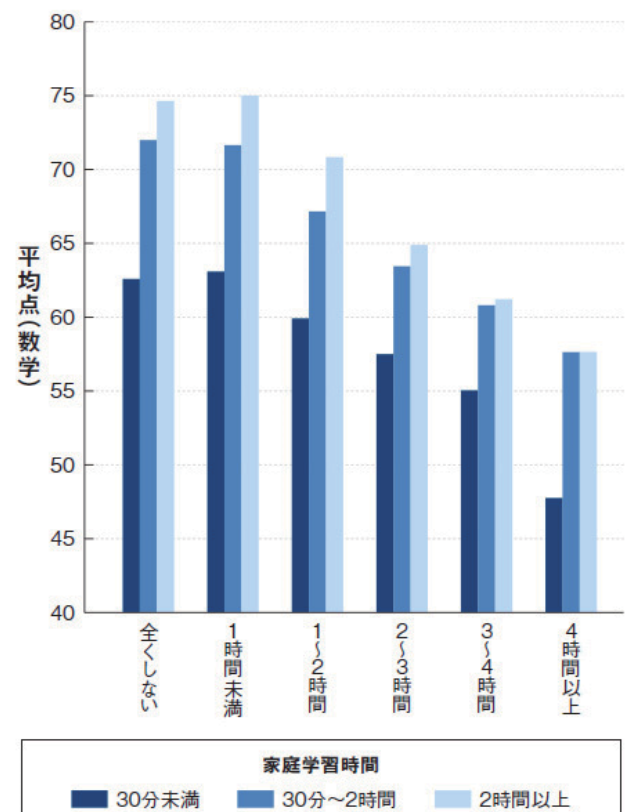
他に、わかること

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

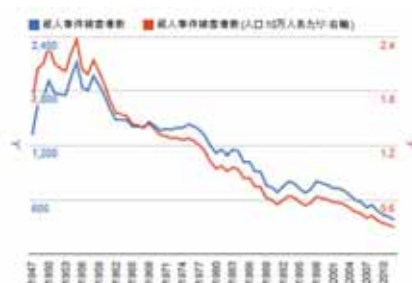
自分の仮説が強いと間違いやすい

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

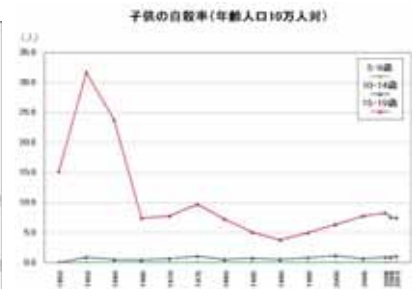
最近の親は虐待が多い



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、

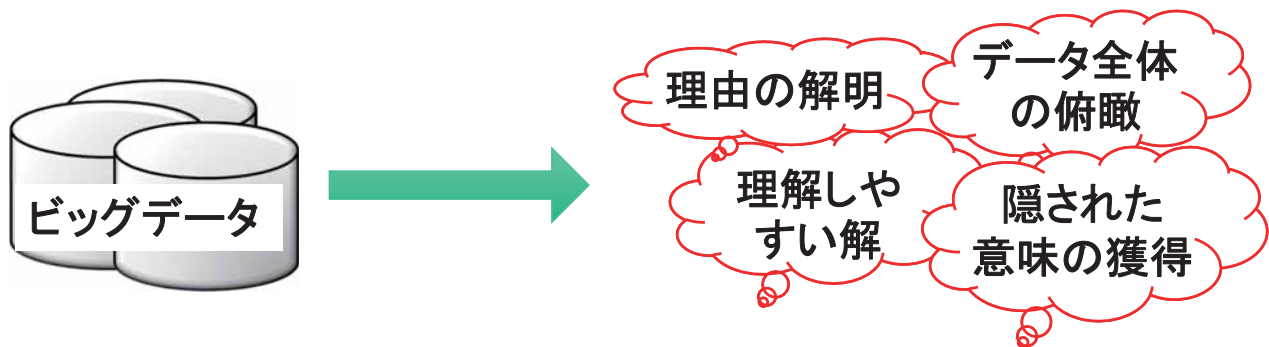
スマホとか LINE とか Youtube とかの **使い方**

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



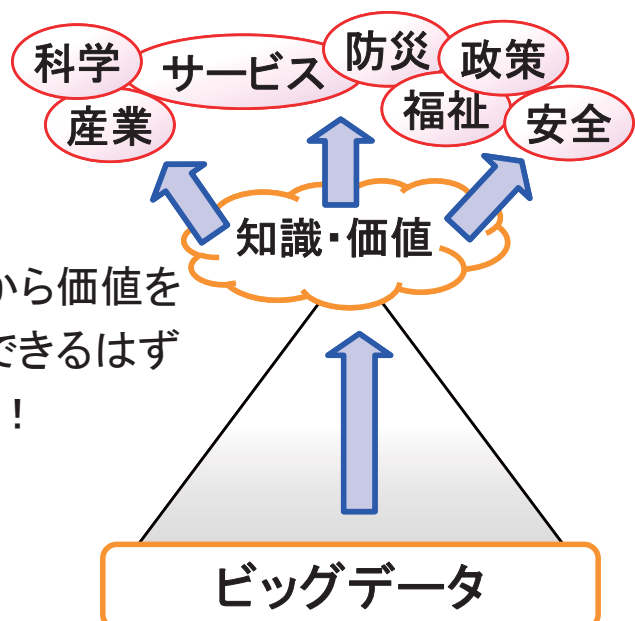
今、足りないもの

- 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



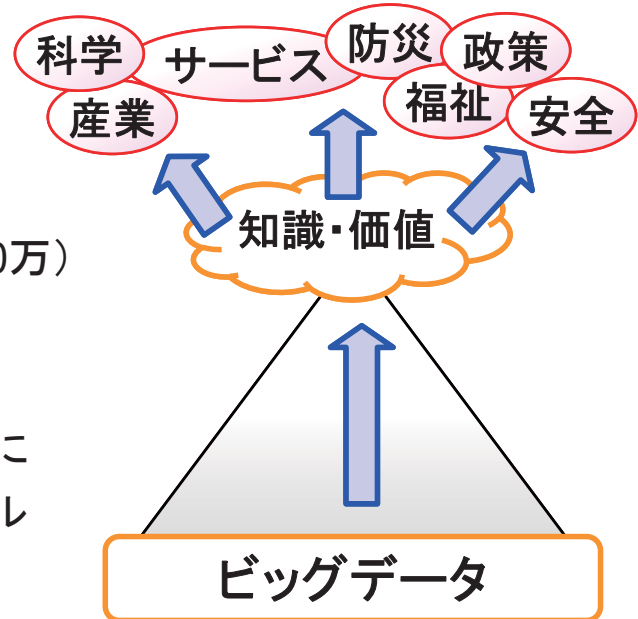
世界の中の日本

- 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
ラスタを明確にする

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



深層学習用ツール Advance/iMacleのご紹介

第3事業部 技術第7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」
2020年1月24日（金）
アドバンスソフト株式会社

本講演の概要

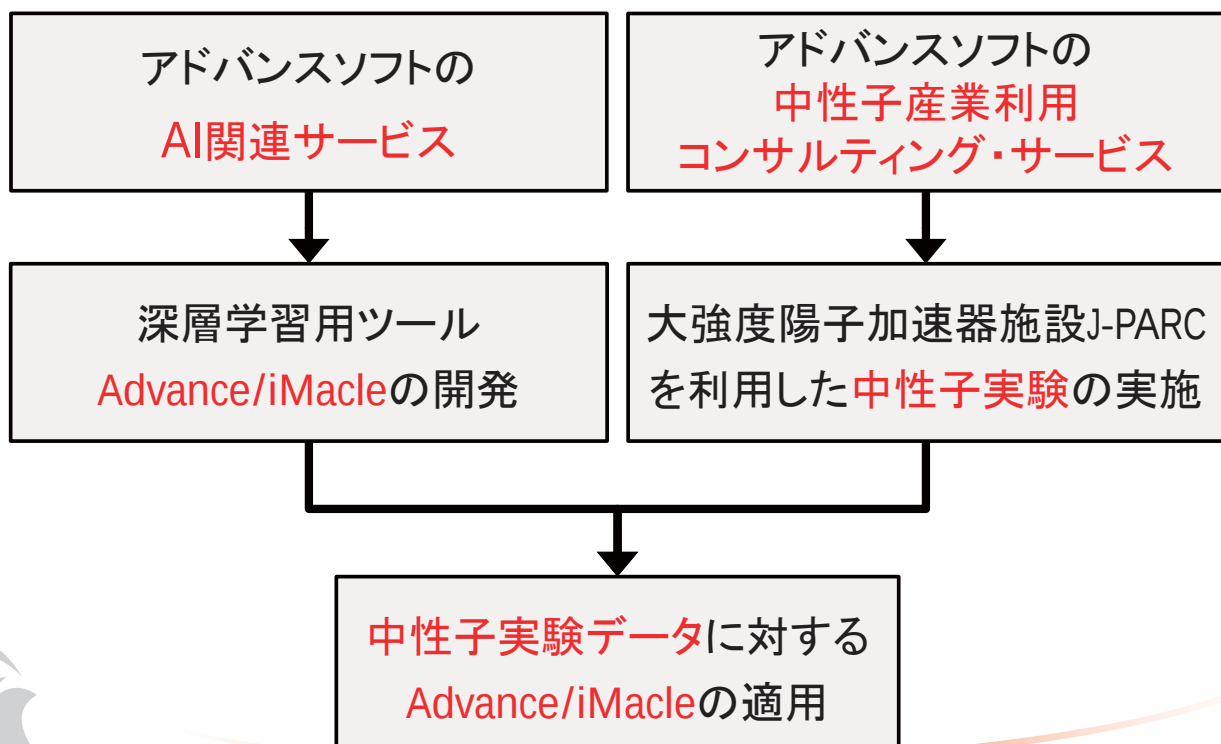


Table of Contents

- 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 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 ※ 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 ※ 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

次の講演

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 ©2020 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

7

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.

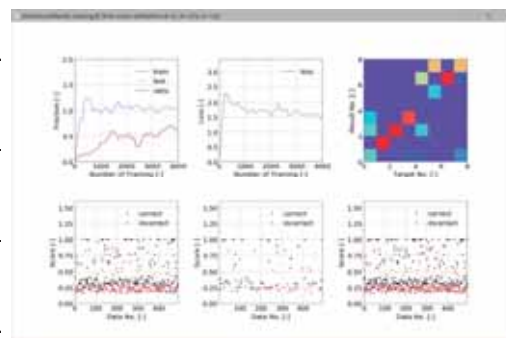
Copyright ©2020 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

8

深層学習用ツール Advance/iMacle

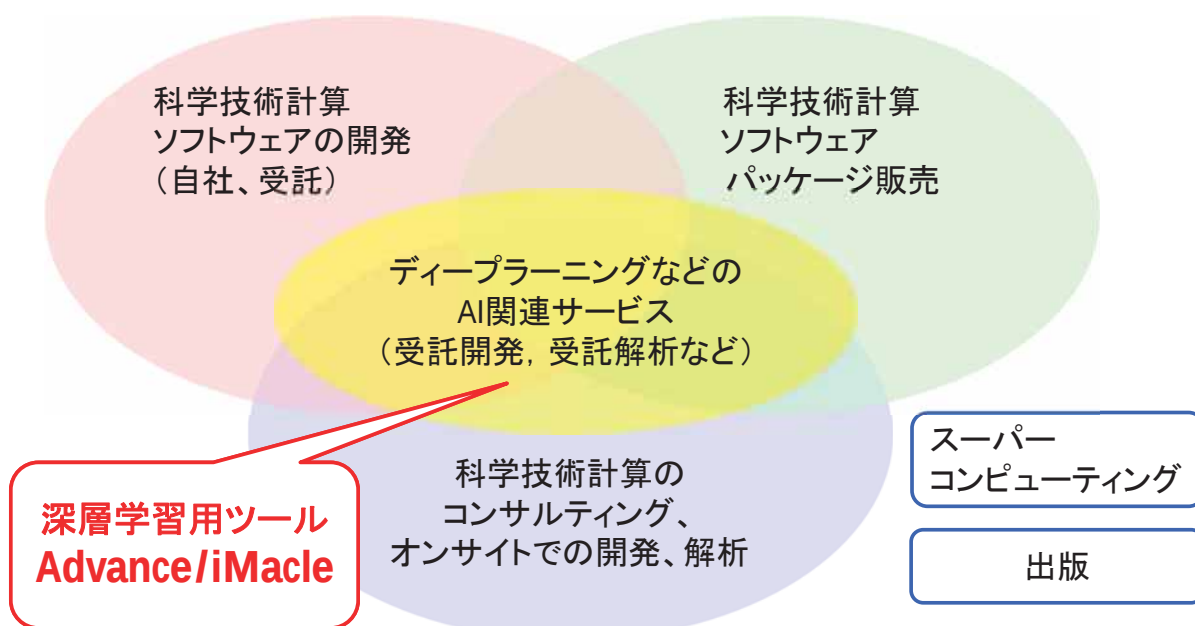
Advance/iMacleの主な機能

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)



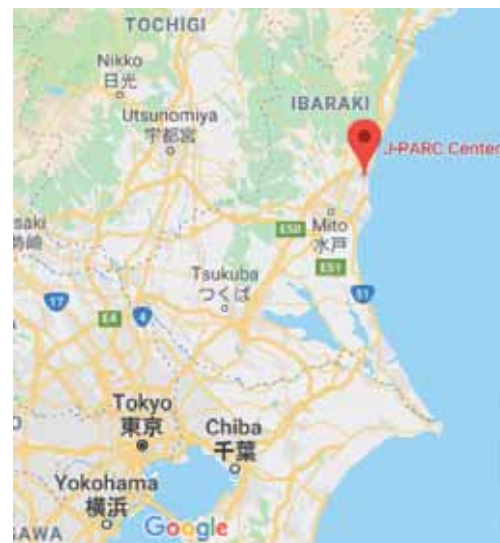
従来からの科学技術計算ソフトウェアの開発を基礎とした科学技術計算に関する様々なソリューションとともに、**ディープラーニングなどのAI関連サービスを展開中。**

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“

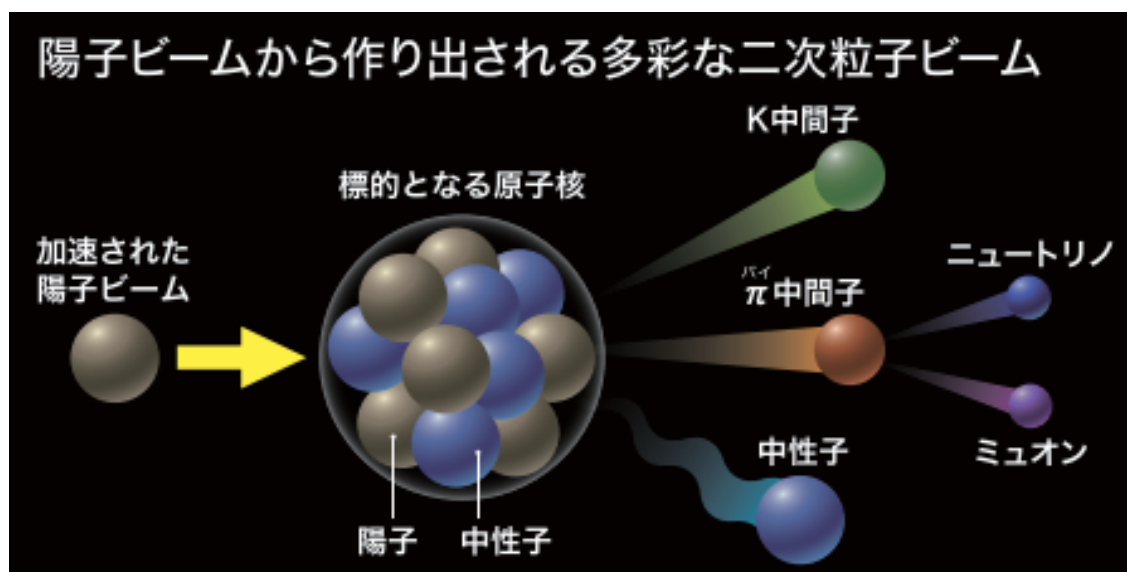
画像提供:J-PARCセンター (<https://j-parc.jp/public/database/publication/index.html>)

Copyright ©2020 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

13

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“

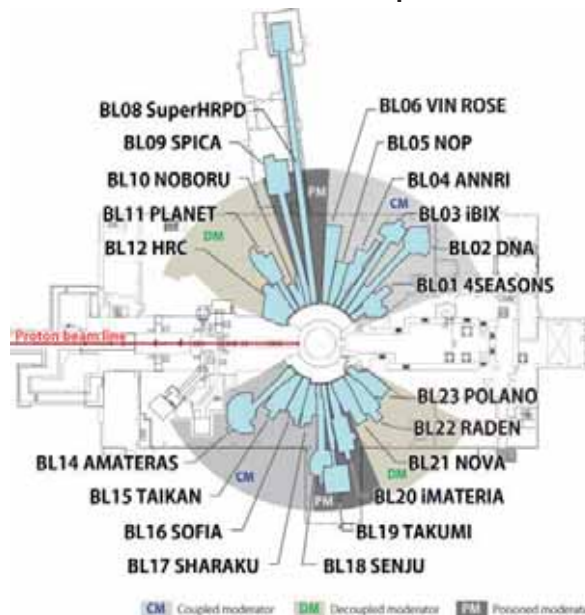
画像提供:J-PARCセンター (<https://j-parc.jp/public/database/publication/index.html>)

Copyright ©2020 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

14

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。

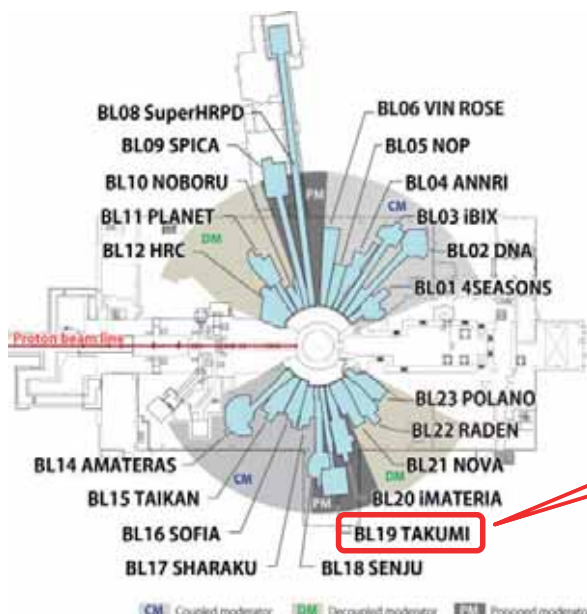
アドバンスソフトの 中性子産業利用コンサルティング・サービス

- 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>)

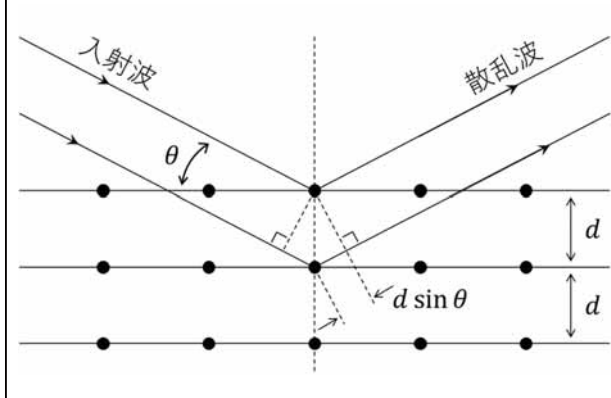
Copyright ©2020 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

19

中性子回折法

Bragg's Law:

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

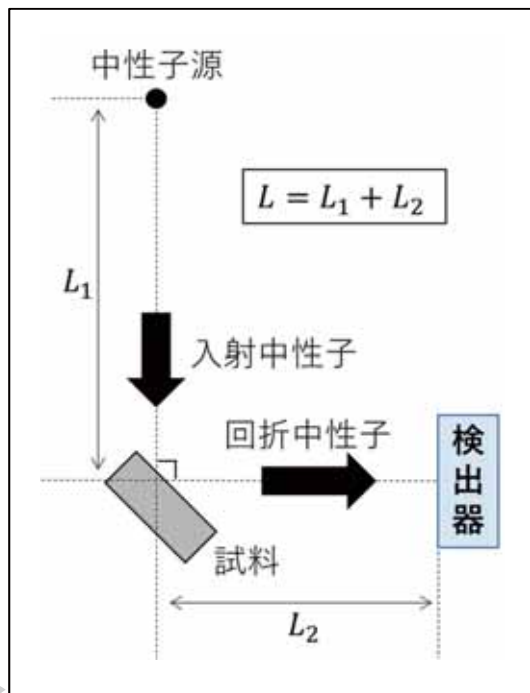


- X線と同様に, 中性子も Bragg条件に従って回折.
- 回折パターンを観測することで, 試料の結晶構造などに関する情報が得られる.
- X線と比較して物質内部への侵入深さが深いため, 試料内部の測定が可能.

Copyright ©2020 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

20

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。

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

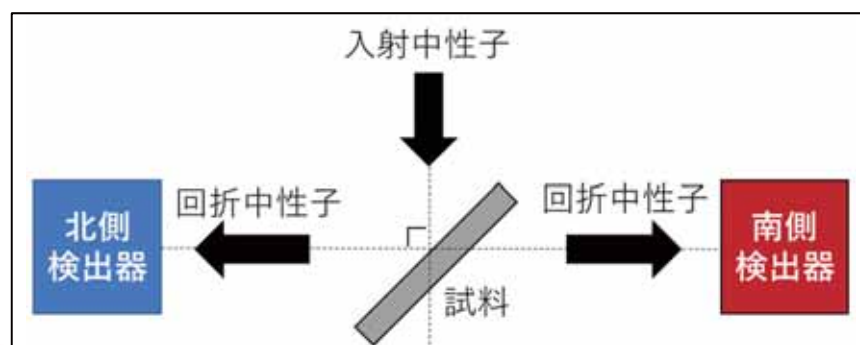


飛行時間 TOF (波長 λ) の変化からひずみ ε が求まる。

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

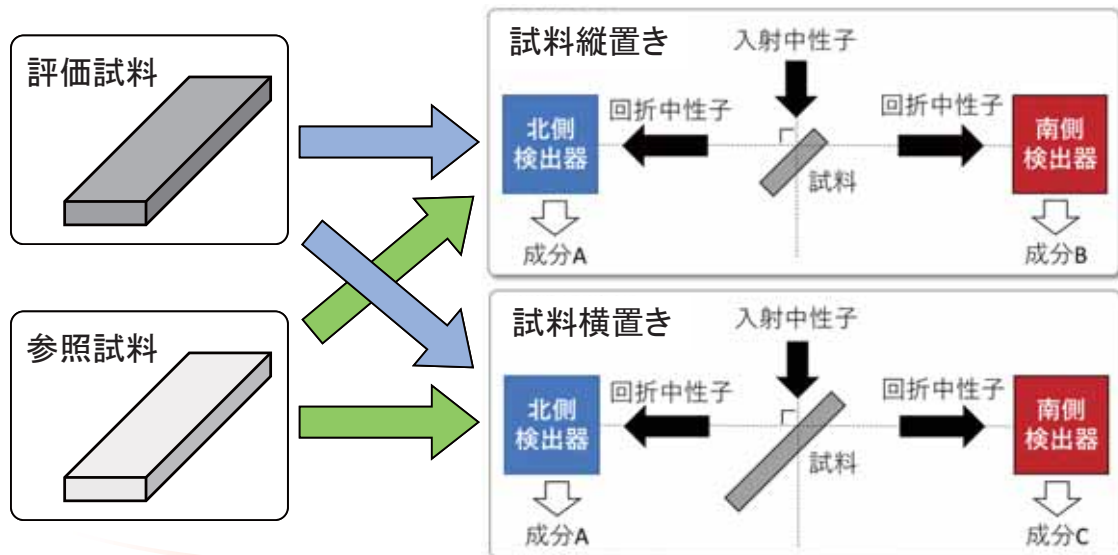
「匠」における“ひずみ”測定

- 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

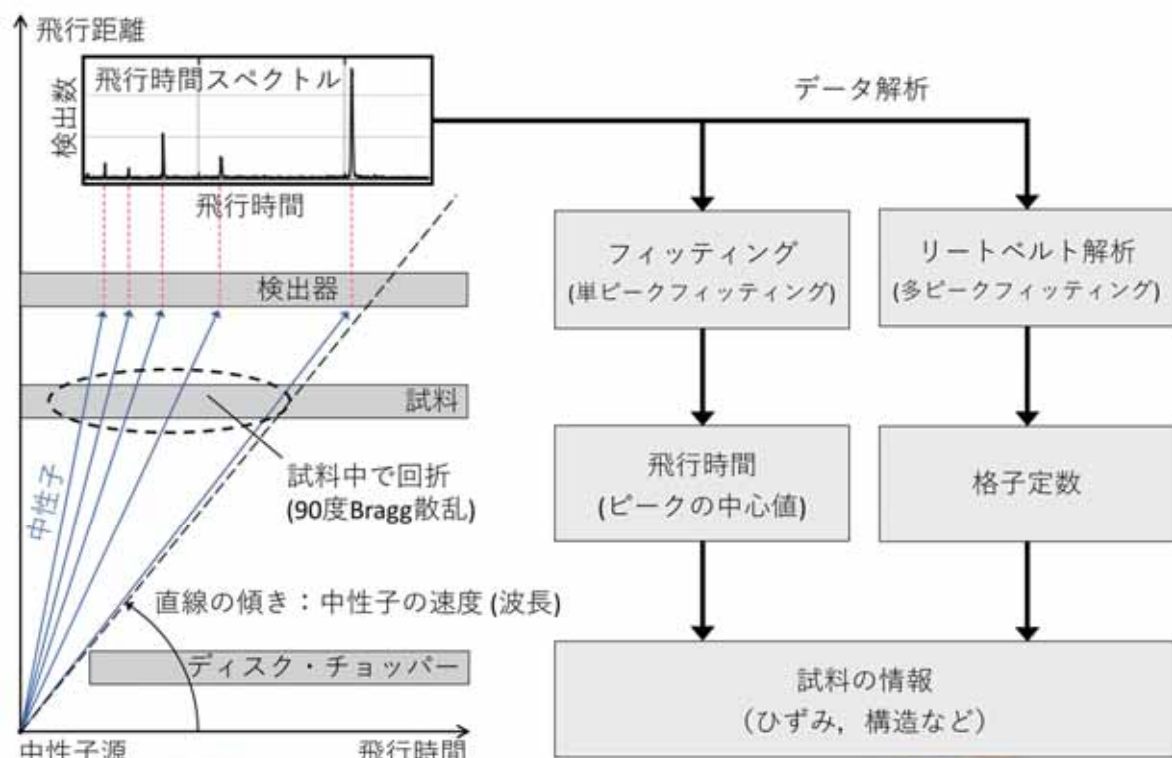
- 工学材料回折装置「匠」を用いて実験.
- 評価試料と参照試料の飛行時間スペクトル(回折パターン)を測定し, その比較から試料の“ひずみ”を求めた.



Copyright ©2020 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

23

測定・データ解析フロー



Copyright ©2020 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

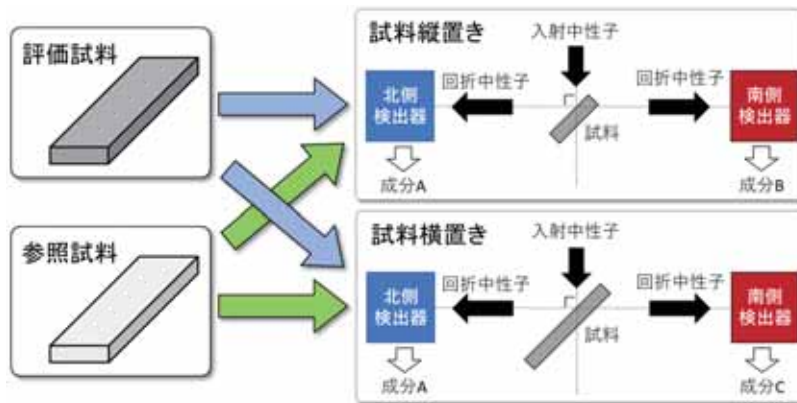
24

省 略

Table of Contents

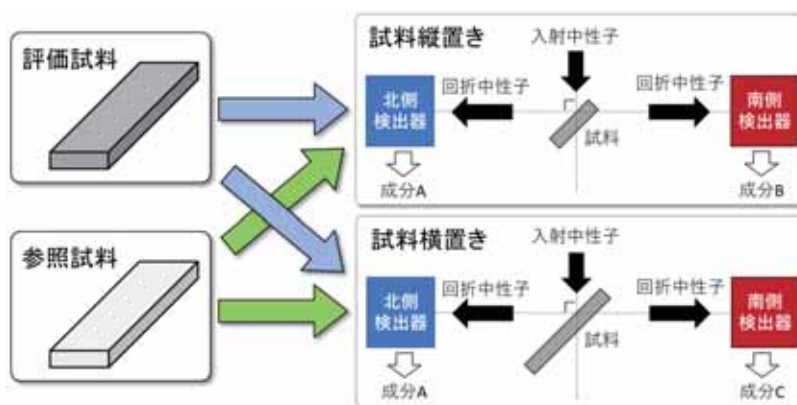
- Advance/iMacleの概要
 - 開発背景
 - 基本機能
- 中性子実験の概要
 - 大強度陽子加速器施設 J-PARC
 - 物質・生命科学実験施設 MLF
 - 工学材料回折装置「匠」を用いた中性子実験
- ➡ • Advance/iMacleの適用事例
 - 多クラス分類による測定条件の判定
 - 回帰分析による物理量の予測
- まとめ

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

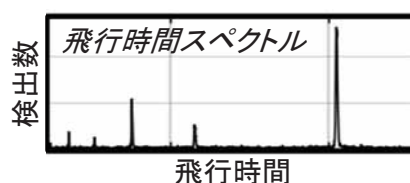
中性子実験の測定条件



- ☑ 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



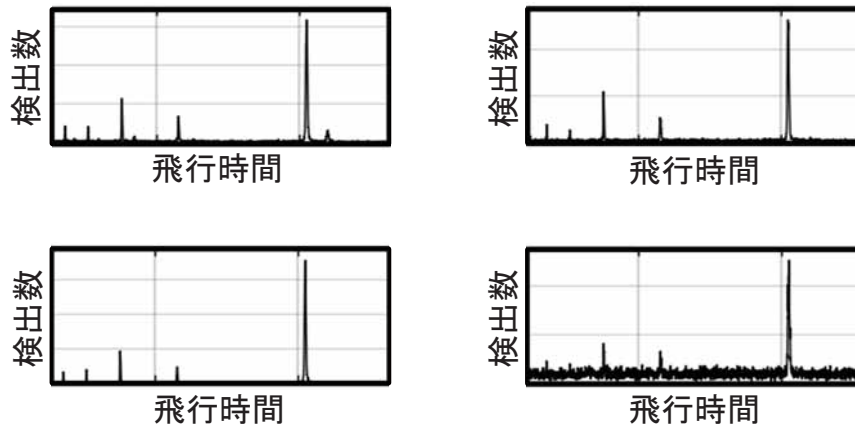
測定データ:



~1000 個

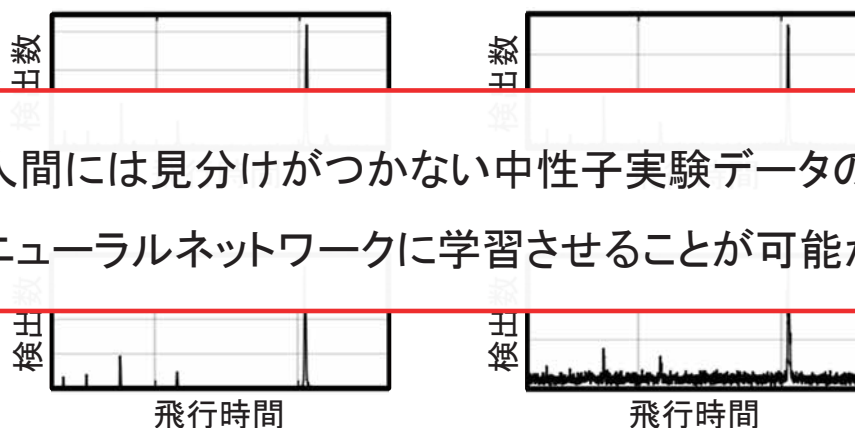
測定データの例

- 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.



人間には見分けがつか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

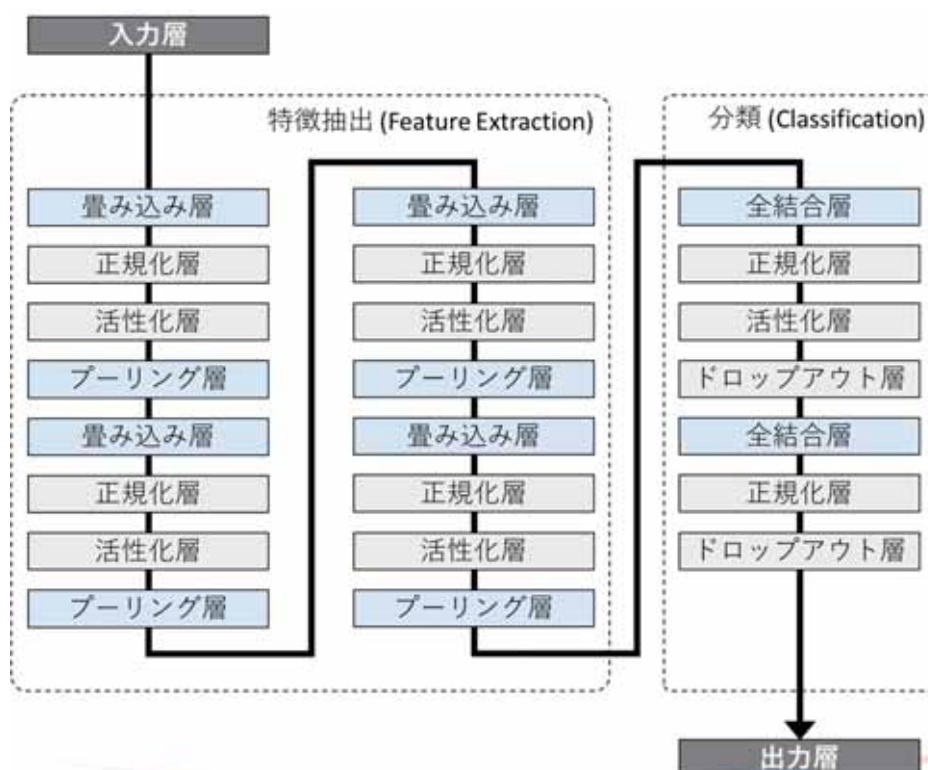
多クラス分類（教師あり学習）

- | | |
|---------------|-------------------------|
| (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) |

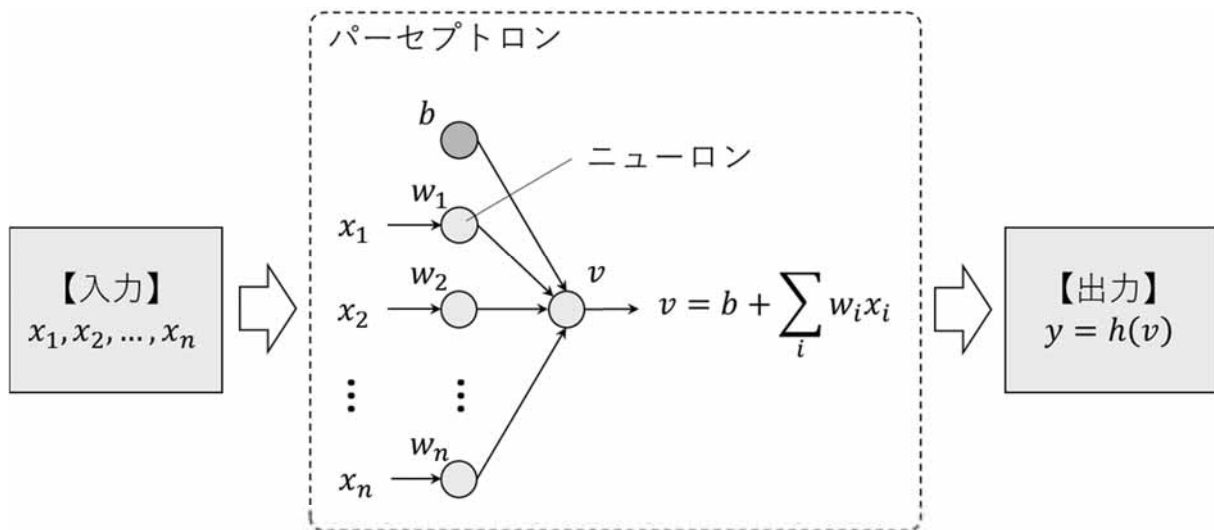
回帰分析（教師あり学習）

- 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

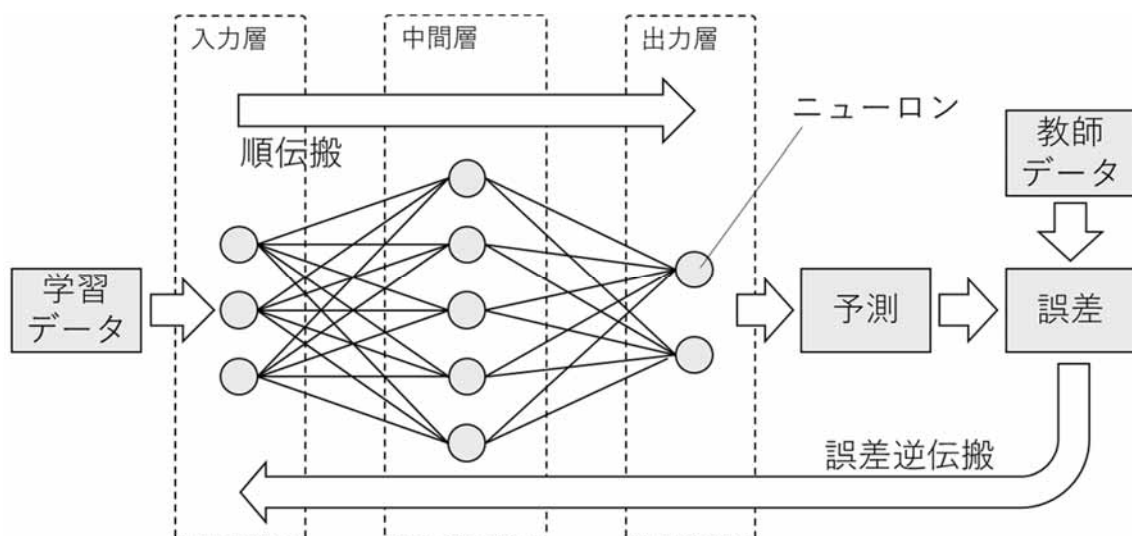


x_i = 入力, y = 出力,
 w_i = 重み, b = バイアス,
 $h(v)$ = 活性化関数

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

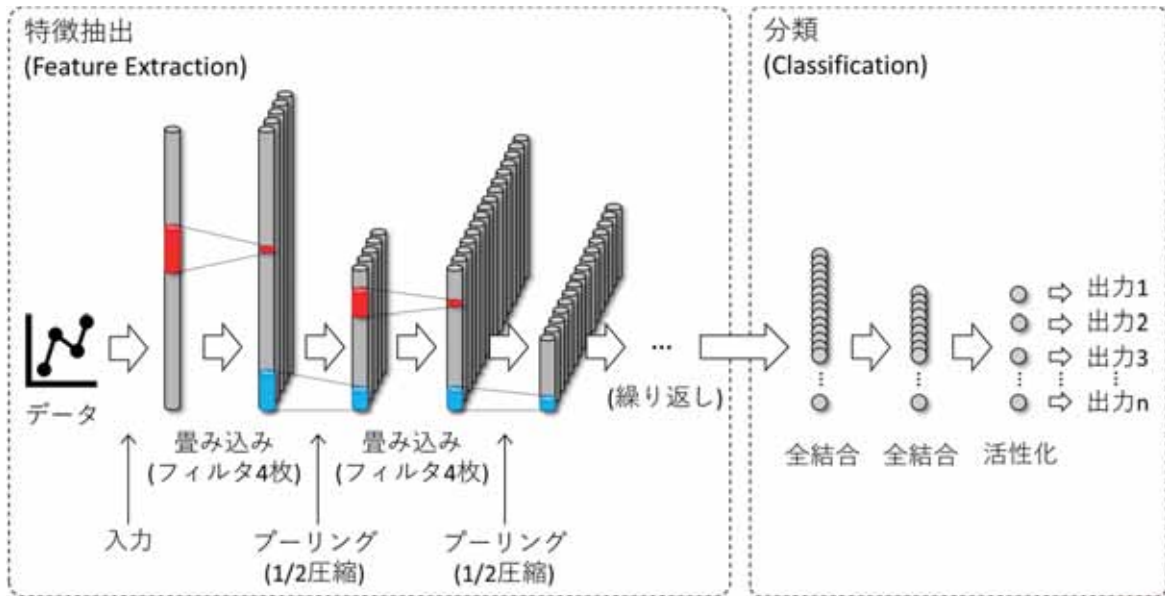
- 教師あり学習の場合の学習フロー概要.



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

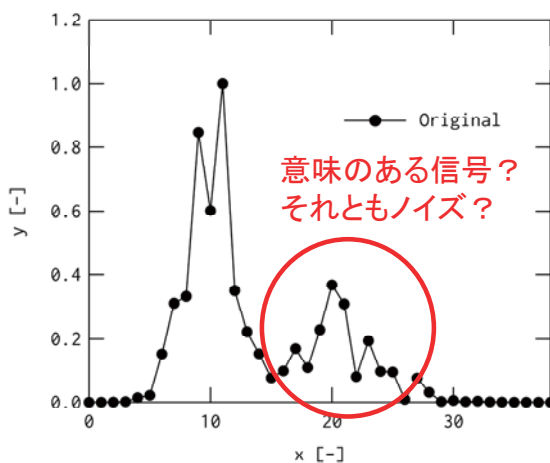


Copyright ©2020 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

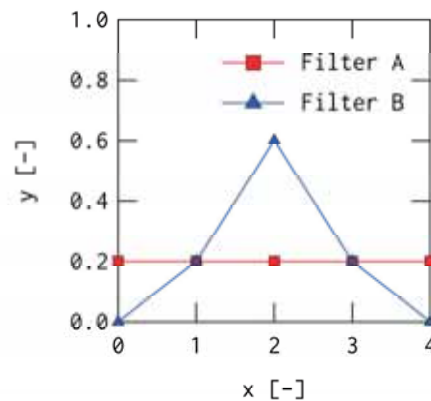
35

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

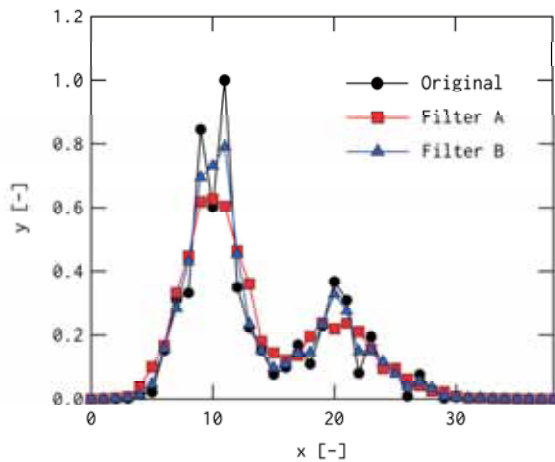
⇒ サイズ5のフィルタをスライドさせながら波形全体に適用

Copyright ©2020 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

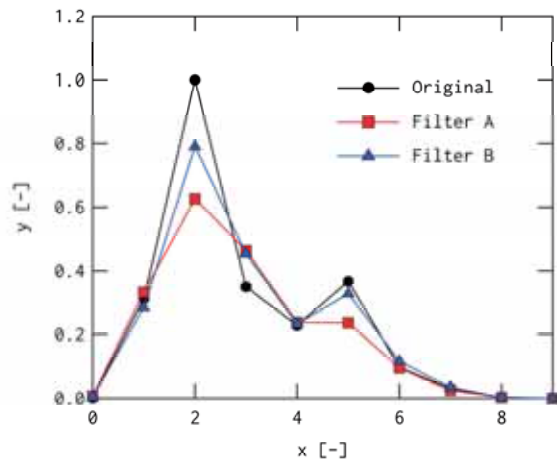
36

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



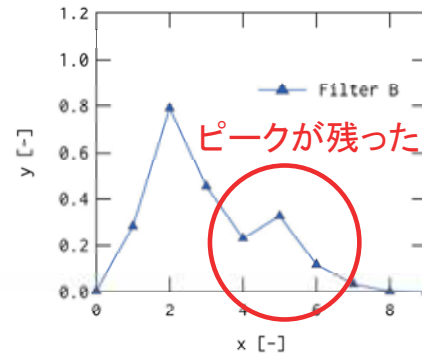
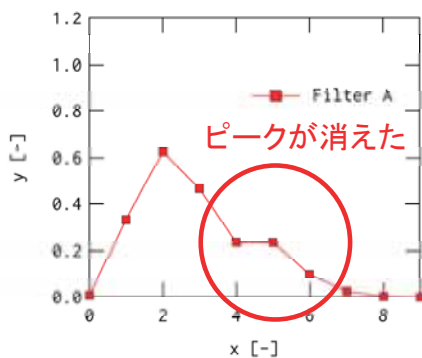
畳み込み処理後
(フィルタサイズ = 5)



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？

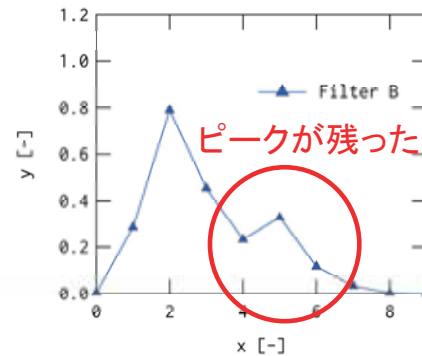
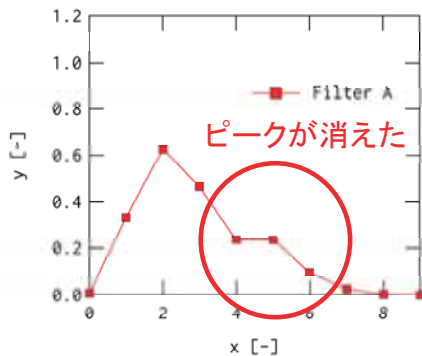
☐ 特徴を残せた？

☐ 特徴を除去してしまった？

☐ ノイズを除去できなかった？

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？

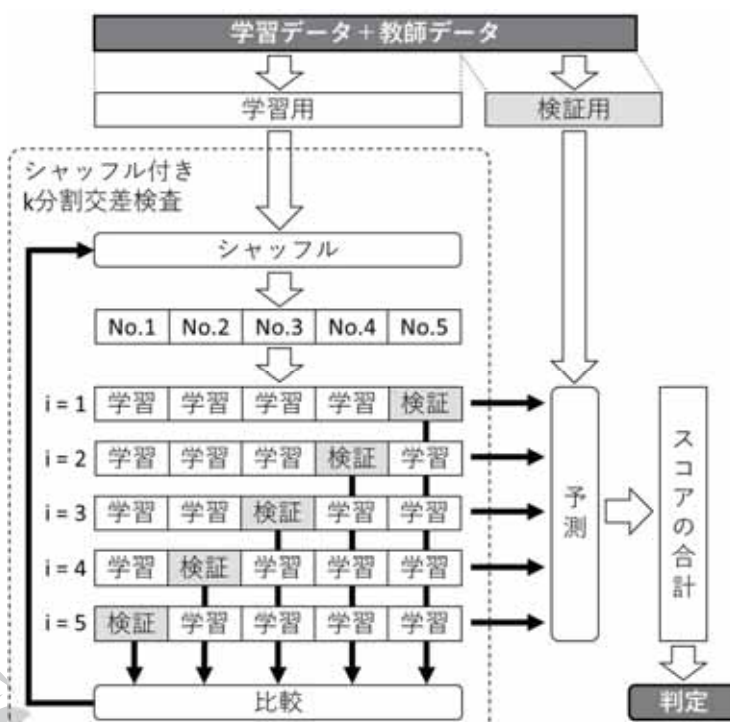
□ ノイズを除去できなかった？



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) |

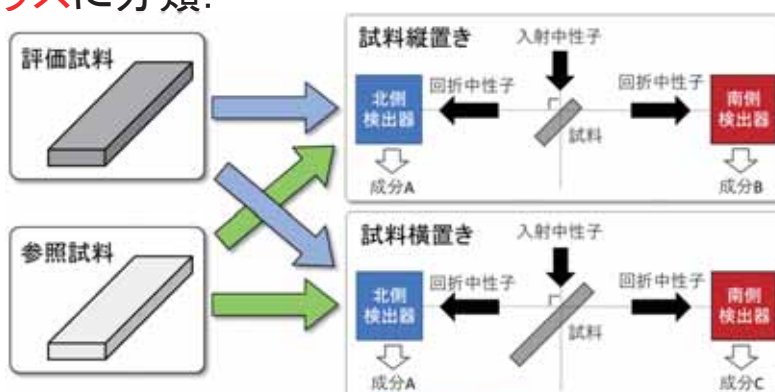
回帰分析（教師あり学習）

- 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.



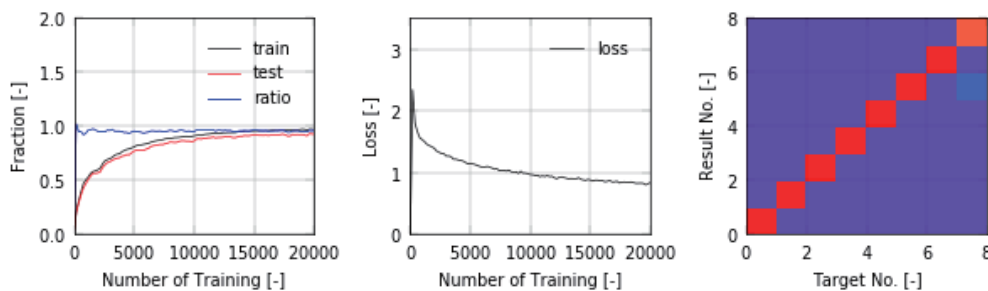
多クラス分類

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

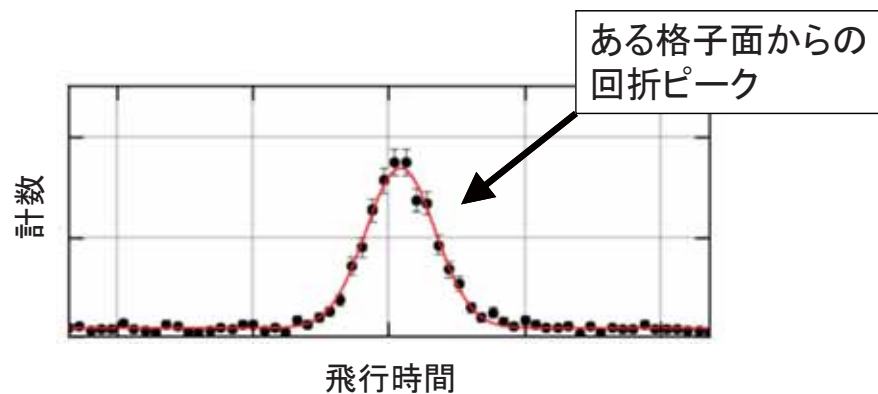


Copyright ©2020 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

43

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**.



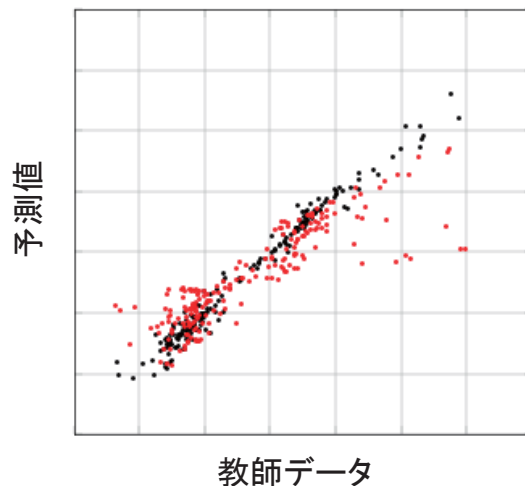
フィッティング例

Copyright ©2020 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

44

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

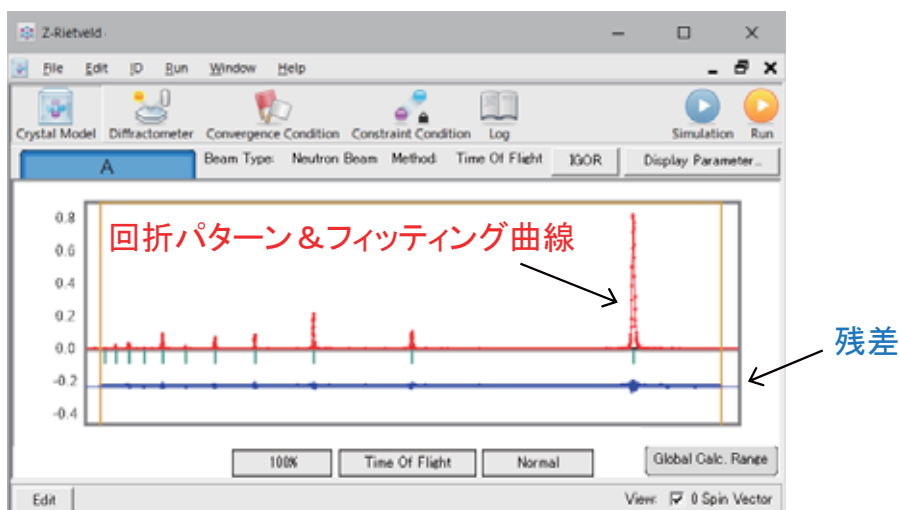
回帰分析②：格子定数

- 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。



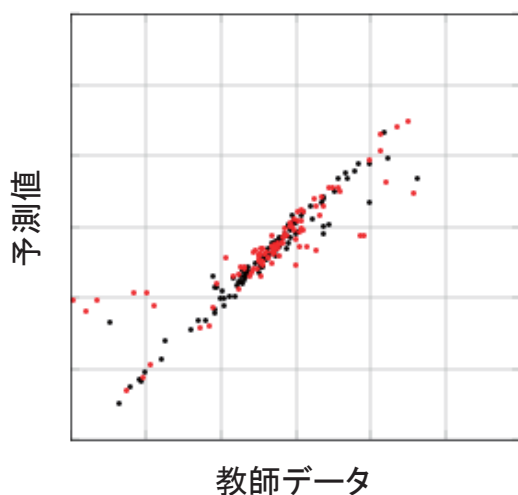
<https://z-code.kek.jp/zrg/>

Copyright ©2020 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

47

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。



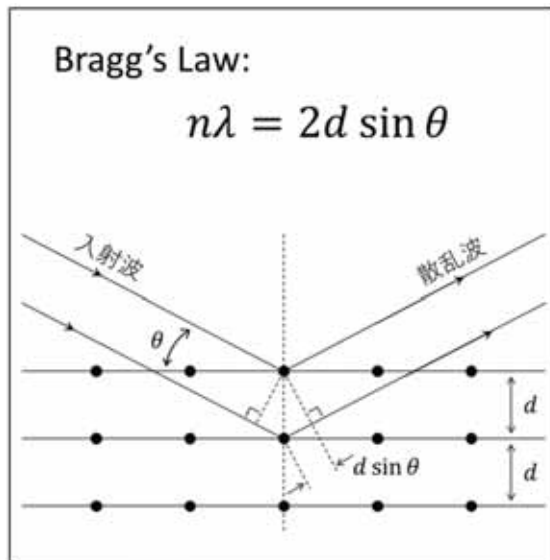
黒：学習データに対する予測値
赤：未知のデータに対する予測値

Copyright ©2020 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

48

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.

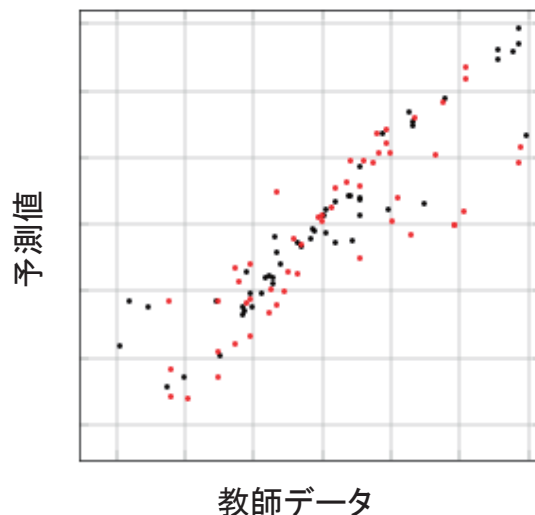


飛行時間 TOF (波長 λ) の変化からひずみ ε を算出.

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

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、人間では見分けがつかない測定条件の違いを判別
 - 回帰分析により、解析しなければ導出できない物理量を予測
- 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

第一原理計算ソフトウェア Advance/PHASE の マテリアルズ・インフォマティクスへの 展開

関西支店技術部 岡崎 一行

AI 技術セミナー
「CAE分野におけるAI技術適用可能性」
2020年1月24日（金）
アドバンスソフト株式会社

Copyright ©2020 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

1

発表内容

- マテリアルズ・インフォマティクスとは
- 第一原理計算とは
- 第一原理計算ソフトウェアAdvance/PHASEとは
- Advance/PHASEにおける
マテリアルズ・インフォマティクスへの展開

Copyright ©2020 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

2

発表内容

- **マテリアルズ・インフォマティクスとは**
- 第一原理計算とは
- 第一原理計算ソフトウェアAdvance/PHASEとは
- Advance/PHASEにおけるマテリアルズ・インフォマティクスへの展開

マテリアルズ・インフォマティクス

- **過去の材料実験・シミュレーションデータを利用した効率的な探索アルゴリズムによって、よりスピーディーに新素材を開発・商品化する**
 - それぞれの材料の基礎データと、実験から得たデータをもとにして「材料基礎データのパラメータ α が、素材の性能を決めるのでは？」という予測をAIで立てる
 - 「材料Aと材料Bを組み合わせると一番性能が良くなるのでは？」と予測をAIで立て、実際に実験で作ってみる
- **米国の前オバマ政権は、2011年に発表した「Materials Genome Initiative (MGI)」においてマテリアルズ・インフォマティクスの推進を打ち出し、その予算総額は2億ドルに上る。**

問題点

- 「この計算をすれば上手くいく！」という絶対的な計算はない
 - 材料のパラメータをどう加工するか
 - 計算手法はどうするか
 - 膨大な計算コストをどう下げるか
- マテリアルズ・インフォマティクスを始めとする情報科学の分野では、「欠陥が無く綺麗で、大量のデータ」が必要
 - しかしそのようなデータは、企業も研究所も持ち合わせていない
- 材料の基礎データが数多く揃っても「化学反応の世界は未知の部分が多い」
 - 材料Aと材料Bを組み合わせたとき、期待する材料Cをどのようにうまく作るか？

発表内容

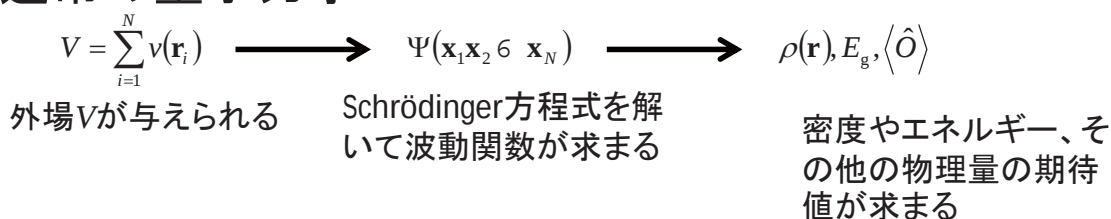
- マテリアルズ・インフォマティクスとは
- 第一原理計算とは
- 第一原理計算ソフトウェアAdvance/PHASEとは
- Advance/PHASEにおける
マテリアルズ・インフォマティクスへの展開

第一原理計算とは

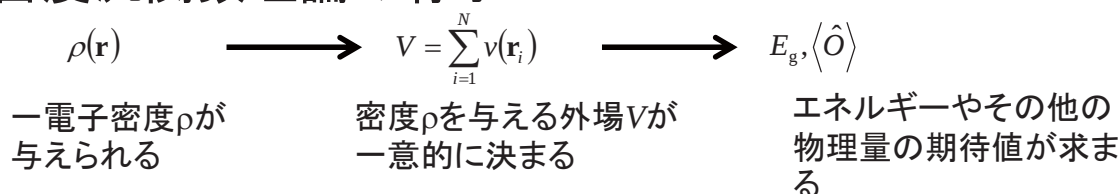
- 実験結果などの**経験的なパラメータを用いず**に、物理学の第一原理に基づき、物質の性質を**電子・原子レベル**で精密に解析する方法
 - 物理学の第一原理
 - 古典力学 ニュートン方程式
 - 電磁気学 マクスウェル方程式
 - 統計力学
 - 量子力学 シュレディンガー方程式
- 計算機上で、物質の電子状態をシミュレーション
 - 物質の性質を決定する要因や機構の理解
 - 未知物質の予測
 - より望ましい性質をもつ物質の設計

密度汎関数理論

通常量子力学



密度汎関数理論の骨子



すべての物理量は一電子密度 $\rho(\mathbf{r})$ の汎関数として与えられる

平面波基底

- 周期的に原子が並んだ固体中の電子の波動関数は、先に述べたブロッホの定理より

$$\begin{aligned}\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) &= u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \\ &= \sum_{\mathbf{G}} c_{\mathbf{k}+\mathbf{G}} \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \exp(i(\mathbf{k} + \mathbf{G})\cdot\mathbf{r})\end{aligned}$$

のように、平面波を基底関数として展開することができる。



カットオフ波数

- 展開に用いる逆格子点 $\mathbf{G}$ の数は原理的には無限であるが、計算機で計算するためにはある有限の数で打ち切らないといけない。
- 通常、 $\mathbf{k}+\mathbf{G}$ の大きさがカットオフ波数 $G_{\max}$ より小さい波数ベクトルで展開する。

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}}^{|{\mathbf{k}+\mathbf{G}}|\leq G_{\max}} c_{\mathbf{k}+\mathbf{G}} \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \exp(i(\mathbf{k} + \mathbf{G})\cdot\mathbf{r})$$

係数 $c_{\mathbf{k}+\mathbf{G}}$ は $\psi_{\mathbf{k}}$ のフーリエ変換である。

- $2\pi/G_{\max}$ は空間分解能に対応し、これより小さいスケールでの変化は記述できない。どのくらいの $G_{\max}$ が必要かは展開したい波動関数の変化が空間的にどれくらい急峻化に依存する。



発表内容

- マテリアルズ・インフォマティクスとは
- 第一原理計算とは
- 第一原理計算ソフトウェアAdvance/PHASEとは
- Advance/PHASEにおける
マテリアルズ・インフォマティクスへの展開

Advance/PHASEとは

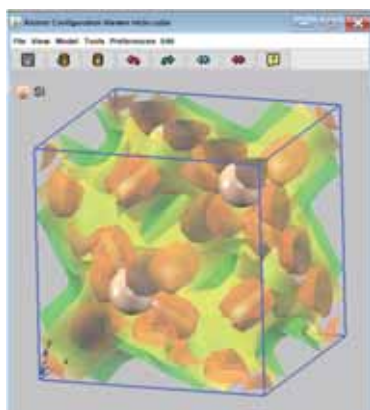
- Advance/PHASEで用いる基礎理論
 - 密度汎関数理論
 - Hohenberg-Kohnの定理
 - Kohn-Sham方程式
 - 平面波基底
 - 周期境界条件
 - Blochの定理
 - 第一原理擬ポテンシャル法
 - ノルム保存型
 - ウルトラスフト

Advance/PHASEとは

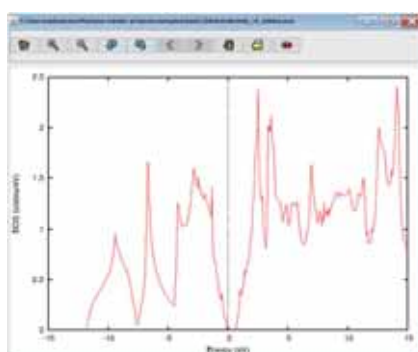
- 第一原理計算ソフトウェア
 - 計算ソルバー
 - phase : SCF計算などを行うメインエンジン
 - ekcal : 任意のk点での計算を行うエンジン
SCF計算で求めた価電子密度を利用
 - epsmain : 光学応答を計算するエンジン
SCF計算で求めた価電子密度を利用
 - グラフィカル・ユーザー・インターフェイス (GUI)
 - Phaseviewer付属

基本機能の出力例 GUI

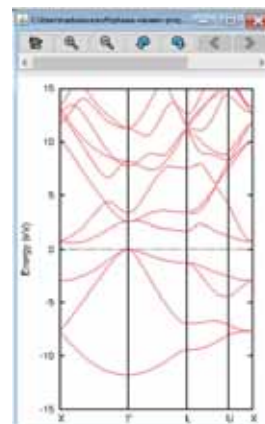
Si価電子密度分布



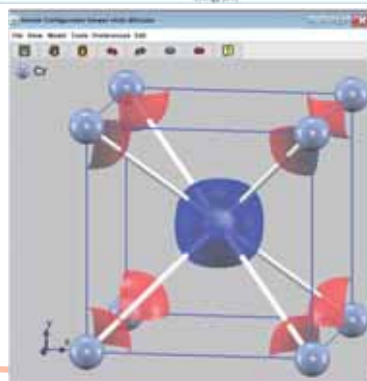
Si状態密度



Siバンド構造



Crスピン密度分布



Advance/PHASEとは

- 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

発表内容

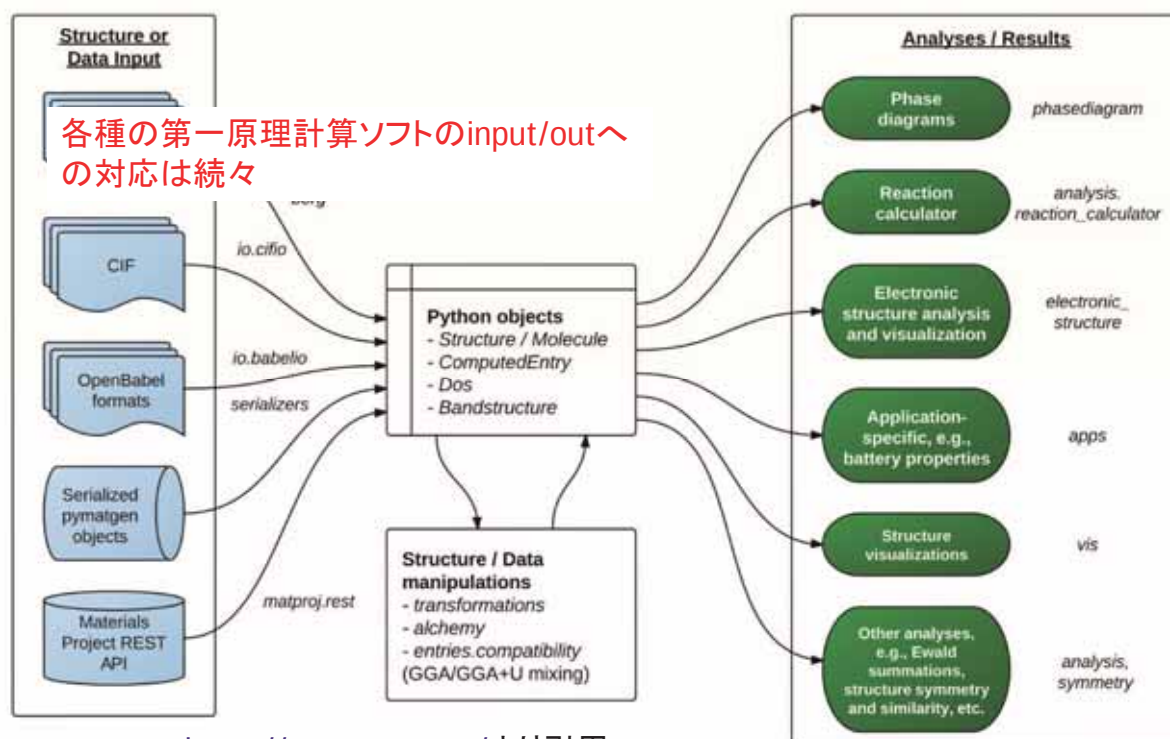
- マテリアルズ・インフォマティクスとは
- 第一原理計算とは
- 第一原理計算ソフトウェアAdvance/PHASEとは
- Advance/PHASEにおける
マテリアルズ・インフォマティクスへの展開

pymatgen概要 (pymatgen.org)

- Python Materials Genomicsの意味で、第一原理計算関連のMI分野で最も注目されるpython library
- Materials Project, Crystallography Open Databaseのデータベースに極めて簡単にアクセス
- 各種入力・出力・モデリング・解析機能
- GUIではないが、図の作成機能が豊富
- 責任者: Prof. Shyue Ping Ong ([Materials Virtual Lab](http://materials.vtl.stanford.edu/)), from 2011.
- 最新版は 2019.9.16で、python3のみに対応。

Copyright ©2020 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

pymatgenの機能



<https://pymatgen.org/>より引用

Copyright ©2020 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

PHASEとpython libraryの連携

(1) 第一原理計算関連のMI機能

- ① 主にGUIでMI関連機能をご利用頂く
- ② Python環境や整備した各種python scriptもご利用頂くので、PHASEスクールやconsultingサービスをご利用すれば、python scriptの**カスタマイズも可能**。

例：PHASEで計算したデータ + データベースのデータ取得でAIの学習データの作成

(2) 実験データとの比較機能: XRD計算

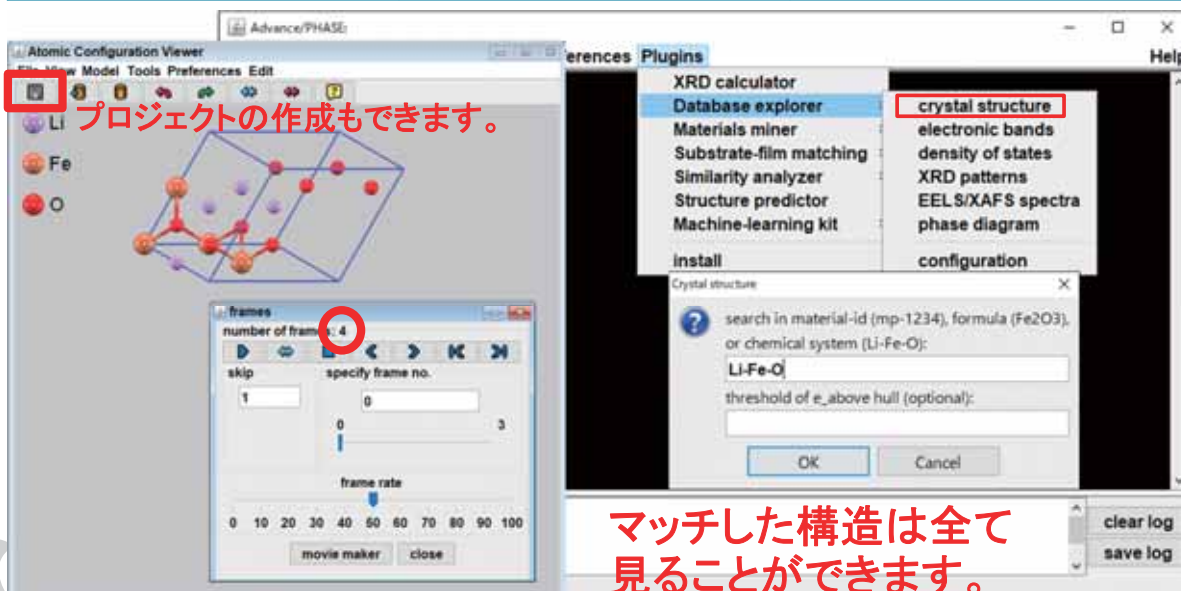
(3) 構造モデリング機能: 整合界面の簡単作成・計算 作成した構造からプロジェクトを自動生成

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

(※)画面は開発中のものです

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



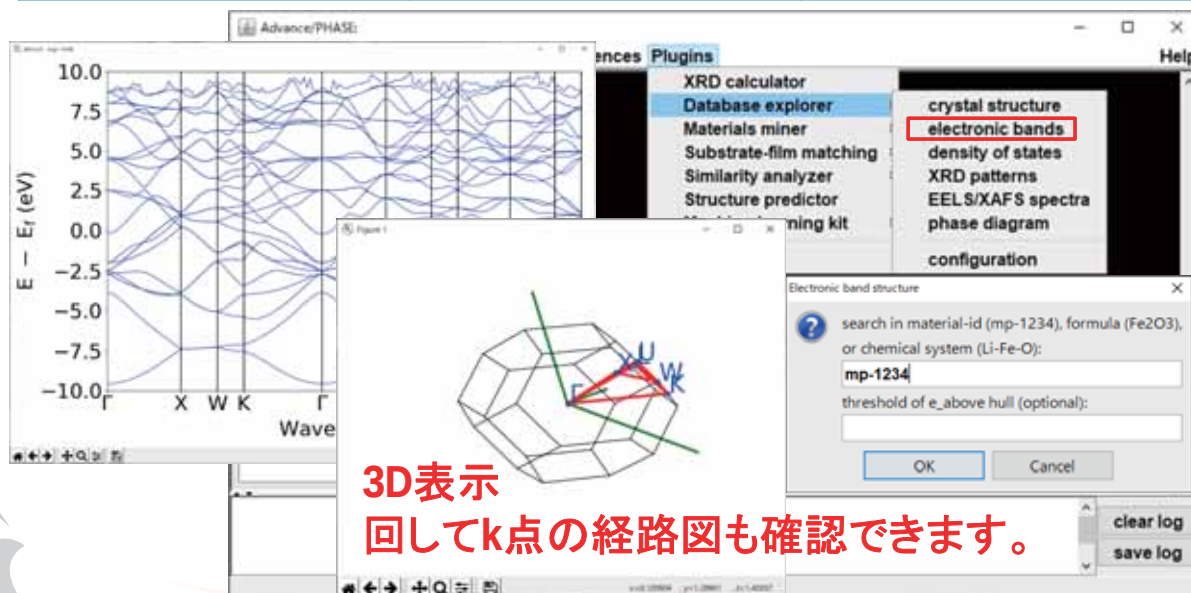
プロジェクトの作成もできます。

マッチした構造は全て
見ることができます。

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



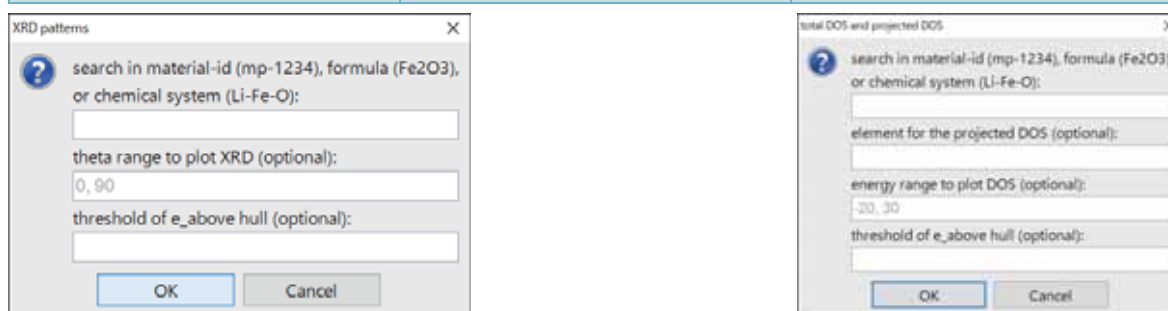
Copyright ©2020 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

21

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



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！

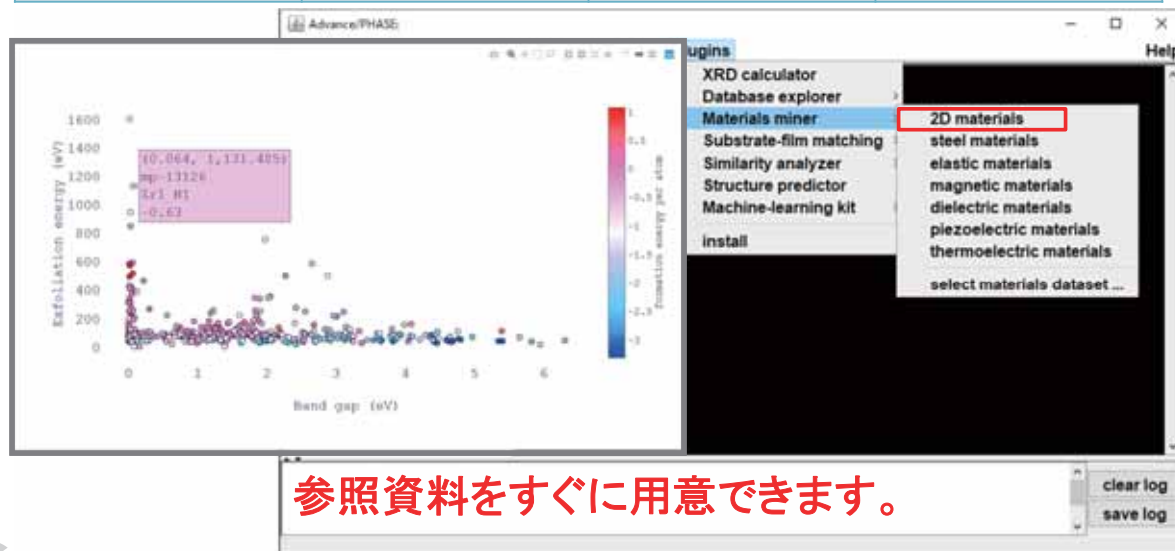
Copyright ©2020 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

22

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

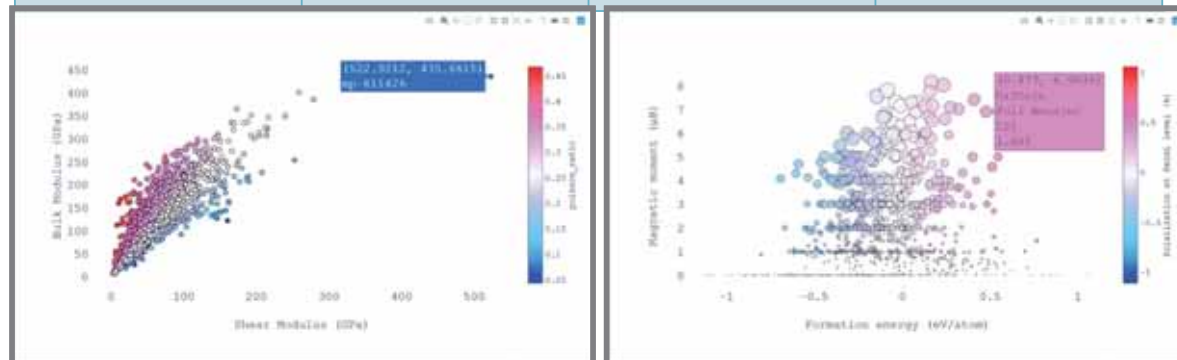


参照資料をすぐに用意できます。

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(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

Substrate finder: result

File

film structure: Au1, mp-81

sub_id	orient	sub_form	film_orient	area
mp-T029	1 0 -1	BaF2	1 0 -1	110.730690
mp-1029	1 1 -1	BaF2	1 1 -1	129.843227
mp-1029	1 1 0	BaF2	1 1 0	78.298409
mp-1029	1 1 1	BaF2	1 1 1	52.739883
mp-1138	1 0 -1	LiF	1 0 -1	12.303410
mp-1138	1 1 -1	LiF	1 1 -1	14.427025
mp-1138	1 1 0	LiF	1 1 0	8.898823
mp-1138	1 1 1	LiF	1 1 1	7.534269
mp-1143	0 0 1	Al2O3	1 1 1	135.816843
mp-1143	1 0 -1	Al2O3	1 1 0	113.097701
mp-1143	1 0 0	Al2O3	1 1 1	135.816843
mp-1143	1 0 1	Al2O3	1 0 -1	73.820460
mp-1143	1 1 0	Al2O3	1 0 -1	73.820460
mp-1143	1 1 1	Al2O3	1 0 -1	98.427280
mp-1156	1 0 -1	GaSb	1 0 -1	110.730690
mp-1156	1 1 -1	GaSb	1 1 -1	129.843227
mp-1156	1 1 0	GaSb	1 1 0	78.298409
mp-1156	1 1 1	GaSb	1 1 1	52.739883
mp-11714	0 0 1	SiC	1 1 1	97.945498

Substrate finder

the film structure (bulk)

☒ materials-id (mp-1234) ☐ local file

mp-81

choose

OK Cancel

clear log save log

データベースの構造を基にあり得る材料・面方位を表示

Copyright ©2020 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

25

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

Interface builder

the substrate structure (bulk)

☒ materials-id (mp-1234) ☐ local file

mp-149

choose

the film structure (bulk)

☒ materials-id (mp-1234) ☐ local file

mp-81

choose

miller indices of substrate (optional): 1, 0, 0

number of layers (optional):

substrate 3 film 3

OK Cancel

clear log save log

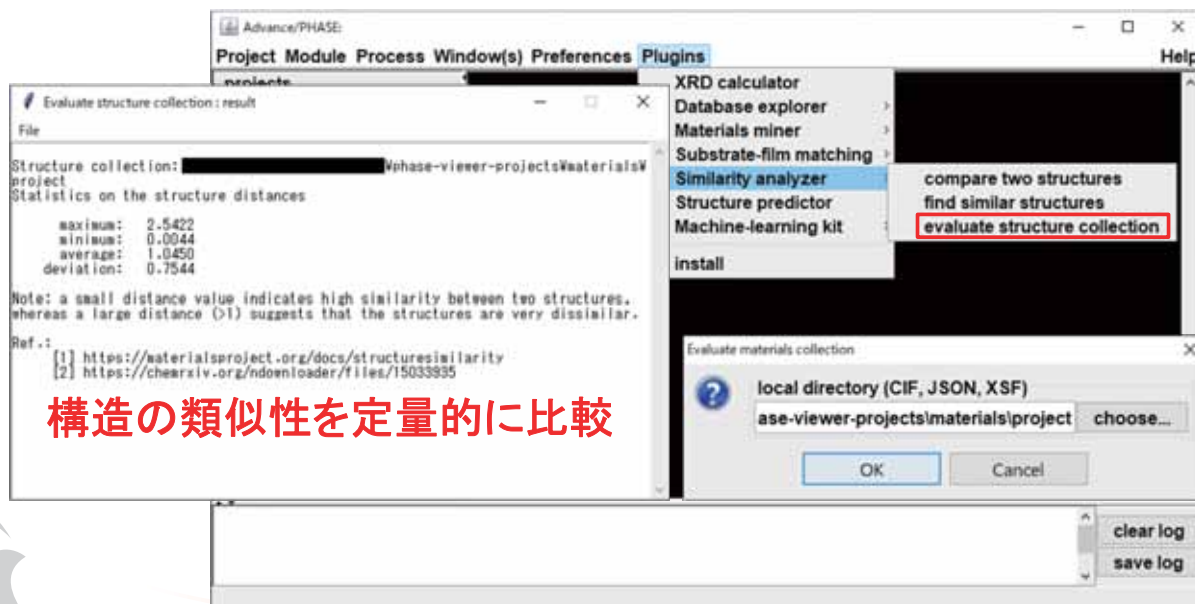
作るのが面倒な整合界面をさっと作れる!

Copyright ©2020 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

26

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

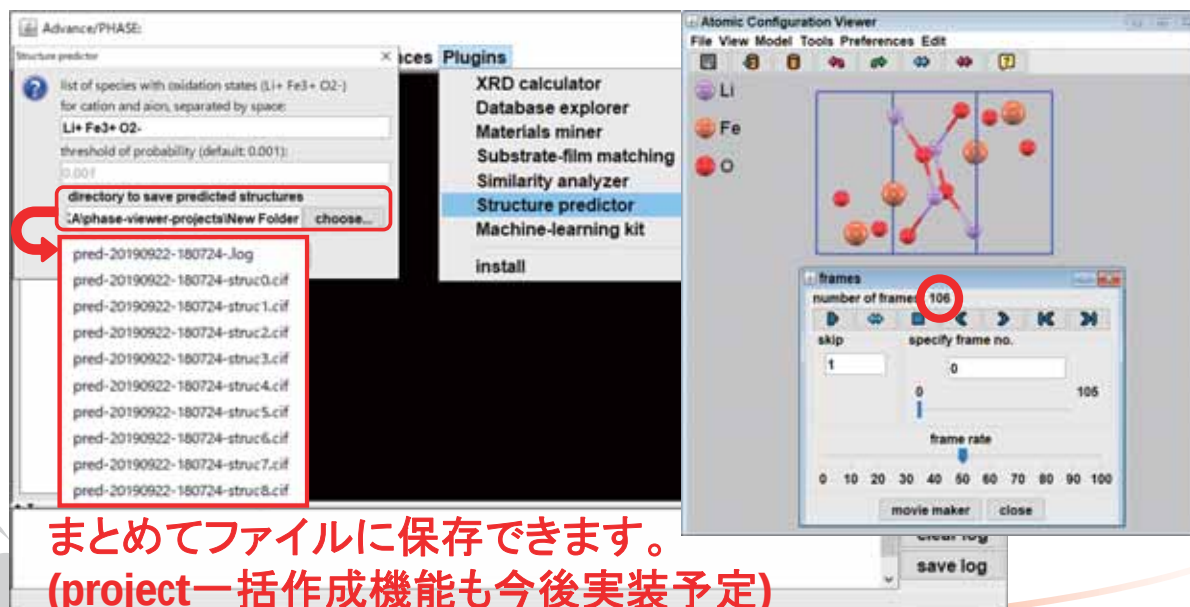


Copyright ©2020 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

27

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。

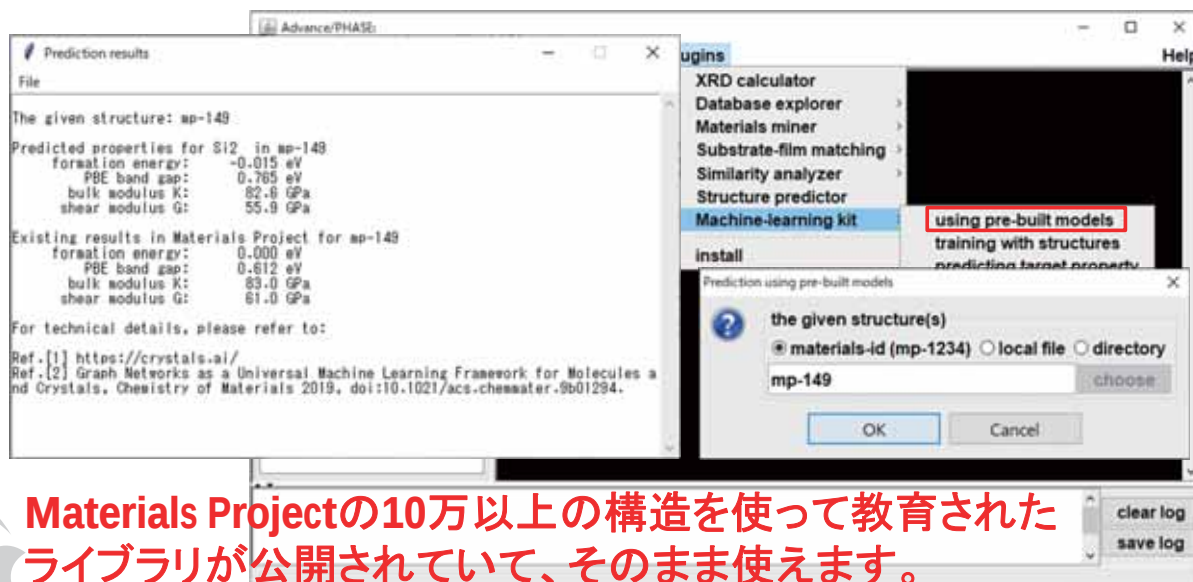


Copyright ©2020 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

28

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



AI事業および関連サービスのご紹介、質疑応答

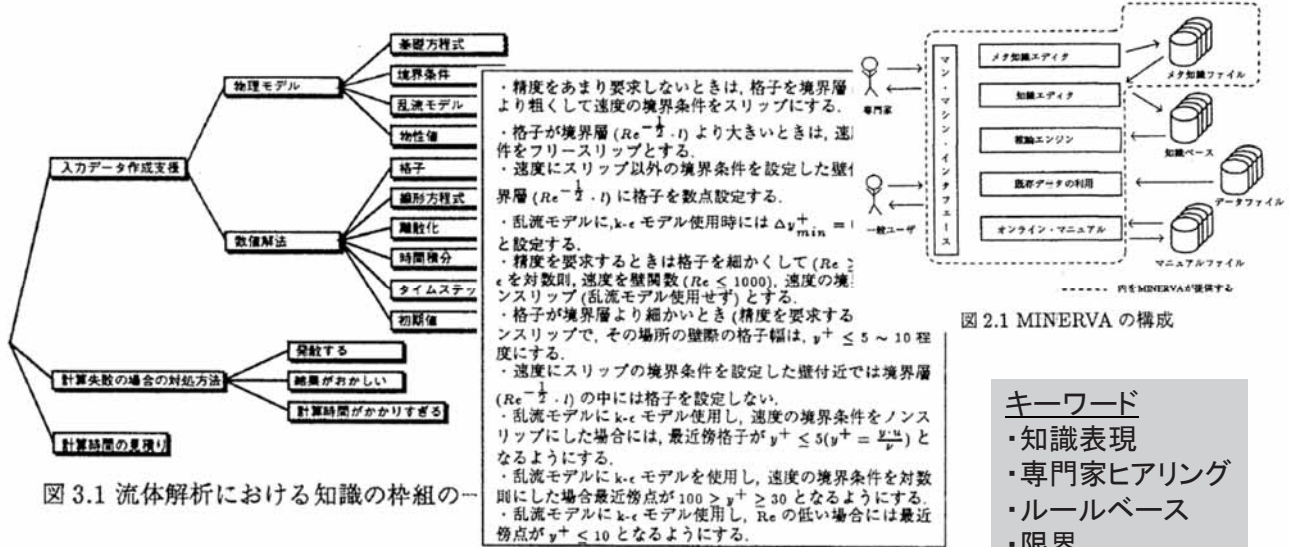
営業部 富塚 孝之

AI 技術セミナー
「CAE分野におけるAI技術適用可能性」
2020年1月24日（金）
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

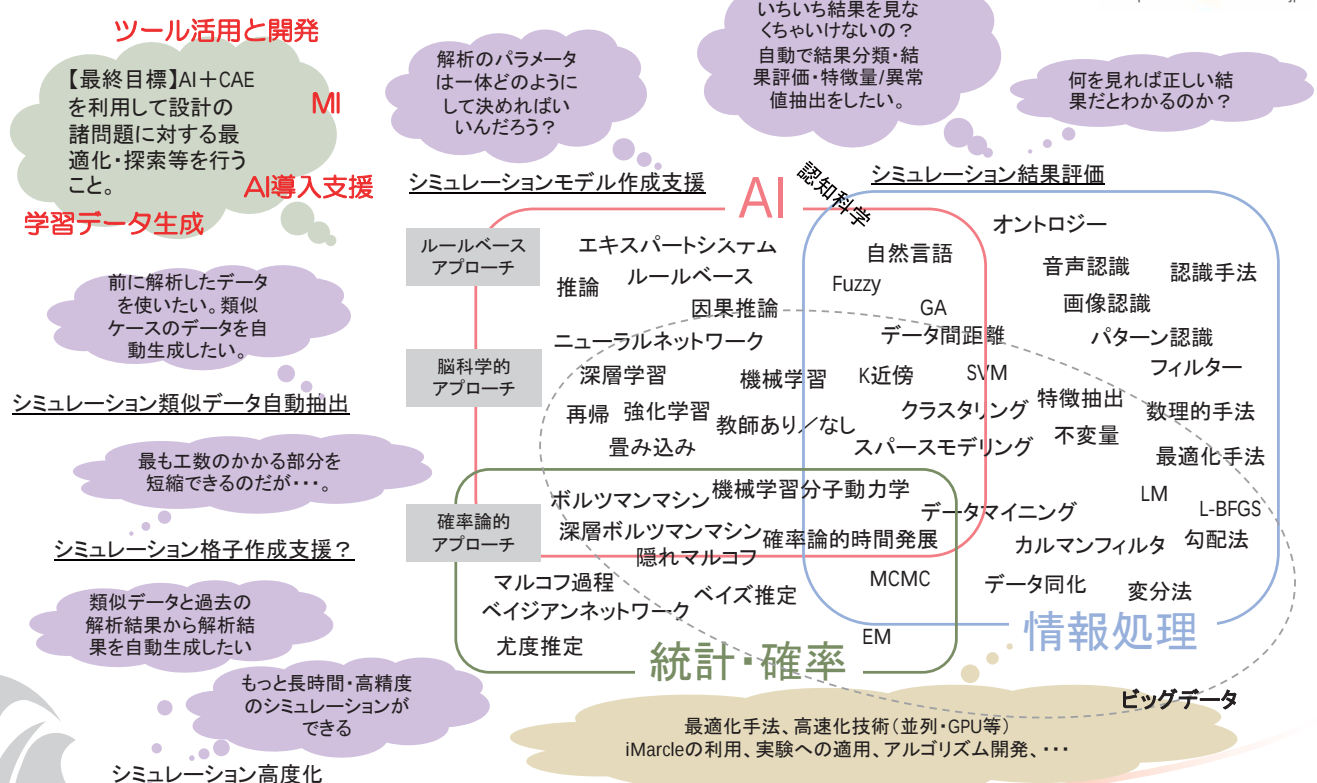
- CAEへのAIの応用について
- AIサービス・メニュー
 - AI導入のコンサルテーション
 - 深層学習用ツール Advance/iMacleの活用と開発
 - 精密な3Dモデル・シミュレーションによる学習（教師）データ生成
 - マテリアルズ・インフォマティクスへの対応
- 質疑応答

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 Fourm 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

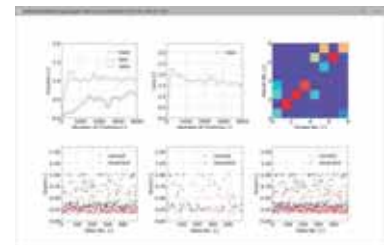
– 最小限度の機能に絞り込んだ、比較的軽いツール

– 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



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。