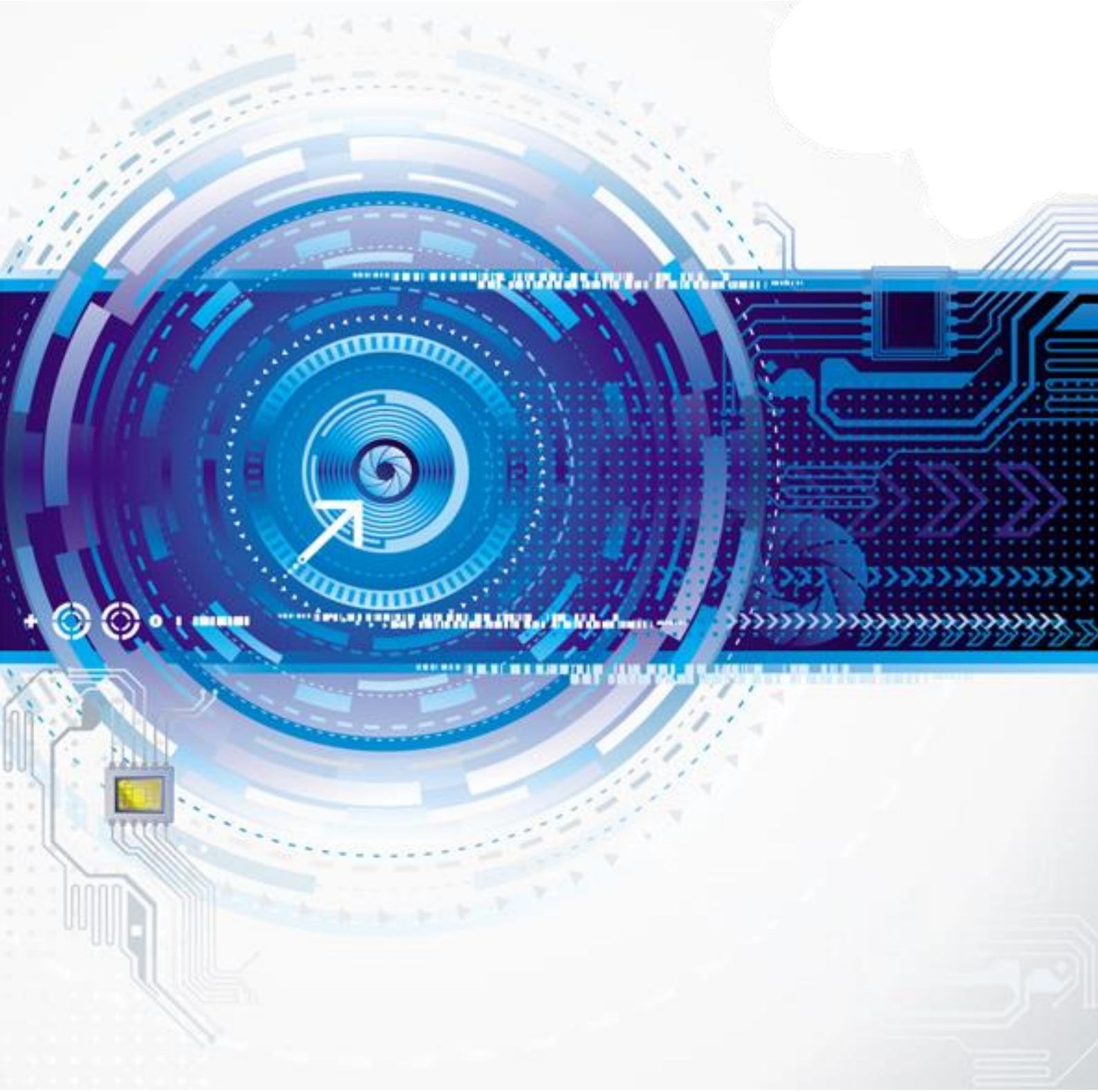
サイエンティフィック・システム研究会
Scientific Systems

ISSN 1883-5554

SS 研ニュースレター選集

vol.18



SS研ニュースレター選集 Vol.18 目次

「SS研ニュースレター選集」は、サイエンティフィック・システム研究会(SS研)の活動報告として、1年間の講演資料から代表的なものを選出して冊子としたものです。
毎年5月のSS研通常総会に合わせて発行しています。

(敬称略)

巻頭言

サイエンティフィック・システム研究会
会長　　松尾　裕一
(国立研究開発法人宇宙航空研究開発機構)

サイエンティフィック・システム研究会(SS 研)は、大学や研究所などの科学技術分野におけるコンピュータ利用機関を主体とした研究会として 1978 年に設立されました。以来 39 年間、会員の相互利益を図ることを目的に、各種の分科会や WG などの活動を通じて、コンピュータのシステム技術、応用技術、利用技術に関する質の高い情報共有・情報交換の場、ユーザとベンダー間の高度な議論の場としての役割を果たしてきています。これらのうち分科会活動の内容は『ニュースレター』で随時ご紹介しているところです。

この 1 年間の SS 研の活動を振り返ってみますと、本冊子の巻末の活動一覧にあります通り、分科会、WG、タスクフォースともいずれも時宜を得た企画であり、有益な講演やディスカッションを行うことができたと思います。その中でも特に会員の皆様のご参考となると思われる講演資料を、皆様からのアンケート結果を参考にしながら選び出したのが、この『ニュースレター選集』です。ビッグバンから 113 番元素ニホニウムまでの元素創成 138 億年にまつわる話題、大規模研究データの保管・配布におけるクラウド利用の課題と期待に関する話題、Moodle を用いた初学者用プログラミング環境やプログラミング学習環境 BitArrow 等の教育環境の話題、量子ダイナミクスの第一原理計算と光科学フロンティアへの展開、マテリアルズインフォマティクスの最前線、ヒト規模の脳神経回路シミュレーション等の科学技術計算の話題、人工知能はカンブリア爆発を起こすかという最新の人工知能の話題、等々、正に旬なテーマを反映した選集になっているかと存じます。

18 年の長きに渡り『ニュースレター選集』を発刊できたこと、今号第 18 巻を、皆様にお届けできることは大きな慶びでございます。2009 年発刊の第 9 巻からは、会員以外の方にも広くご覧頂けるようになりました。SS 研の活動成果を会員が活用されるのと同様に、会員外へも積極的に情報発信することによって広く社会に役立てるという方針の一環です。これもひとえに、活動に熱心にご参加頂いている会員の皆様および関係者の方々のご理解・ご協力によるものであります。ここに厚く感謝するとともに、この選集が広く活用されることを願って止みません。

2018 年 5 月

通	常	総	会		選	出
SS 研第 39 回通常総会 より						

ビッグバンから 113 番元素ニホニウムまで、元素創生の 138 億年

延與 秀人（理化学研究所）

ビックバンから
113番元素ニホニウムまで、
元素創成の138億年

理化学研究所
仁科加速器研究センター

延與　秀人
えんよ　ひでと

1


2017年3月14日　命名式典


$^{278}_{113}Nh$
Nihonium
RIBF サイクロペディア
RIBF CYCLOPEDIA
2016年　6月9日　ニホニウム
馳文科大臣、豊田政務官、松本和光市長　理研訪問

「元素ネイル」（©化学者イラストレーター旭天満）

水 兵 リーベ ぼ く の 船
H He Li Be B C N O F Ne

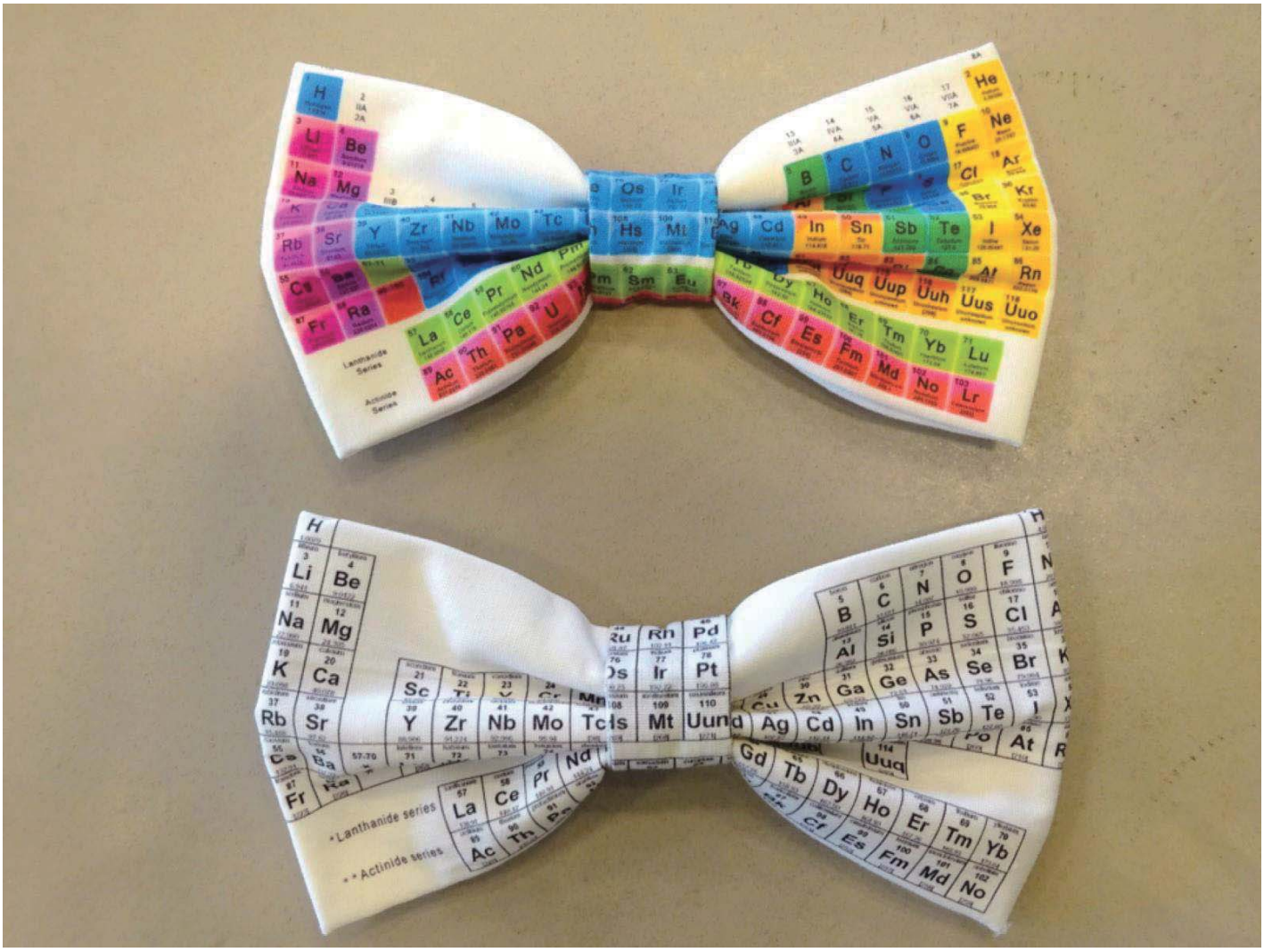
10元素
指10本

左手小指からつける。
左手中指と人差し指でVサインすると「LiBe」
右手中指と人差し指でVサインすると「NO」

ドイツ語
Liebe 愛
⇩
Li Be

6

「元素ネイルポストカード」 by 化学者イラストレーター旭天満さん
発行 日本化学会



2012年9月27日

2012年(平成24年)9月27日 木曜日 毎日新聞

113番目の新元素、認定か

理化学研究所のチームが2004年に発見を報告した新元素が、国際的に認定される可能性が高まった。再実験の結果、新元素の詳しい性質が明らかになり、発見の確度が高まったためだ。発見者と認定されればチームに命名権が与えられる。日本が発見した初の元素として、理研は「ジャポニウム」などの名を候補に挙げている。

新元素は原子番号が113で、113個の陽子を含む原子核を持つ。自然界には存在せず、理研の森田浩介准主任研究員らのチームは04年9月と05年、それぞれ一つずつ人工的に作って発見を報告した。ロシアと米国の共同チームも04年2月に発見を報告したが、成果を審査する国際専門委員会はいずれも「データ不足」として認定を見送っていた。

理研はその後、三つ目となる新元素を作って詳しく観測。崩壊して別の元素に変わる過程などをより詳しく調べ、論文とともに27日付の日本物理学会(陽子版)に発表した。データが増え、「113番目の新元素であることがほぼ証明された」とみている。

理研、実験で証明 ■ 命名権得れば日本初

審査する専門委は、化学国際機関「国際純正・応用連合」などが選ぶ5～6人者で構成される。委員の一中原弘道・東京都立大名誉は「データには高い信頼性がある。発見が承認される可能性高まったと言える」と話す。専門委は半年から1年かけて、結論を出す見通しだ。ノーベル化学賞を受賞した理研の野依良治理事長は「元素に命名権がつくことは、科学を目指す日本の若者を元気づけるうえでも大いに意義がある」と話している。(杉本崇、田中峻士)

毎日新聞 2012年(平成24年)9月27日(木) 28

「国、科学界の悲願」

理研チーム 成果に感無量

「日本発」元素 周期表に

「化学のバイブル」と呼ばれる元素周期表にメード・イン・ジャパンの名前を載せ、日本を元気にしたい——。10年かけて100兆回も原子同士を繰り返し衝突させるという途方もない努力を続けた理化学研究所のチーム。東日本大震災後は電力不足という逆境に直面したが、チームワークで「新元素発見」を決定付ける証拠をつかんだ。【河内敏康】

記者会見で理研の野依良治理事長は「我が国、科学界の悲願と言っても過言でない。初めての元素の命名権(獲得)に大きく近づいたと成果を強調した。

道のりは決して平たんではなかった。自然界に存在しない「超重元素」を人工的に作る実験を計画したのは20年以上前。原子を加速するための加速器を整備し、03年から113番目の元素を見つけるための実験を始めた。04年と05年に一つずつ見つけたが、その後は成果が途切れた。

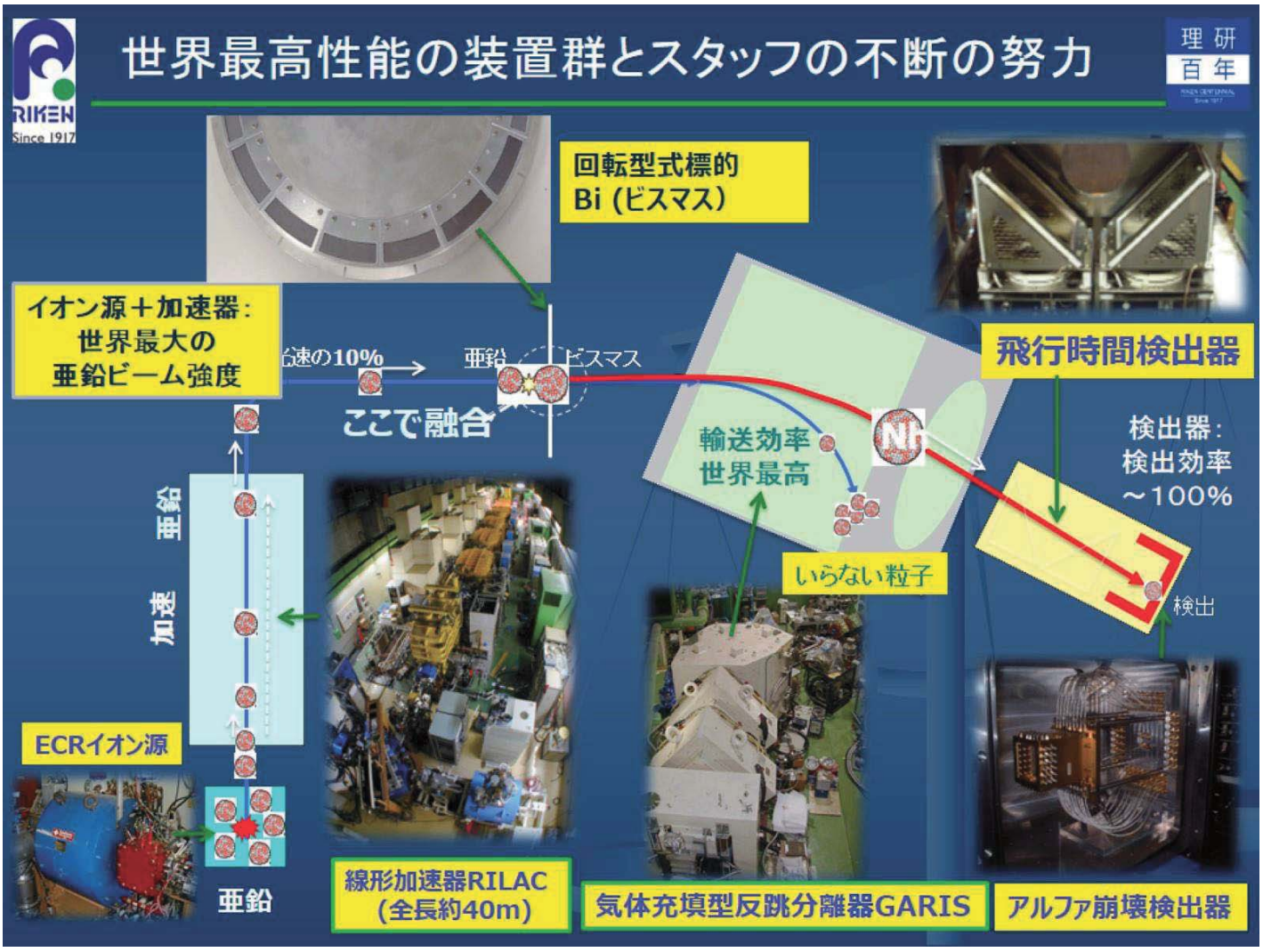
チームリーダーの森田浩介・准主任研究員(56)は(見つけたと)自信はあったが、これで結果が出なかったら打ち止めにしないといけないと覚悟していた。追い打ちをかけたのが原発事故による電力不足。加速器を使った実験は膨大な電気を使うため、他チームが先するなど協力した。

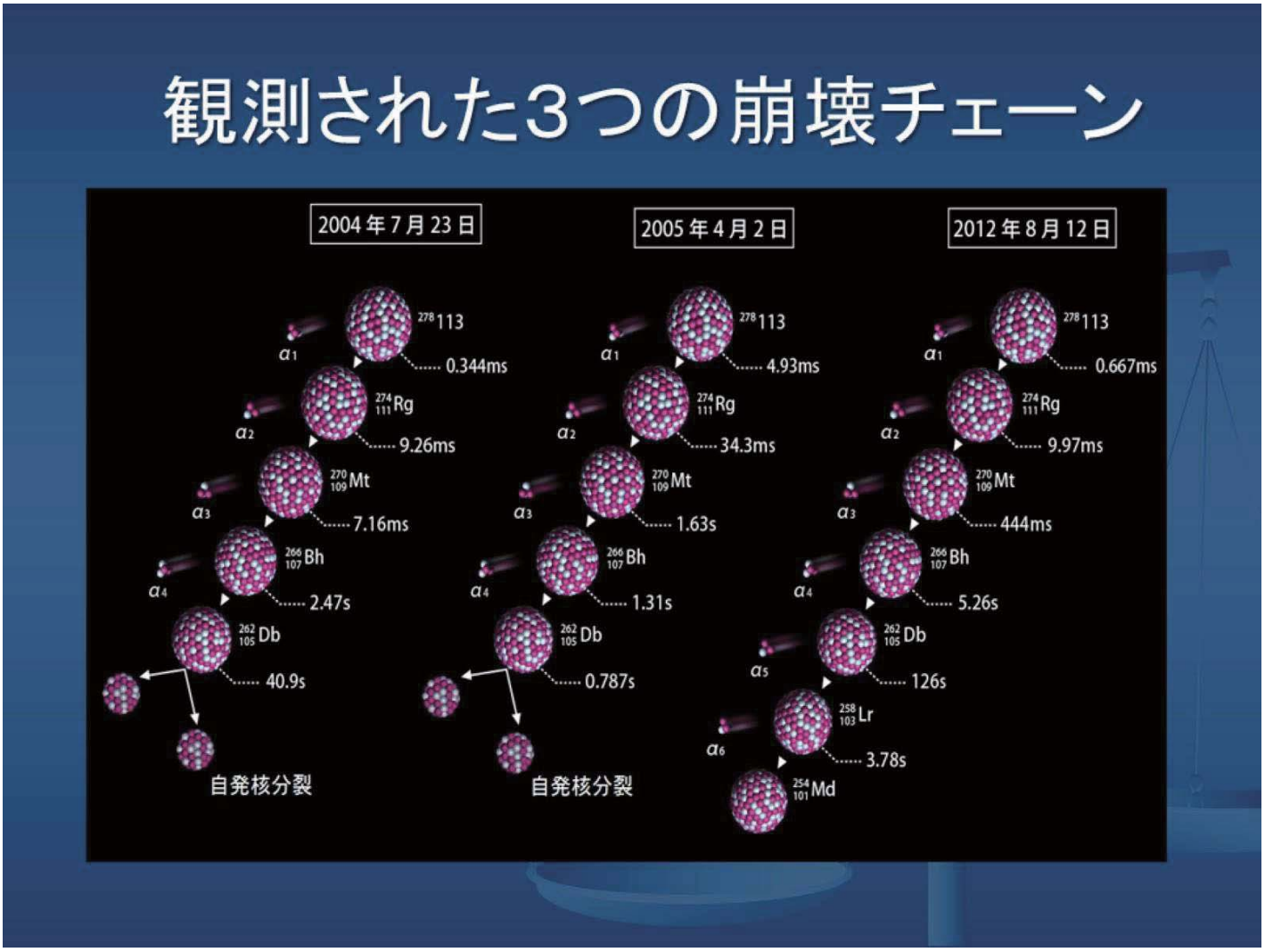
そんな中、朗報が飛び込んだ。今年8月18日、データ解析担当の大学院生が「それらしい兆候がある」と慌てて電話をかけてきた。「これまで発見した2個とは違うルートでの発見。死ぬほどうれしかった。今でも覚えが

笑顔で手を合わせる(左から)理化学研究所の野依良治理事長、仁科加速器研究センターの森田浩介准主任研究員、延與秀人センター長＝東京都千代田区で、木葉健二撮影

113番元素の合成・発見

「ニュートン」2006年10月号より


世界最高性能の装置群とスタッフの不断の努力
理研
百年
RIKEN
Since 1917
回転型式標的
Bi (ビスマス)
イオン源＋加速器：
世界最大の
亜鉛ビーム強度
亜鉛
ビスマス
ここで融合
輸送効率
世界最高
Nh
飛行時間検出器
検出器：
検出効率
～100%
いらない粒子
検出
亜鉛
加速
ECRイオン源
亜鉛
線形加速器RILAC
(全長約40m)
気体充填型反跳分離器GARIS
アルファ崩壊検出器

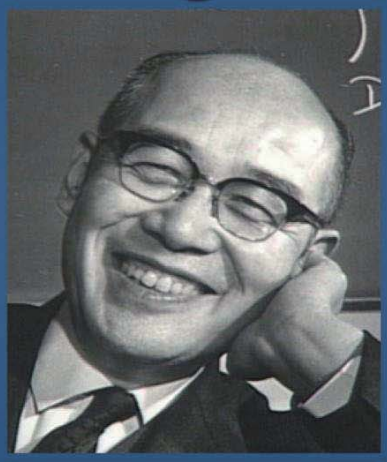

観測された3つの崩壊チェーン
2004年7月23日
2005年4月2日
2012年8月12日
278 113
0.344ms
4.93ms
0.667ms
274 111 Rg
9.26ms
34.3ms
9.97ms
270 109 Mt
7.16ms
1.63s
444ms
266 107 Bh
2.47s
1.31s
5.26s
262 105 Db
40.9s
0.787s
126s
258 103 Lr
3.78s
254 101 Md
自発核分裂
自発核分裂


東京から富士山の頂上のグリーンに
パターで入れる感じ
下手な鉄砲、数打ちゃあたる
加速器の役目
15


加速器三態
チュロス型
パンケーキ型
ドーナツ型
リニアック
サイクロトロン
シンクロトロン
16

問題：このひとは誰でしょう

①



湯川秀樹

②

朝永振一郎

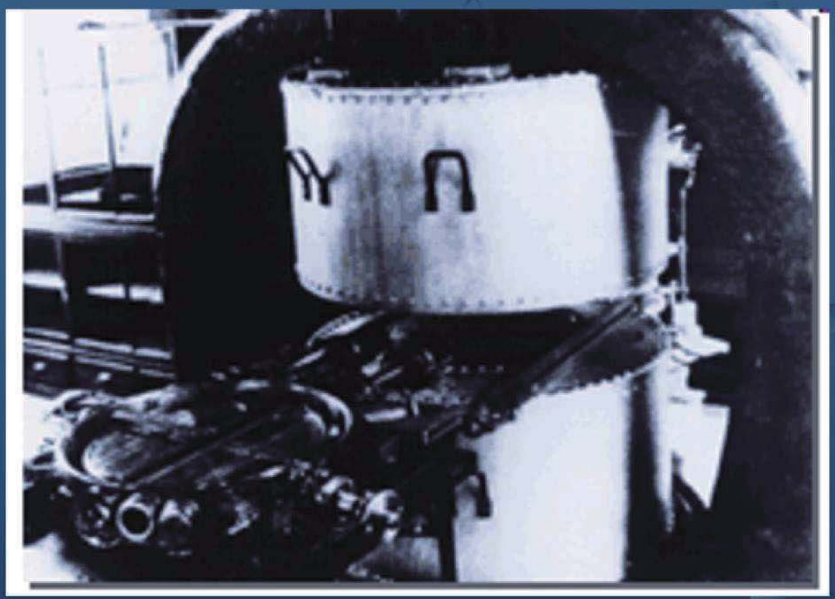
③

仁科芳雄
日本物理学の父

17

日本で最初のサイクロトロン
1937年　理研・仁科研究室にて稼働

粒子を加速する装置：加速器



18

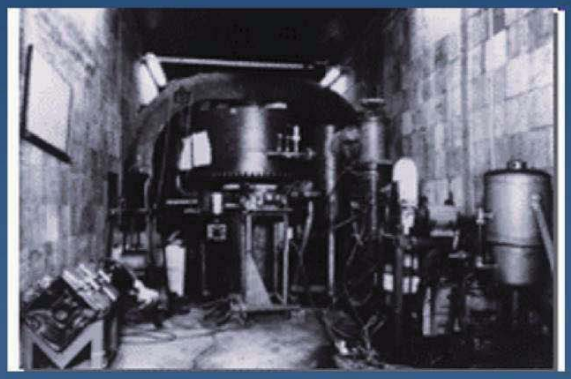
悲劇: 米軍による解体、海中投棄

大阪でも

京都でも

20

負けないで　もうすこし　最後まで走りぬけて～♪



3号サイクロトロン
戦後、1号の部品を再利用して建設
今は理研旧キャンパスのモニュメント

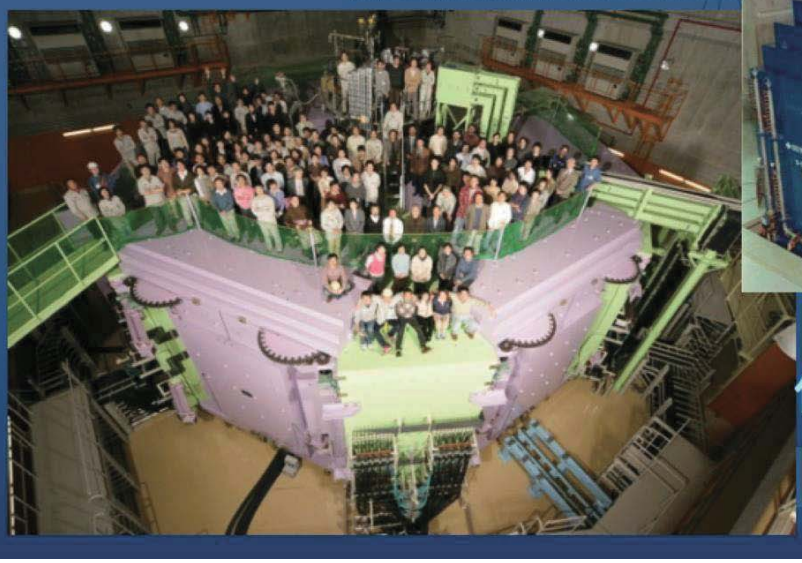
4号サイクロトロン
1966年完成
今は理研和光キャンパスのモニュメント

21

第2号サイクロトロン。1944年完成。中央に仁科芳雄。
現住所は東京湾海底。

第4号サイクロトロン。1966年完成。
現在は理研和光のモニュメントに。

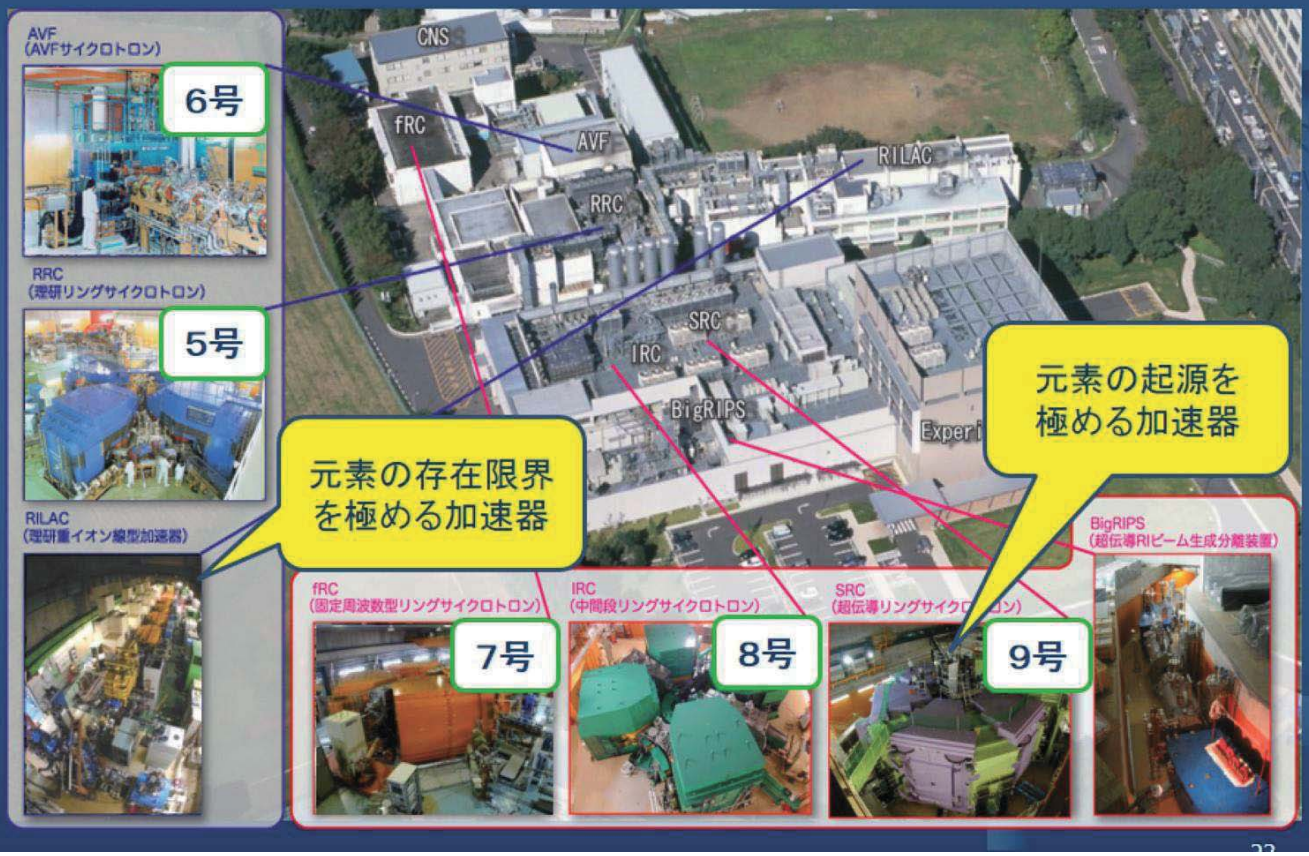
第5号リングサイクロトロン
1986年から稼動。現役



仁科の夢、ここにかなう

第9号、新造・超伝導リングサイクロトロン。
2006年12月稼働開始。8000トン。22

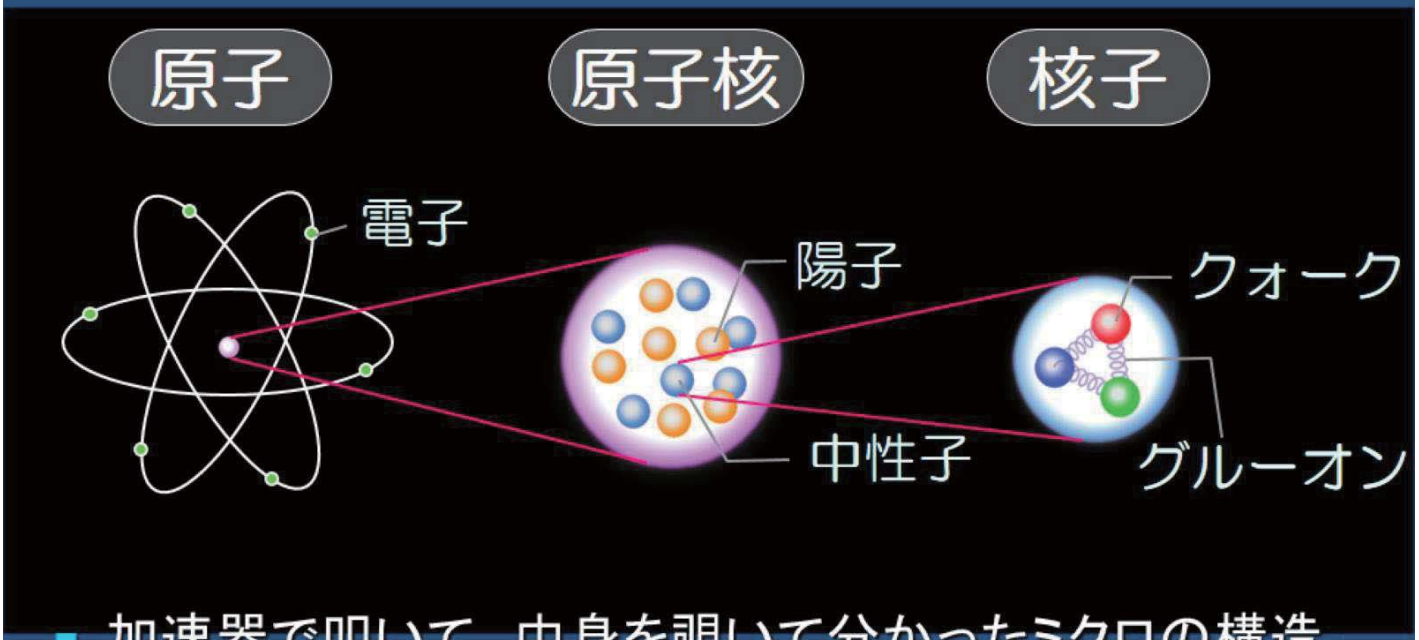
RIビーム・ファクトリー （理研和光）
重い元素の加速では世界最強最大



Why
do we need
such big machines ?

24

物質の起源ー ミクロの世界へ ー



- 加速器で叩いて、中身を覗いて分かったミクロの構造。
- 138億年前と言われるビッグバンから始まって素粒子から我々の世界が組みあがって来た、その過程は？

25

わたしたちはなぜ重いか？

食べ過ぎて太ったせい

だけ？

ではありません

南部陽一郎さんがみつけた
「自発的対称性の破れ」

26

$$E = mc^2$$

27

"Fiat lux!"

初めに、神は天地を創造された。
地は混沌であって、闇が深淵の面にあり
、神 の霊が水の面を動いていた。
神は言われた。「光あれ。」

こうして、光があった。

BIG BANG

George Gamow

28

ところがどっこい、光は止まれない

質量が無いと止まれない⇒物質はできない！

- 光は（静止）質量を持たないが、エネルギーは持つ。
- 質量は、エネルギーを何とか閉じ込め、止まれるようにしたもの
- 閉じ込めるもの

  ＝　力（フォース）

  - フォースの御加護がありますように
  - May the force be with you

29

クォークは単独で居られない

- クォークは核子や中間子の中に閉じ込められてしまう

中間子

引っぱる

ぷちっ

あれ？

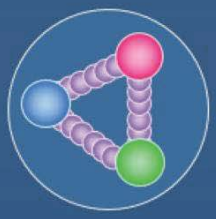
磁石

ぽきっ

30

もともと光みたいに質量をほとんど持たない
クォークが「強い力」で集まって陽子や中性子を
ときに残りの99%の質量を「閉じ込める」

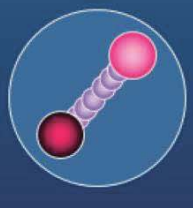
- 陽子や中性子



3つクォーク

クォークを繋ぐグルーオン

- 中間子



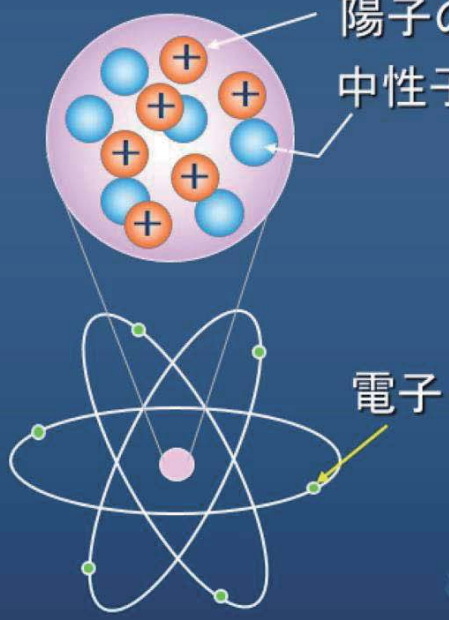
クォークと反クォーク

次は原子核の世界へ
・・・元素の種・・・

陽子と中性子は揃った

原子核ってなあに？

- 陽子や中性子でできている



陽子の数：6個は炭素という元素を決める

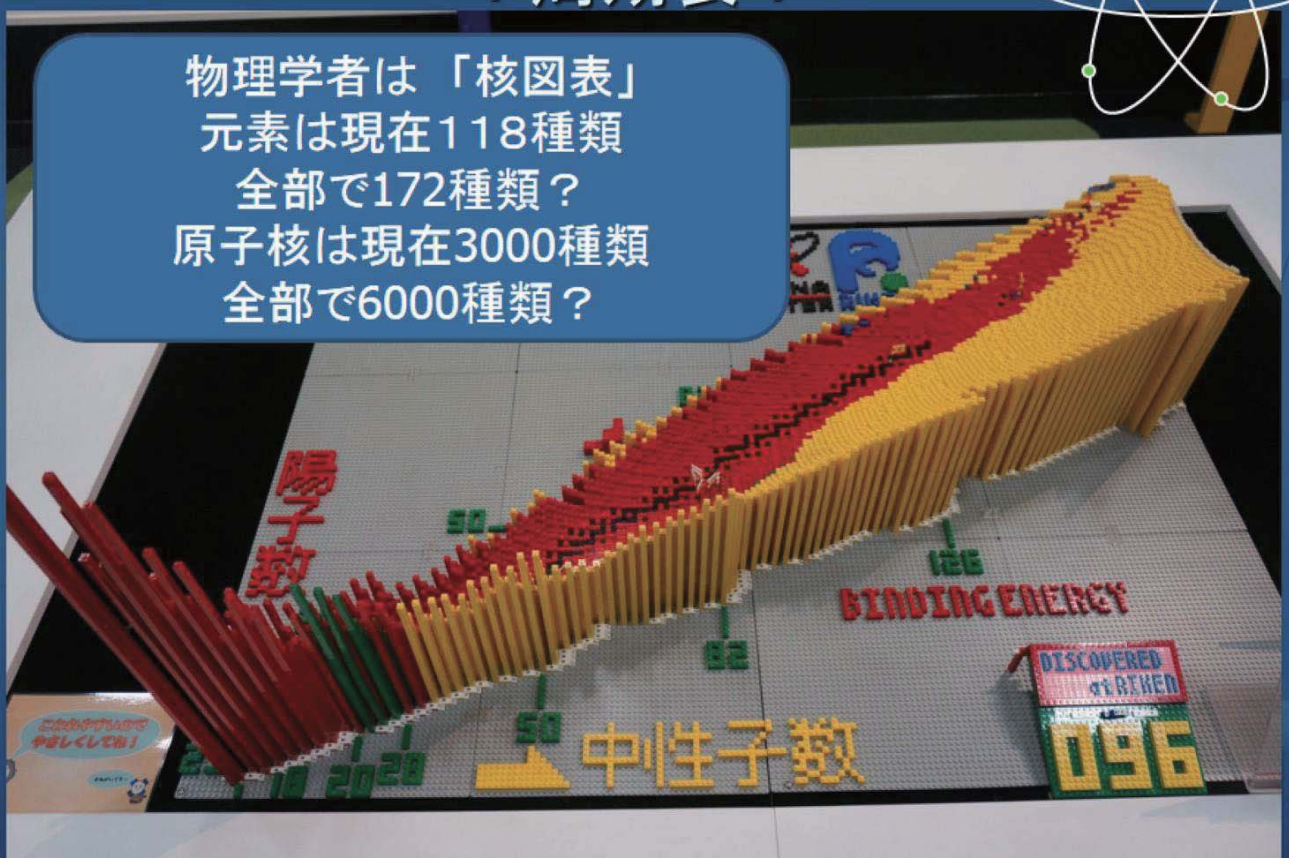
中性子の数：6個だと安定な原子核

陽子や中性子という粒子を総称して
核子と呼ぶ。

6個の電子で電気的に中性になる
（化学的には陽子の数が重要）
中性子の数は色々違ってもよい。

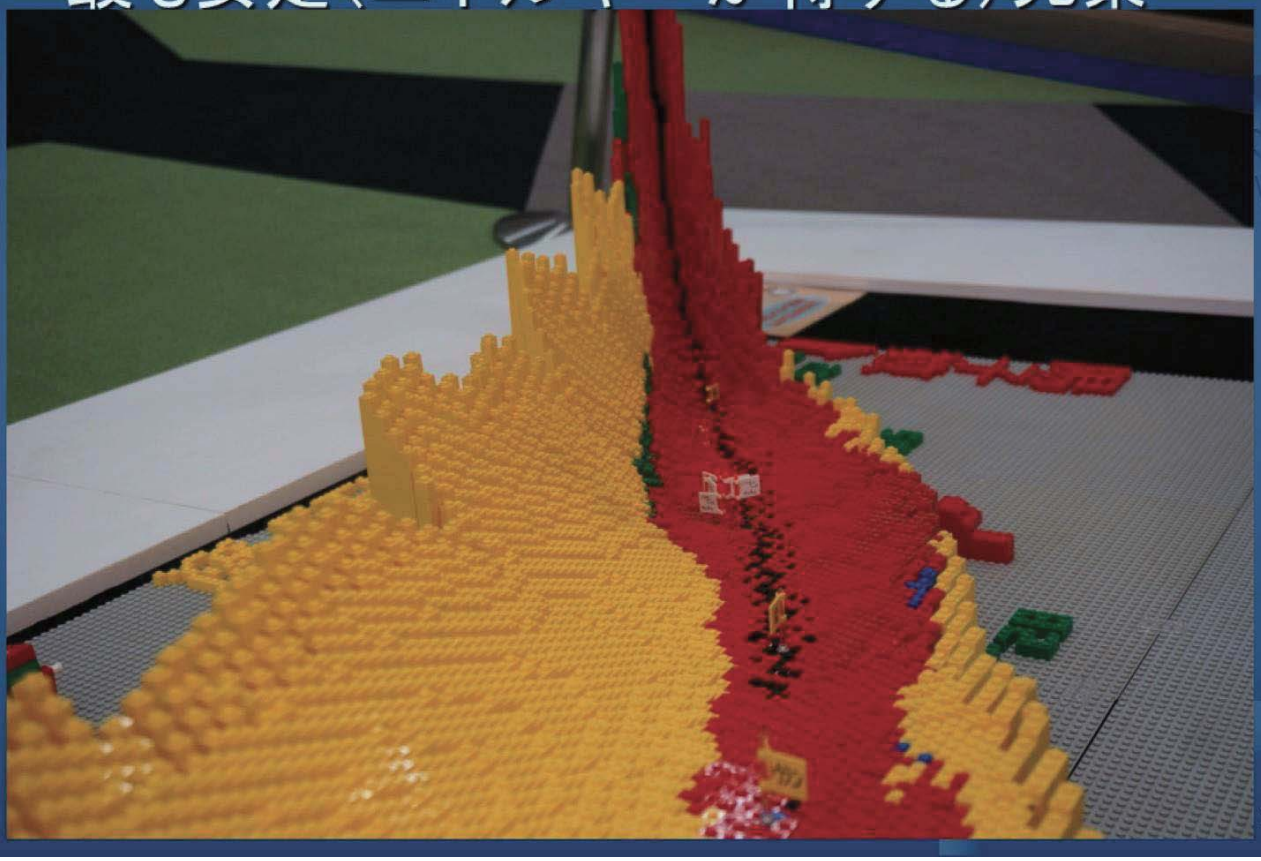
33

元素の種類と性質は陽子の数で決まってる
！周期表！



34

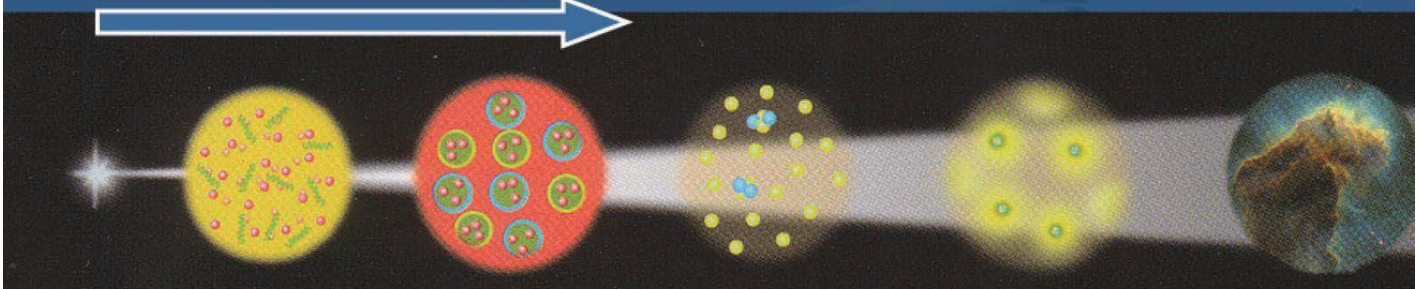
自然は鉄になりたがる，最も安定（エネルギーが得する）元素



35

宇宙初期

- 138億年の最初のたった100万分の1秒



Big Bang	quark-gluon plasma	proton and neutron formation	formation of low-mass nuclei	formation of neutral atoms	star formation
Temperature of universe	> a trillion °C	one trillion °C	one billion °C	4,000 °C	≈ -240 °C
Time after Big Bang	0.000001 second	0.0001 second	3 minutes	400,000 years	> one billion years

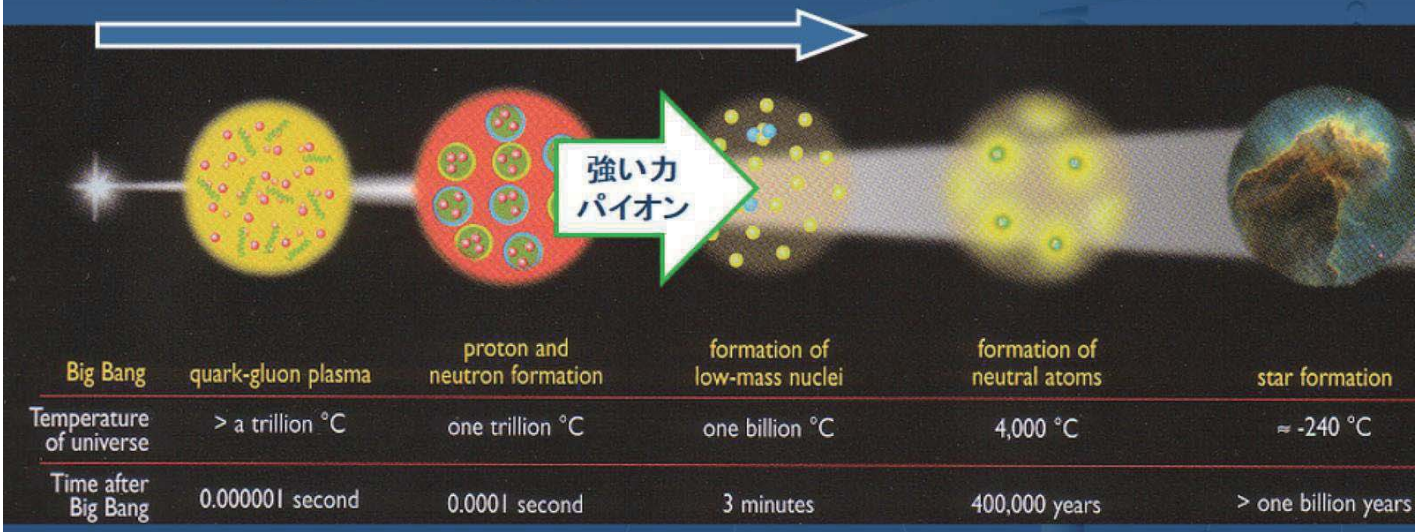
ビッグバン　陽子・中性子の形成

クォークやグルオン

36

宇宙初期

- 138億年の最初のたった3分



ビッグバン　陽子・中性子の形成

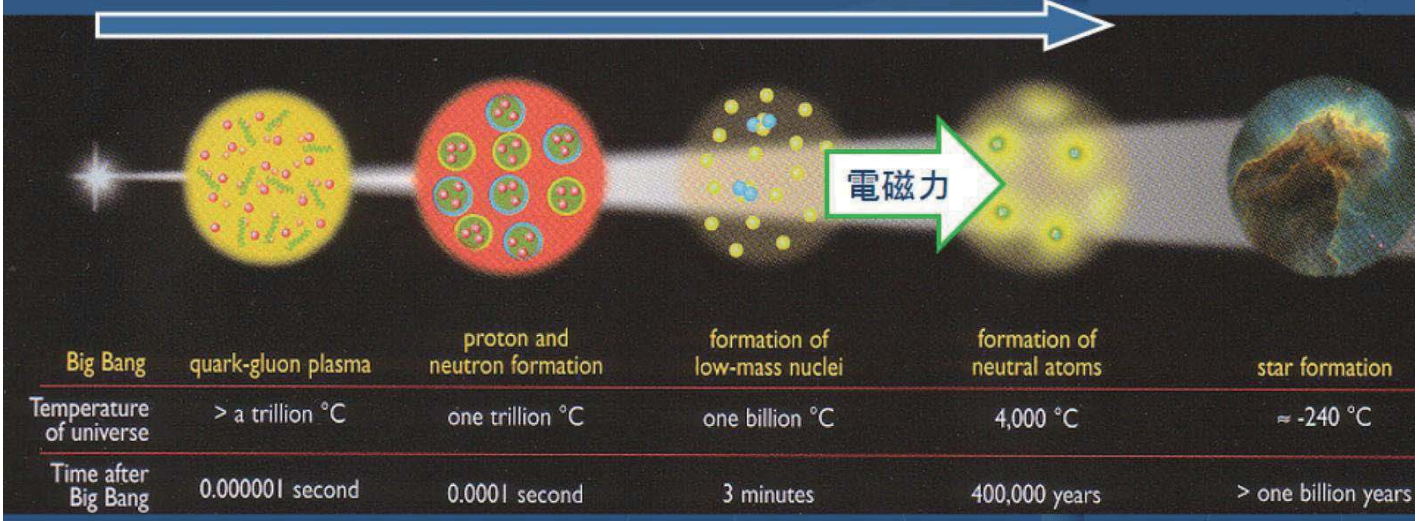
クォークや
グルオン

小さい原子核

37

中性原子の登場

- 138億年の最初の40万年



ビッグバン　陽子・中性子の形成　軽い原子

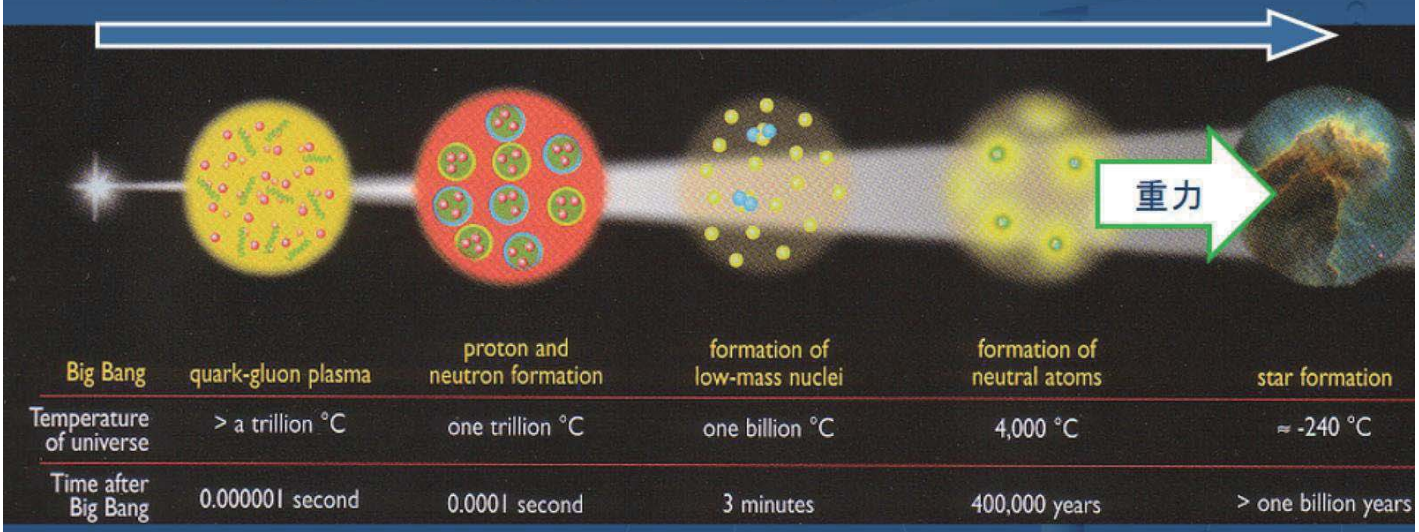
クォークや
グルオン

小さい原子核

38

星の登場

- 138億年の最初の10億年

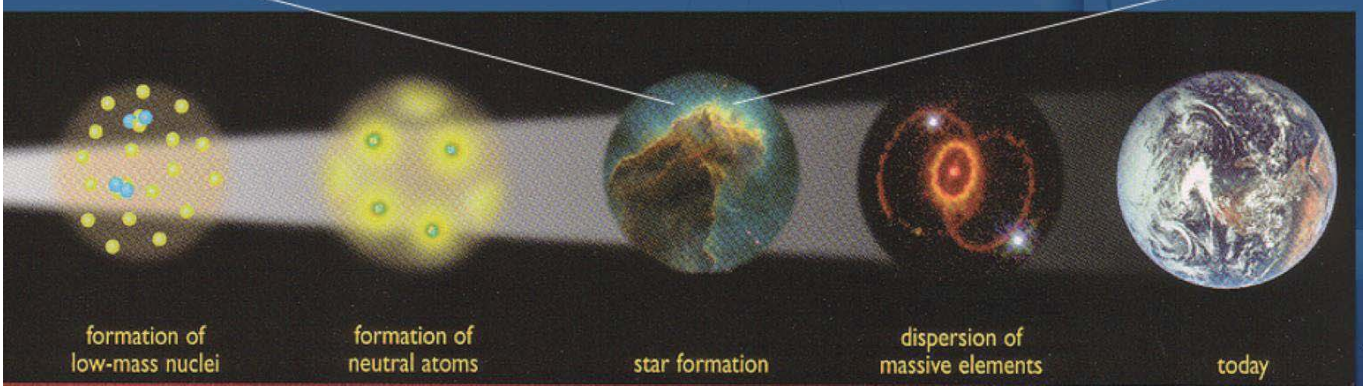


ビッグバン　クォークやグルオン　陽子・中性子の形成　小さい原子核　軽い原子　星

39

星の中でゆっくり進む元素合成

- 核融合のエネルギーで星が輝き始める



40

自然は鉄になりたがる，
最も安定（エネルギーが得する）元素

41

じゃーこれで生命も出来るの？
金、銀、ウラニ

ビッグバンと星の成長で出来る元素

超新星爆発で出来る元素

43

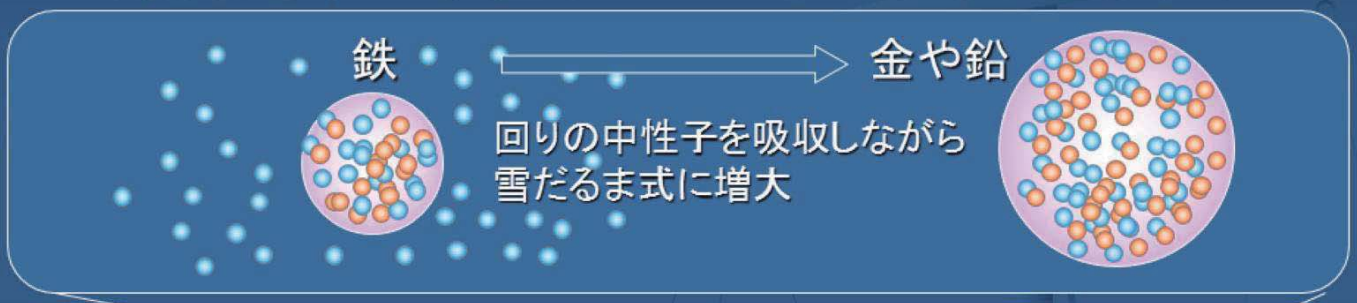
またもや ドカンと超新星爆発
中性子性合体という説もある

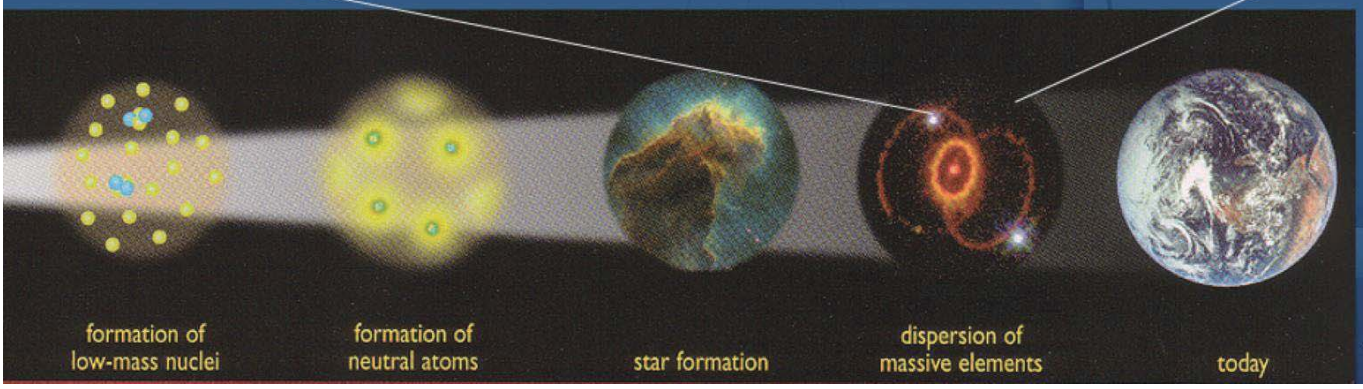
ケプラーの超新星 (SN 1604) の超新星残骸。スピッツァー宇宙望遠鏡、ハッブル宇宙望遠鏡およびチャンドラX線天文台による画像の合成画像。

44

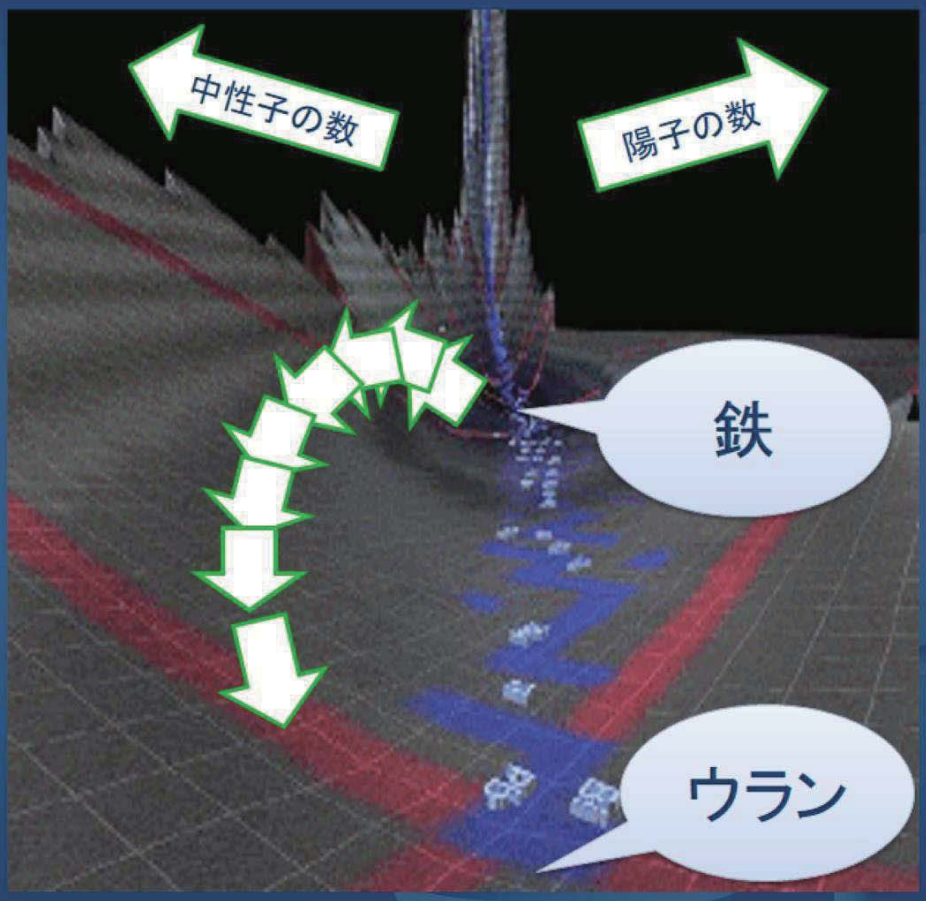
超新星爆発中で高速に進む元素合成

- 爆発途中で中性子がたくさんいるような状況





45



46

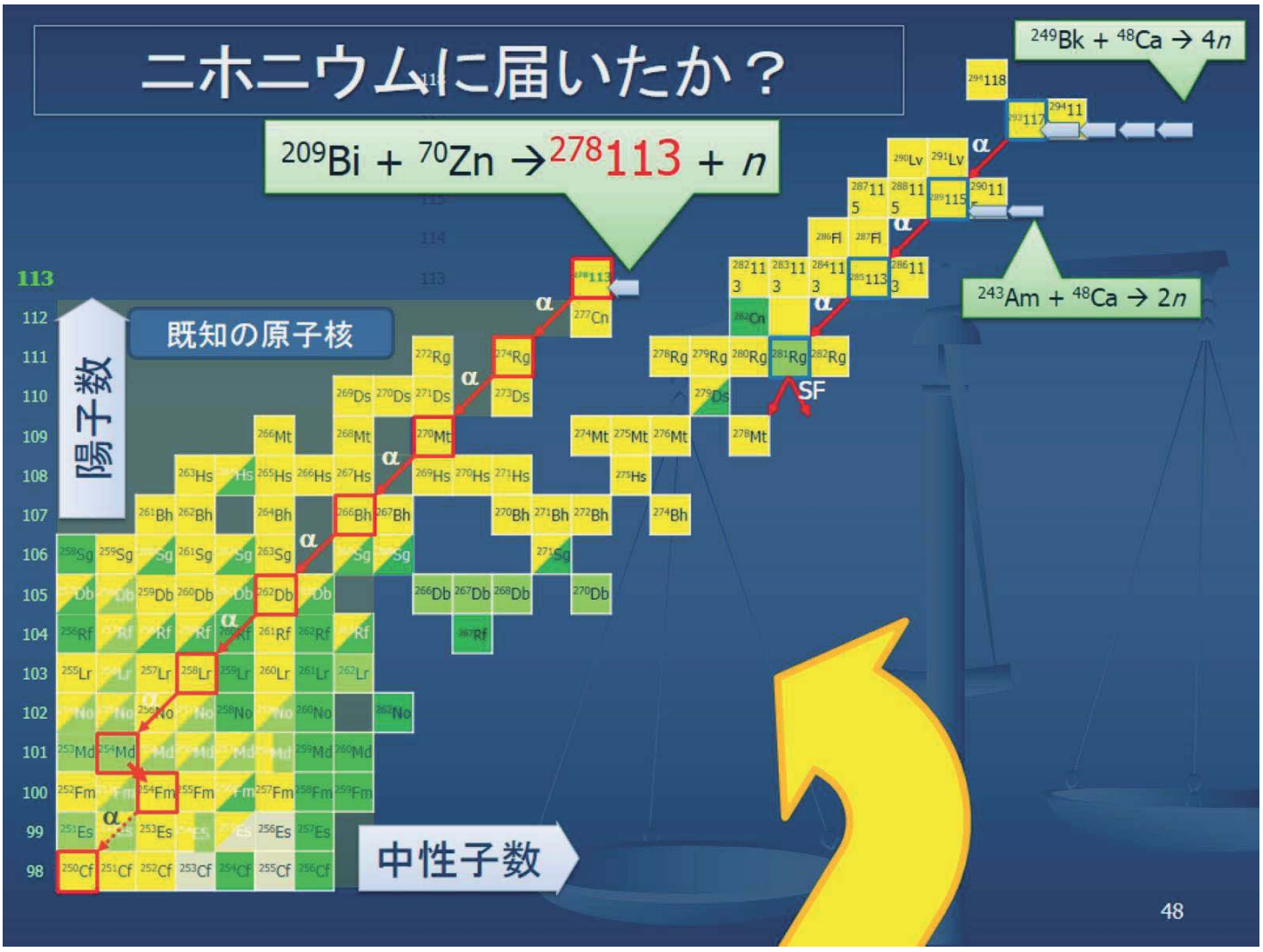
なんで全部が「鉄」にならないのでしょう

- 安定な原子核の落とし穴に落ちる
- 崩壊できなくなる（原子核構造が離散的なため）
- 鉛208が安定で最も重い
- ビスマス209は2×10^{19}年
- ウラン238は44×10^{8}年

宇宙の年齢は137×10^{8}年
寿命の短いものは消えちゃった

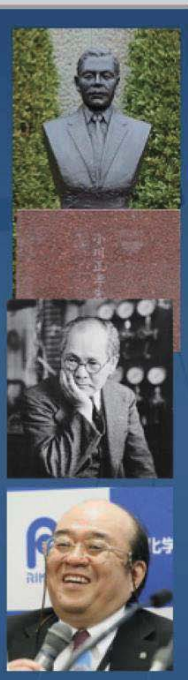
47

ニホニウムに届いたか？



48

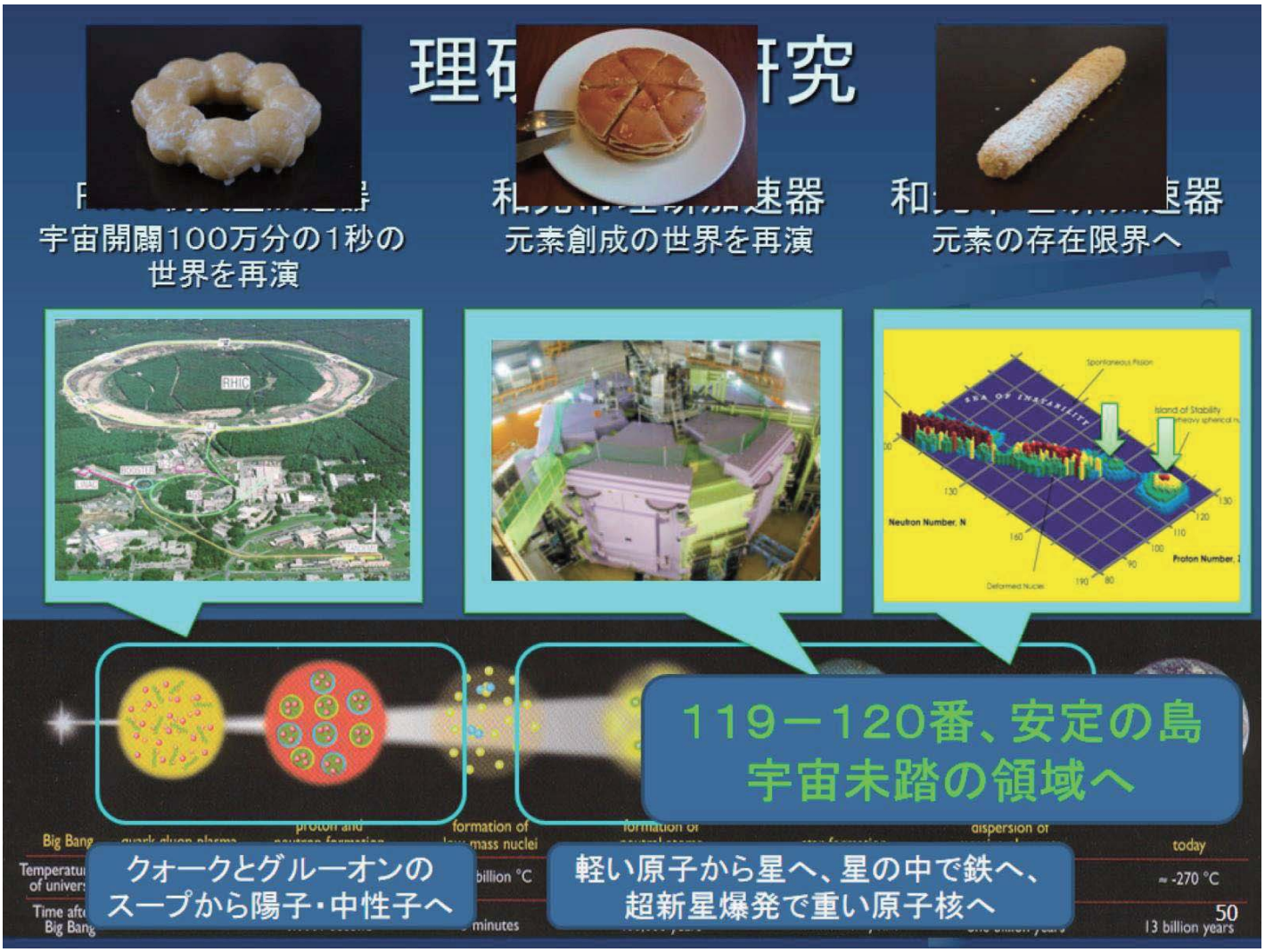
^{113}Nh, ニホニウム　トリビア



- 1908年、東北大学教授・小川正孝は43元素を発見、ニッポニウム（Np)となずけました。昔の周期表にはニッポニウムが載っていた。
- ところが、43番元素は、不安定で天然には存在しなかった。小川の見つけたのは、75番元素だった。レニウム(Re)と後に名付けられる。
- 43番元素は、テクネシウム(Tc)と後に名付けられた
- 1940年に理研の仁科芳雄は93番元素の作り出すことに成功するも、化学的な分離・同定ができずに命名権を逃す。
- 93番元素はネプツニウム(Np !!!)と名付けられる。
- 名前、ニッポニウムと記号Npはもう使えない。
- 過去の先達に思いをはせ、
- 「ニホニウム」と名付けた。

	name		symbol	
1	ジャポニウム	○	Jp	○
2	ニッポニウム	×	Np	×
3	ニホニウム	○	Nh	○

49


宇宙開闢100万分の1秒の
世界を再演
元素創成の世界を再演
元素の存在限界へ
RHIC
Neutron Number, N
Proton Number, Z
119－120番、安定の島
宇宙未踏の領域へ
クォークとグルーオンの
スープから陽子・中性子へ
軽い原子から星へ、星の中で鉄へ、
超新星爆発で重い原子核へ
Big Bang
today
≈ -270 °C
13 billion years

大規模研究データの保管・配布における クラウド利用の課題と期待

藤田 直行（宇宙航空研究開発機構）

大規模研究データの保管・配布における クラウド利用の課題と期待

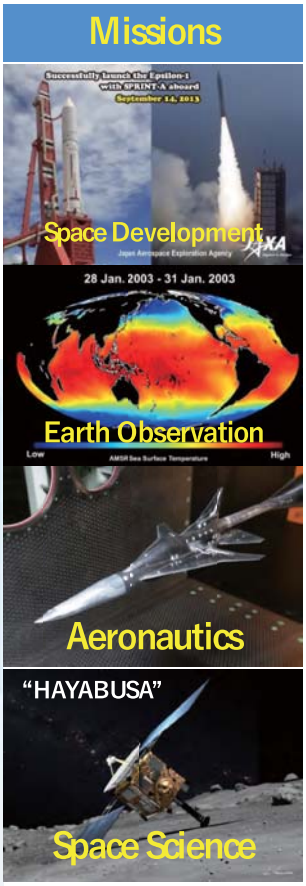
国立研究開発法人 宇宙航空研究開発機構
スーパーコンピュータ活用課
藤田 直行
fujita@chofu.jaxa.jp

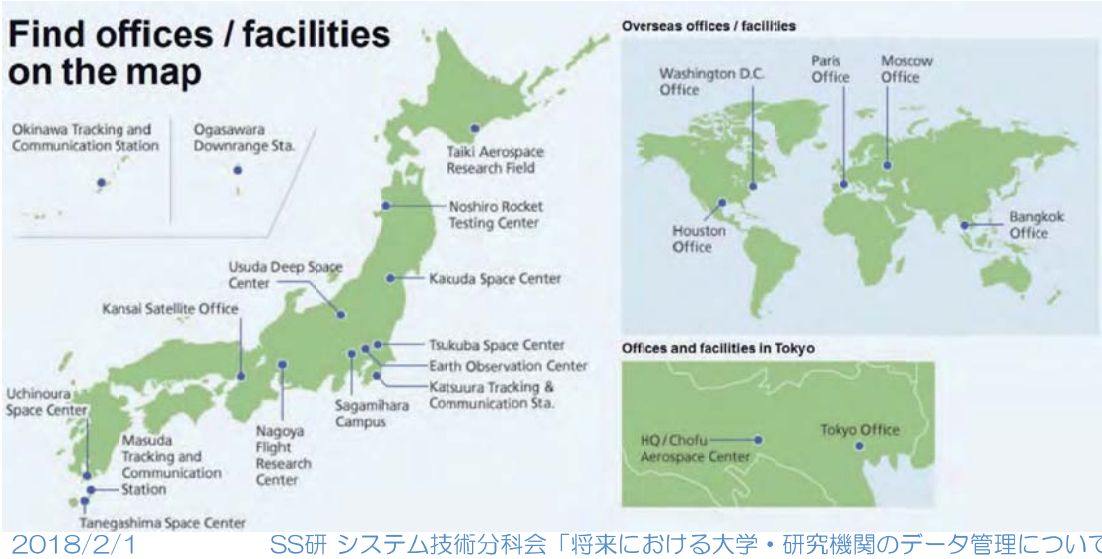
アジェンダ

- JAXAについて
- JAXAスパコン～JSS2～とそのアプリケーション例
  - 数値シミュレーションデータ(NS)
  - 地球観測データ(EO)
  - 宇宙科学データ(SS)
- JSS2にあるデータ
- 欧米の地球観測データ管理
  - 欧州
  - 米国
- クラウドストレージ利用の課題と期待
- まとめ

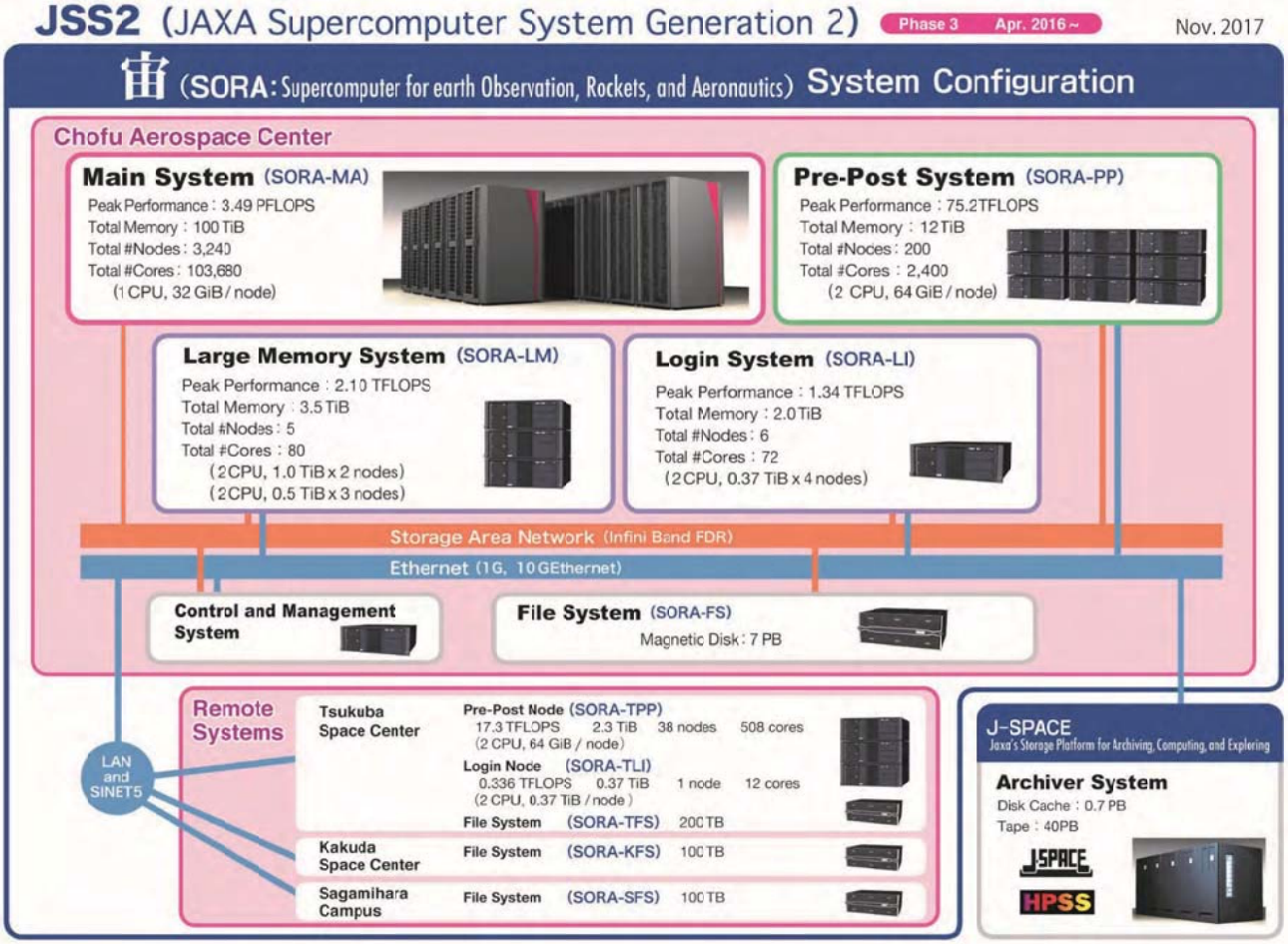
About JAXA

- Established at 2003
  (Formaly NAL:National Aerospace Laboratory of JAPAN)
- Employees：1,529
- Budget：　153.7 Billion JPY
  / 1.360 Billion USD
  / 1.138 Billion Euro
  (April 2017)





JAXA Supercomputer and its Application Examples

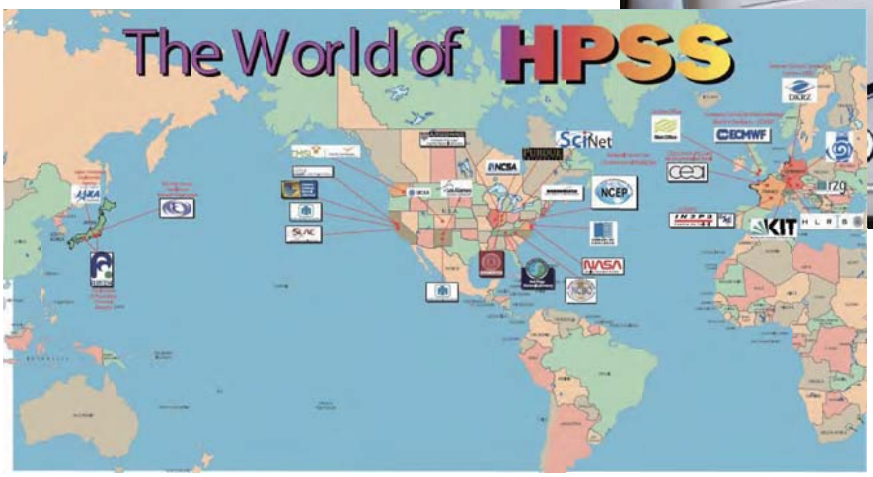


■J-SPACE/JSS2

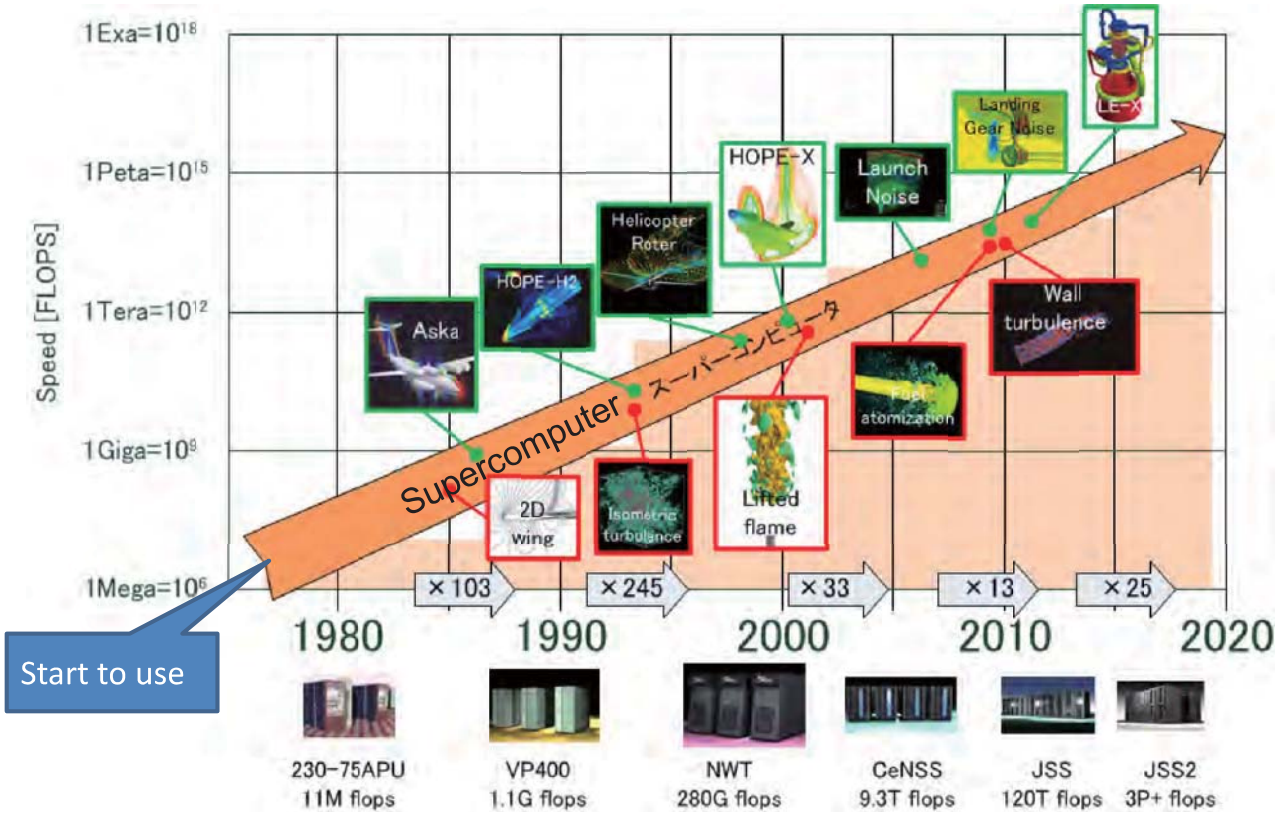
Jaxa's Storage Platform for Archiving, Computing, and Exploring

40PB Tape cartridge

0.7PB Disk cache

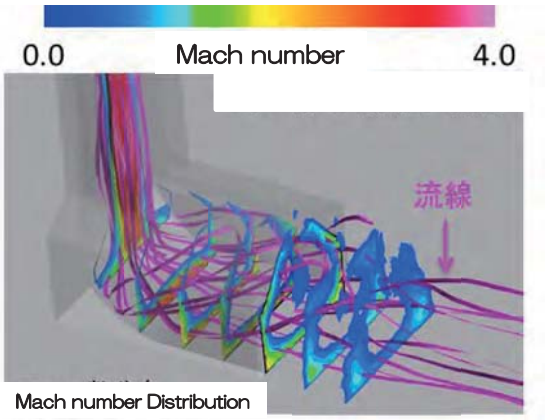


■JAXA Supercomputer History

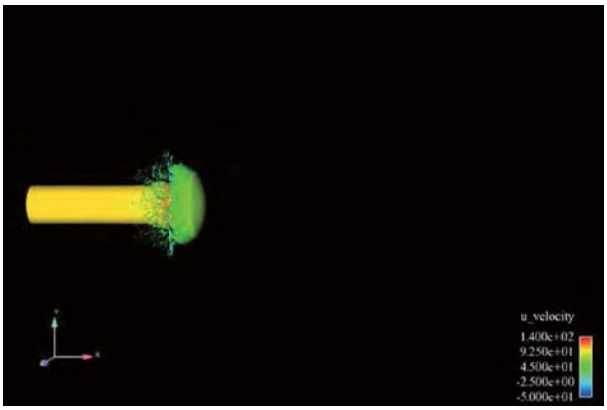


■Application Examples -NS(1/2)-

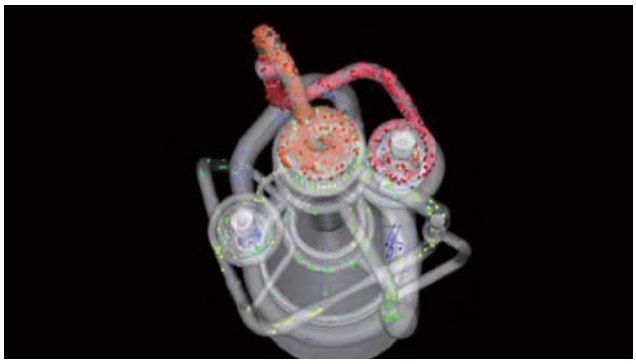
■Epsilon Rocket Launch pad



■Liquid Fuel Atomization

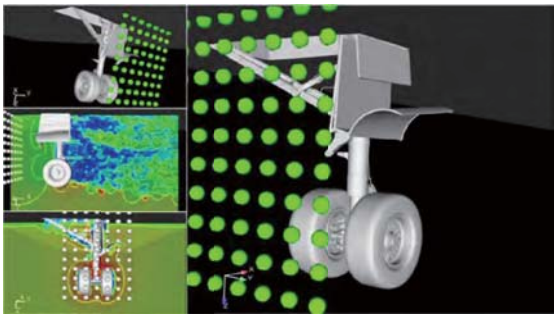


■Rocket Engine Design



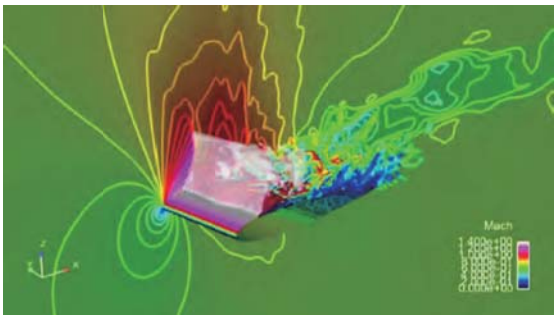
■Application Examples -NS(2/2)-

■Airplane Landing Gear

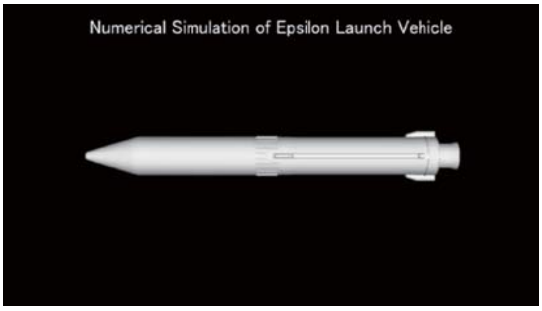


■Re-entry Vehicle Design

■Visialization of Shockwave on Wing

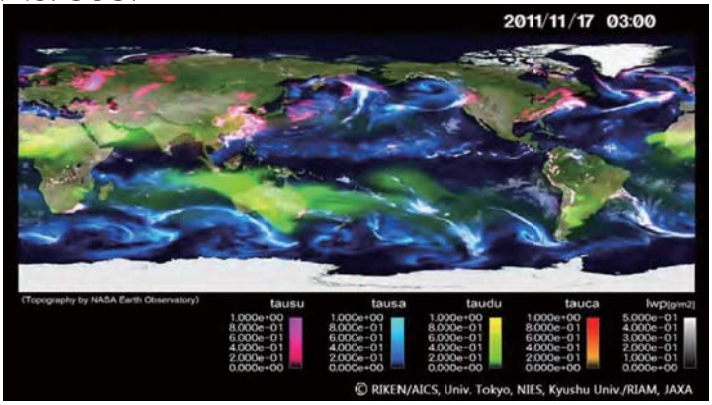


■Fluid Dynamics on Epsilon Rocket



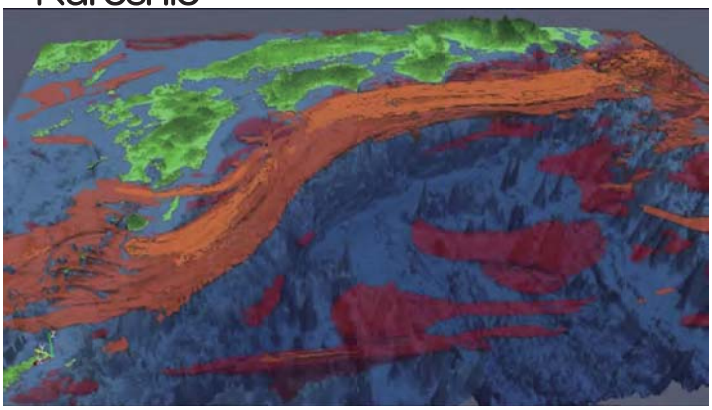
■Application Examples -EO-

■Aerosol



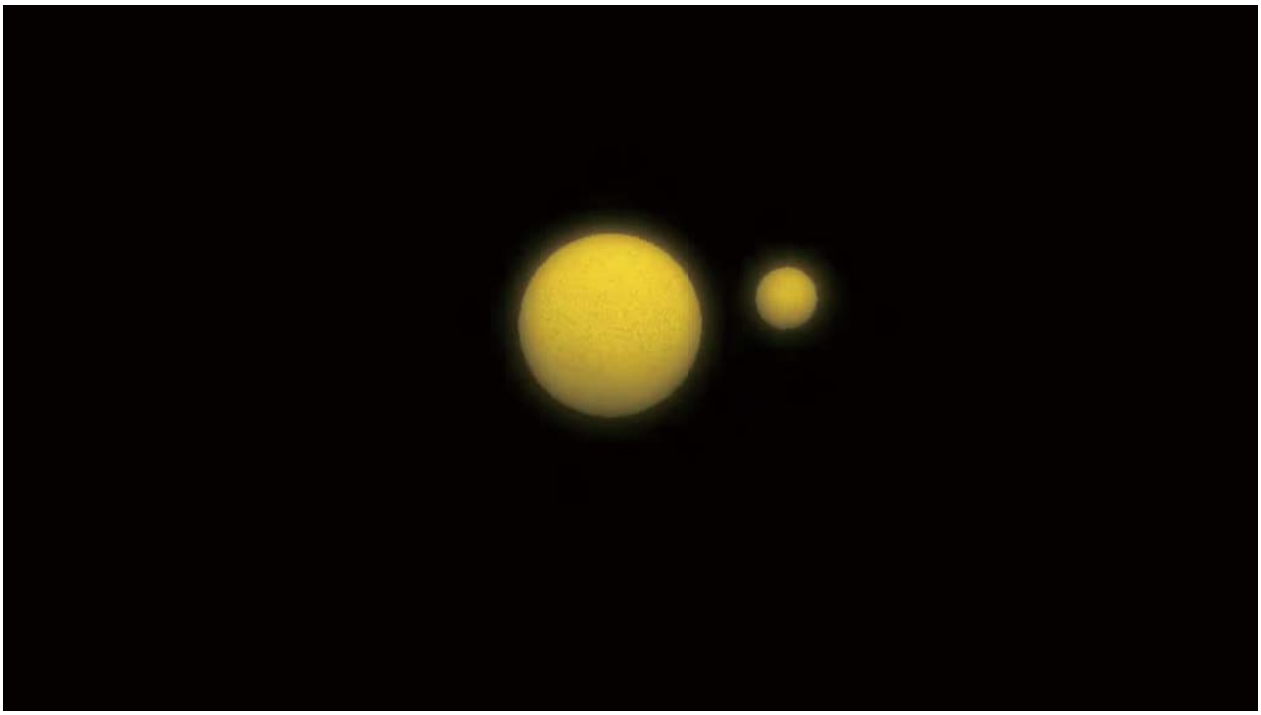
■Global Precipitation Measurement

■" Kuroshio"

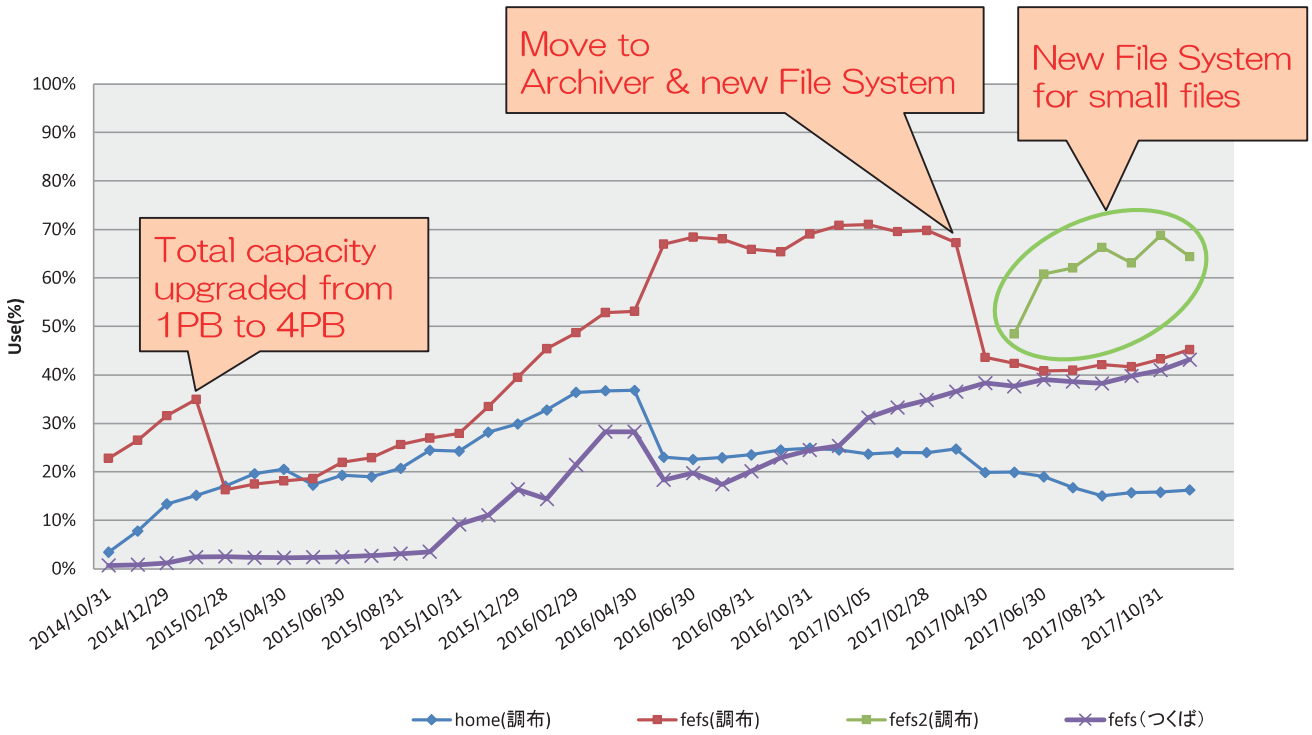


Application Examples -SS-

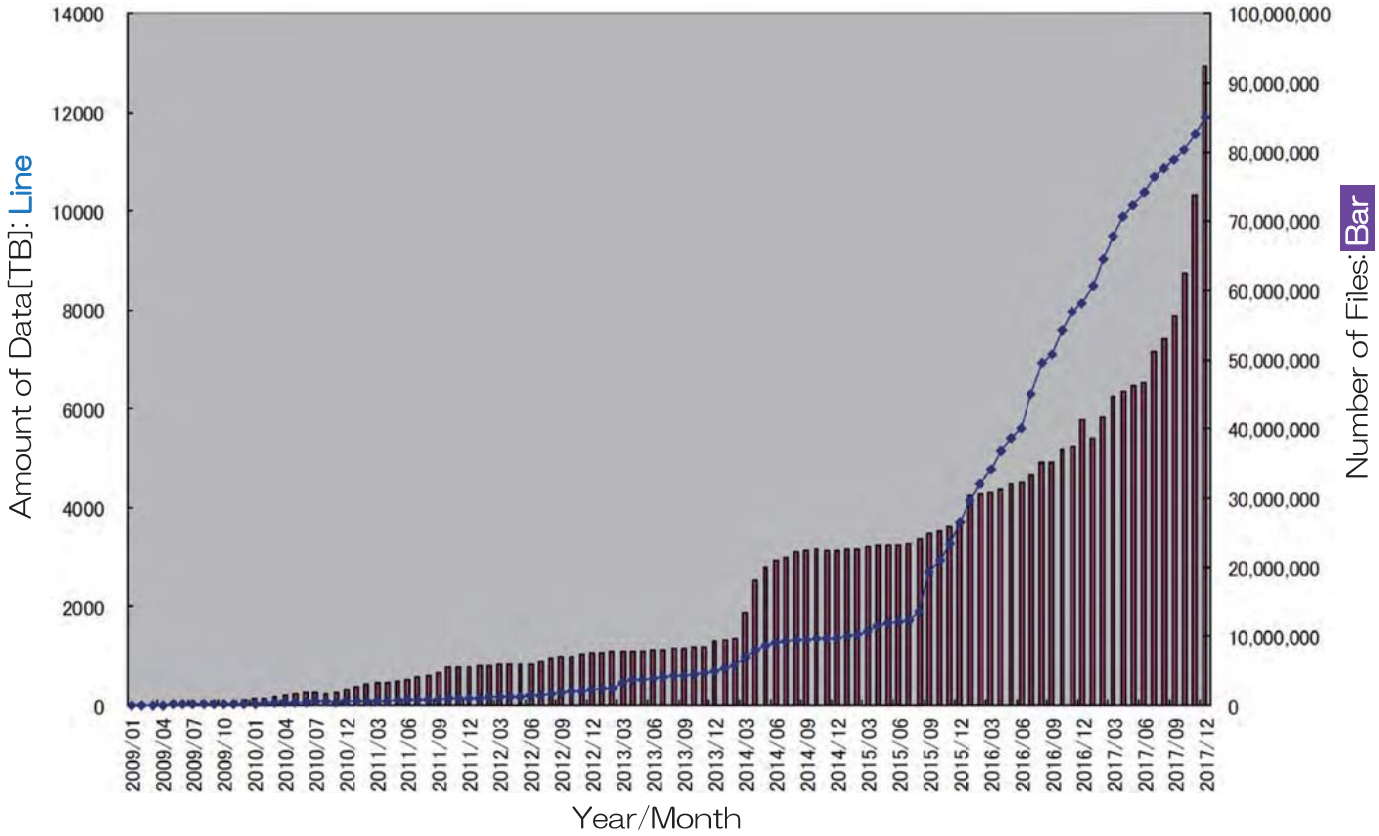
■Giant Impact



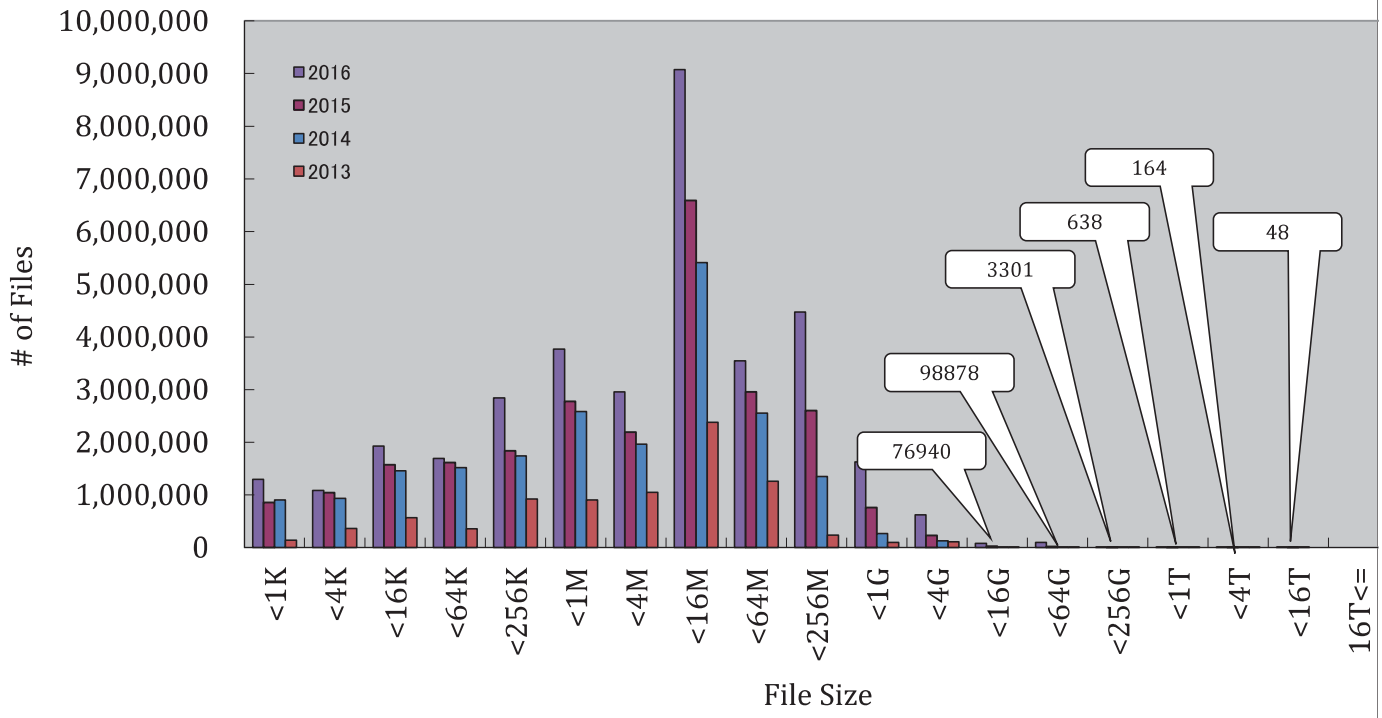
SORA-FS(File System) Usage



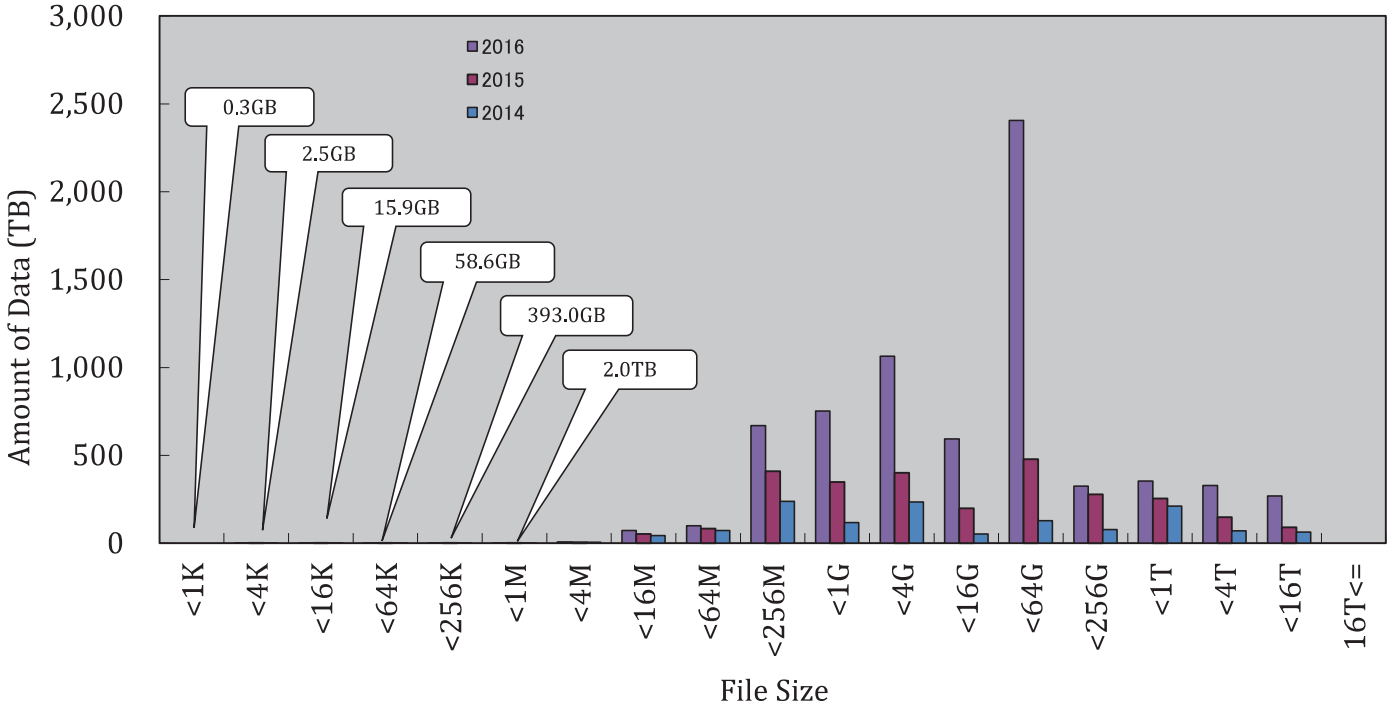
■J-SPACE(Archiver) Usage



■Number of files on J-SPACE(by size, by year)



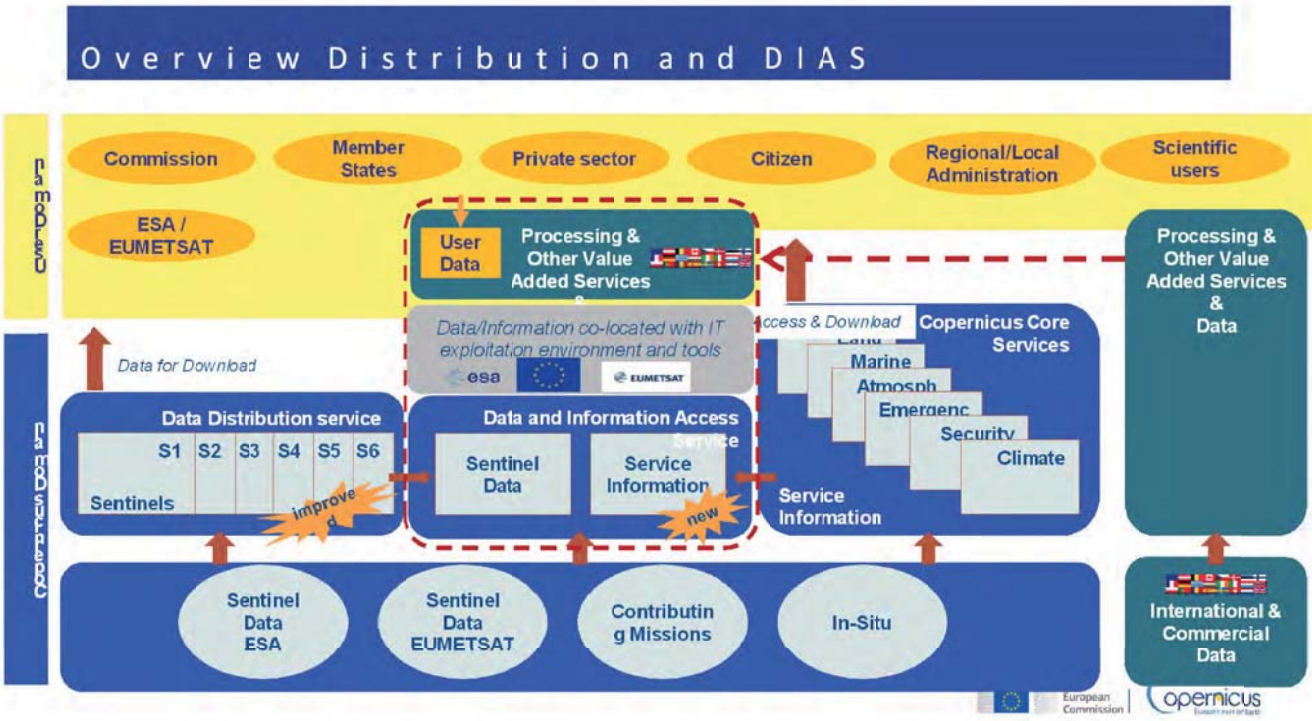
■Amount of DATA on J-SPACE(by size, by year)



■EU -COPERNICUS(1/2)-

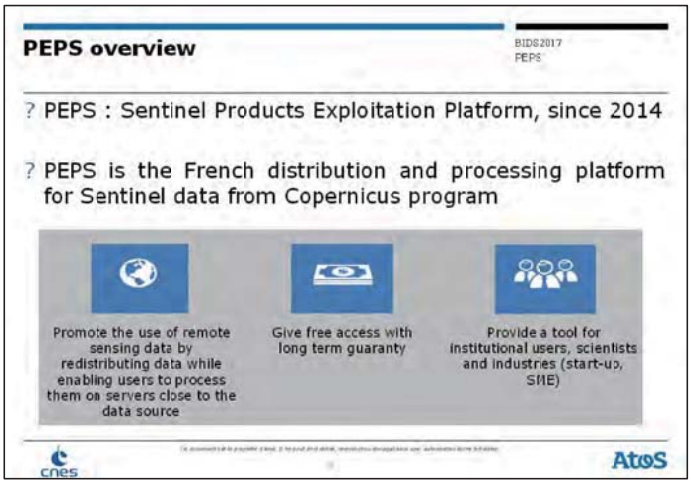
(BiDS2017,Andreas Veispak, EC)

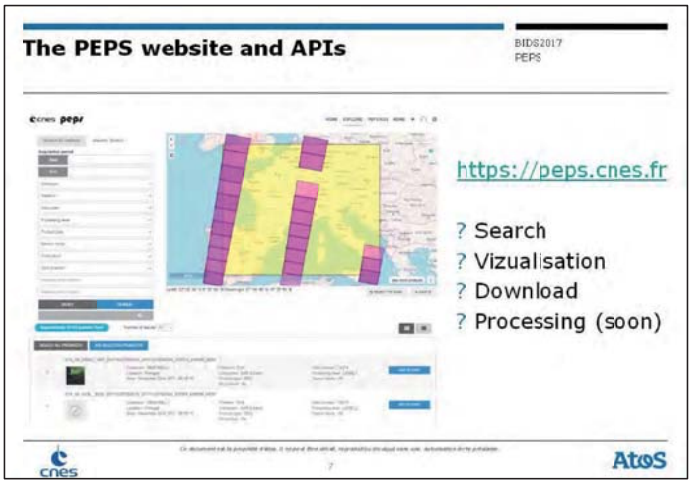
■EU -COPERNICUS(2/2)-



(BiDS2017,Andreas Veispak, EC)

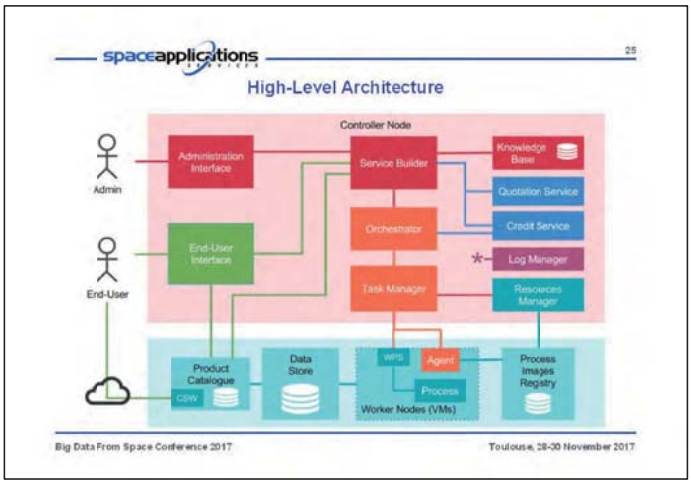
■EU -Service Providers(1/2)-

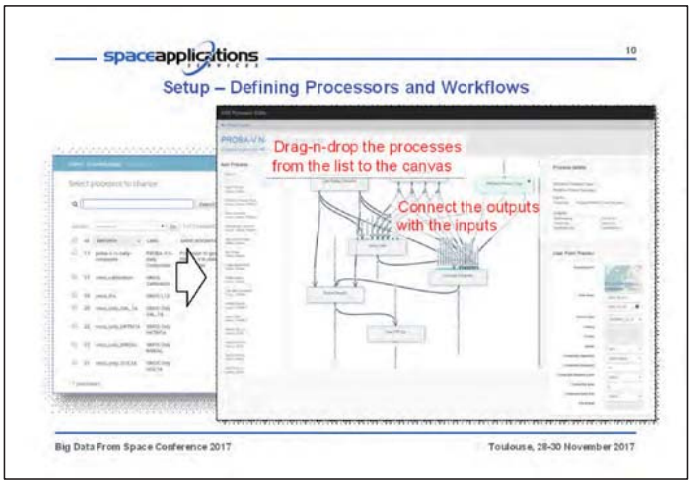




(BiDS2017, Camille Louge et al.)

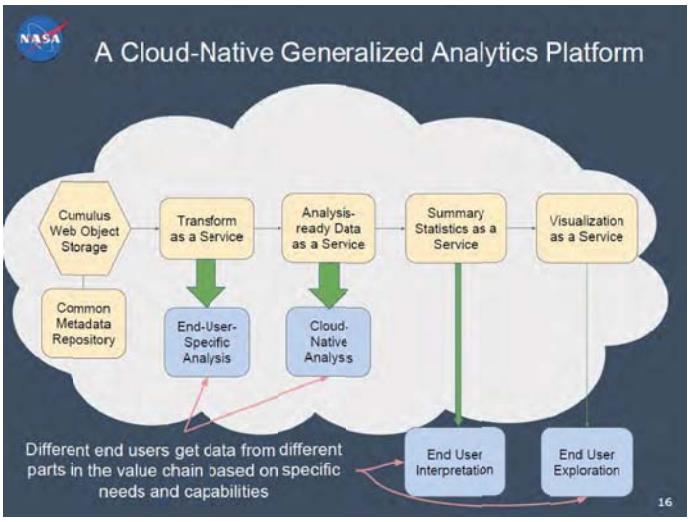
■EU -Service Providers(2/2)-

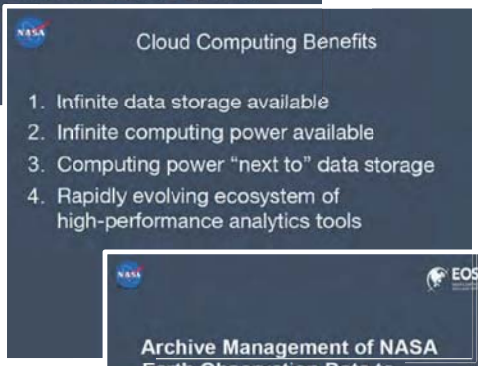


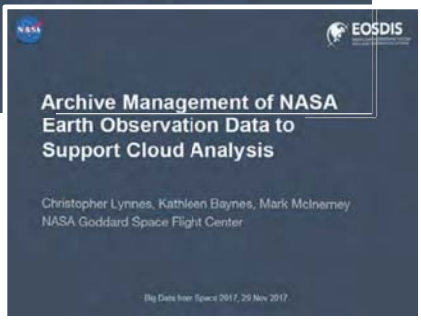


(BiDS2017,Melcot M.)

■U.S. -NASA Concept-







(BiDS2017, Christopher L.)

アジェンダ

- JAXAについて
- JAXAスパコン～JSS2～とそのアプリケーション例
  - 数値シミュレーションデータ(NS)
  - 地球観測データ(EO)
  - 宇宙科学データ(SS)
- JSS2にあるデータ
- 欧米の地球観測データ管理
  - 欧州
  - 米国
- クラウドストレージ利用の課題と期待
  - 柔軟性
  - 機密性
  - 信頼性
  - 継続性
  - 接続性
  - 調達制度
  - 法令順守
- まとめ

■Issues and Expectation to using Cloud storage

■クラウドストレージ利用のメリット

No.	メリット	注記	分類
1	どこからでもアクセス可能	インターネットに直結、どこからも平等にアクセスできる。	
2	バックアップの省力化	様々なバックアップ機能(冗長化、ディザスタリカバリ)をサービスとして購入できる。	
3	基盤システムの運用管理が不要	サービス調達(基盤システムの運用管理はクラウド業者が実施)	
4	定期的なシステム換装が不要	同上	
5	導入コストが安い	Small Start。	
6	従量課金	費用対効果の説明が分かり易い。	
7	高い拡張性	好きな時に、好きなだけ拡張できる。	
8	利用量の柔軟性	研究開発業務の急激な変化に対応できる。	
9	DR・BCP対策	強固な設備環境、全地球的な基盤整備。	

■クラウドストレージ利用のデメリット

No.	デメリット	注記	分類
10	利用内容をカスタマイズできない	サービスメニューから選ぶ程度の自由度。	柔軟性
11	保守タイミング	クラウド業者が決めた保守タイミングに、研究開発業務の流れを合わせる必要がある。	
12	障害対応	共用設備として対応するため、個別の事情に合わせた処置を求められない。	
13	セキュリティ	セキュリティ内容を個別に指定できないため、確保されているセキュリティレベルの把握が難しい(セキュリティのレベル理解)。 同じ基盤を誰が使っているが分からない(利用者母集団)。 同じ基盤を使っている人との隔離ができているか不安(アクセス制御)。	機密性
14	データの二次利用	例えば、クラウド業者によるビッグデータ解析の対象データになる。	
15	ベストエフォート	計算機、ストレージ、ネットワーク等が共用のため性能保証が受けられない。	信頼性
16	信頼できるのか	情報資産を預けるに耐えられるもの(サービス、設備、規約)なのか。	
17	廃業	研究開発業務の継続性と関係なくクラウドサービス事業が終了するリスク。	継続性
18	拡張性	設備の拡張計画、ラック・電気・冷却の空き状況が分からない。	
19	利用終了時のデータ取り出し	蓄積したデータの取り出し時間や費用が予め見積り難い。	接続性
20	従量課金	計画的に予算執行をする政府系調達の考え方との整合性が悪い。	調達制度
21	輸出管理	クラウドセンターの所在が海外の場合、輸出審査の実施が必要。	法令順守

■柔軟性:Flexibility

■利用内容をカスタマイズできない

「マスター・スレーブ的なクラスタ構成が無い。」

■保守タイミング

「学会〆切間際なのに保守で使えない。」

■障害対応

「一部のサーバだけで良いから可及的速やかに
復旧させたいが、全部一律に障害復旧作業が進む。」

■機密性:Confidentiality

- ■セキュリティレベルの理解:
  Understanding the Security Level
  「このサービスメニューで我々が欲しいセキュリティが手に入っているのか理解できない。」
- ■利用者母集団:Population Set
  「同じCPUでクラッカーのプロセスが動いているかも。」
- ■アクセス制御:Access Control
  「クラッカーから我々のプロセスは見えないよね？ファイルシステムは見えないよね？」
- ■データの二次利用:Secondary use
  「統計処理するって言っても我々の研究データが読まれてるんだよね。」

■信頼性:Reliability

- ■ベストエフォート:Best Effort
  「期待する性能を使えるのか？」
- ■信頼できるのか:May I trust?
  「そこに情報資産を保管して大丈夫なのか？」
  「何を以って信頼できると考えるのか？」
  - ■SOC1/2、ISO27001等
  - ■国内設置、通信経路

■継続性:Continuity

■廃業:Discontinuation of service

「突然サービスが買えなくなったらどうする？」

「『６か月以内に全てのデータを取り出せ』と言われても…」

■拡張性:Scalability

「規模が2倍になっても引っ越しなどせずに
当初の設備を利用し続けられるのか？」

- ■データセンターの規模
- ■空き状況
- ■建設計画

■接続性:Connectivity

■利用終了時のデータ取り出し: Outbound Data Transfer

「ファイル転送速度はどれくらい出るの？」

「全部取り出すのに何か月かかるの？」

「費用は全部でいくらかかるの？」

- ■クラウドと外部システムの接続方法
  - ✓SINET5に直結してる？
  - ✓データセンター内で光ケーブルで直結していい？
  - ✓接続に伴う追加費用は？

■調達制度:Procurement system

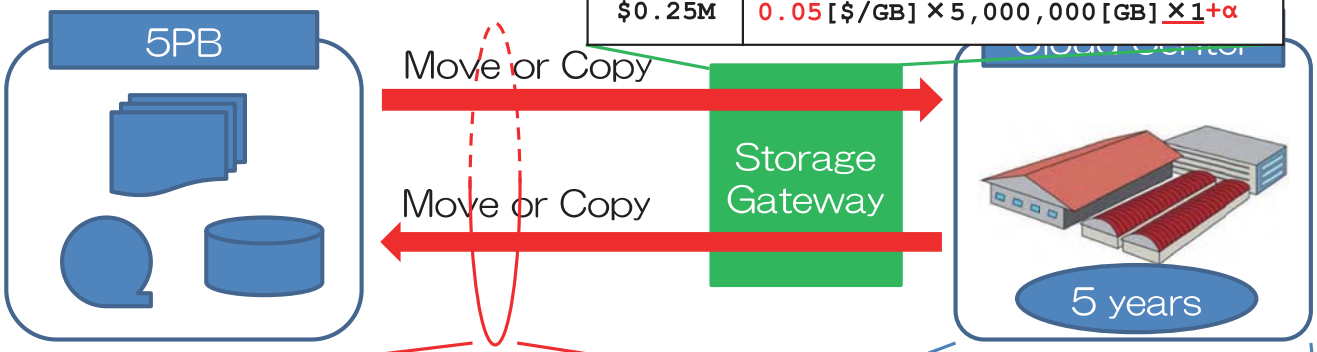
■従量課金

■費用

■サービスメニューの複雑さ

■Black Hole model

Option	Specification
$0.25M	0.05[$/GB]×5,000,000[GB]×1+α



Upload Download	Specification	Service
$0.1M	0.01[$/GB]×5,000,000[GB]×1+α	Standard
$0.025M	0.0025[$/GB]×5,000,000[GB]×1+α	Glacier

・Request
・Storage Management
・Transfer Acceleration
：

Storage	Specification	Service
$6.3M	0.021[$/GB･month]×5,000,000[GB]×60[month]	Standard
$1.2M	0.004[$/GB･month]×5,000,000[GB]×60[month]	Glacier

■法令順守:Compliance

■輸出管理

「いつの間にか、輸出審査をしていないデータが
外国のサーバに置かれていたorz」

■まとめ

■クラウド利用には多くの課題(≒不安)がある。

✓柔軟性
✓機密性
✓信頼性
✓継続性
✓接続性
✓調達制度
✓法令順守

■ 大規模研究データのクラウド利用にも課題が多い。

ありがとうございました。

教育環境分科会選出
教育環境分科会 2017 年度会合 より

Moodle を用いた初学者用プログラミング環境 −サンプルのコピペ実行を起点とする学習−

布施 泉（北海道大学）

SS研2017年10月28日

Moodleを用いた初学者用プログラミング環境

サンプルのコピペ実行を起点とする学習

布施泉　北海道大学

大学の初学者を対象とする授業用プログラミング教育環境の構築

対象者

@本格的なプログラミング経験はないが興味はある大学生

@簡単なプログラミング体験はしている大学生（Scratch）

大学の初学者を対象とする 授業用プログラミング教育環境の構築

構築方針

@授業での利用が前提。自宅からも同じ環境で利用可能

@教師の資料提示を安直に

@学習者の集中力の保持：一画面内でプログラムの編集や実行、および教師の提示資料を確認できる。

@学習者同士のインタラクション可能な設計

@言語は汎用的なもので。->本環境からの「卒業」を考える

大学の初学者を対象とする 授業用プログラミング教育環境の構築

構築方針

@授業での利用が前提。自宅からも同じ環境で利用可能

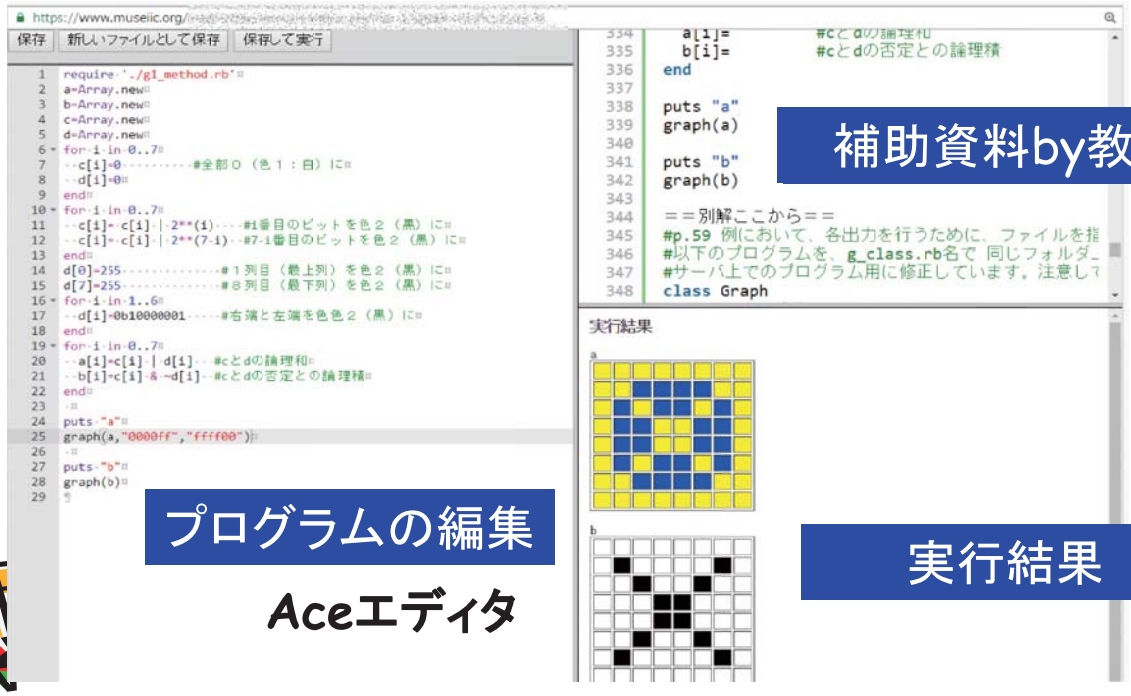
@教師の資料提示を安直に

@学習者の集中力の保持：一画面内でプログラムの編集や実行、および教師の提示資料を確認できる。

Webインターフェース＆学習者管理-> Moodleプラグイン

言語->Ruby（& Python& JavaScript：現時点では未実践）

一画面：学習者の集中力の保持



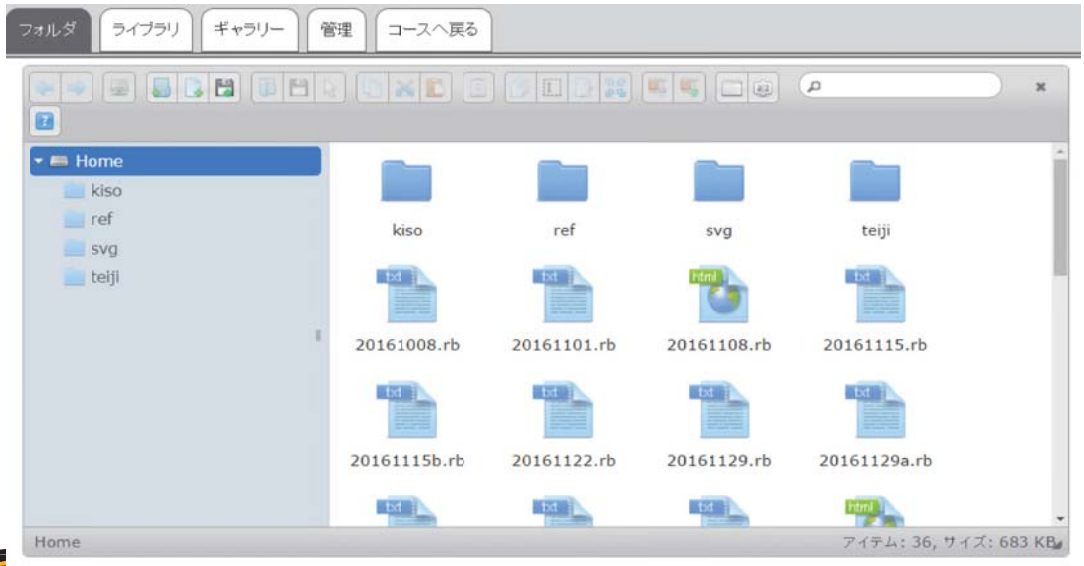
補助資料by教師

プログラムの編集

Aceエディタ

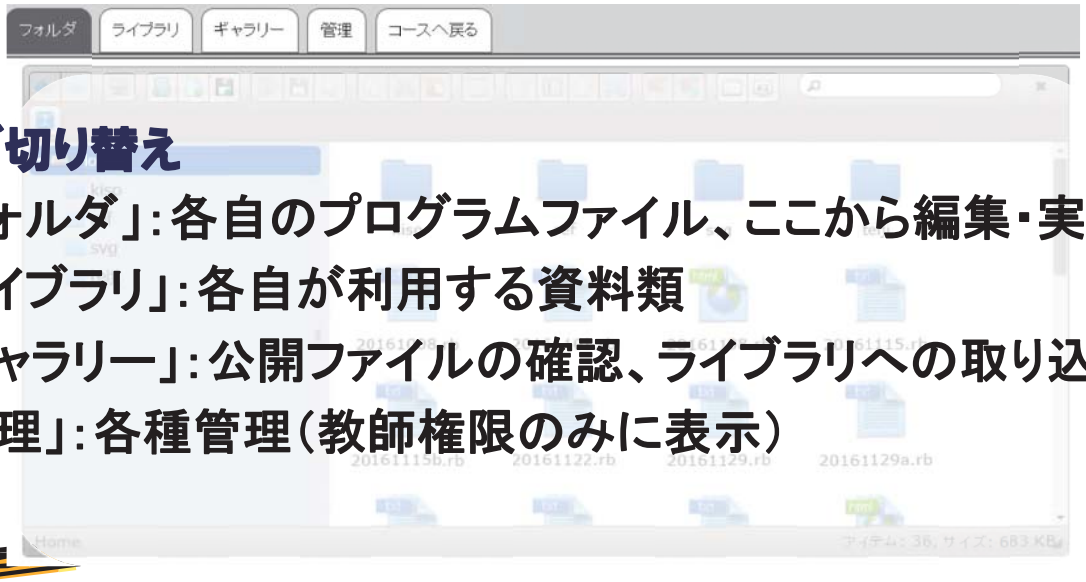
実行結果

学習者毎のプログラム格納領域



いつでもどこでも～続きから～プログラミング

当該教育環境の機能



タブ切り替え

「フォルダ」:各自のプログラムファイル、ここから編集・実行

「ライブラリ」:各自が利用する資料類

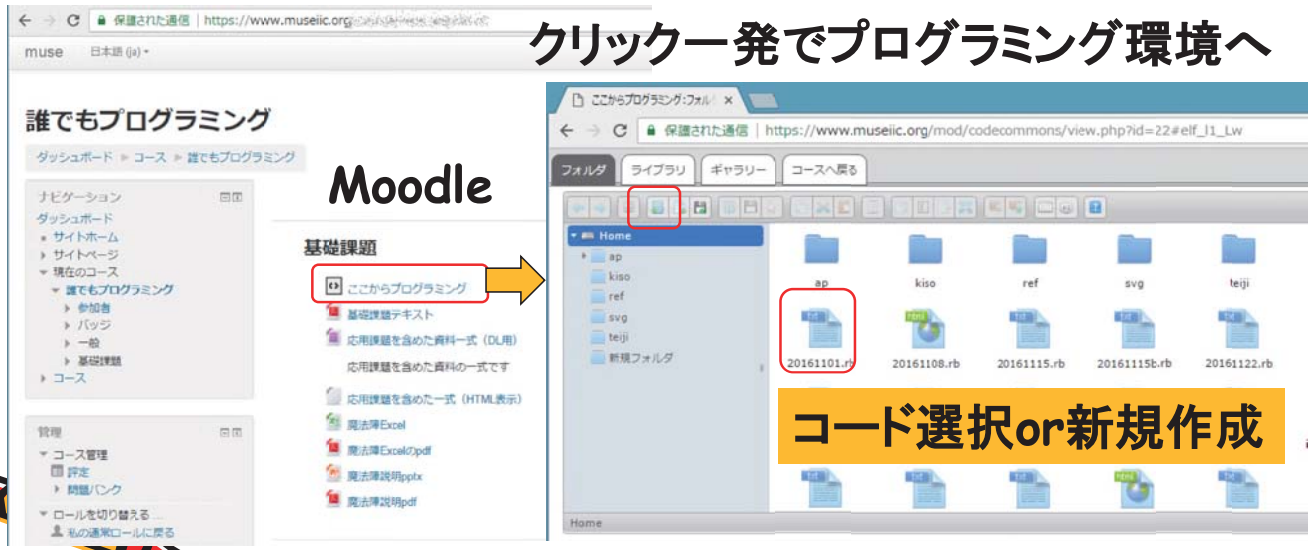
「ギャラリー」:公開ファイルの確認、ライブラリへの取り込み

「管理」:各種管理(教師権限のみに表示)

プログラムの具体的な実行手順

いつでもどこでも～続きから～プログラミング

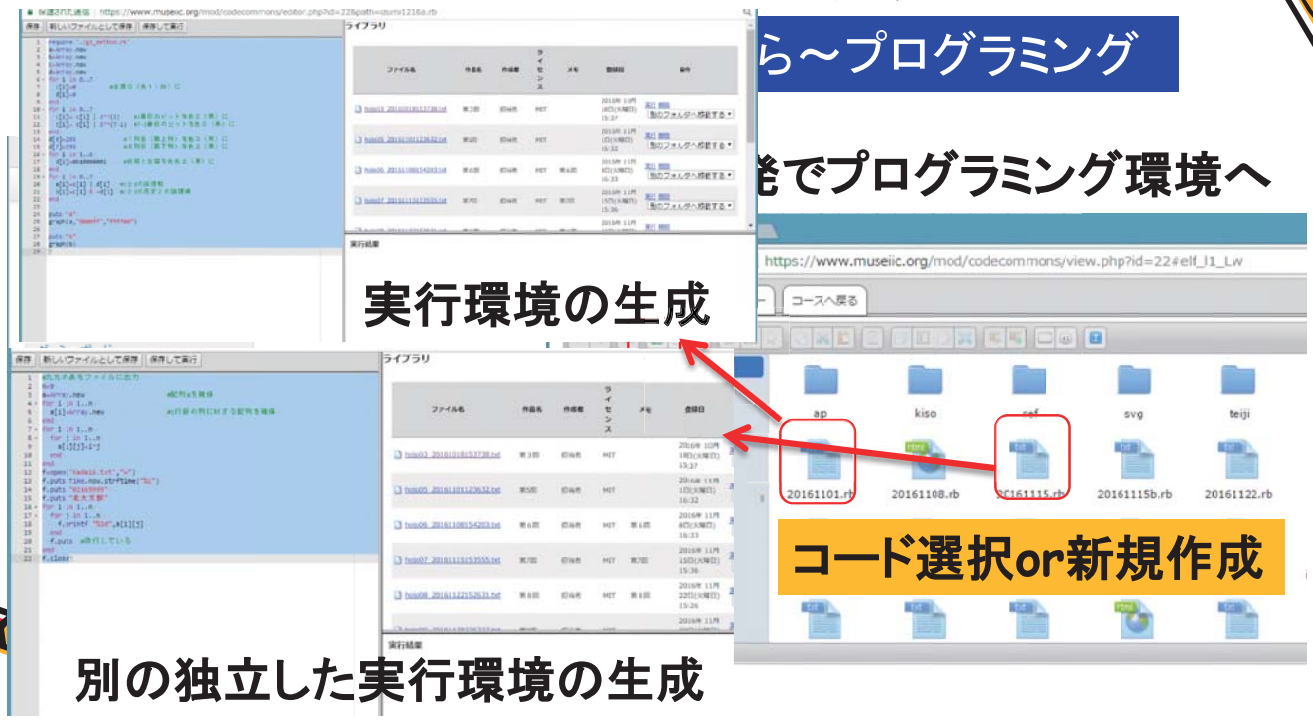
クリック一発でプログラミング環境へ



プログラムの具体的な実行手順

ら～プログラミング

発でプログラミング環境へ



ライブラリ領域へのファイル表示等

ライブラリ一覧からの操作

リンク名をクリック：当該ファイルの内容が表示

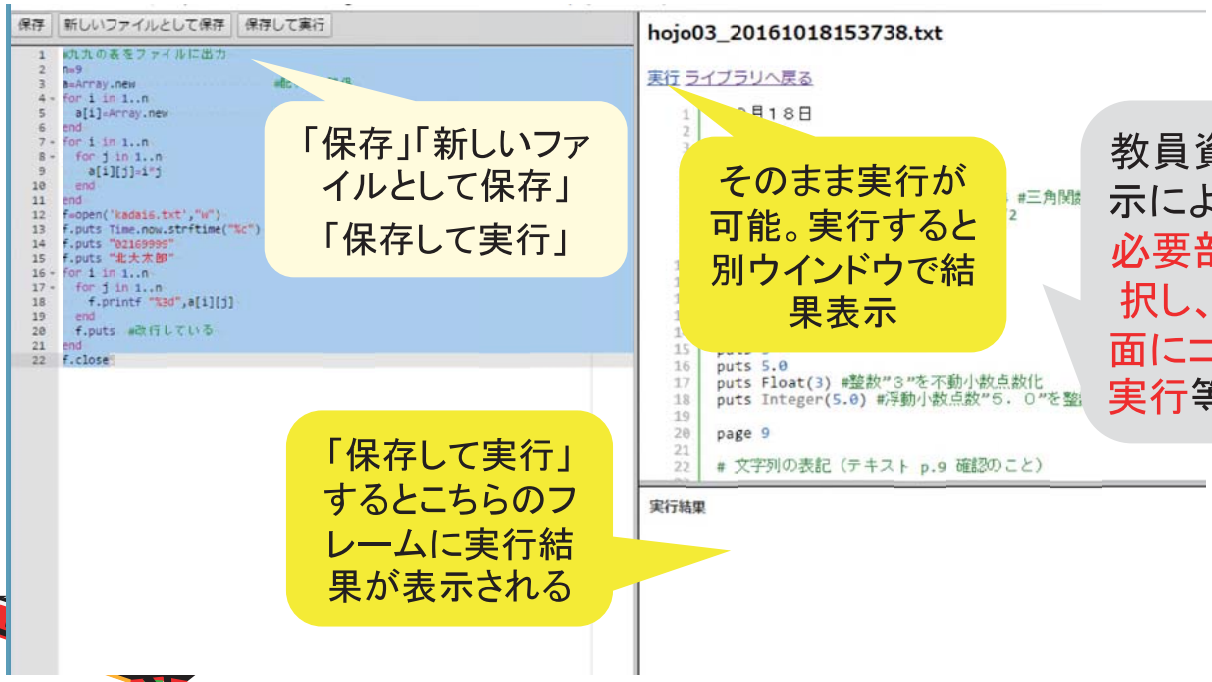
実行・削除・別フォルダへの移動：各自が整理

＊上記ライブラリ一覧の実体＝＞「ライブラリ」タブ

教師資料ファイルの閲覧・取込み

ギャラリーに表示されるファイルをライブラリ へ取りこみ

プログラムの編集・実行



「保存」「新しいファイルとして保存」「保存して実行」

そのまま実行が可能。実行すると別ウインドウで結果表示

教員資料を指示により表示。必要部分を選択し、編集画面にコピペし、実行等が可能

「保存して実行」するとこちらのフレームに実行結果が表示される

大学での初学者対象の授業への適用

一般教育「誰でもプログラミング」

授業計画

1）基礎課題を通してプログラミング言語に慣れる。
2）指定された基礎課題を解決し，その結果を提出する。
3）取り組む応用課題を決め，それを解決し，その結果を提出する。
4）結果について，発表し，評価する。
グループ学習を行うこともある。
応用課題の適用例として、北大OCWならびにiTunesUに映像を掲載しているので参照のこと。

基礎から応用まで

準備学習(予習・復習)等の内容と分量

大学設置基準に従い，１５回の授業時間（高々３０時間）の他，授業時間外でのプログラム作成等を考慮した内容をもって構成している。

本環境の試行評価

2015年度（システム未使用）と2016年度の比較

同じ

北海道大学・全学教育科目（総合科目）
対象：1-4年生
履修者：概ね60-90名程度、3か所に分かれて授業
　　遠隔授業も含む（数名程度、両年各1名）
単位数：1単位
授業内容：基礎課題は同じ内容と構成/応用課題

違う

＊本システムの利用有無
　2016年度に初学者クラスで試行

本環境の試行評価

システムを用いた初心者グループの流れ（2016年度）

2015年度と同じ内容

実行人数・回数

基礎課題（1-11）

週	日時	主たる内容	実行人数	実行回数
1	10/4	ガイダンス（大部屋）		
2	10/11	プログラムの入力・保存・実行・終了等の操作，四則演算（課題 1，2）	24	1000 42/人
3	10/18	数学関数，文字列，基本入出力，代入	22	1595 73/人
4	10/25	定数と変数（課題 3），比較，条件分岐，繰り返し	22	1075 49/人
5	11/1	繰り返し，ループ脱出（課題 4，5），配列	20	1098 55/人
6	11/8	配列とハッシュ，ファイル入出力（課題 6，7）	21	654 31/人
7	11/15	課題 7（魔法陣）の詳細，メソッド	20	623 31/人
8	11/22	メソッド（課題 8），再帰（課題 9）	19	715 38/人
9	11/29	クラス，ビット演算（課題 10）	19	699 37/人
10	12/6	正規表現（課題 11）	19	805 42/人
11	12/13	応用課題：(例) 円周率（モンテカルロ法ほか），ライフゲーム，スピングラス，公開鍵暗号，アミノ酸の頻度分布，文字の頻度分布，金利計算等	19	518 27/人
12	12/20		17	521 31/人
13	1/10		13	299 23/人
14	1/17		13	266 20/人
15	1/24		13	266 20/人

本環境の試行評価

2015年度（システム未使用）と2016年度の比較

作業記録（毎回授業終了時に記入）

- 授業時に行ったこと（箇条書きでよい）
- 質問（あれば）
- 進捗度合（満足、まあ満足、普通、少し不満、不満、の5択）
- 難易度（難しい、まあ難しい、普通、少し易しい、とても易しい）

本環境の試行評価

2015年度（システム未使用）と2016年度の比較

最初の2回

・プログラムの書き方と実行方法の確認、四則演算（整数・浮動小数点数）

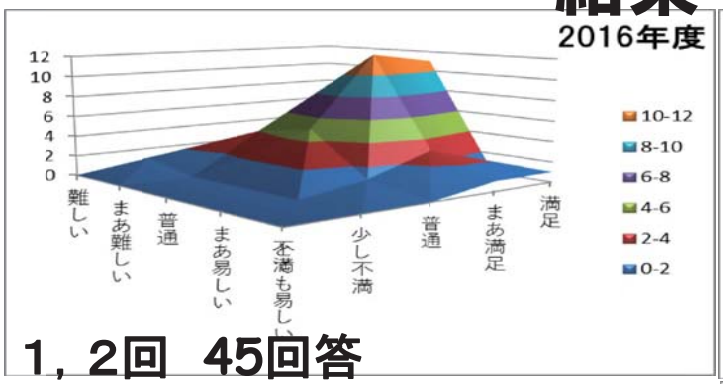
・数学関数、文字列の表記と操作、書式付き出力、代入等

2016年度 9回、10、11回（基礎課題終わり2回＆応用課題初め，2015年度は同じ部分が10，11，12回目）

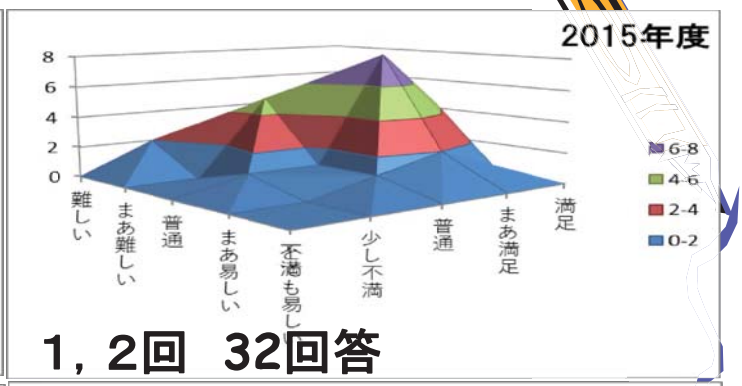
・bit演算、クラス

・正規表現

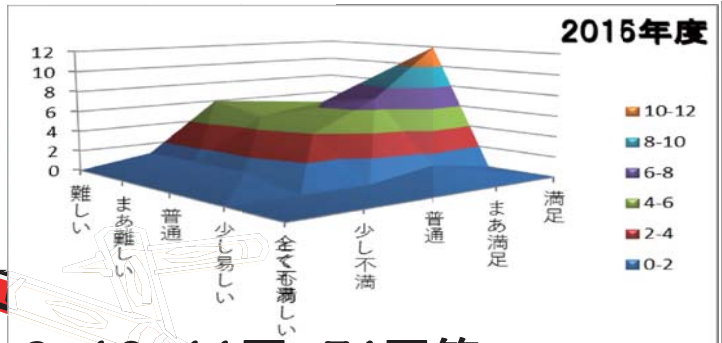
結果



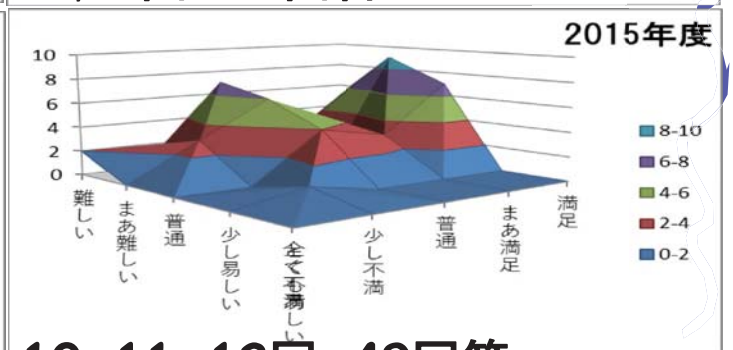
1，2回　45回答



1，2回　32回答

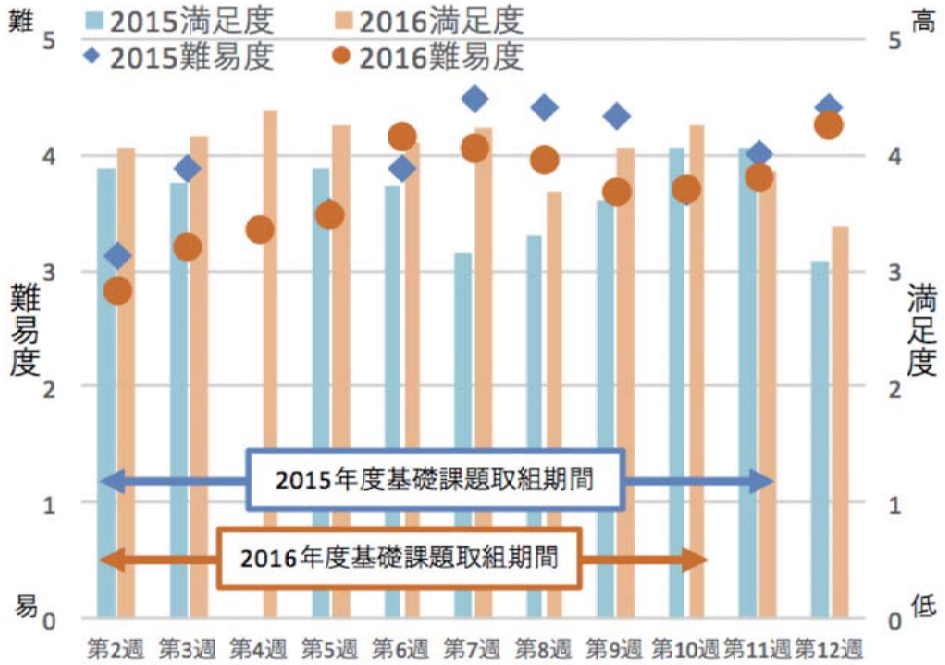


9，10，11回　56回答



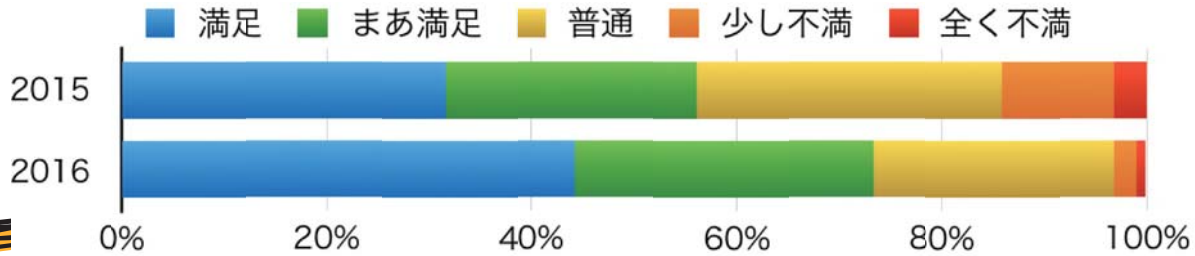
10，11，12回　49回答

各週の満足度と難易度の評価結果



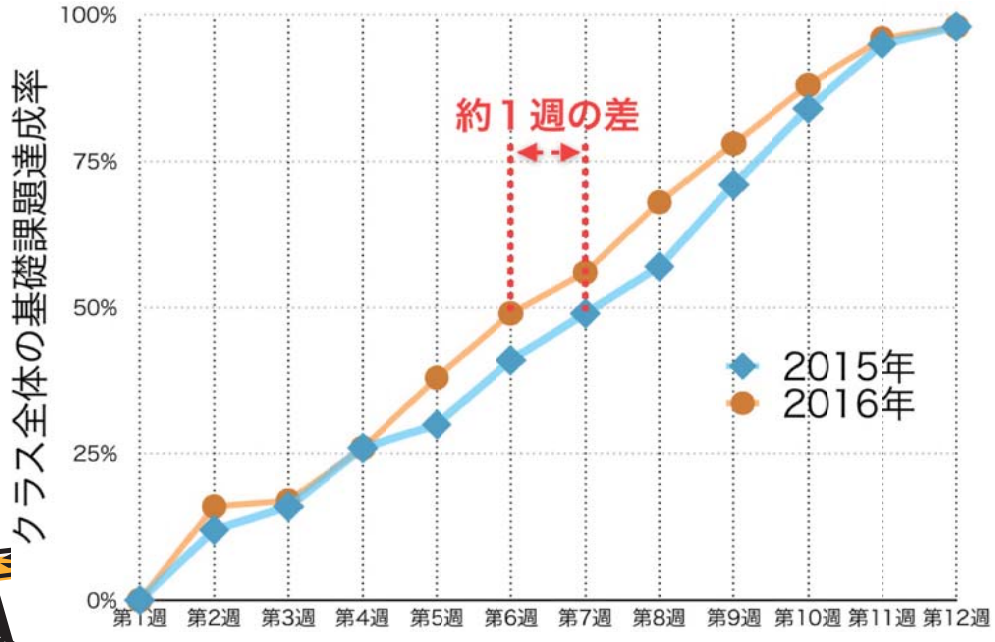
各週の満足度と難易度の評価結果

	満足度		難易度	
	平均	分散	平均	分散
2015 年度	3.71	0.10	3.92	0.20
2016 年度	4.13	0.04	3.60	0.18



基礎課題取組期間全体での授業の満足度の比較

基礎課題の進捗比較（平均到達提出題数）



基礎課題
（全１１題）

システム利用履歴（Moodle機能）

（例：大学外での、とある学生の履歴）

12月 15日 12:10

Moodleコースの閲覧　＞コードコモンズ（コースモジュールが閲覧）

応用課題を含めた資料一式（DL用）のファイルを閲覧

12月 15日 14:27　コードの編集開始

12月 15日 14:28　ファイルを上書き保存、ファイルを実行

12月 15日 14:28　コードの編集開始＞ファイルを上書き保存＞実行

・・・・・・

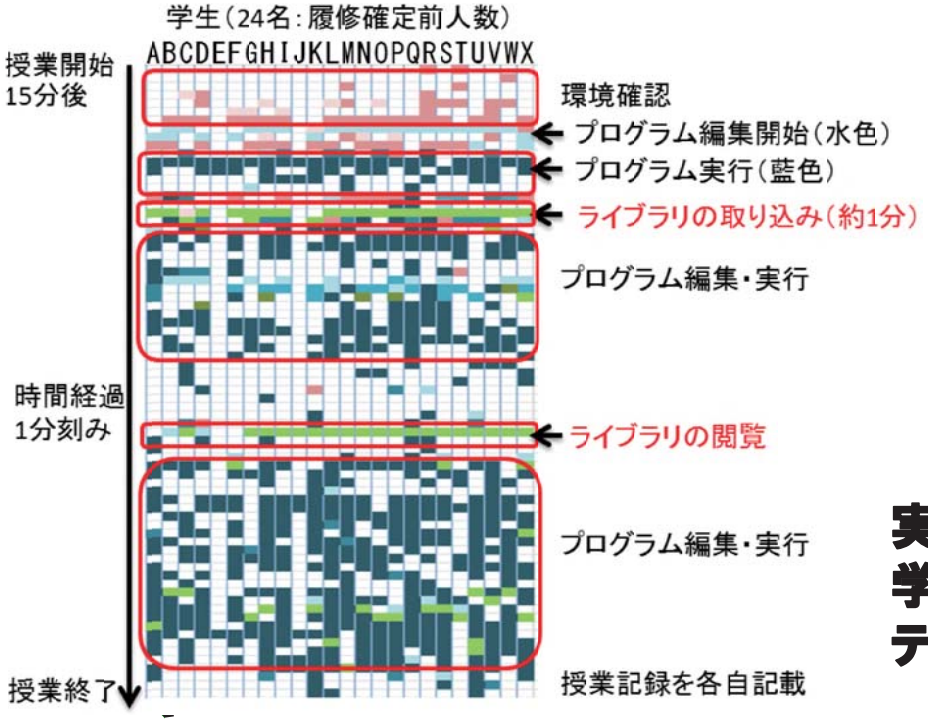
12月 15日 14:46　コードの編集を開始＞

12月 15日 14:49　ファイルを上書き保存＞実行

12月 15日 14:50　ファイルを上書き保存＞実行

誰がいつどのように利用したかの確認可能

システム利用履歴（授業時の振る舞い）



実習初回の授業時の学生の振る舞い：システム利用に問題なし

応用課題

行う課題を自分で選択・自力でプログラム作成（TA等が質問対応・相談には乗る、作例の一部が掲載されている課題もある）

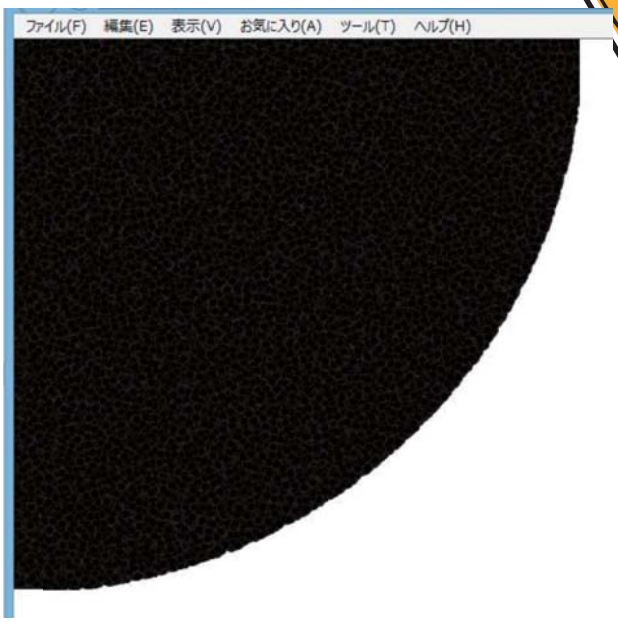
- 基礎課題までで理解してきた内容を応用する
- Tkを用いた描画は、本システムを用いず、ローカルPCで実行することとした

  例）ライフゲーム、粒子の拡散、

  スピングラスシミュレーション、等

結果例（モンテカルロ法で円周率）

Tkを用いたもの（ローカルPC）



SVGを用いたもの（本システム）

まとめ

初学者・授業用のプログラミング教育環境を構築し実践した

- 汎用的言語：Ruby
- Moodleプラグインとして：学習者のフォルダを有する
  いつでもどこでもプログラミング
- 学習者の集中力の保持を意図
  コピペ実行、修正、改善の経験を踏まえ、応用課題へ取組む

2015年度（システム未使用）と2016年度の比較

＊1週程度、早い進捗

＊学習者の自己評価：バラツキの抑制

＊応用課題の出来は概ね良い（詳細な比較分析は今後）

教育環境分科会　選出
教育環境分科会 2017 年度会合 より

プログラミング学習環境 ‘BitArrow’ の紹介
-Web ブラウザのみでプログラムが学べる-

長 慎也(明星大学)

プログラミング学習環境 'BitArrow'の紹介

-Webブラウザのみでプログラムが学べる-

発表　長 慎也（明星大学）
デモ　堀越将之（明星大学）長島和平（東京農工大学）
共同研究者
間辺 広樹（神奈川県立柏陽高校）
兼宗 進（大阪電気通信大学）
並木 美太郎（東京農工大学）

http://bitarrow.eplang.jp/

自己紹介

- 研究テーマ
  - プログラミング言語と言語処理系
  - プログラミング教育
- ゲーム制作が趣味
  - ゲーム制作を通じたプログラミングの学習

Agenda

- BitArrowの特徴
- 言語ごとの特徴・実践例
  - JavaScript
  - C
  - ドリトル
- クラス管理機能
- さらなる機能追加

プログラミング学習をする上で難しいこと

- 開発環境の問題
  - インストールが大変なものや、管理者権限がなくてインストールできないPCもある
  - 学校のPC、自宅のPCなどあちこちにインストールする必要がある
- 言語の問題
  - 覚えることが多い
  - エラーへの対処が難しい

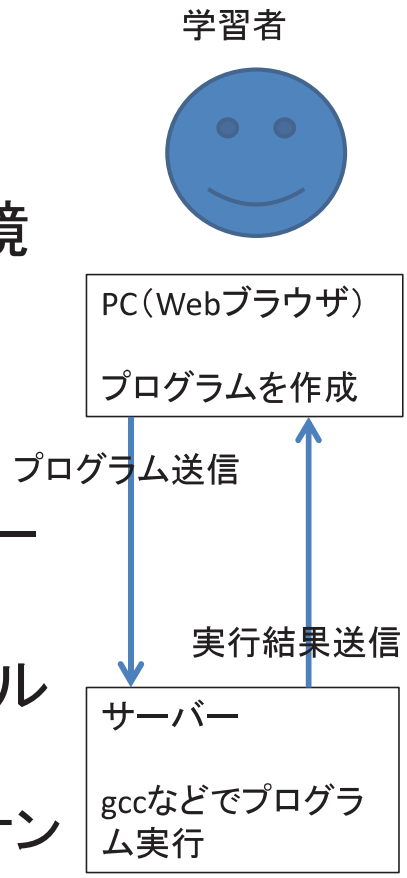
Webブラウザでのプログラミング学習環境

- セットアップが不要
- 家でも学べる
- ネットワークに接続されている
  →他のユーザ・デバイスとデータ共有が容易
- Webブラウザだけで学べるプログラミング学習環境「BitArrow」を開発中

既存の環境

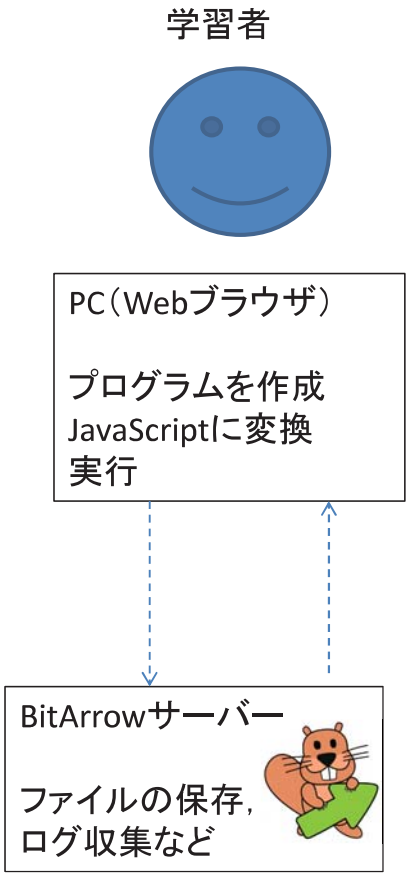
- Webブラウザでc言語を学ぶ環境
  – CloudCoder，CodeWrite
  → サーバサイドで実行

- インタラクティブ性の高いアニメーションなどには不向き
- サーバ側に処理系のインストールが必要
  – 変なコードで壊されないために，サンドボックス化等の対策も必要



BitArrowの特徴

- 学習者の環境セットアップ不要
  - 教員も
- 学習者の書いたプログラムをブラウザで直接実行
  - アニメーションなどのインタラクティブ性のある作品を作れる
- サーバの負荷・セットアップの手間が少ない（運営サイドのメリット）
  - gccなどの処理系不要
  - Apache,PHP,mysql等があればOK



Agenda

- BitArrowの特徴
- 言語ごとの特徴・実践例
  - JavaScript
  - C
  - ドリトル
- クラス管理機能
- さらなる機能追加

BitArrowは現在これら3つの言語が学習できる

JavaScript

JavaScriptをより簡単に書ける「教育用JavaScript」

- 学生にとってWebは身近な存在
- JavaScriptプログラミングを通じて，日常触れているWebアプリの仕組みを知ることができる

  例：ゲーム，LINE(チャット等)
- 制作した作品がネットワーク上で共有される体験ができる

  QRコードによるスマートフォンでの実行

教育用JavaScriptのコード例

HTML

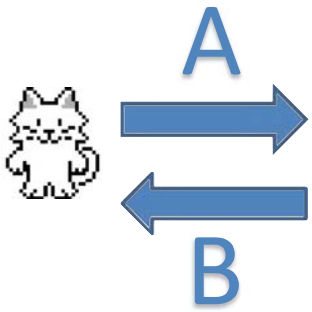
```
<html>
    <body>
        <img name="hello" src="images/neko1.png"/>
    </body>
</html>
```

教育用JavaScript

```
x=10;
y=0;
while(true){
    while(x<300){
        move("hello",x,y);
        x+=3;
        wait(30);
    }
    while(x>0){
        move("hello",x,y);
        x-=3;
        wait(30);
    }
}
```

A

B



- 「繰り返し」行う処理にwhile文を使用
  - waitメソッドは指定の時間(ms)処理を中断させる
- 要素を動かすためのmoveメソッド
  - 長い文が不要 document.getElementById…

BitArrowの開発環境（各言語共通）

- コーディングと実行を一つのウィンドウで行う
- エディタの入力補助
  - 「"」を打つと対となる「"」も自動入力
  - 実行時に自動セーブ・自動インデント
- エラー内容とおおまかな発生個所を表示
- 記述したコードはサーバと同期され、QRコードを発行し、スマホなどを通じ生徒間で共有可能

BitArrowのエラー表示

エラー

文法エラー 場所:Js02.tonyu:3:3

```
// Javascript
x=0;
y=0
while(true){
    while(x<300){
        move("helloWorld",x,y);
```

教育用JavaScript 授業実践

- 共同研究者の所属する高校にて
  - 神奈川県立柏陽高校
  - 2016年10月6日から11月8日までの間にBitArrowを利用(1年生，170名)
- 教育用JavaScriptを用いた簡単なアルゴリズム学習
  - FizzBuzzなど
  - (数値・文字列の代わりに)画像を表示させるなど，興味を持続させるようにした

プログラム例

HTML

```
<html>
    <body>
        <div name="t"></div>
    </body>
</html>
```

JavaScript

```
for(i=1;i<=40;i++){
    if(i%3==0 && i%5==0){
        addText("t","FizzBuzz");
    }else if(i%3==0){
        addText("t","Fizz");
    }else if(i%5==0){
        addText("t","Buzz");
    }else{
        addText("t",i);
    }
    addText("t","<br>");
    wait(100);
}
```

waitが入ると盛り上がる！

生徒の書いたプログラムの分析

- 生徒の書いたプログラムをログとして収集
- 処理系がエラーを発生させ、そのエラーが消えるまでの時間は平均して2分未満

→自力でのエラー脱出を支援できている

- プログラムがうまく動作しない原因
  - 書き間違い等：約1/5
  - アルゴリズムや構文の使い方の誤り：約3/4

→分岐と反復の使い方，アルゴリズムの構築について考えさせることができている

Agenda

- BitArrowの特徴
- 言語ごとの特徴・実践例
  - JavaScript
  - C
  - ドリトル
- クラス管理機能
- さらなる機能追加

BitArrow上のC言語の処理系「C-JS」

- C言語をJavaScript(JS)に変換しブラウザ上で実行
- JavaScriptとC言語は文法的に似ている
  - 文法はC→Java→JS と受け継いで，基本のところは同じ．演算子や制御構造などに共通点多い

  →これらの同じ部分は同じコードとして出力
- JavaScriptとC言語でデータ構造はだいぶ違う
  - C言語はすべてがメモリ空間．ポインタあり
  - JSはメモリ空間を制御できず，動的メモリのみの世界．メモリへの参照がポインタ代わり

  →これらの差異を吸収するようにコードを出力

C-JS：初学者向けへの配慮

- 初期化忘れ
  - 初期化されていない値には「ゴミ」をわざと混入 →ゴミ検出で警告
- 配列の範囲外のアクセス
  - 検出してエラーを出して停止
- 無限ループ
  - 5秒以上の実行で強制停止（scanfなどの待ち時間は除く）

C-JS: サポートする命令

- printf とscanf
  - フォーマット指定は%f, %d, %c, %s 対応
  - scanf の変数は1 つだけ指定できる.
- 数値関数（math.h）の一部
- 文字列関数（string.h）の一部
- rand

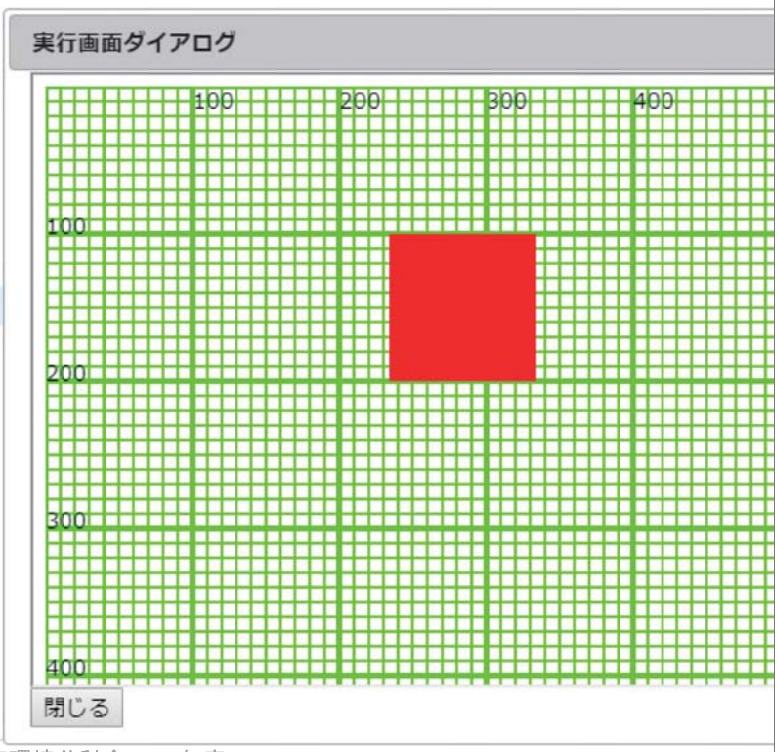
（malloc やファイルアクセスなどに未対応）

C-JS:グラフィックスライブラリ

fillRect	四角形を描く
fillOval	楕円を描く
clear	画面を消去する
setColor	描画色を設定する
drawGrid	座標を判別するための枠線を描画する
setPen	線分を描画する（開始点の指定）
movePen	線分を描画する（終了点の指定）
getkey	キーボードの押下状態を取得する
update	一定時間（1/60秒程度）待機する

Graph別ページで表示保存しました。

```
1  #include<x.h>
2  int main(void) {
3      int x=0,y=100;
4      drawGrid();
5      setColor(255,0,0);
6      while(1) {
7          clear();
8          fillRect(x,y,100,100);
9          x+=1;
10         update();
11     }
12 }
```



授業実践

- 明星大学 情報学部2年前期
  「プログラミングI」にてC-JSを使用
- 1年後期「プログラミング序論」の続き
  - FreeBSD+gccを使用
  - 変数，制御構造など
- 受講者44人
- 2限続き
  - 1限に単元の説明
  - 2限に課題

授業の内容

回	学習内容	題材
1	入出力，変数，演算	日付の計算，グラフィックスの入門
2	繰り返し	合計計算，繰り返しの図形表示，アニメーション
3	条件判断	数当て，アニメーションの動作変更
4	関数	三角形の描画，面積の計算，再帰
5	配列	複数の図形からなるアニメーション，2次元配列
6	構造体	前回のプログラムを構造体に置き換える
7	これまでの復習	確認問題（以降数回実施）
8	ポインタ・参照渡し	第6回の内容にポインタを適用
9	マクロ	ゲーム制作:プレイヤーと敵の作成，衝突判定
10	配列の参照渡し	前回のプログラムを関数にまとめる
11	配列の探索	ゲーム制作: 弾の発射
12	並べ替え	ゲーム制作: スコアランキング
13	総合	作品制作
14	総合	コンテスト
15	総合	まとめ

授業時間外の利用

- 総アクセス数
  - 授業時間内：97473回(90%)
  - 授業時間外：10300回（10%)

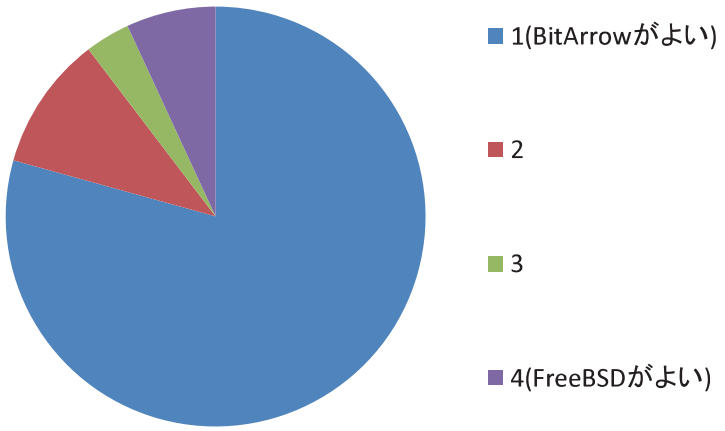
  →教室での演習時間だけでなく，課題をこなすための時間外アクセスがある程度見られた

アンケートによる授業の結果

BitArrowがよい (1)から
従来の学習環境（FreeBSD）がよい(4)までの
4段階の尺度で回答

n=29

尺度	人数
1	23
2	3
3	1
4	2



アンケートで集まった意見

- よい意見
  - 直感的に操作できる
  - エディタの補完機能
  - エラーの把握が楽
  - どこでも使える
  - ゲームを作るのが楽しい
- 悪い意見
  - ネットで調べたものが(C-JSと一般的なCで）互換性がなくて)実行できない
  - 一般的なCと異なる動作をするので混乱する

Agenda

- BitArrowの特徴
- 言語ごとの特徴・実践例
  - 教育用JavaScript
  - C
  - ドリトル
- クラス管理機能
- さらなる機能追加

ドリトルとは

- ドリトルとは
  - 日本語の命令でプログラムが書ける
  - オブジェクト指向の基本が学べる
  - もともとはJavaで開発
  - アプレット版でブラウザからもアクセスできる

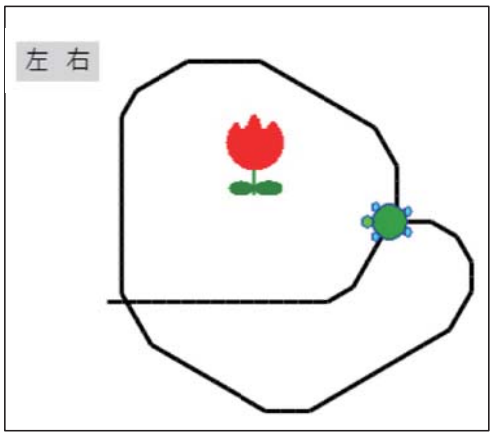
- JavaScriptのみで動作できるように書き直し，BitArrowに搭載
  - 多くの機能でJava版と互換性をもつ

ドリトルのプログラム例

- プログラミング未経験者でも30分程度でゲーム制作などを体験可能

Kameneko1

```
かめた＝タートル！作る。
左ボタン＝ボタン！"左" 作る。
左ボタン:動作＝「かめた！30 左回り」。
右ボタン＝ボタン！"右" 作る。
右ボタン:動作＝「かめた！30 右回り」。
時計＝タイマー！作る。
時計！「かめた！10 歩く」実行。
タートル！作る ペンなし "tulip.png" 変身する
100 100 位置。
かめた:衝突＝「｜相手｜ 相手！消える」。
```



BitArrow版での新機能

- スマートフォンのセンサーを利用したプログラム

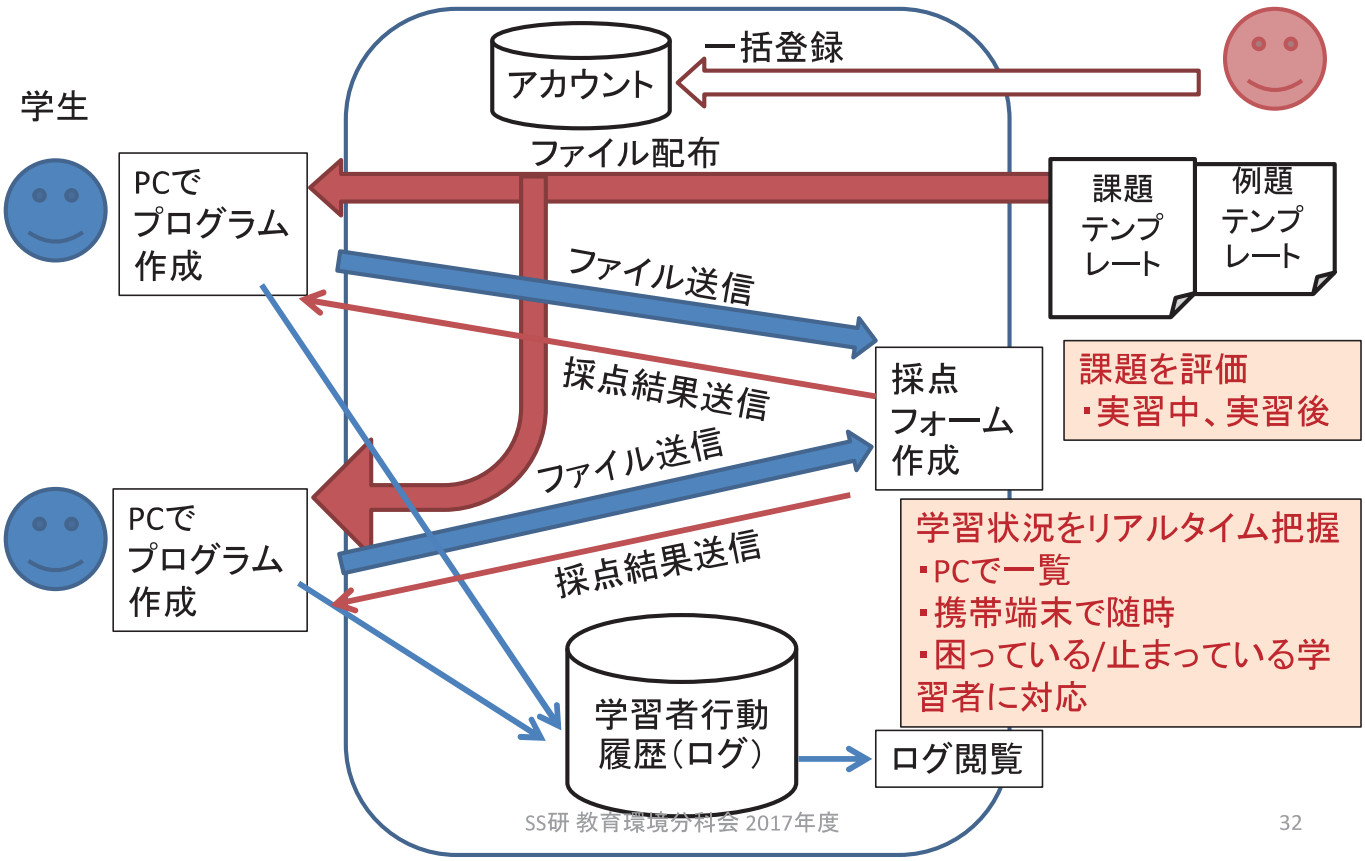
```
かめた＝タートル！作る.
タイマー！作る　１２０　時間「
　かめた！（加速度センサ！左右の加速度？）
　（加速度センサ！前後の加速度？）移動する.
」実行.
```

Agenda

- BitArrowの特徴
- 言語ごとの特徴・実践例
  - JavaScript
  - C
  - ドリトル
- クラス管理機能
- さらなる機能追加

教員支援機能の全体構成

準備から評価までを支援



学習状況把握(1)携帯端末

- 実習時の学習者の状態を一覧
- 携帯端末で確認（TA/教員）
  - 同じ間違いで学習停止
  - 集中できず作業停止
- 特徴のある状況を強調表示
  - 困っている学生を発見してフォロー

学習状況把握(2)PC画面

- 未操作時間を色表示
- コンパイルエラーを色表示
- コンパイル履歴
  - 成功（R）
  - 失敗（E）

1	11/11(100%)	00:01:03	0512/P0512_4.c	EEEEEEEEEEE
8	6/6(100%)	00:02:10	0512/P0512_1.c	EEEEEE
5	6/7(85%)	00:03:31	0512/P0512_3.c	EREEEEE
8	14/19(73%)	00:00:04	0512/P0512_3.c	RERREEEEEEEEEEEERREE
7	8/13(61%)	00:00:04	0512/P0512_2.c	EEEEEEREERRRR
5	3/5(60%)	00:00:23	0512/P0512_2.c	REEER
.3	1/2(50%)	00:03:19	0512/P0512_3.c	ER
1	2/4(50%)	00:02:56	0512/P0512_3.c	RREE
e3	1/2(50%)	00:08:19	0512/P0512_2.c	ER
2	9/19(47%)	00:00:09	0512/P0512_3.c	RERREEERERREREERRE
2	2/5(40%)	00:00:56	0512/P0512_1.c	RRERE
.5	3/8(37%)	00:00:41	0512/P0512_2.c	RRRRREEE
.4	1/3(33%)	00:02:50	0512/P0512_3.c	ERR
0	1/3(33%)	00:06:04	0512/P0512_5.c	ERR
3	3/9(33%)	00:02:05	0512/P0512_2.c	EERRRERRR
4	1/3(33%)	00:06:08	0512/P0512_6.c	RER
7	3/11(27%)	00:00:09	0512/P0512_3.c	RRRRRRREERE

学習状況把握(3)詳細状況

6/6(100%)	00:02:10	0512/P0512_1.c	EEEEEE

6/7(85%)	00:03:31	0512/P0512_3.c	EREEEEE
			Prev Next
			C Compile Error
			---------- 	
			#include<stdio.h>
			int seihoukei_menseki(int nagasa);
			
			int main() {
			//-----ここを埋める
			// (printf,scanfを使う)
			// (途中でseihouke_menseki を呼び出す)
			int m,menseki;
			m = seihoukei_menseki(menseki);
			scanf("%d¥n",&nagasa)
			printf("面積 %d ¥n" , m)
			}
			
			int seihoukei_menseki(int nagasa) {
			//----ここを埋める(printfは使わない)
			int menseki;
			menseki = nagasa*nagasa;
			return menseki;
			}

14/19(73%)	00:00:04	0512/P0512_3.c	RERREEEEEEEEEEERREE

課題の配布機能

Kadai1別ページで表示

```
// C
#include<stdio.h>
int main(){
    int i;
    for(i=0;i<10;i++){
        printf("hello world\n");
    }
}
```

教員が作った課題の正解プログラム

一斉配布

プログラム

```
// C
#include<stdio.h>
int main(){
    int i;
    // 10回「hello world」と繰り返し表示せよ

    // ここまで
}
```

配布用に編集したプログラム

評価支援（1）概要

- 提出課題を対話的に評価
  - ソースコードを閲覧・読解
  - 実行して動作検証
  - 点数やコメントの記載
- グラフィックスプログラムの動作検証に対応する

評価支援（2）教員コメント

test_class/hori/0414/P0414_2

プログラム

```
#include<stdio.h>
int main(void) {
    int a, b;
    printf("input a : ");
    scanf("%d", &a);
    printf("input b : ");
    scanf("%d", &b);
    printf("%d + %d = %d", a, b, a+b);
}
```

実行結果

入力1

15
5

出力1

input a : input b : 15 + 5 = 20

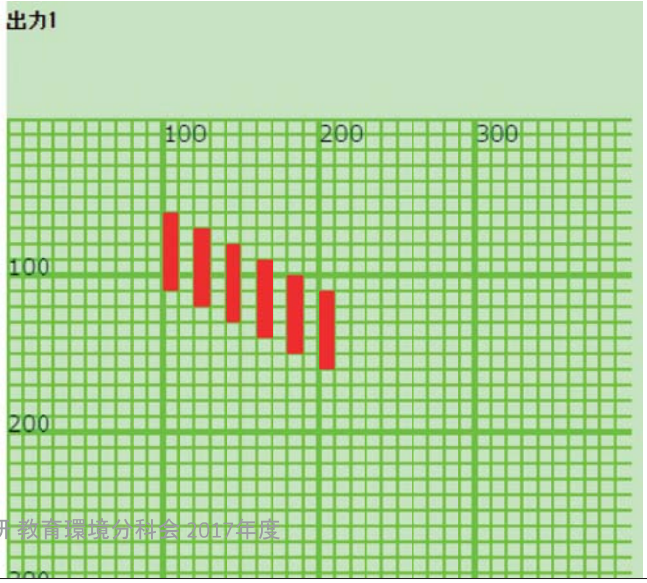
OK!

送信 正解

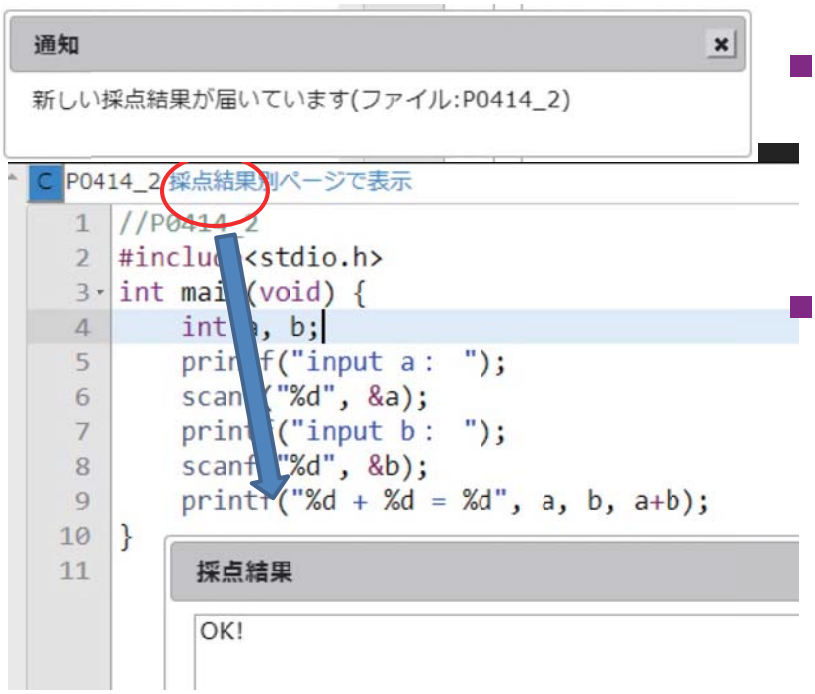
- 提出されたプログラムと実行結果を表示
- 教員が確認してコメントを返す

評価支援(3)実行確認

- グラフィックスをダイジェスト表示
- 動きに変化が起きる画像を連続的に提示



学習者によるコメントの確認



- 編集画面に教員からコメントが来た旨が通知される
- コメントの内容によっては修正して再提出する

Agenda

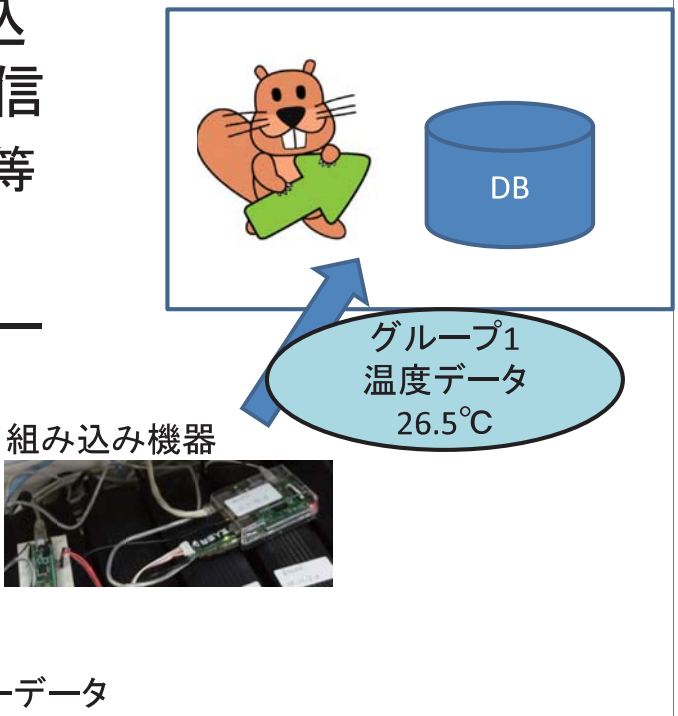
- BitArrowの特徴
- 言語ごとの特徴・実践例
  - JavaScript
  - C
  - ドリトル
- クラス管理機能
- さらなる機能追加

今後の機能

- 組み込み機器などからのデータ収集
- 統計・グラフ
  →データサイエンス・IoTの体験
- 共有データ
  → ネットワークアプリケーションの体験

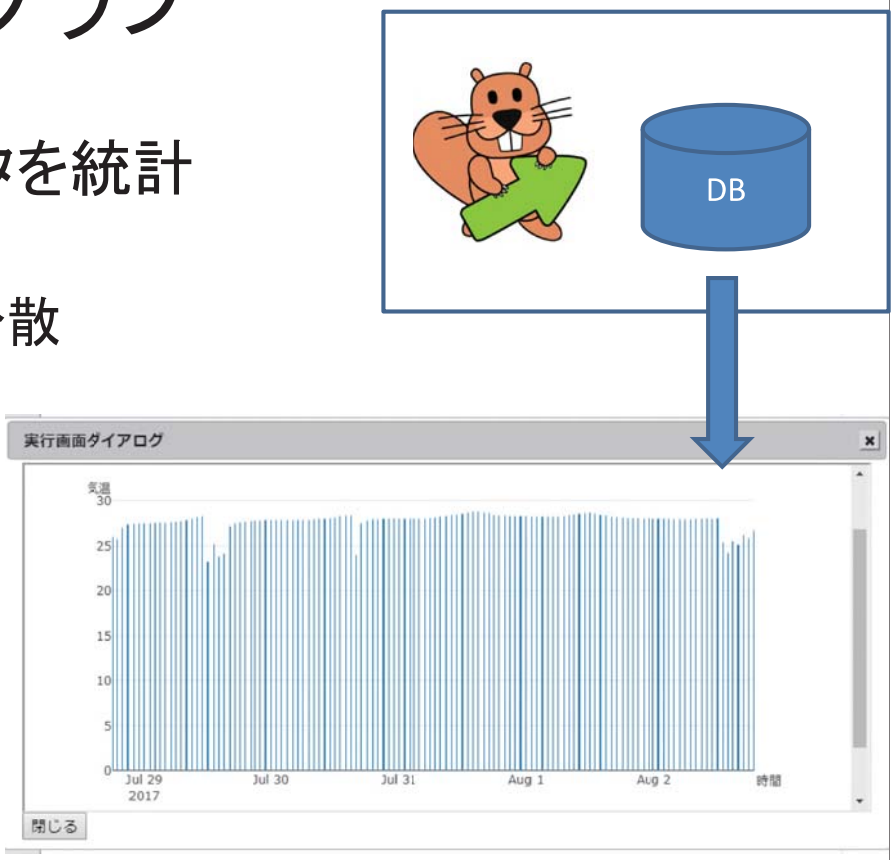
組み込み機器からのからのデータ収集

- HTTP通信が可能な組み込み機器からBitArrowに送信
  - ラズベリーパイ，Aruduino等
  - 温度等のセンサーデータ
- クラス・グループごとにデータを共有



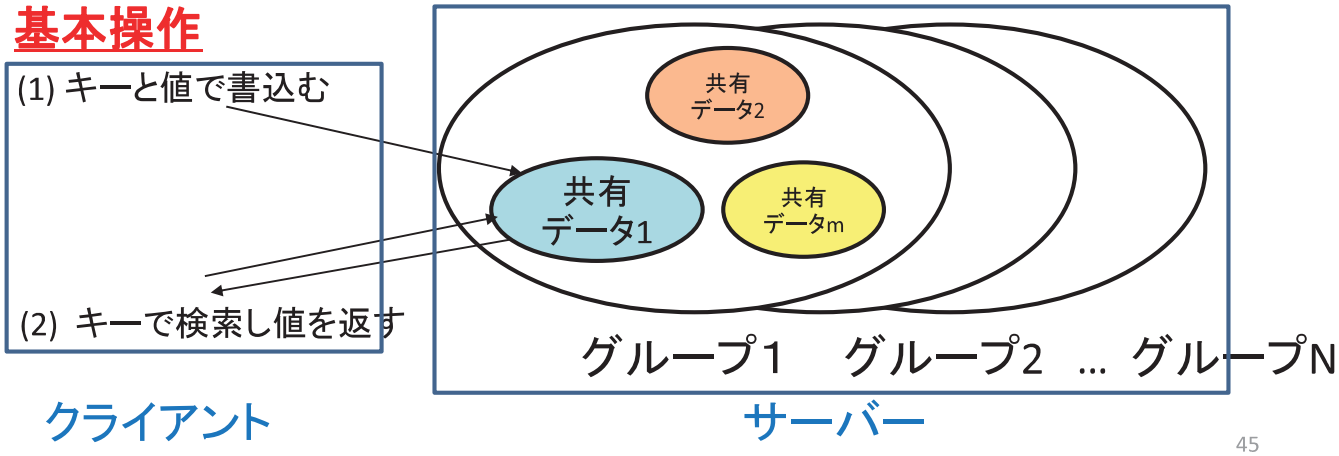
統計・グラフ

- 収集したデータを統計分析
  - 合計・平均・分散
  - グループ化
  - 相関係数
- グラフ化



共有データ

- ネットワーク上の仮想共有空間（Key-Value Store）を通じた通信プログラムの作成
  - 通信を用いた対戦ゲーム
  - LINEなどのSNS



まとめ

- Webブラウザ上で動作可能なプログラミング学習環境「BitArrow」の紹介
  - プログラミング初心者に配慮した3つの言語を提供
  - 統計・IoT・ネットワークなどの学習体験
  - 教員支援
- ご利用をお待ちしております

  Webサイト http://bitarrow.eplang.jp/

  （クラス登録も本サイトから）

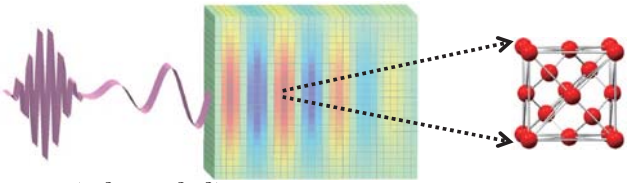
量子ダイナミクスの第一原理計算と光科学フロンティアへの展開

矢花 一浩（筑波大学）

量子ダイナミクスの第一原理計算と光科学フロンティアへの展開

矢花一浩

筑波大学計算科学研究センター



$$\left(\nabla^2 - c^{-2}\partial_t^2\right)\mathbf{A} = -4\pi\mathbf{J}/c$$

Bulk material
(Electromagnetics)

$$i\hbar\partial_t\Psi = \hat{\mathcal{H}}\Psi$$

Crystalline unit cell
(Quantum mechanics)

自己紹介

1982.4 – 1987.3
京都大学大学院理学研究科物理学第二専攻
原子核物理学の理論（博士学位取得）

1987.4 – 1988.2
京都大学基礎物理学研究所（学振特別研究員）

1988.2-1999.7
新潟大学理学部助手、助教授

1999.8-2004.3
筑波大学物理学系助教授、教授

2004.4-現在
筑波大学計算科学研究センター教授
・量子物性研究部門（部門長）
・原子核物理研究部門

原子核物理学 ➡ 量子（波動）ダイナミクス・シミュレーション ➡ 光科学

・量子（波動）ダイナミクス計算とは

・原子核物理学からナノサイエンス、そして光科学へ

・光科学フロンティア：強い光・短い光

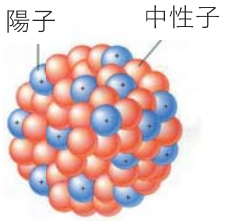
・電磁気学と量子力学の多階層連結シミュレーション

・Oakforest-PACS全ノード計算の試み

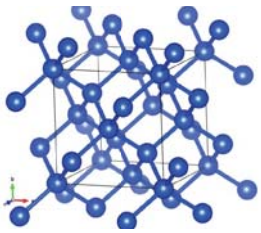
高校物理の最後に学ぶこと

物質と光は、ともに粒子でもあり波動でもある。

しかし、現実の問題どのような状況で粒子になるか波動になるかは、結構複雑。

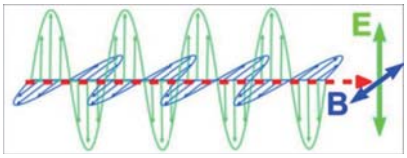


原子核の中の
陽子と中性子＝波動



物質：電子＝波動
原子＝粒子

DFT（波動）・MD（粒子）



光電磁場：
（多くの場合）動

FDTD法（波動）

物質の波動計算の難しさ

粒子：古典力学（ニュートン方程式）
波動：量子力学（シュレディンガー方程式）

$$\left[\sum_{i=1}^{N}-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_i+V(\vec{r}_i)+\sum_{i<j}^{N}v(\vec{r}_i-\vec{r}_j)\right]\Psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2,\cdots,\vec{r}_N,t)=i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2,\cdots,\vec{r}_N,t)$$

ニュートン力学であれば、

$$M_i\frac{d^2\vec{R}_i(t)}{dt^2}=\sum_j\vec{F}_{ij}$$

自由度の数は、粒子数をNとして
3N

量子力学では、座標を100点に分割すると、自由度の数は、粒子数をNとして

$$\Psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2,\cdots,\vec{r}_N,t)$$

$$100^{3N}$$

直接計算が可能なのは、高々数粒子系（2， 3， 4， …）まで

多数の粒子を含む物質をどうやって扱うか？

密度汎関数理論

波動関数 $\Psi(r_1,r_2,r_3,\cdots,r_N)$ ではなくて、
密度 $n(\vec{r})$ を扱えば良い。

W. Kohn
1998年ノーベル化学賞

実際の計算は、「平均場近似」
それぞれの粒子が、平均的な場の中を
独立に運動する。

$$\Psi(r_1,r_2,r_3,\cdots,r_N)\approx A\psi_1(r_1)\psi_2(r_2)\cdots\psi_N(r_N)$$

100^{3N} 元々の自由度

$\psi_i(r)$ 自由度の数は、N×100^3

厳密な計算に比べて、圧倒的に計算量は少ないが、大胆な近似をすることになる。

「物質科学の第一原理計算は、経験的パラメータは含まないが、大胆な近似を伴う。」

波には定在波と進行波がある。

これまでの、物質科学の計算：
電子波動（軌道）関数の定在波計算

$$H\phi_i(r) = \varepsilon_i\,\phi_i(r)$$

（密度汎関数理論）

この講演で考える量子（波動）ダイナミクス計算：
電子波動（軌道）関数の進行波計算

$$H\psi_i(r,t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi_i(r,t)$$

（時間依存密度汎関数理論）

光が照射した物質の中で、電子の運動を記述できる。

原子核衝突のシミュレーション（時間依存密度汎関数理論）

私が大学院に入学 (1982) する数年前

H. Flocard, S.E. Koonin, M.S. Weiss,
Phys. Rev. 17(1978)1682.

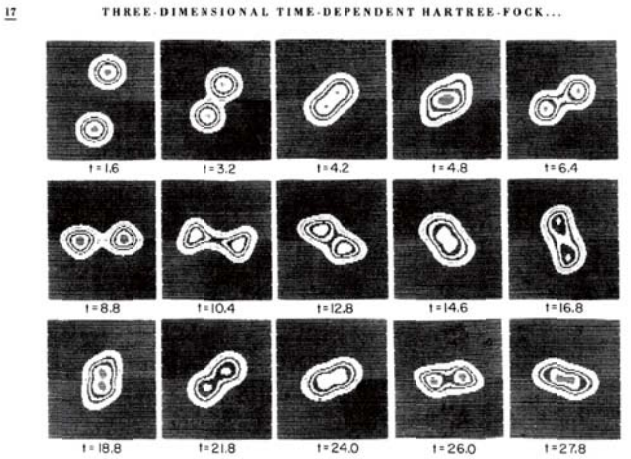


FIG. 2. Contour lines of the density integrated over the coordinate normal to the scattering plane for an $^{16}O+^{16}O$ collision at $E_{lab}=105$ MeV and incident angular momentum $L=13\hbar$. The times t are given in units of 10^{-22} sec.

^{16}O-^{16}O collision

Spatial grid 30x28x16, time step 4×10^{2}

Time evolution of proton and neutron orbitals.

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi_i(\vec{r},t) = h[n(\vec{r},t)]\psi_i(\vec{r},t)$$

$$n(\vec{r},t) = \sum_i |\psi_i(\vec{r},t)|^2$$

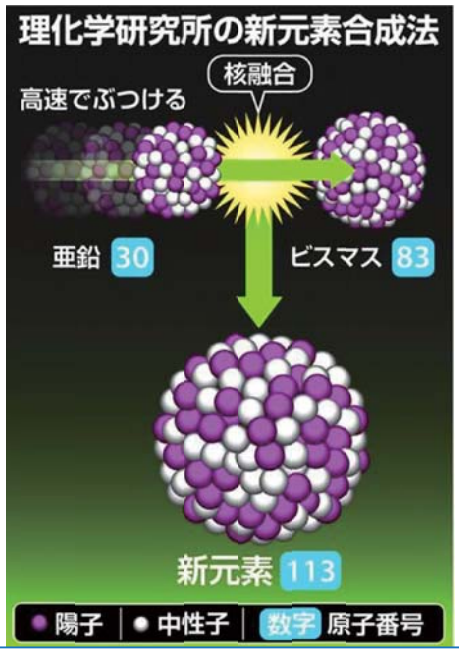
$$\psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2,\cdots,\vec{r}_N,t) = A\{\psi_1(\vec{r}_1,t)\psi_2(\vec{r}_2,t)\cdots\psi_N(\vec{r}_N,t)\}$$

当時のスパコン
CRAY-1 (80MFLOPS)

原子核物理の最近の話題

原子番号１１３番：　新元素合成（ニホニウム）

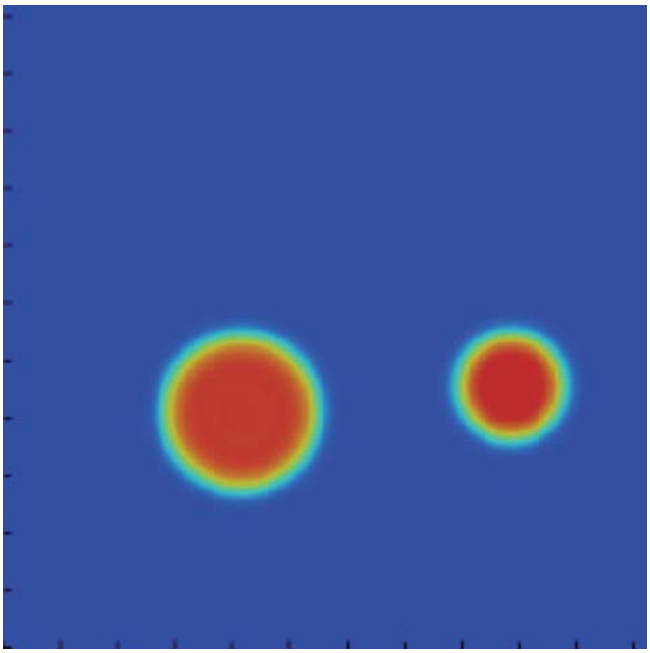
2015.12.30 IUPAC, IUPAPが、新元素Z=113, 115, 117, 118を認定。
Z=113元素の命名権が理研グループに。2016.11正式名称決定。



超重原子核 Z=120 生成の時間依存密度汎関数理論によるシミュレーション

K. Sekizawa, K. Yabana, Phys. Rev. C93, 054616 (2016)

^{238}U + ^{64}Ni　(proton number: 92 + 28 = 120)



全部で238+64=302個の
陽子と中性子（フェルミ粒子）
に対する量子シミュレーション

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi_i(\vec{r},t) = h[n(\vec{r},t)]\psi_i(\vec{r},t)$$

$$n(\vec{r},t) = \sum_i |\psi_i(\vec{r},t)|^2$$

空間：フェムトメートル(10^{-15}m)
時間：ゼプトセカンド(10^{-21}s)

10

・量子（波動）ダイナミクス計算とは

・原子核物理学からナノサイエンス、そして光科学へ

・光科学フロンティア：強い光・短い光

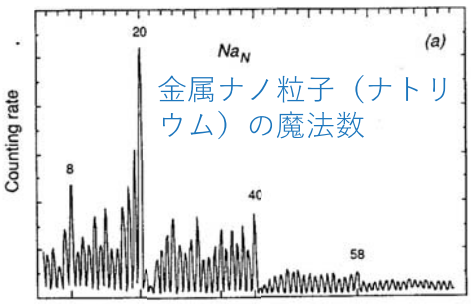
・電磁気学と量子力学の多階層連結シミュレーション

・Oakforest-PACS全ノード計算の試み

量子ダイナミクス計算が、原子核物理から光科学・物質科学に展開するきっかけ

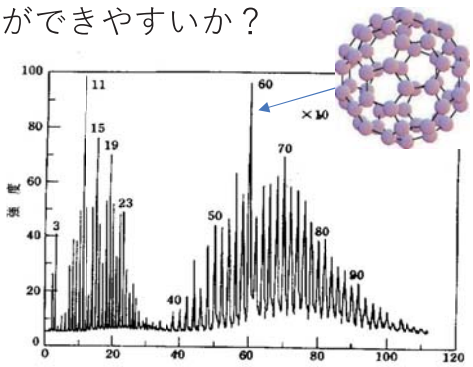
1980年代：ナノサイエンスの誕生

質量分布：どのサイズのナノ粒子ができやすいか？



金属ナノ粒子： 2,8,20,40,58,92,138、…

原子核： 2,8,20,28,50,82,126、…



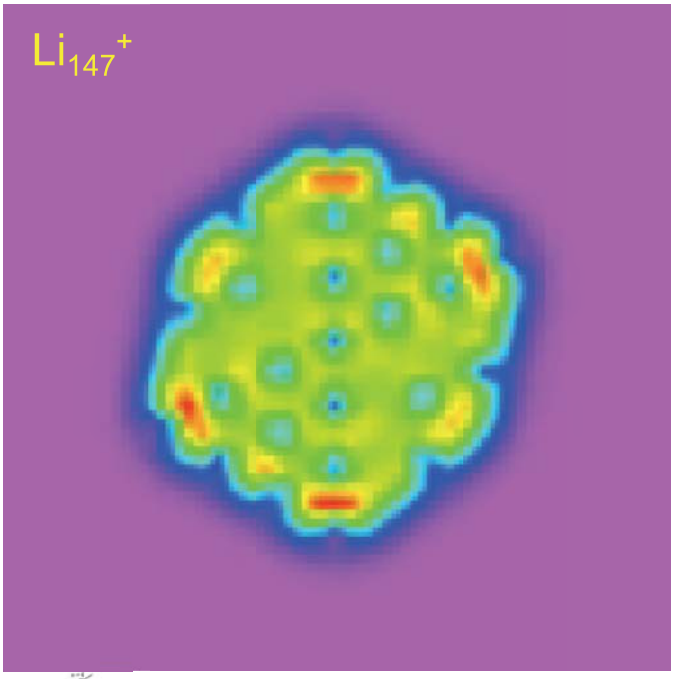
炭素のナノ粒子：
フラーレンC_{60}の発見

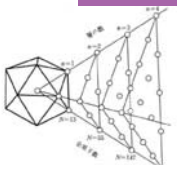
ナノサイエンスは、様々な分野の学際科学として発展
異分野交流が盛んな時代

物性物理学（固体）、量子化学（分子）、原子核物理学（原子核）・・・

ナノ粒子の光応答の時間依存密度汎関数理論計算(1996-)

K. Yabana, G.F. Bertsch, Phys. Rev. B54, 4484 (1996).

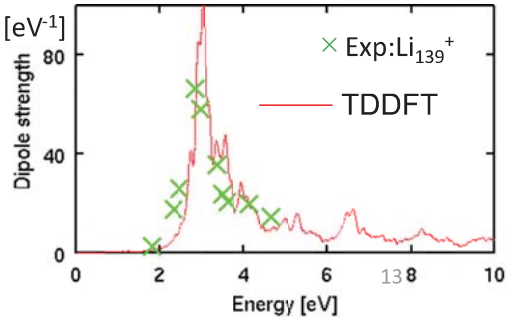




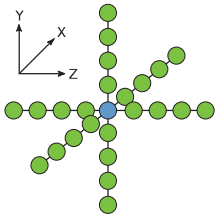
全ての電子に撃力を加えた後の電子運動

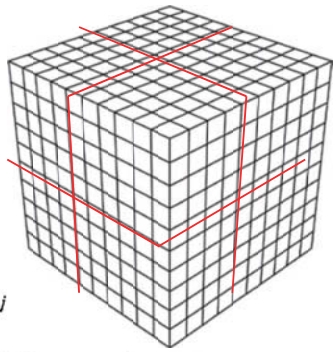
正20面体配位を仮定

光吸収断面積



計算法：実時間・実空間解法





３次元デカルト座標を離散化：高次差分法
擬ポテンシャル

J. Chelikowsky et.al, Phys. Rev. B50(1994)11355

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\sum_{n_1=-N}^{N} C_{n_1}\psi(x_i+n_1h,y_j,z_k)+\sum_{n_2=-N}^{N} C_{n_2}\psi(x_i,y_j+n_2h,z_k)+\sum_{n_3=-N}^{N} C_{n_3}\psi(x_i,y_j\right.$$
$$+[V_{\rm ion}(x_i,y_j,z_k)+V_H(x_i,y_j,z_k)+V_{\rm xc}(x_i,y_j,z_k)]\psi(x_i,y_j,z_k)=E\psi(x_i,y_j,z_k)\ .$$

RSDFT (2013 Gordon Bell Prize)と同じ計算方法

時間発展のアルゴリズム: 陽解法(テイラー展開)

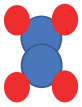
K. Yabana, G.F. Bertsch, Phys. Rev. B54, 4484 (1996).

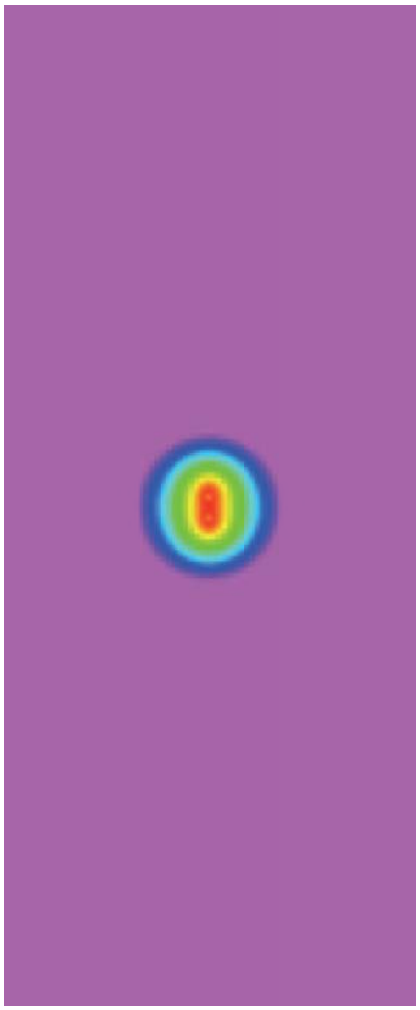
$$\psi_i(t+\Delta t)=\exp\left[\frac{h_{KS}(t)\Delta t}{i\hbar}\right]\psi_i(t)\approx\sum_{k=0}^{N}\frac{1}{k!}\left(\frac{h_{KS}(t)\Delta t}{i\hbar}\right)\psi_i(t),\qquad N=4$$

物質科学では、これまで平面波を用いた計算が主流。
この頃から並列化に優れた実空間解法が大規模計算で用いられるようになる。

分子にパルス光を照射する

エチレン分子(C_2H_4)

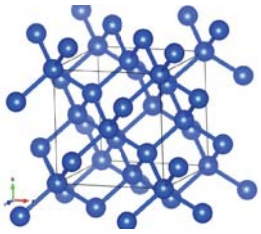




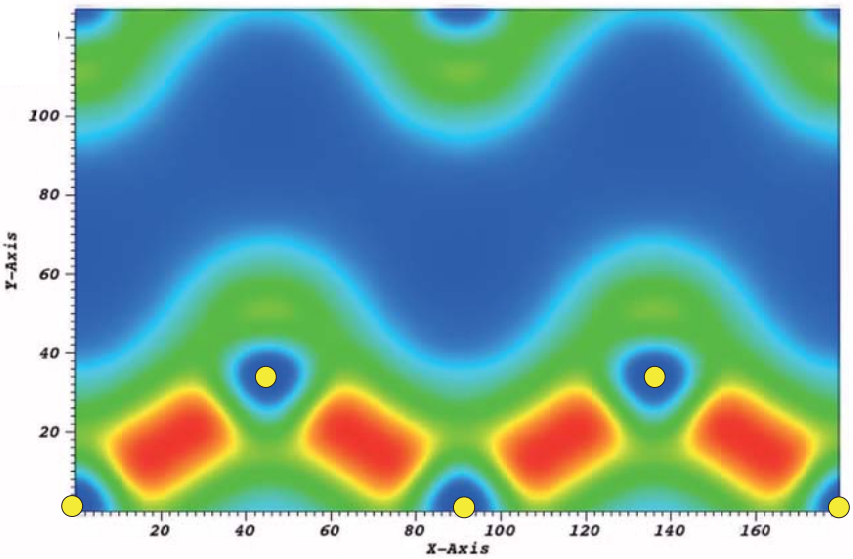
電子密度の時間変化

電子再散乱
高次高調波発生

結晶にパルス光を照射する



シリコン結晶中の電子の密度分布



・量子（波動）ダイナミクス計算とは

・原子核物理学からナノサイエンス、そして光科学へ

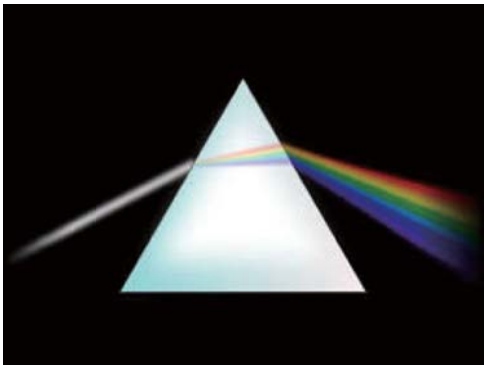
・光科学フロンティア：強い光・短い光

・電磁気学と量子力学の多階層連結シミュレーション

・Oakforest-PACS全ノード計算の試み

光と物質の相互作用を特徴づけるのは・・・　屈折率と誘電率

$$n = \sqrt{\varepsilon}$$



分散関係
（振動数依存性）

$$n(\omega), \quad \varepsilon(\omega)$$

非線形性
（強度依存性）

$$n = n_0 + n_2 E^2$$

18

もう少し、詳しく書くと・・・

光と物質の相互作用には、２つの物理学が関わっている。

電磁気学

物質中の光の伝播を記述するのは
巨視的マクスウェル方程式

$$\nabla \cdot \boldsymbol{B} = 0$$
$$\nabla \times \boldsymbol{E} + \frac{\partial \boldsymbol{B}}{\partial t} = \boldsymbol{0}$$
$$\nabla \cdot \boldsymbol{D} = \rho$$
$$\nabla \times \boldsymbol{H} - \frac{\partial \boldsymbol{D}}{\partial t} = \boldsymbol{j}$$

$$D = \varepsilon E$$

量子力学

光電場と電子の相互作用に摂動論を
用いると、誘電率の式が得られる。

$$\varepsilon_r = 1 + \frac{2Ne^2}{\varepsilon_0 \hbar} \sum_j \frac{\omega_{j0} \left| \langle 0 | x | j \rangle \right|^2}{\omega_{j0}^2 - (\omega + i\gamma)^2}$$

19

しかし、それだけでは済まないこともある。

例えば、レーザーを用いて、「透明」なガラスを「加工」することができる。

$$\mathrm{Im}\,\varepsilon = 0 \qquad \mathrm{Im}\,\varepsilon \neq 0$$

つまり、強いレーザーを照射すると、ガラスは透明ではなくなる。
これは、通常の電磁気学では記述できない。

20

高強度パルス光と物質の相互作用

太陽定数
0.1366 W/cm^2

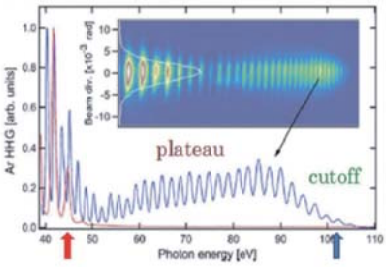
$10^{13} - 10^{15}$ W/cm^2

最強のレーザー
10^{22} W/cm^2 光強度

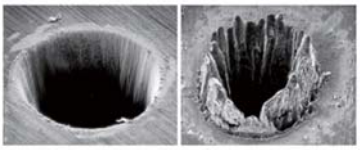
非線形光学
$\chi^{(2)}, \chi^{(3)}$

極限非線形光学
高次高調波発生
レーザー加工

原子核反応
真空崩壊

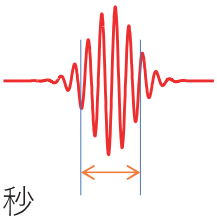


高次の非線形光応答で、
可視光からX線を作る。



超短パルス光（フェムト秒）を
使うと微細加工が可能になる。

超短パルス光と、さまざまな現象の時間スケール



ピコ秒 10^{-12} s

フェムト秒 10^{-15} s

アト秒 10^{-18} s

時間 10^{-23} s

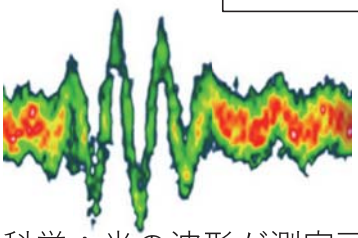
光学フォノン
(Si, 64 fs)

水素原子の電子軌
道周期, 150as

Ti-sapphire
レーザー周期

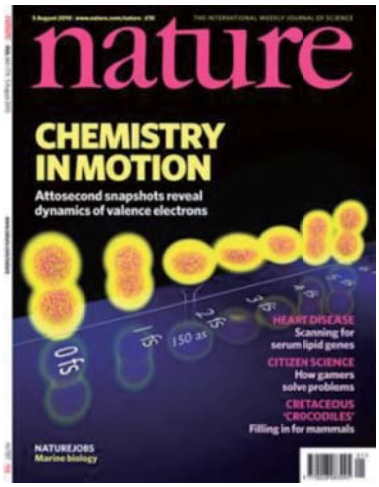
最も短いレーザーの
パルス長　64 as

原子核中の
陽子・中性子運動



アト秒科学：光の波形が測定可能に
http://www.attoworld.de (Max Planck Inst. for Quantum Optics)

電子が動く様子を
撮影する試み
E. Goulielmakis et.al,
Nature 466, 739 (2010).



未来の「ペタヘルツ光デバイス」実現に向けて

Attosecond nanophotonics
G. Vampa, H. Fattahi, J. Vuckovic, F. Krausz, Nature Photonics 11, 210 (2017)

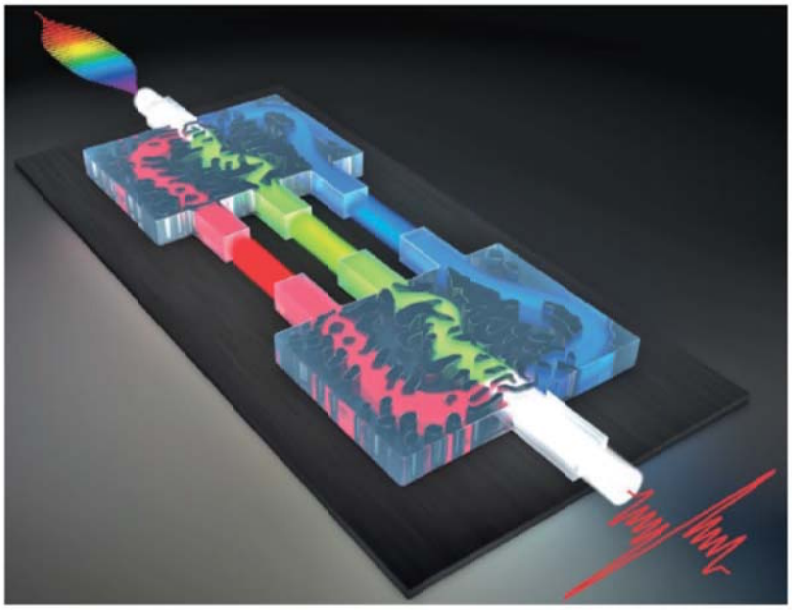


Figure 1 | On-chip ultrafast photonics. Nanophotonic devices can be designed to introduce controlled delays between different wavelengths of broadband laser pulses, akin to the role of bulk, chirped gratings in free space. This capability potentially allows controlled, ultrafast optical waveforms to be obtained at the output.

・量子（波動）ダイナミクス計算とは

・原子核物理学からナノサイエンス、そして光科学へ

・光科学フロンティア：強い光・短い光

・電磁気学と量子力学の多階層連結シミュレーション

・Oakforest-PACS全ノード計算の試み

結晶表面に入射する強いパルス光

パルス光

$\lambda = 800\text{nm},$

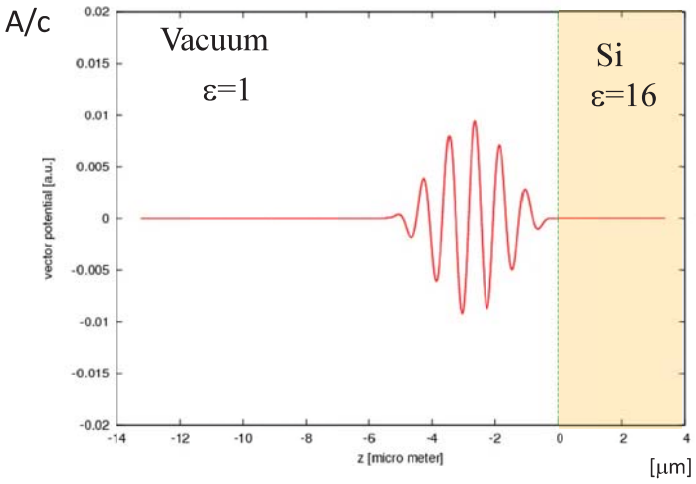
$\hbar\omega = 1.55\text{eV}\,(\text{below direct gap})$

誘電率を仮定

$$\varepsilon(z) = \begin{cases} 16 & (\text{Si}) \\ 1 & (\text{vacuum}) \end{cases}$$

波動方程式

$$\frac{\varepsilon(z)}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}A(z,t) - \frac{\partial^2}{\partial z^2}A(z,t) = 0$$



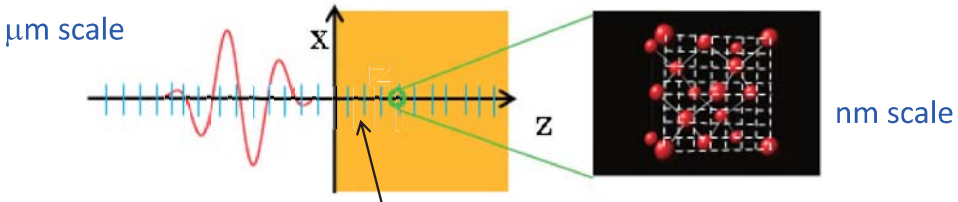
弱い光は、これで良い。
強い光の場合、誘電率を使わない記述が必要となる。

25

電磁気学と量子力学を繋ぐ多階層シミュレーション

マクスウェル方程式
（電磁気学）

時間依存密度汎関数理論
（量子力学）



$$\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}A_Z(t) - \frac{\partial^2}{\partial Z^2}A_Z(t) = \frac{4\pi}{c}J_Z(t)$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}u_{Z,n\vec{k}}(\vec{r},t) = h\left[\vec{A}_Z(t), n_Z(\vec{r},t)\right]u_{Z,n\vec{k}}(\vec{r},t)$$

$$\vec{J}_Z(t) = \frac{1}{V}\int_V \vec{j}_Z(\vec{r},t)$$

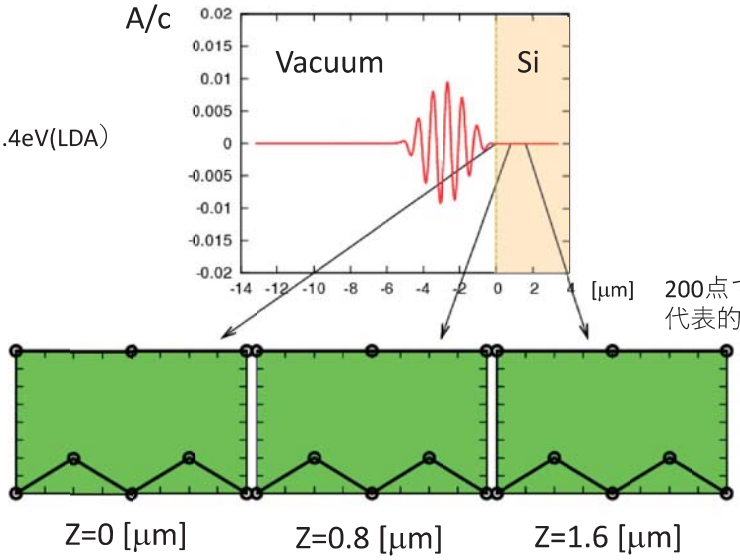
マクスウェル方程式の各格子点で、
電子ダイナミクス計算を並列実行。

K. Yabana et.al, Phys. Rev. B85, 045134 (2012).

弱いパルス光がSi結晶に入射する場合
(線形領域、誘電率による記述が有効)

$I=10^{10}W/cm^2$

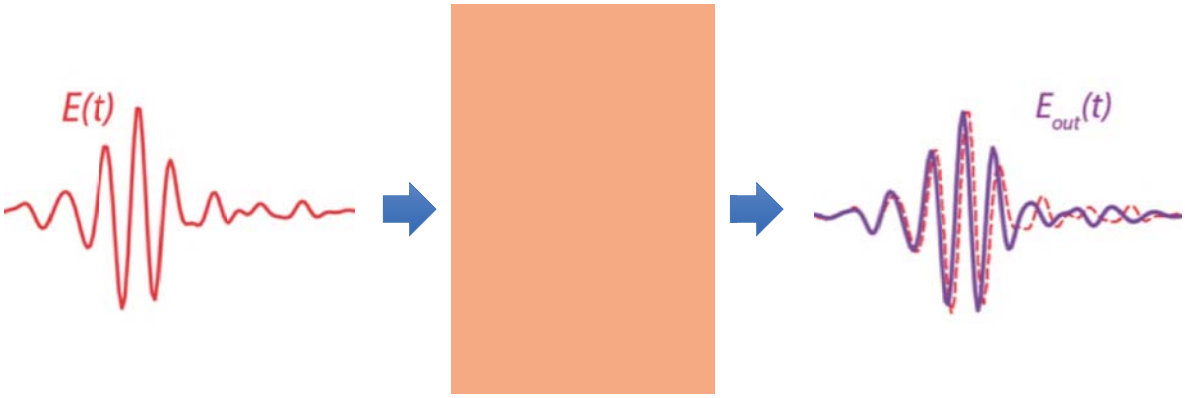
振動数：1.55eV
直接バンドギャップ：2.4eV(LDA)



200点で電子ダイナミクスを計算
代表的な３点を示す。

27

ガラスの薄膜は、どのくらいの光強度から不透明になるのか？



SiO_2薄膜
10μm

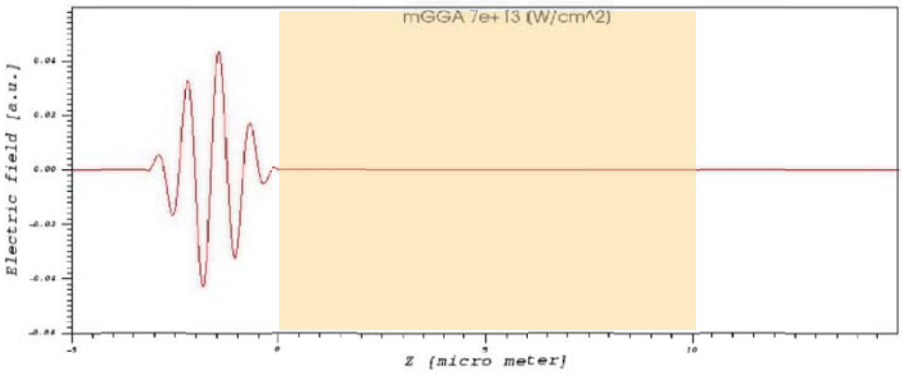
Laser pulse propagation: 10 μm SiO_2

Laser electric field, red (strong), blue (weak)

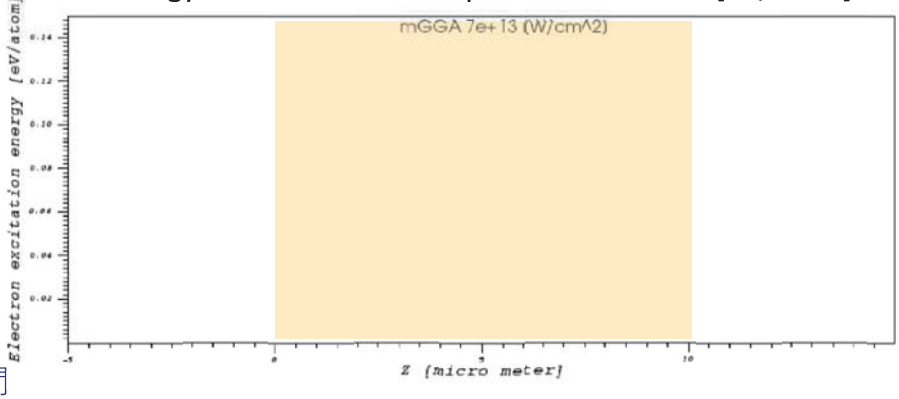
$\hbar\omega = 1.55\text{eV}$

$\lambda = 800\text{nm}$

$I = 7\times10^{13}\text{W/cm}^2$

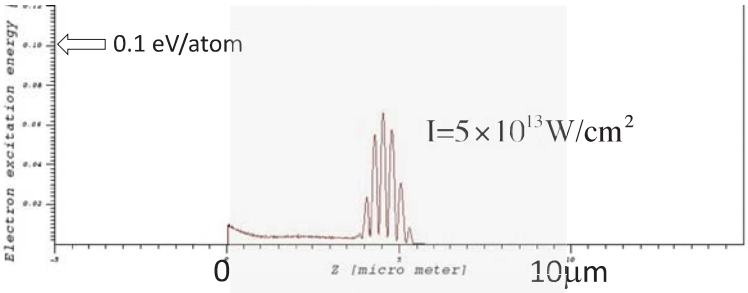


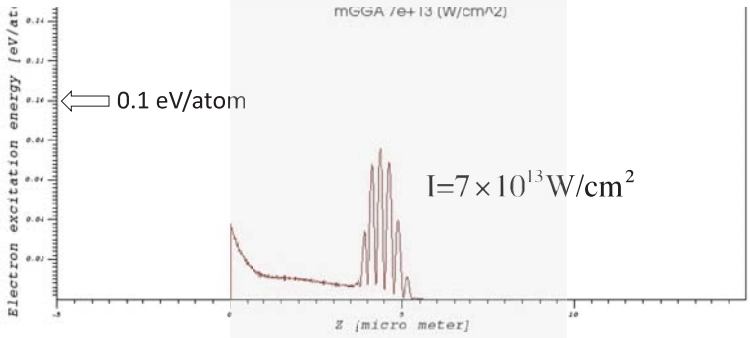
Energy transfer from laser pulse to electrons [eV/atom]

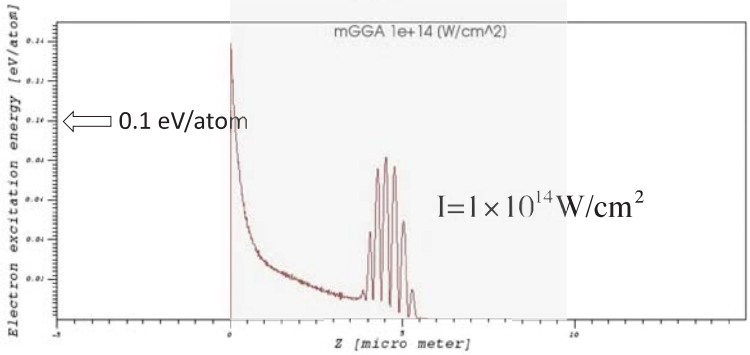


京コンピュータ
10,000ノード, 20時間

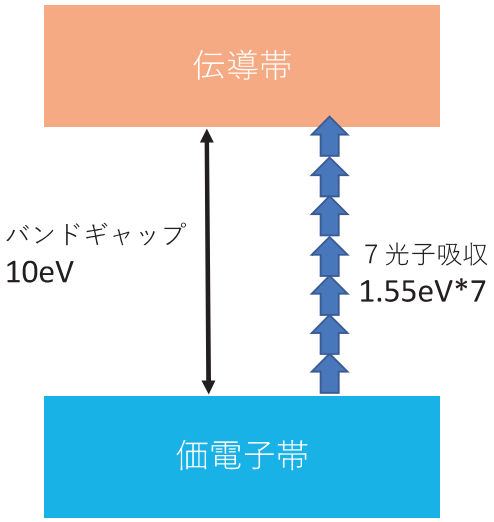
あるレーザー強度から、
光から電子へのエネルギー
移行が急激に増加





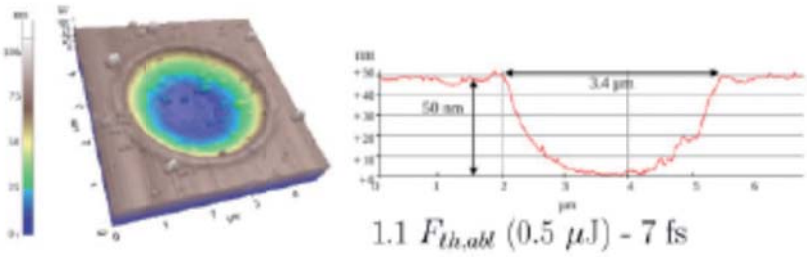


多光子/トンネル励起



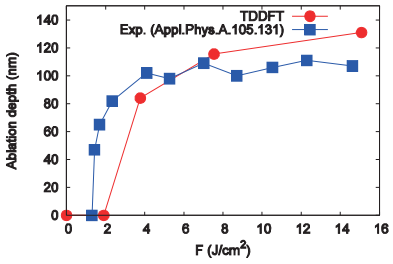
レーザーアブレーションの深さ

パルスレーザーをガラス表面に１回照射すると、およそ100nmの穴があく。



B. Chimier et al, Phys. Rev. B84, 094104 (2011)

電磁気学＋量子力学を多階層連結した第一原理シミュレーションは、
レーザーの加工閾値と、穴の深さを、おおよそ再現する。



S.A. Sato et.al, Phys Rev. B92, 205413 (2015)

31

SALMON プロジェクト （筑波大学＋分子科学研究所）

Scalable Ab-initio Light-Matter simulator for Optics and Nanoscience

- 先端の光科学実験を精密に模倣する数値実験室を実現する。
- 実験家や企業研究者でも使って役に立つソフトウェアを整備する。

・ポスト「京」重点課題７「次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成」
　　サブ課題B「光・電子融合デバイス」
・JST-CREST 研究課題「光・電子融合第一原理ソフトウェアの開発と応用」

Open-source software, License: Apache 2.0

http://salmon-tddft.jp/

計算機科学者（朴泰祐教授のグループ）との
日常的な協働（コ・デザイン）
　　筑波大D2 廣川祐太氏（４年目）

・量子（波動）ダイナミクス計算とは

・原子核物理学からナノサイエンス、そして光科学へ

・光科学フロンティア：強い光・短い光

・電磁気学と量子力学の多階層連結シミュレーション

・Oakforest-PACS全ノード計算の試み

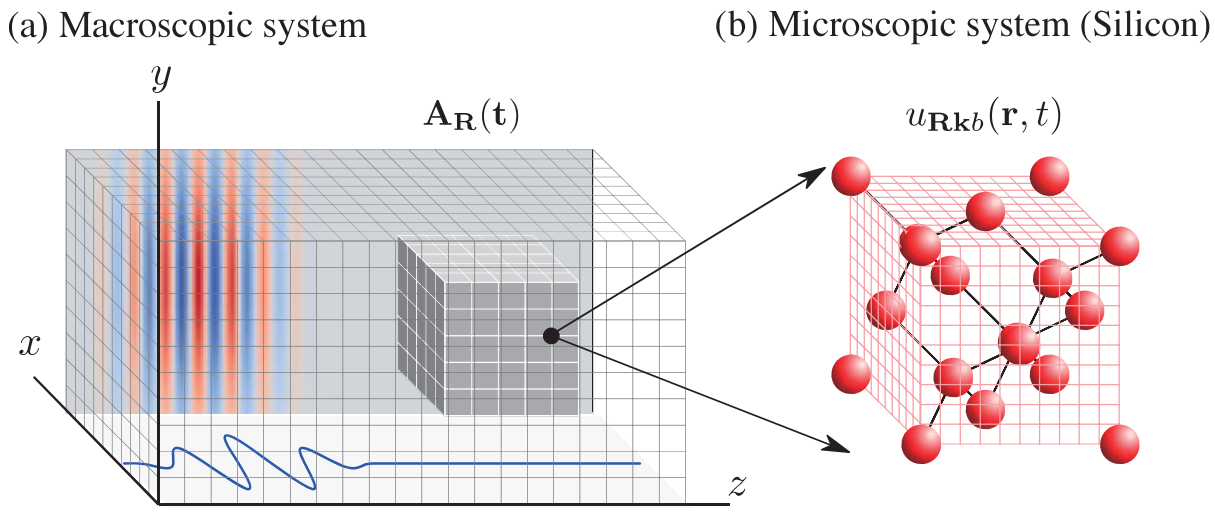
Oakforest-PACS　全ノード計算

1st in Japan
7th in the world (2017.6 Top 500 list)

Machine time 2017.3.25-28 (72 hours)

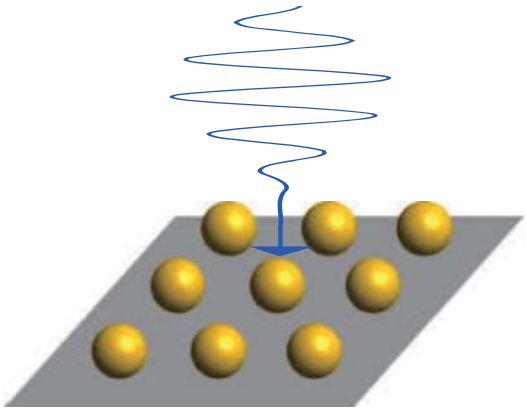
CPU	Intel Xeon Phi 7250 with 68 cores, 1.4 GHz base clock
# of nodes	8208 (use up to 8192)
Memory	16 GB MCDRAM and 96 GB DDR4-2400
Interconnect	Intel Omni-Path Architecture with 100Gbps link
Network topology	Full bisection bandwidth of Fat-Tree
Cooling	Water cooling for CPU and Air cooling for others
OS	CentOS7 (for compute node)
Compiler and MPI	Intel compiler 17.0.1 and Intel MPI 2017 update 1

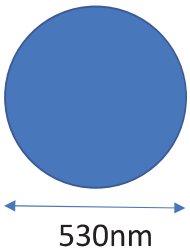
３次元マクスウェル＋３次元電子ダイナミクスシミュレーション



Picture by M. Uemoto

例：シリコン球 (直径530nm)に、1.55eV、5fsのパルス光が入射





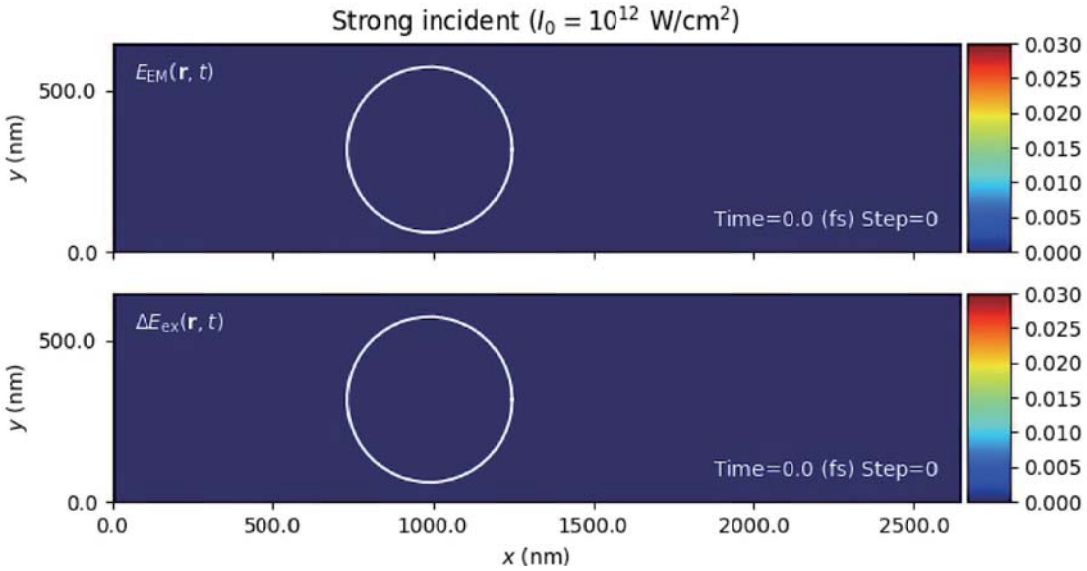
シリコン球を、32,752 点で表現
各点で、電子の量子ダイナミクス
第一原理計算を実施

レーザーパルスをナノシリコン球に照射(10^{12}W/cm^2, 1.55eV, 5fs)

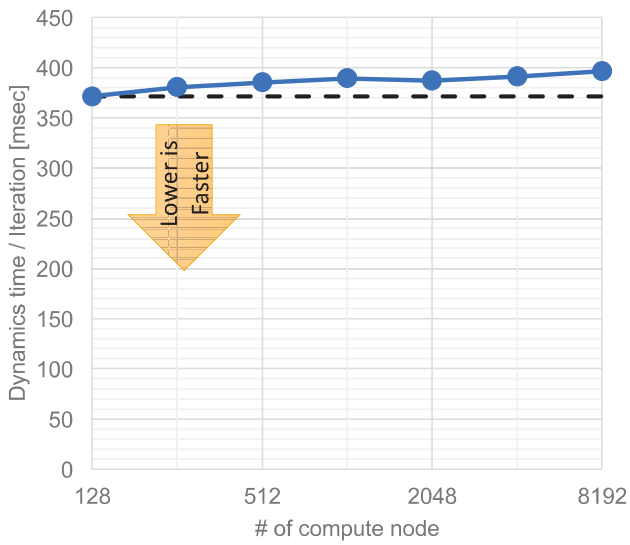
2.5 hours by Oakforest-PACS, 8188 nodes

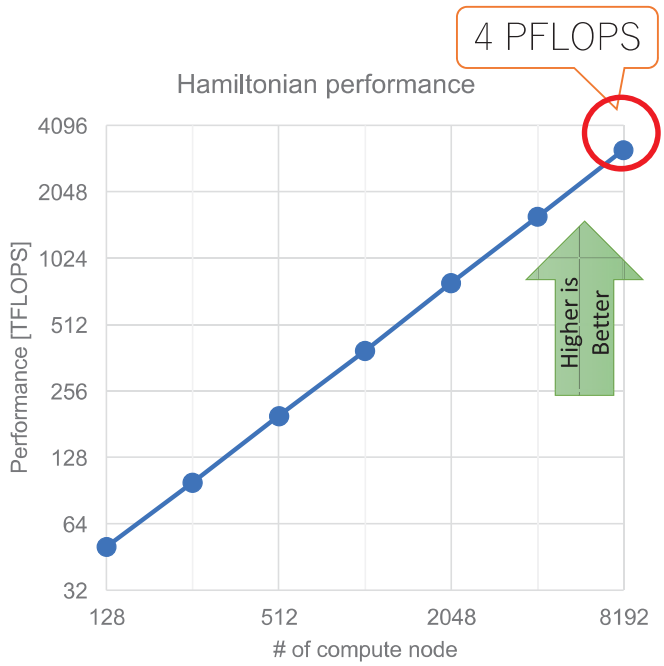
電磁場の
エネルギー密度
$E^2 + B^2$

励起電子分布
(２光子吸収)

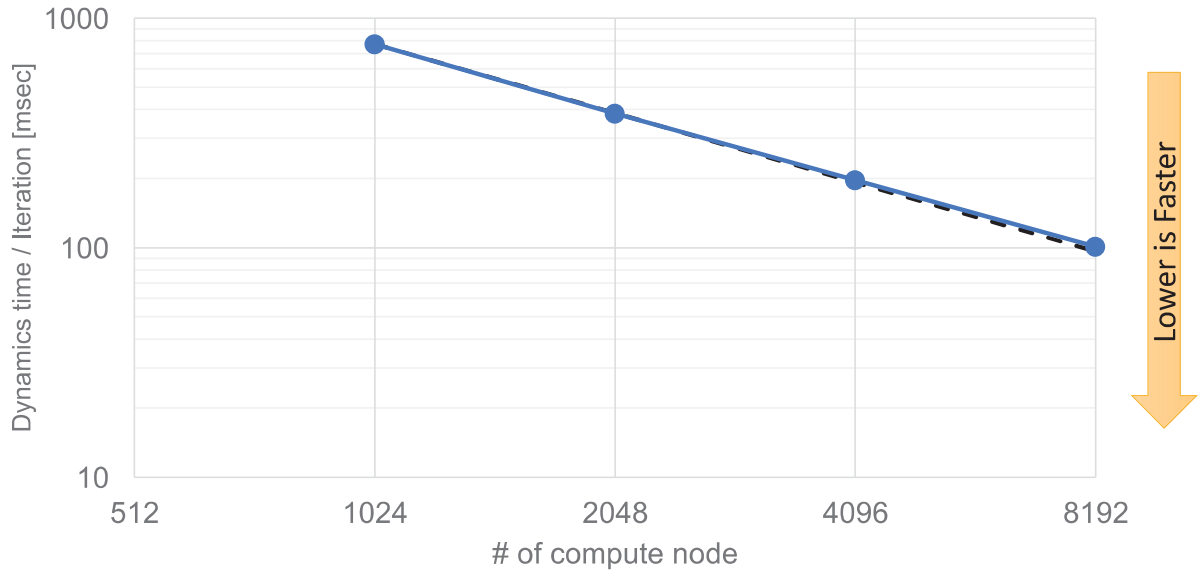


Weak scaling

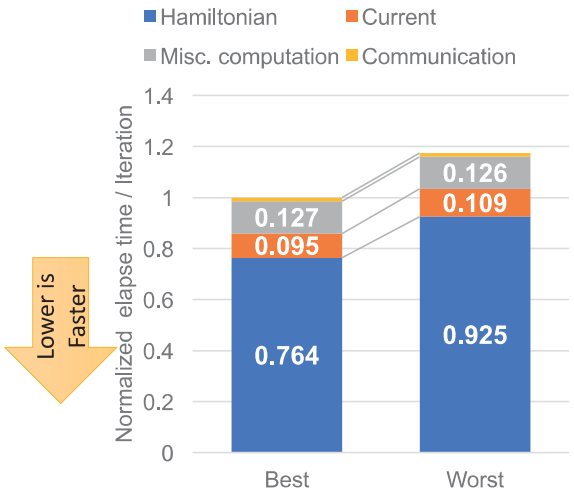




Strong scaling



考察: ノード間に生じる性能ギャップ



※Bestで正規化

- 差のほとんどがハミルトニアンの計算時間
  1. プロセス間通信は一切含まれない
  2. 全プロセスの問題サイズは一定
- Non-algorithmic load-imbalancing
  1. プロセッサを2ノードペアで冷却
  2. Turbo Boostによる動的クロック調整

まとめ

量子（波動）ダイナミクス計算
　原子核物理学の分野で生まれ、ナノサイエンスを経て光科学に展開

光科学フロンティアと計算光科学
　強い光・短い光を用いた科学・技術が発展
　計算科学による階層連結が役に立つ

SALMONプロジェクト http://salmon-tddft.jp
　量子論の第一原理計算による光科学の新しいシミュレータを開発
　計算科学者と計算機科学者のインハウス連携

41

謝辞

共同研究者

筑波大学
　植本光治
　廣川祐太
　朴泰祐

関西原研
　乙部智仁

東京大学
　篠原康

マックスプランク構造動力学研究所
　佐藤駿丞

分子科学研究所
　信定克幸
　野田真史

ワシントン大学
　George F. Bertsch

マックスプランク量子光学研究所
　Annkatrin Sommer
　Martin Schultze
　Ferenc Krausz

研究費

CREST 戦略的創造研究推進事業 Core Research for Evolutionary Science and Technology

cdmsi

科研費 KAKENHI

スーパーコンピュータ

京 K computer

JCAHPC

42

マテリアルズインフォマティクスの最前線

吉田 亮（統計数理研究所）

サイエンティフィック・システム研究会 科学技術計算分科会 2017年度会合

マテリアルズインフォマティクスの最前線

吉田 亮 [1,2,3,4] *yoshidar@ism.ac.jp*

[1] 情報・システム研究機構 統計数理研究所 モデリング研究系 准教授
[2] 情報・システム研究機構 統計数理研究所 ものづくりデータ科学研究センター センター長
[3] 総合研究大学院大学 複合科学研究科 統計科学専攻 准教授
[4] 物質・材料研究機構 特別研究員

Mi²i "Materials research by Information Integration" Initiative 情報統合型物質・材料開発イニシアティブ

1

“外挿的予測と発見” のデータ科学

Data Science towards Extrapolative Prediction and Discovery

- **データサイエンスの予測は “内挿的” (材料開発者の経験や勘も同様に)**
- **“外挿的予測と発見” を実現するシナリオ？**

Bayesian Inverse Materials Design

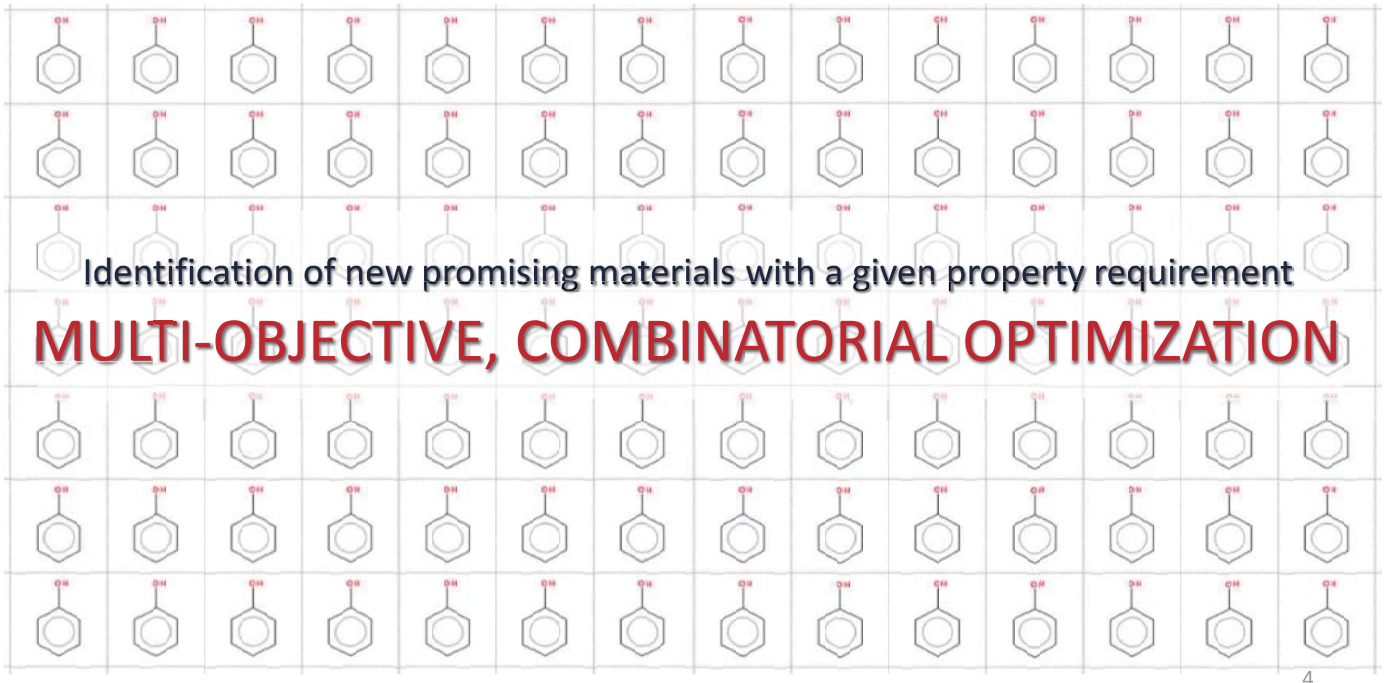
ベイズ推論で新物質を発見する

3

MACHINE LEARNING

SAILING THE BIG MATERIAL SPACE

e.g. 10^{60} small-sized organic molecules (GO game: 250^{150})



4

Supplementary Movie in Ikebata et al., J Compt Aided Mol Des, 2017

BAYESIAN INFERENCE

Transforming forward models into the backward prediction

Given data

Y

FORWARD PREDICTION

BACKWARD PREDICTION

Unknown

S

Posterior - backward prediction
Likeliness of *S* with respect to observed *Y*

Likelihood - forward prediction
Goodness-of-fit of *S* with respect to *Y*

Prior distribution
Prior knowledge on *S*

Backward Forward Prior

$$S \sim p(S|Y) \propto p(Y|S) \times p(S)$$

Inversion

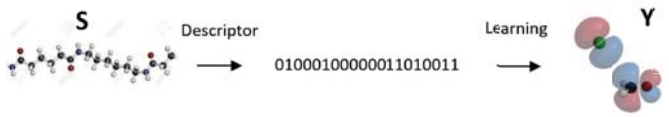
5

BAYESIAN INVERSE MATERIALS DESIGN

Ikebata *et al.*, *J Compt Aided Mol Des*, 2017

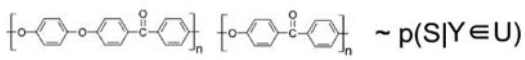
FORWARD PREDICTION - p(Y|S)

Prediction of properties $Y = (Y_1,\ldots, Y_m)$ of input material S
Machine learning with structure-property data



BACKWARD PREDICTION - p(S|Y∈U)

New structures S with properties falling within a desired region $Y \in U$
Generation of new 'materials'

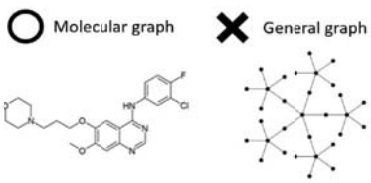


backward Y → S forward S → Y prior

$$S \sim p(S|Y \in U) \propto p(Y \in U|S) \times p(S)$$

PRIOR DISTRIBUTION - p(S)

Regularization to generate "*chemically favorable structures*"
Natural Language Processing techniques: "*chemical language model*"



Geometry
Exclusion of chemically unfavorable bonds
Chemical stability
Drug-likeliness
Synthesizability

R package iqspr v2.3 @CRAN
https://cran.r-project.org/web/packages/iqspr/index.htm

R package iqspr v2.3 @GitHub
https://github.com/GLambard/inverse-molecular-design

6

高分子材料ビッグデータに基づく材料探索を中心に

ベイズ推論 × PolyInfo

Mi²i "Materials research by Information Integration" Initiative 情報統合型物質・材料開発イニシアティブ

PolyInfo (@NIMS) PROJECT

PolyInfo

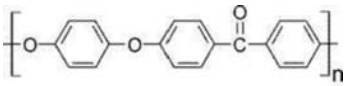
Morikawa (Tokyo Tech)
Xu, Kuwajima, Kondo (NIMS)
Hongo (JAIST)
Yamada, Lambard (ISM)

[redacted]
Wu S
(ISM)

WORLD LARGEST POLYMER DATABASE × STATE-OF-THE-ART MACHINE LEARNING

Target: higher thermal conductivity polymers

Structure (S) → **Descriptor (ϕ)** → **Properties (Y)**



01000100000011010011

λ: thermal conductivity
T_g: glass transition temp.
T_m: melting points
and so on

S = molecular structure of repeat unit (monomer)
(and/or process/other parameters)

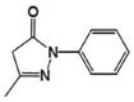
Quantitative Structure-Property Relationship

順方向の物性予測モデルを作る

FORWARD PREDICTION

Quantitative structure-property relationship analysis (QSPR)

Structure (S)



Descriptor (ϕ)

01000100000011010011

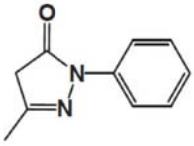
Properties (Y)

Physiological activity
Toxicity
Band gap
Energy

Molecular fingerprint
PubChem
MDL MACCS keys
ECFP6
Kolekota-Roth
etc

Deep Learning
Elastic Net
Random Forest
Gradient Boosting
Support Vector Machine
etc

e.g. **molecular fingerprint**



$f \in F$

$\phi(S) = (1, 0, 1, 1, 1, \cdots\cdots)$

R PACKAGES: DESCRIPTOR & ML ALGORITHM

Regression and classification

Method	Package
Elastic-net	glmnet
Deep Learning	h2o, mxnet
Support Vector Machine	kernlab
Gaussian Process regression	GPfit, laGP
Boosting	Boost
Bagging	Ipred
Random Forest	randomForest, ranger, Rborist
Gradient Boosting	xgboost

✖

Hyperparameter optimization

Method	Package
Bayesian Optimization	rBayesianOptimization

Descriptors in the *rcdk* package

Name	Description
standard	Paths of a given length
extended	standard + ring + atomic property
maccs	166 bits MDL MACCS keys
circular	ECFP6
pubchem	881 bits PubChem fingerprint
graph	standard + connectivity
kr	4860 bits Kolekota-Roth
hybridization	standard + Info. on hybridization
shortestpath	shortest paths between atoms
signature	count type of fingerprint

+ more than 200 physical and chemical descriptors

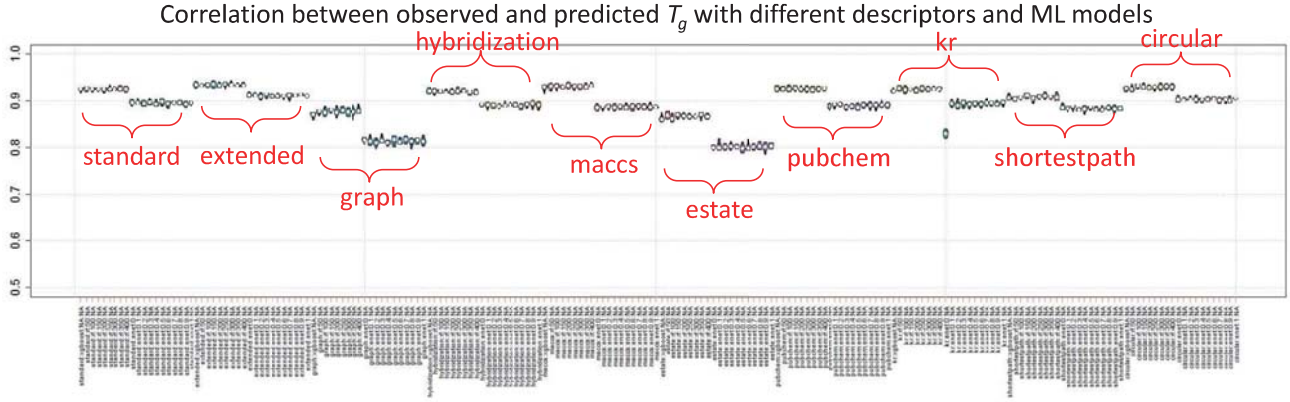
11

POLYMER PROPERTY

PolyInfo

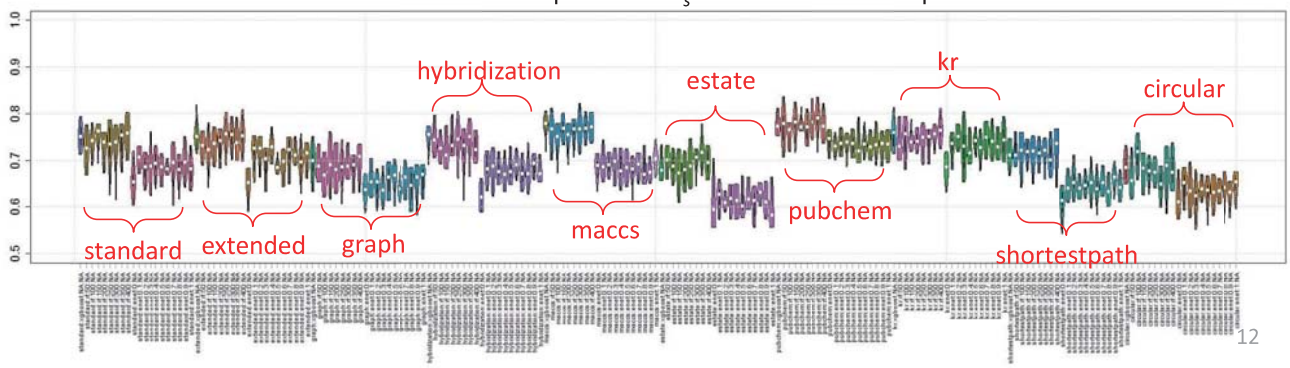
Glass transition temperature

Correlation between observed and predicted T_g with different descriptors and ML models



Density

Correlation between observed and predicted D_s with different descriptors and ML models

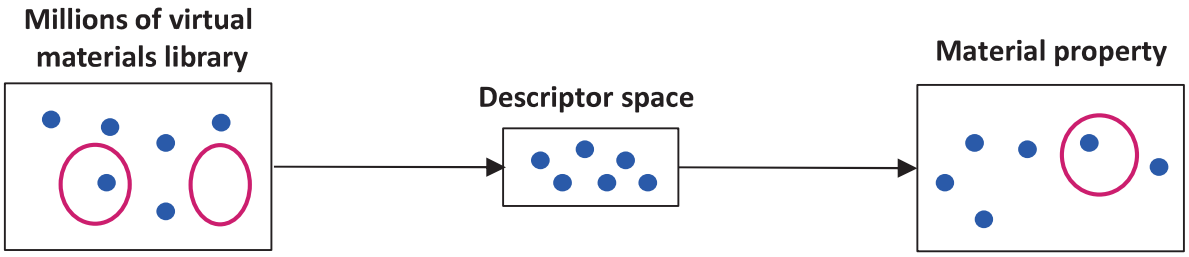


12

One of the grand challenges in Materials Informatics

HIGH-THROUGHPUT SCREENING

高品質・大量の仮想物質を作製・保有することが，莫大な価値を生み出す



Machine Learning based HTS (w/wo Bayesian Optimization) for materials property prediction

Gómez-Bombarelli et al., *Nat Mater*, 15, 1120-1127, 2016
Seko et al., *Phys Rev B*, 89, 054303, 2014
Seko et al., *Phys Rev Lett*, 115, 205901, 2015
Balachandran et al., *Sci Rep*, 6, 19660, 2016
Kiyohara et al., *Sci Adv*, 2, e1600746, 2016
Rupp et al., *Phys Rev Lett*, 108, 058301, 2012
Pilania et al., *Sci Rep*, 3, 2810, 2013

Deep Learning for solving Schrödinger equation

Mills et al., Deep learning and the Schrödinger equation, *arXiv:1702.01361*, 2017
Carleo et al., Solving the quantum many-body problem with artificial neural networks, *Science*, 355(6325), 602-606, 2017

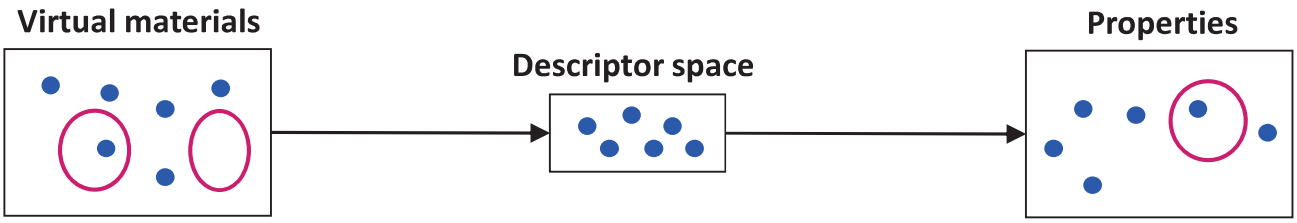
入力はポテンシャル画像，出力は波動関数

Inverse Quantitative Structure-Property Relationship

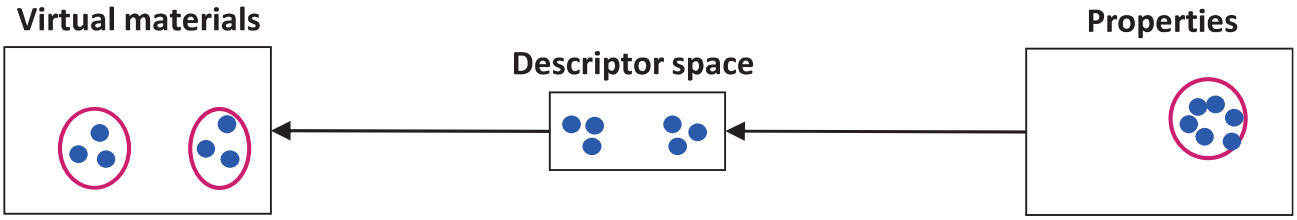
逆方向の計算で埋蔵物質を発掘

BACKWARD PREDICTION

$P(Y|S)$ Limitation = Low hit rate - when the input space is exceedingly high-dimensional, the exhaustive search is impossible to perform



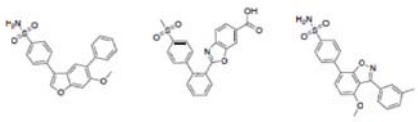
$P(S|Y) \propto P(Y|S)P(S)$ Explore promising materials intensively around high probability regions of the posterior



BACKWARD PREDICTION

MONTE CARLO STRUCTURE GENERATOR

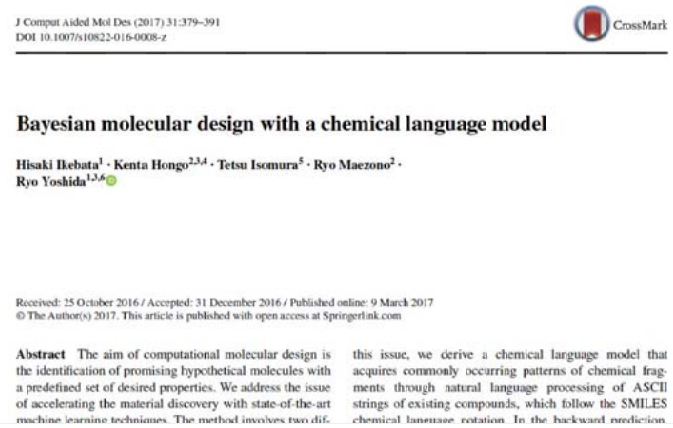
Creation of promising hypothetical materials (*e.g.* molecules) with the posterior probability distribution



Backward prediction — Forward prediction — Prior

$$\sim p(S|Y \in U) \propto \prod_{g=1}^{m} p(Y_g \in U_g|S) \times p(S)$$

※ Prior: “ポリマーらしさ” の学習済モデル



J Comput Aided Mol Des (2017) 31:379–391
DOI 10.1007/s10822-016-0008-z

CrossMark

Bayesian molecular design with a chemical language model

Hisaki Ikebata[1] · Kenta Hongo[2,3,4] · Tetsu Isomura[5] · Ryo Maezono[2] · Ryo Yoshida[1,3,6]

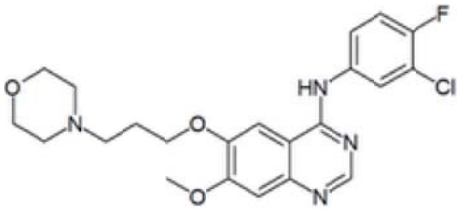
Received: 25 October 2016 / Accepted: 31 December 2016 / Published online: 9 March 2017
© The Author(s) 2017. This article is published with open access at Springerlink.com

Abstract The aim of computational molecular design is the identification of promising hypothetical molecules with a predefined set of desired properties. We address the issue of accelerating the material discovery with state-of-the-art machine learning techniques. The method involves two dif-

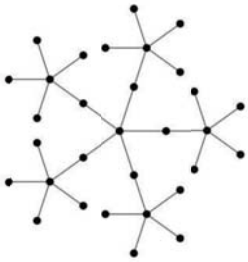
this issue, we derive a chemical language model that acquires commonly occurring patterns of chemical fragments through natural language processing of ASCII strings of existing compounds, which follow the SMILES chemical language notation. In the backward prediction

CHEMICALLY FAVORABLE STRUCTURE?

Molecular graph



General graph



p(S)

prior knowledge

Geometry

Exclusion of chemically unfavorable bonds, *e.g.* F-N, C=O=C

Chemical stability

Drug-likeliness

Synthesizability

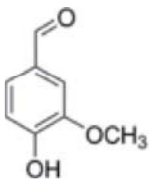
Liquid crystalline likeliness

p(S) CHEMICAL LANGUAGE MODEL

Ikebata *et al.*, *J Compt Aided Mol Des*, 2017

■ 実在の化合物セットから ‘化合物らしさ’ を学習

- 化学構造を文字列で表現 (SMILES)
- 言語モデルを用いて文字のパターンや文法を学習



vanillin $C_8H_8O_3$

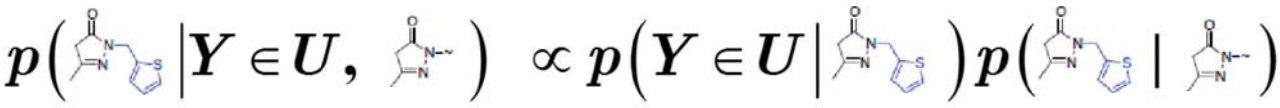
O=Cc1ccc(O)c(OC)c1

環の始点と終点は同じ数字

側鎖は括弧

■ 訓練された言語モデル：‘化合物らしい構造’ の生成器として使用

- Prior dist.
- Proposal distribution in SMC or MCMC



TWO TECHNICAL ISSUES

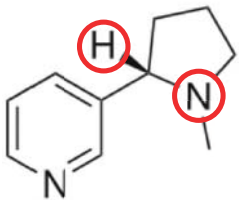
- **Grammar error:** Avoid the occurrence of unclosed ring or side-chain indicators

  `S[1:i-1] = CCCCCC(CCCC(OC(O)C`

  Two unclosed parentheses '('

  The Markov probability should be biased such that two closing letters ')' appear somewhere in the rightward

- **Long term dependency:** 'Neighbors' in a molecular graph are not neighboring in the string representation

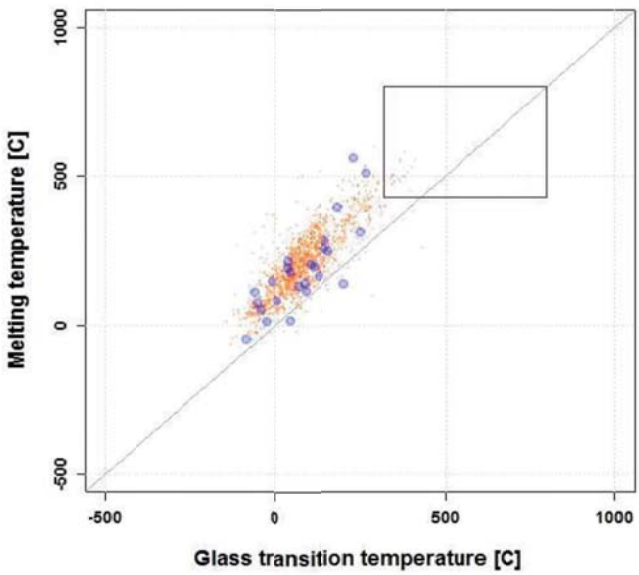


`CN1CCC[C@H]1c2cccnc2`

NEW FUNCTIONAL POLYMERS

Higher glass transition temperatures and higher melting points

Property refinement process



Structure modification

Orange: existing polymers with experimentally measured T_g and T_m

Blue: polymers computationally created by *iqspr* (circle size: the magnitude of likelihood)

NEW FUNCTIONAL POLYMERS

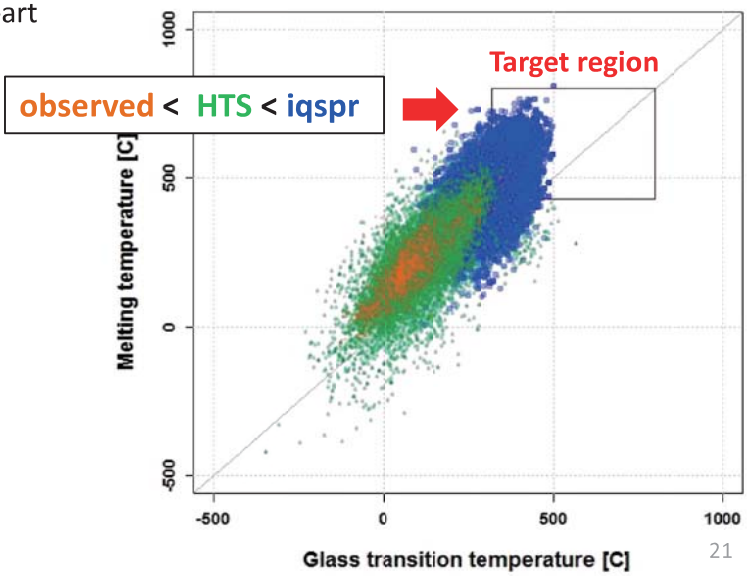
Higher glass transition temperatures and higher melting points

Further expansion of the materials landscape (T_g and T_m)

Orange: polymers with observed T_g and T_m
Green: HTS of polymers with unobserved T_g and T_m
Blue: newly created polymers of iqspr

Result & Conclusion

Our algorithm has predicted the existence of yet-undiscovered many (9,685) polymers with T_g and T_m much higher than those of the state-of-the-art



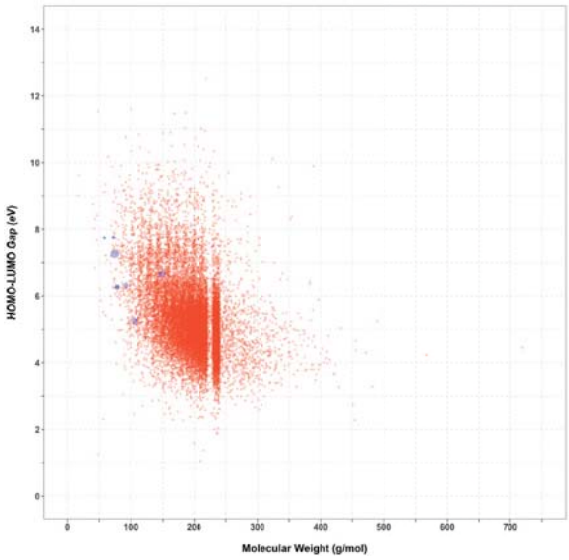
LOW BAND GAP MOLECULES

Application of iqspr on novel monomer discovery

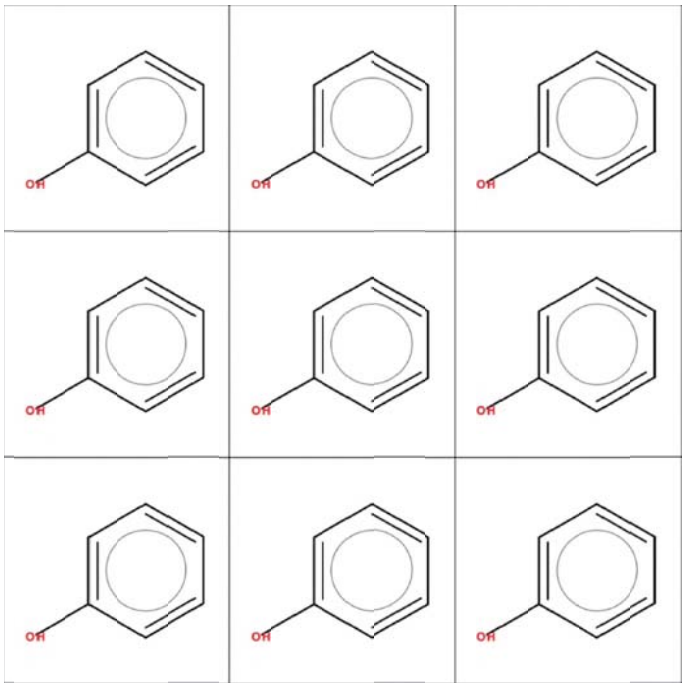
Property requirements

Band gap in [0, 3] eV
MW unconstrained

Band gap vs molecular weight
(vertical, horizontal axes)



Orange: existing molecules (PubChem)
Blue: molecules created by *iqspr*



R PACKAGE iqspr v2.3

CRAN: https://cran.r-project.org/web/packages/iqspr/index.htm
GitHub: https://github.com/GLambard/inverse-molecular-design

Lambard, G
(ISM)

- Version 1 released: 2016/05/22
- Number of downloads: 2,805 (2017/08/31)
- **Version 2.3 released: 2017/07/27**

Tutorial for the package iqspr v2.1

Guillaume Lambard

2017-05-10

Introduction

The structure of chemical species can be uniquely encoded in a single string of standard text characters called SMILES (Simplified Molecular Input Line Entry Specification). A very nice presentation of the SMILES notation can be found here. If one knows the SMILES of a chemical compound, its 2D structure can be univoquely re-constructed. One of the aspect of the SMILES format is that it is particularly useful in the prediction of properties of compounds. The link that exists between the structure of a compound and its properties is generally called a QSPR (Quantitative Structure-Properties Relationship), and it has been widely used in cheminformatics for the design of new drugs or dyes. Generally, compounds structures are primarily investigated by chemists following a trial-and-error construction controlled by their existing knowledge of the chemistry and their intuition. The properties of the investigated compounds are then checked by direct experiments and/or driven by a QSPR analysis. In this kind of analysis, numerous descriptors can be build from the SMILES format. These descriptors can be represented a set of binary and/or continuous properties based on the existence of certain fragments in a molecule, or on the ability of its bonds to rotate for example. An introduction and overview concerning the molecular descriptors can be found here. Then, the descriptors are parsed as input features for a given regression model to predict output properties for a list of novel compounds. This kind of reconstruction of the properties of compounds from descriptors is called a forward prediction.

This package is entirely devoted to the inverse problem which is the backward prediction. **The generation of entirely novel SMILES in output, and consequently chemical compounds, from input targeted properties initially constrained by a user.** Thanks to the inverse-QSPR model(via), this is now possible. This package has the ambition to become a useful tool, in the innovation of novel materials, in a field that is now widely referred as Materials Informatics. It is important to note that as SMILES is the basis format for this package, only organic molecular non-crystalline compounds can be generated.

Forward prediction methods

- Deep Learning (mxnet)
- Gradient Boosting (xgboost)

⋮

- **User-plugin models**
- **van Krevelen models**

Other additional features

- Synthetic Accessibility scoring
- A set of molecular filters
- Richer descriptor set

23

GO BEYOND INTERPOLATIVE PREDICTION

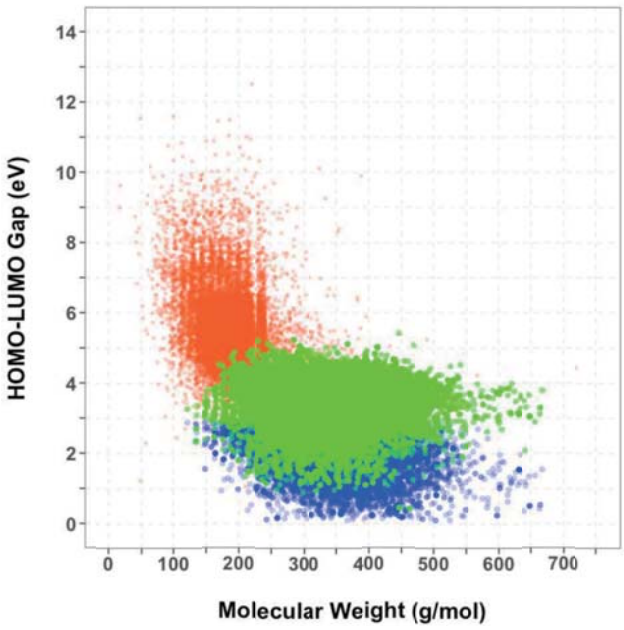
内挿的予測の限界を超える

24

計算機実験による検証

FIRST PRINCIPLES CALCULATION (DFT)

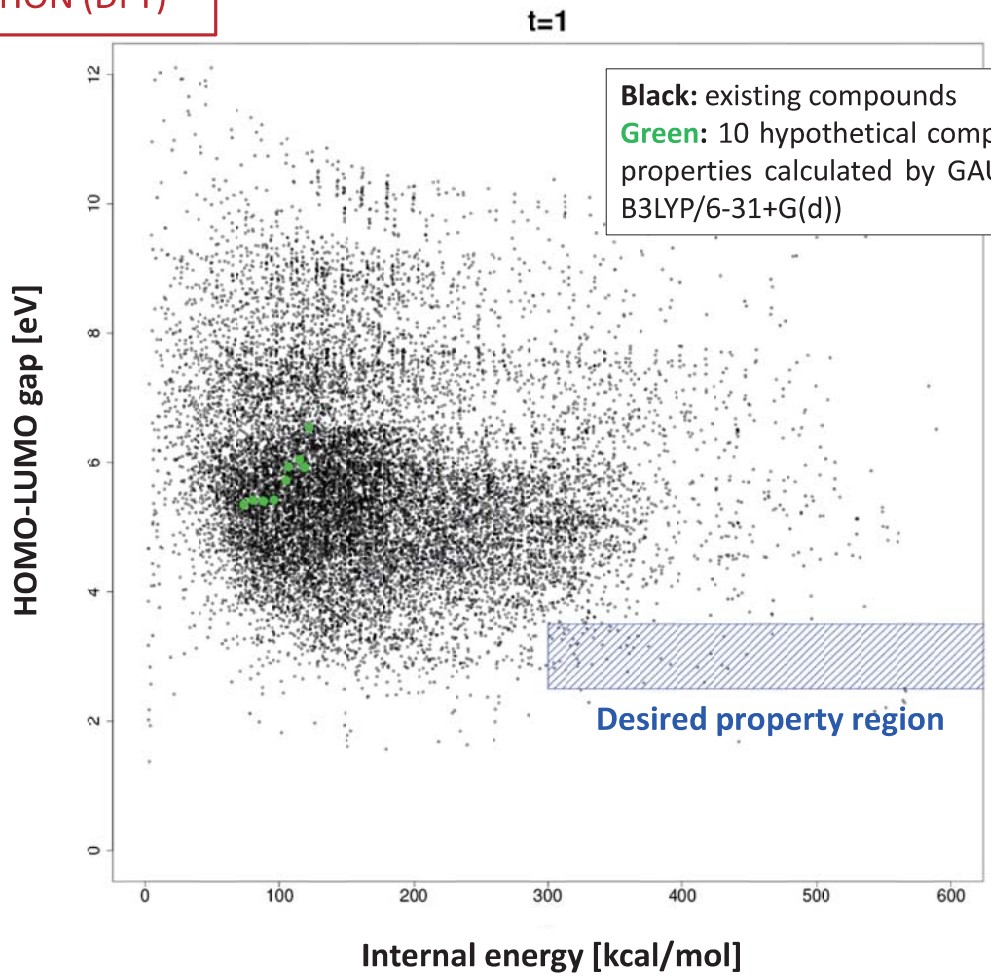
- Identification of promising materials based on DFT calculation (filtering)
- Poor prediction of the machine learning models in regions with few data points



DFT scheme
B3LYP functional, 6-31G basis set

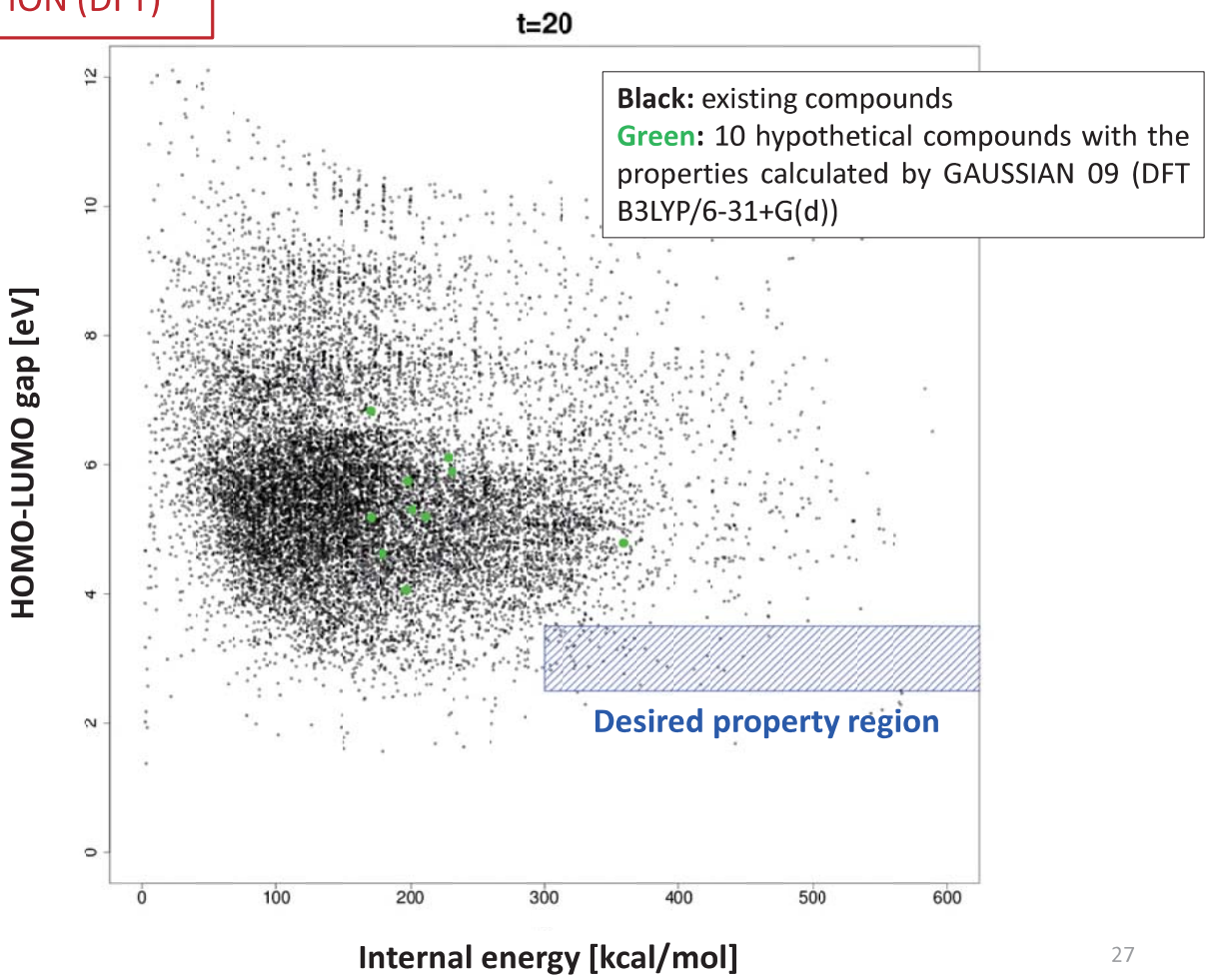
Orange: existing molecules (DFT)
Blue: hypothetical (ML prediction)
Green: hypothetical (DFT)

VALIDATION (DFT)



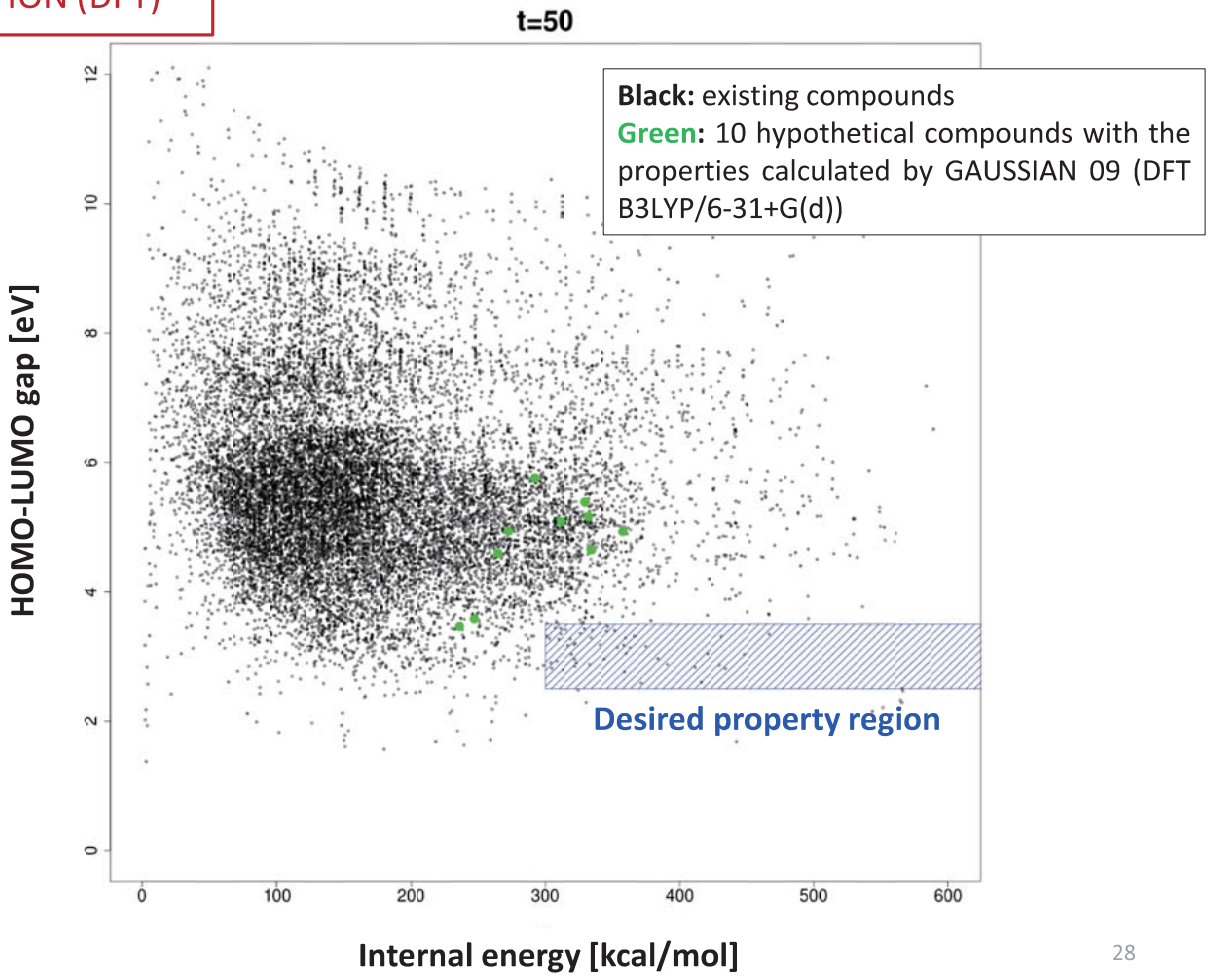
Black: existing compounds
Green: 10 hypothetical compounds with the properties calculated by GAUSSIAN 09 (DFT B3LYP/6-31+G(d))

VALIDATION (DFT)



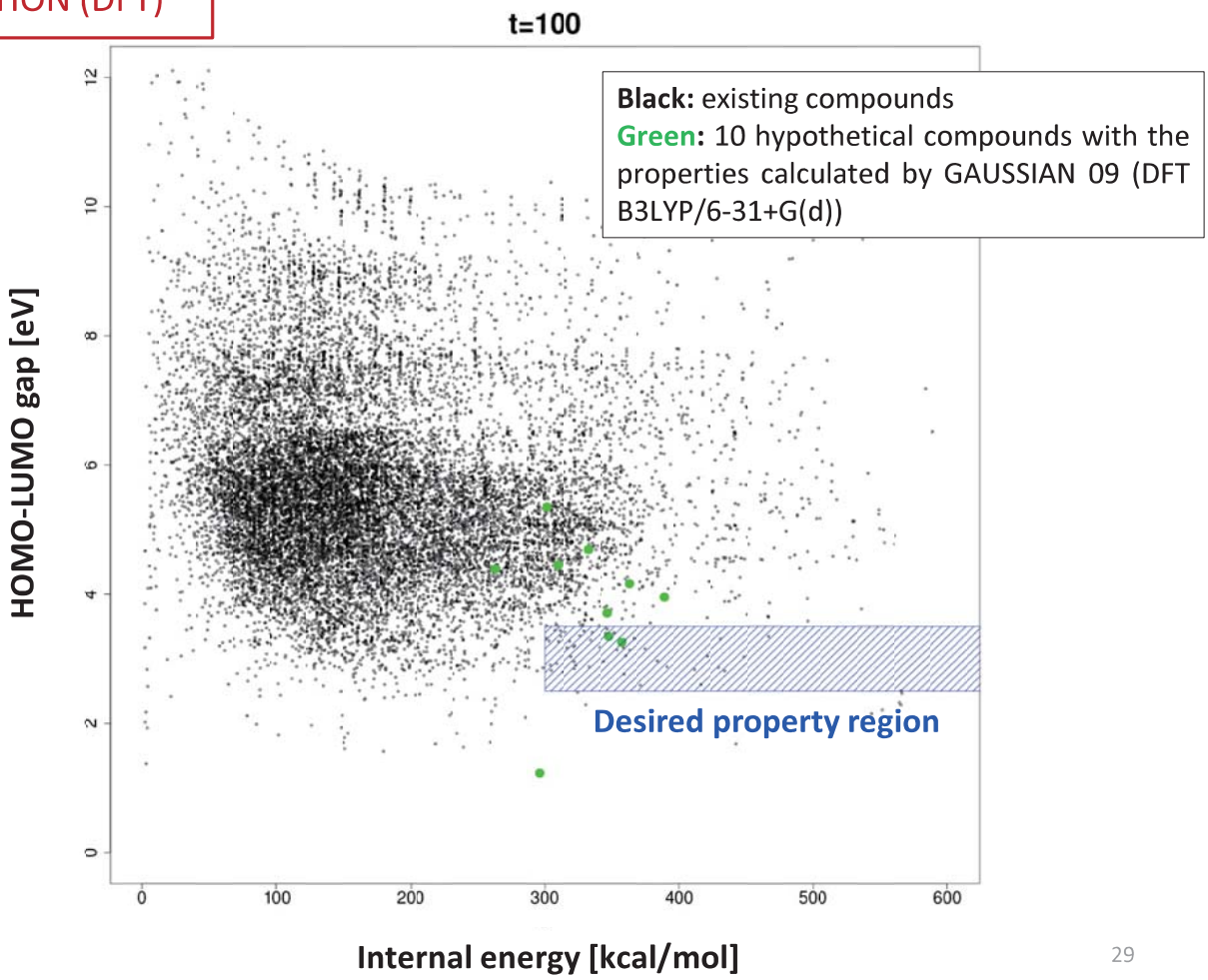
27

VALIDATION (DFT)

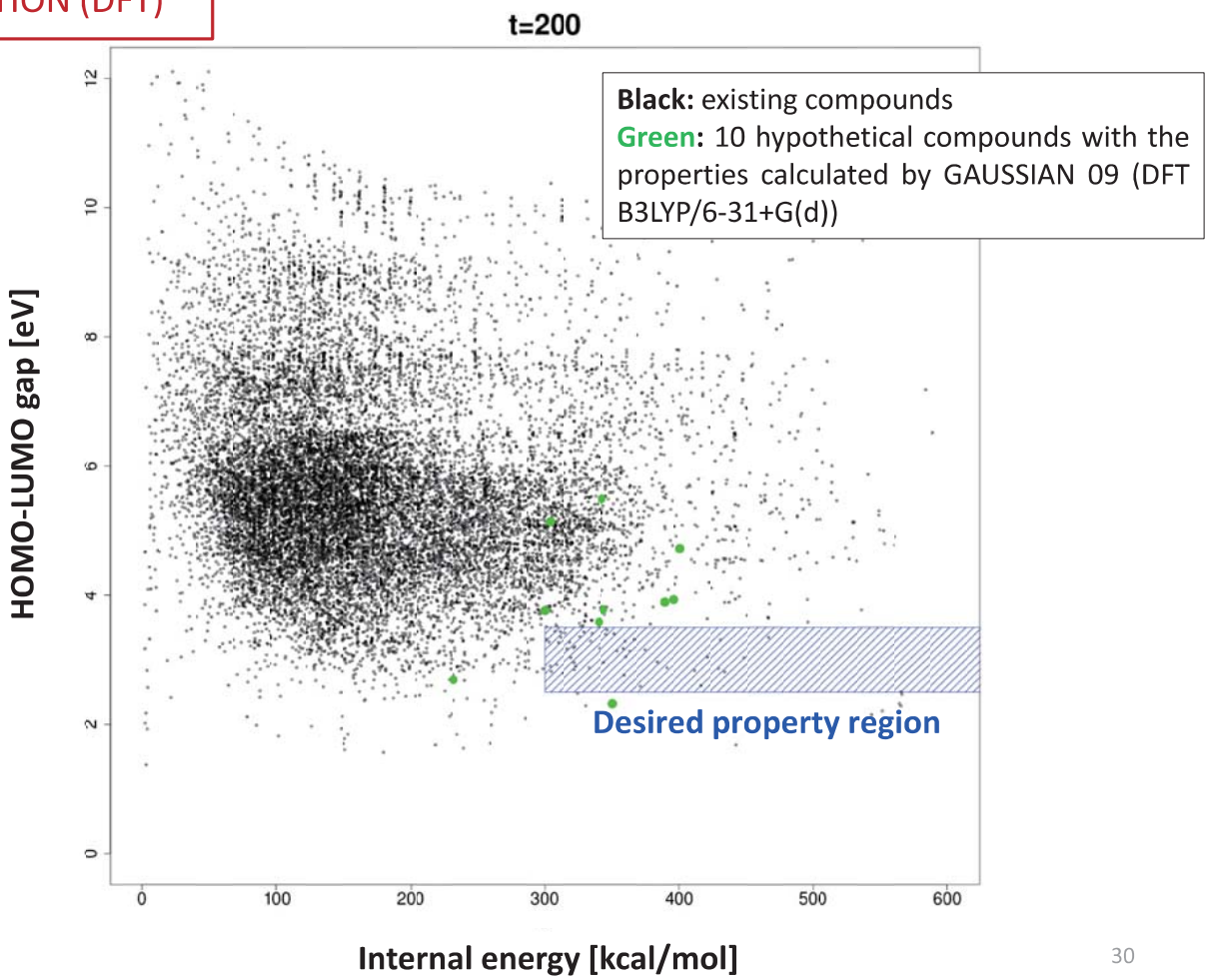


28

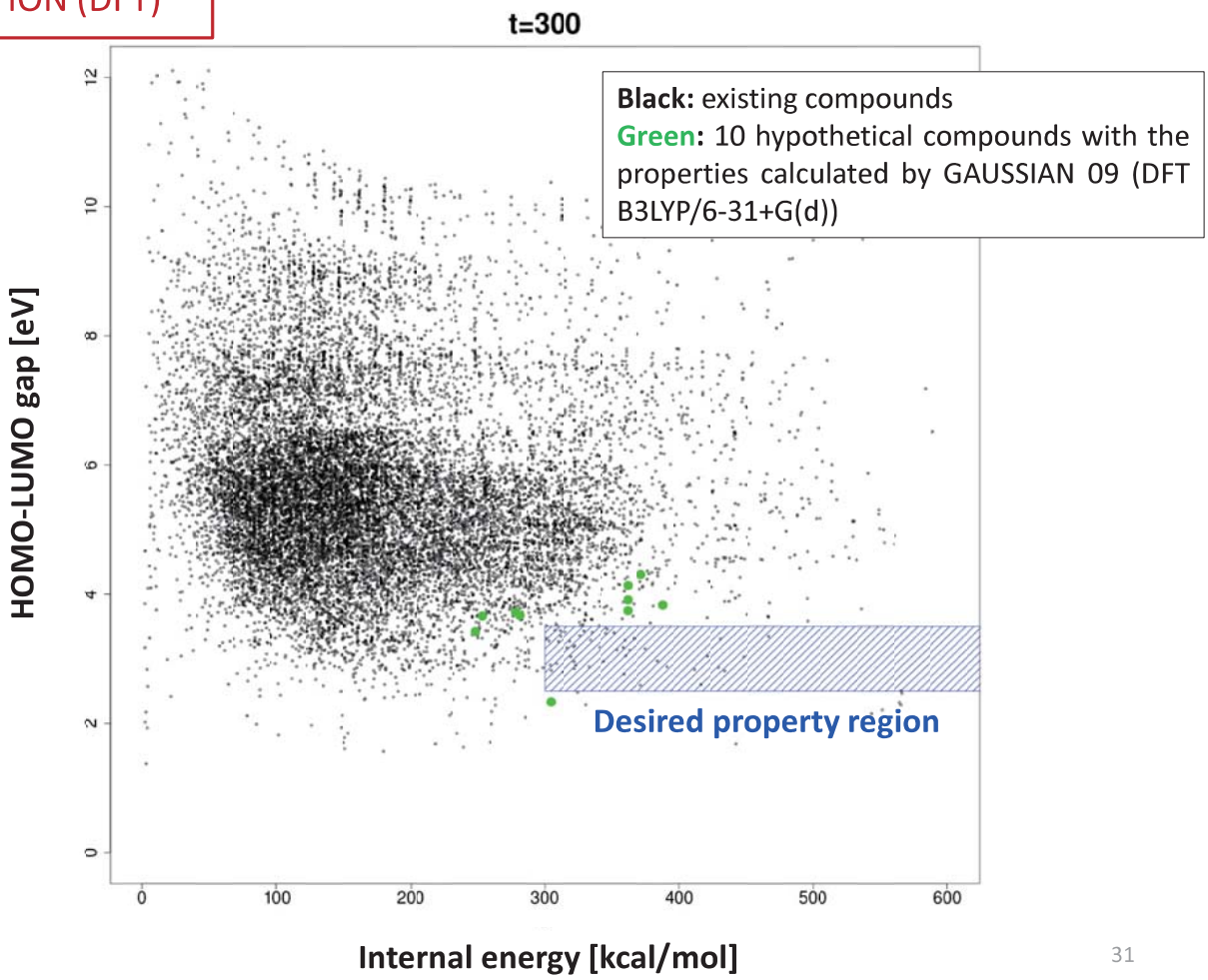
VALIDATION (DFT)



VALIDATION (DFT)

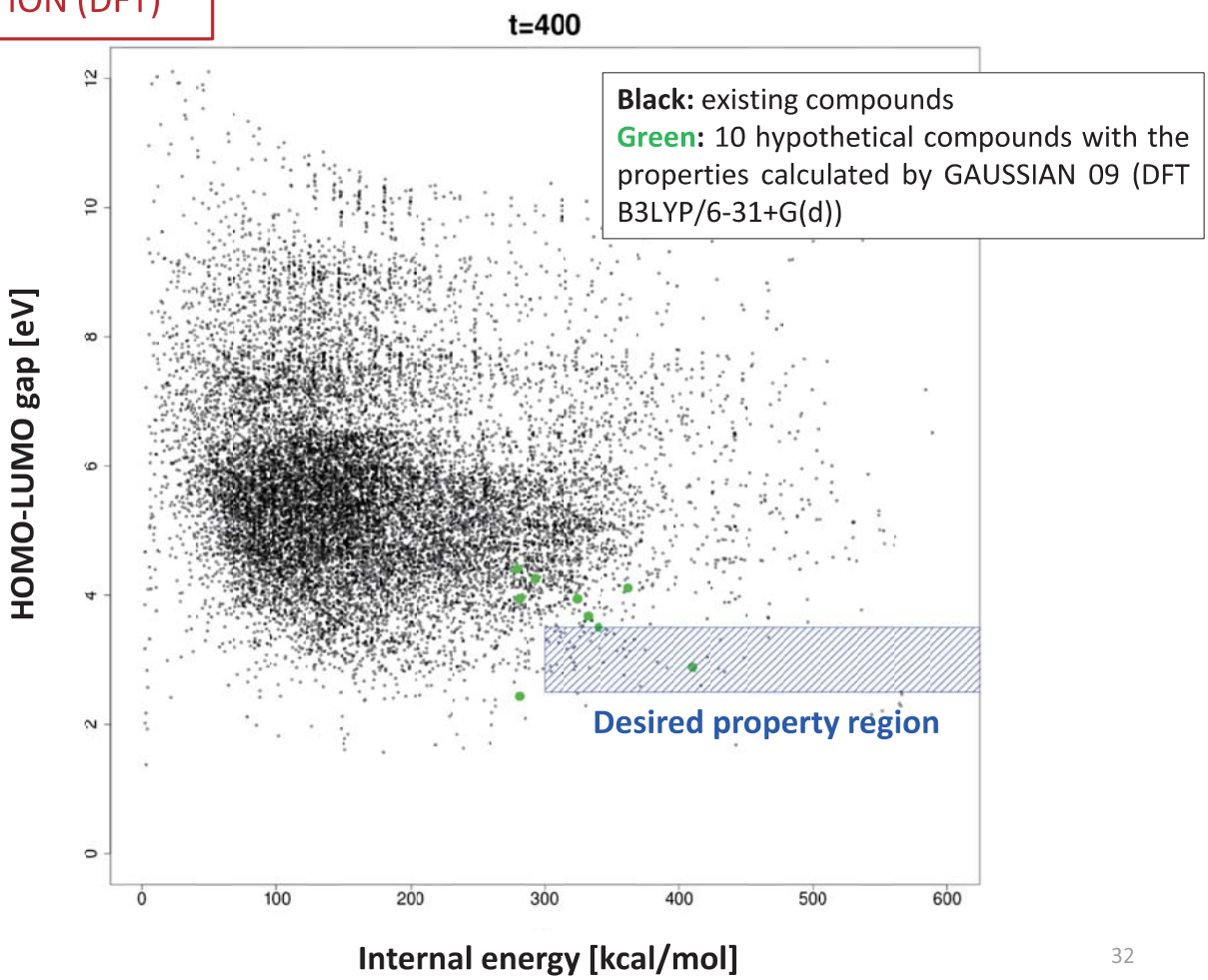


VALIDATION (DFT)



31

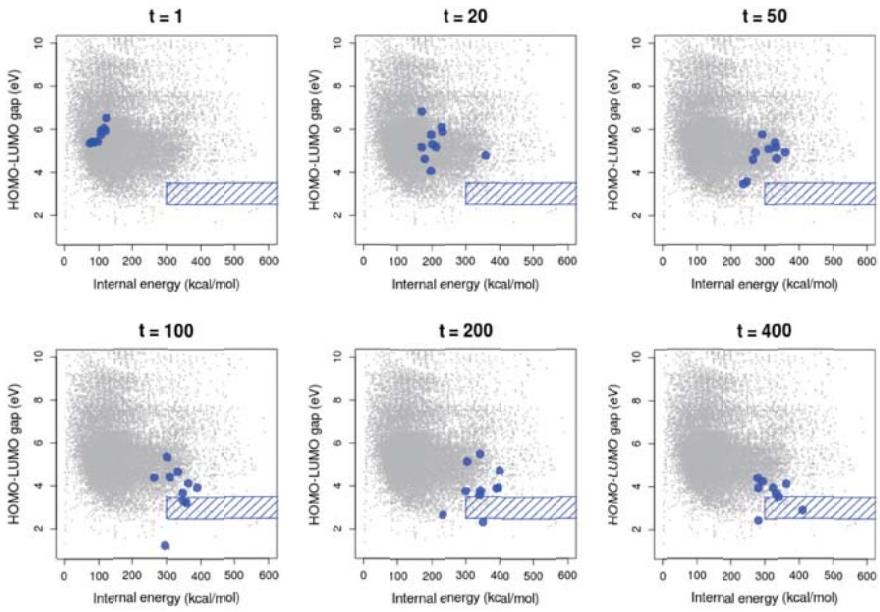
VALIDATION (DFT)



32

Go Beyond Interpolative Prediction

- Limitation of *iqspr*: unreachable to regions where data are sparsely populated (*i.e.*, interpolative prediction)
- Extrapolative prediction by the integration of *iqspr* and DFT (computer experiments)

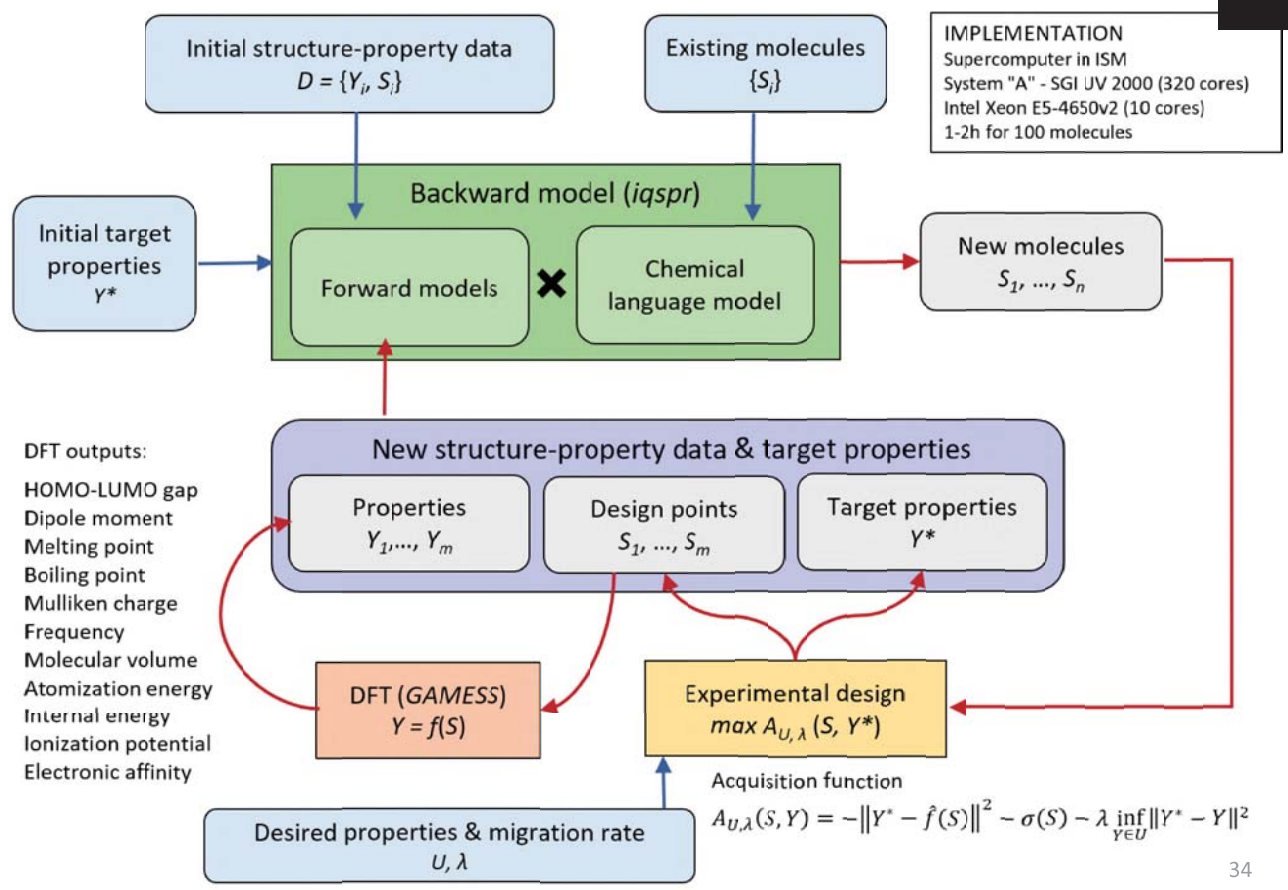


Vertical axis: HOMO-LUMO gap
Horizontal axis: internal energy
Gray dot: existing molecules
Black dot: newly created molecules

33

Lambard, [redacted]
ISM

SPACIER Go Beyond Interpolative Prediction

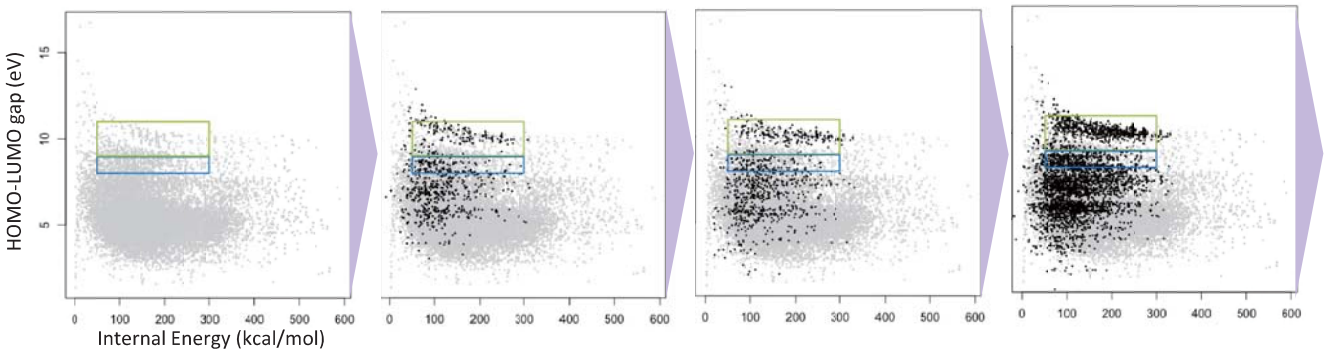


34

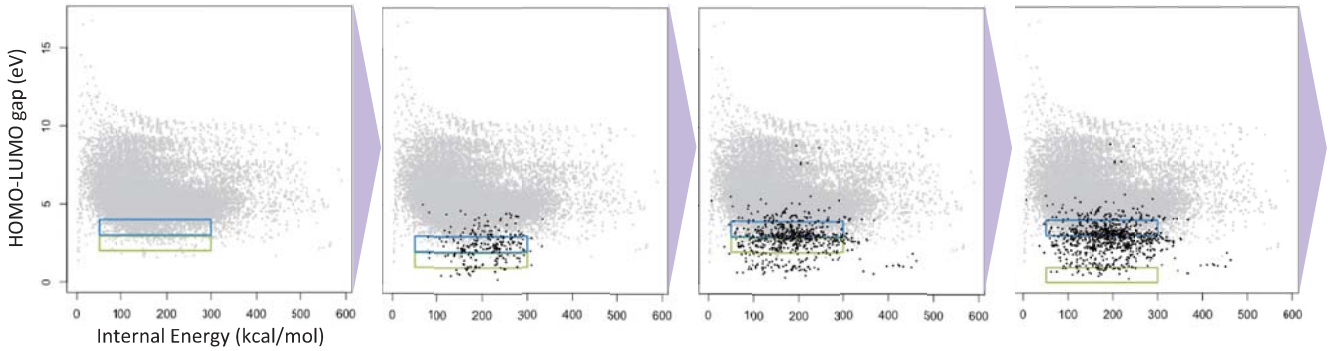
SPACIER Go Beyond Interpolative Prediction

Vertical axis: HOMO-LUMO gap
Horizontal axis: internal energy
Gray dot: existing molecules
Black dot: newly created molecules

Higher HOMO-LUMO gap



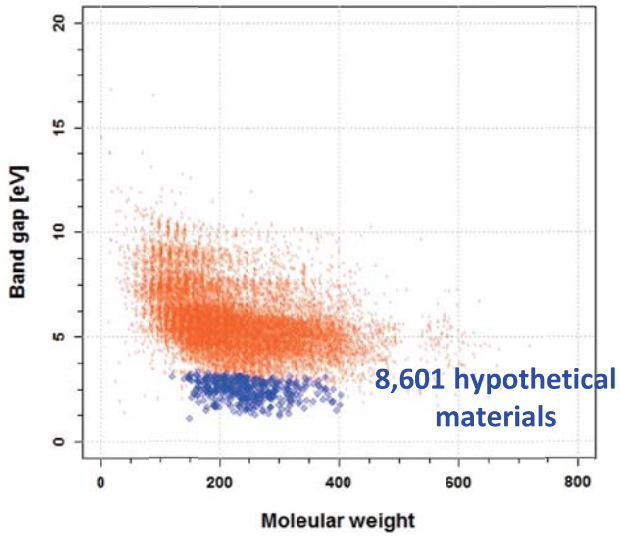
Lower HOMO-LUMO gap



35

SPACIER 低バンドギャップモノマーの発掘

学術的意義：物質・材料科学の事前知識を全く活用しない完全なデータ科学駆動型手法でここまで到達できた.



データが存在しない低バンドギャップ領域に埋蔵する大量の新物質が発掘された.

Orange: DFT properties of existing materials
Blue: newly discovered materials (SPACIER)

Synthesis
Experimental validation
in the next 1-2 years

36

材料研究と実験計画法

- 材料研究では，実験（実空間・仮想空間）とデータ科学を連動させることが極めて重要
- 目的：① 実験コストの抑制，②外挿こそが究極の目標

実験が済んだあとに統計学者に意見を求めても、大抵の場合、それは単に終わったことを議論しようと言っているようなものだ。もしかしたら統計学者は、失敗の原因を語り出すかもしれない。

Fisher R.A. (1938) Presidential Address, *Sankhyā,* 4:14-17.

R. A. フィッシャー (1890-1962)

現代の統計学，集団遺伝学の創始者．ロザムステッド農事試験場における穀物量の変動に関する研究を通して，実験計画法や分散分析等，数々の統計理論を確立．

物性計算（第一原理計算など）の試行回数を削減

物質・材料科学におけるベイズ最適化の活用

Seko et al., *Phys Rev B*, 2014
Property: melting point
Input: crystal structure

Seko et al., *Phys Rev Lett*, 2015
Property: LTC (lattice thermal conductivity)
Input: crystal structure

Balachandran et al., *Sci Rep*, 2016
Property: elastic properties [bulk, shear, and Young's modulus]
Input: crystal structure

Kiyohara et al., *Sci Adv*, 2016
Property: grain boundary energy
Input: interface structure (grain boundary)

Ju et al., *arXiv*, arXiv:1609.04972
Property: interfacial thermal conductivity
Input: interface structure

[SOFTWARE] Ueno et al., COMBO: an efficient Bayesian Optimization library for materials science, *Mater Dis*, 2016

ベイズ最適化に基づく実空間の合成・機能計測の循環

4×9回の実験サイクル 新規形状記憶合金を同定

ARTICLE

Received 2 Sep 2015 | Accepted 4 Mar 2016 | Published 15 Apr 2016 DOI: 10.1038/ncomms11241 OPEN

Accelerated search for materials with targeted properties by adaptive design

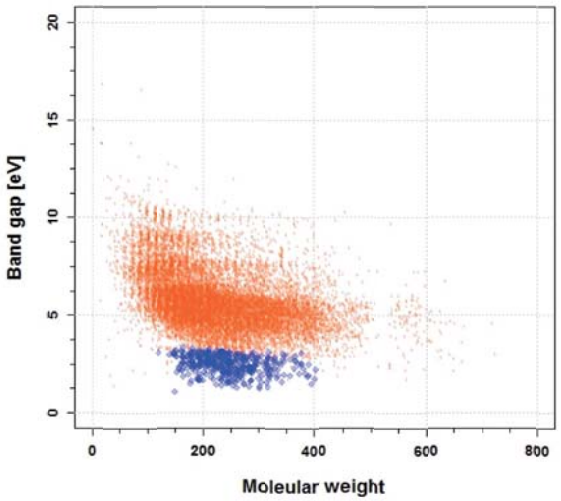
Dezhen Xue[1,2], Prasanna V. Balachandran[1], John Hogden[3], James Theiler[4], Deqing Xue[2] & Turab Lookman[1]

Finding new materials with targeted properties has traditionally been guided by intuition, and trial and error. With increasing chemical complexity, the combinatorial possibilities are too large for an Edisonian approach to be practical. Here we show how an adaptive design strategy, tightly coupled with experiments, can accelerate the discovery process by sequentially identifying the next experiments or calculations, to effectively navigate the complex search space. Our strategy uses inference and global optimization to balance the trade-off between exploitation and exploration of the search space. We demonstrate this by finding very low thermal hysteresis (ΔT) NiTi-based shape memory alloys, with $Ti_{50.0}Ni_{46.7}Cu_{0.8}Fe_{2.3}Pd_{0.2}$ possessing the smallest ΔT (1.84 K). We synthesize and characterize 36 predicted compositions (9 feedback loops) from a potential space of ~800,000 compositions. Of these, 14 had smaller ΔT than any of the 22 in the original data set.

外挿アルゴリズムの到来：何が変わるか

著作権・知財の在り方

- アルゴリズム（& データ）さえあれば，誰もが新材料を発掘できる時代？
- 遥かに高い生産性を有する（弱い）AI による著作物の数が爆発的に増加
- 独占の不可：全候補物質の合成は不可能．同じ計算をすれば，第三者も他の物質を発掘できる．データやアルゴリズムのオープン化は危険かもしれない．
- 特許の網目を抜ける技術としても（*e.g.* A社とB社の特許化合物のハイブリッド）



例：SPACIERによる低バンドギャップポリマーの探索．データが存在しない低バンドギャップ領域に埋蔵する大量の新物質が発掘された．

Orange: DFT properties of existing materials
Blue: newly discovered materials (SPACIER)

科学技術計算分科会　選出
科学技術計算分科会 2017 年度会合 より

ヒト規模の脳神経回路シミュレーションを目指して：小脳の場合

山﨑 匡（電気通信大学）

ヒト規模の脳神経回路シミュレーションを目指して: 小脳の場合

山﨑 匡 (電通大)
NumericalBrain.Org

大学院生募集中
修士博士問わず
給料払えます

2017年10月26日 科学技術計算分科会 2017年度会合 @ANAクラウンプラザホテル神戸

今日の内容

1. (小)脳について
2. 人工小脳の開発
   2.1. 小脳神経回路シミュレーション
   2.2. ネコスケール人工小脳の開発
   2.3. リアルタイムシミュレーションの御利益
3. ヒトスケール小脳の開発に向けて

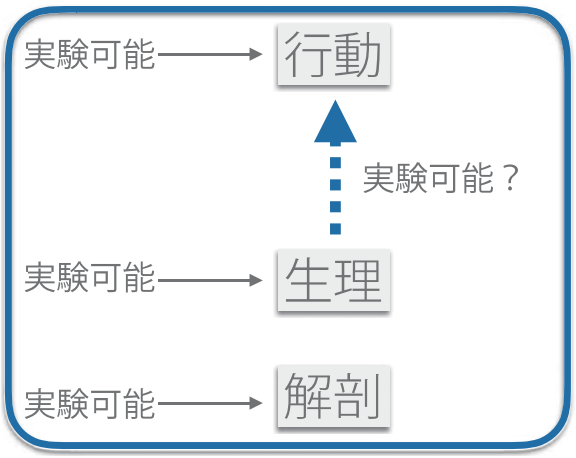
今日の目標 「小脳ってすごい！」と思ってもらえること

神経回路シミュレーションとは

人工の脳を作ることに相当

脳のシステム的理解
- 神経回路の挙動の**再現**
- 仮説の**検証**
- 実験結果の解釈と**予言**

実験ではできない操作が可能



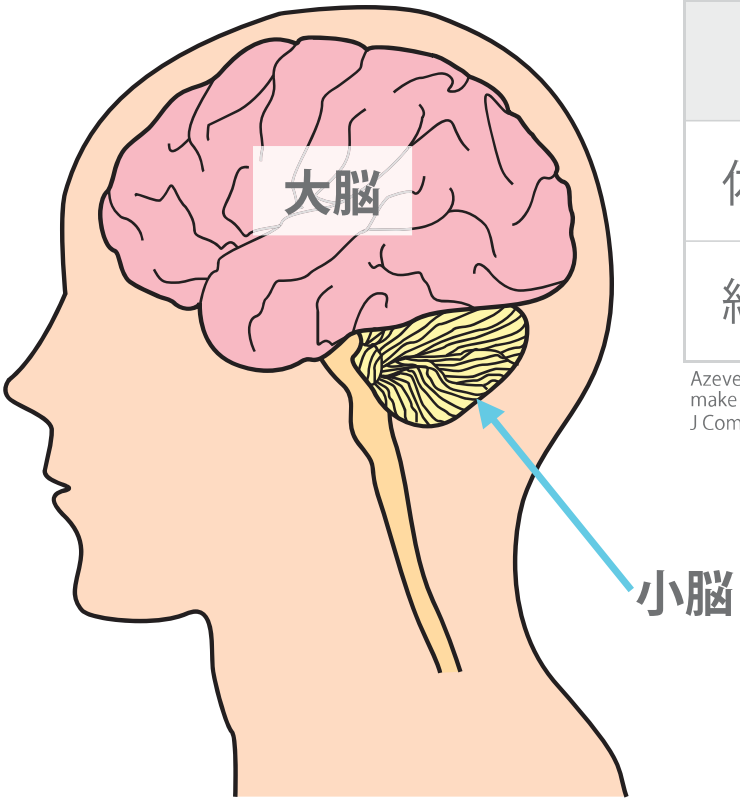
EUのThe Human Brain Project

ヒト全脳シミュレーション
10年で10億ユーロ


JUQUEEN (IBM, 5.9PFs)


Markram et al. Cell (2015)

大脳と小脳



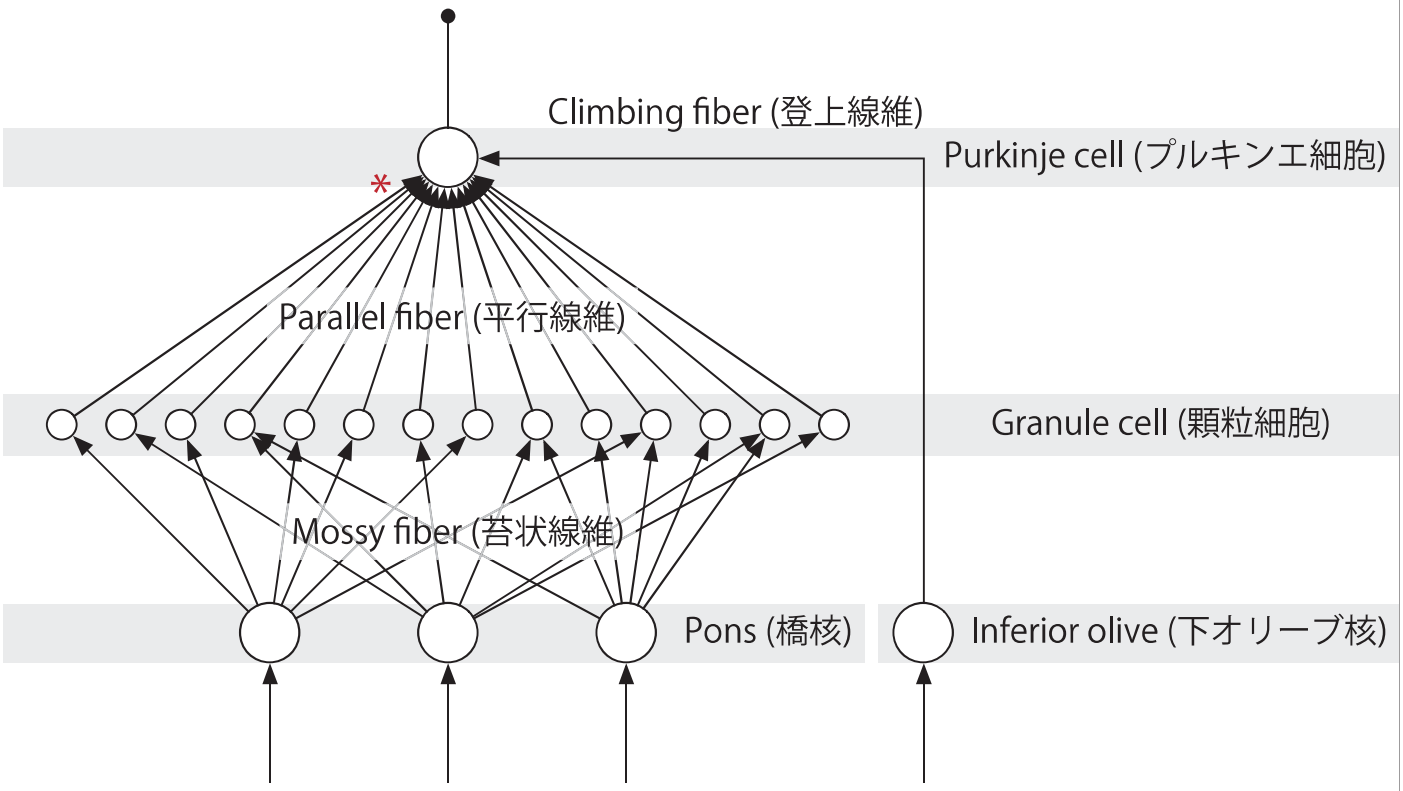
	大脳	小脳
体積比	80%	10%
細胞数	1.6×10^{10} (19%)	6.9×10^{10} (80%)

Azevedo FA et al. Equal numbers of neuronal and nonneuronal cells make the human brain an isometrically scaled-up primate brain. J Comp Neurol. 513:532-541, 2009.

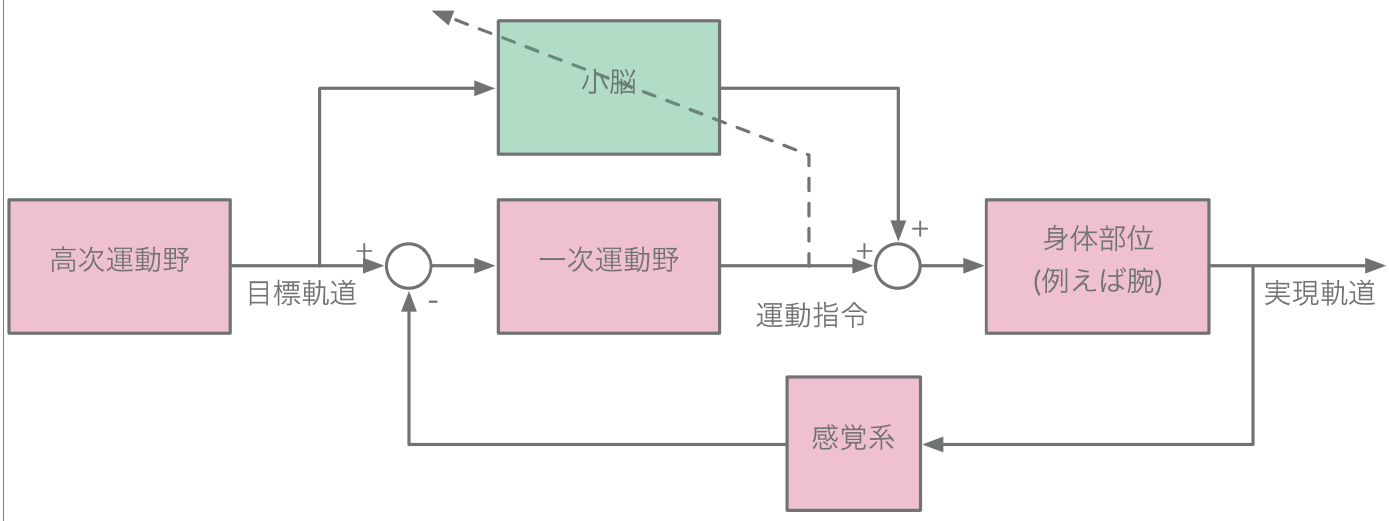
小脳 = 教師付学習機械

(aka Marr-Albus-Ito model)　(Marr 1969; Albus 1971; Ito 1982)

小脳はパーセプトロン



小脳の役割

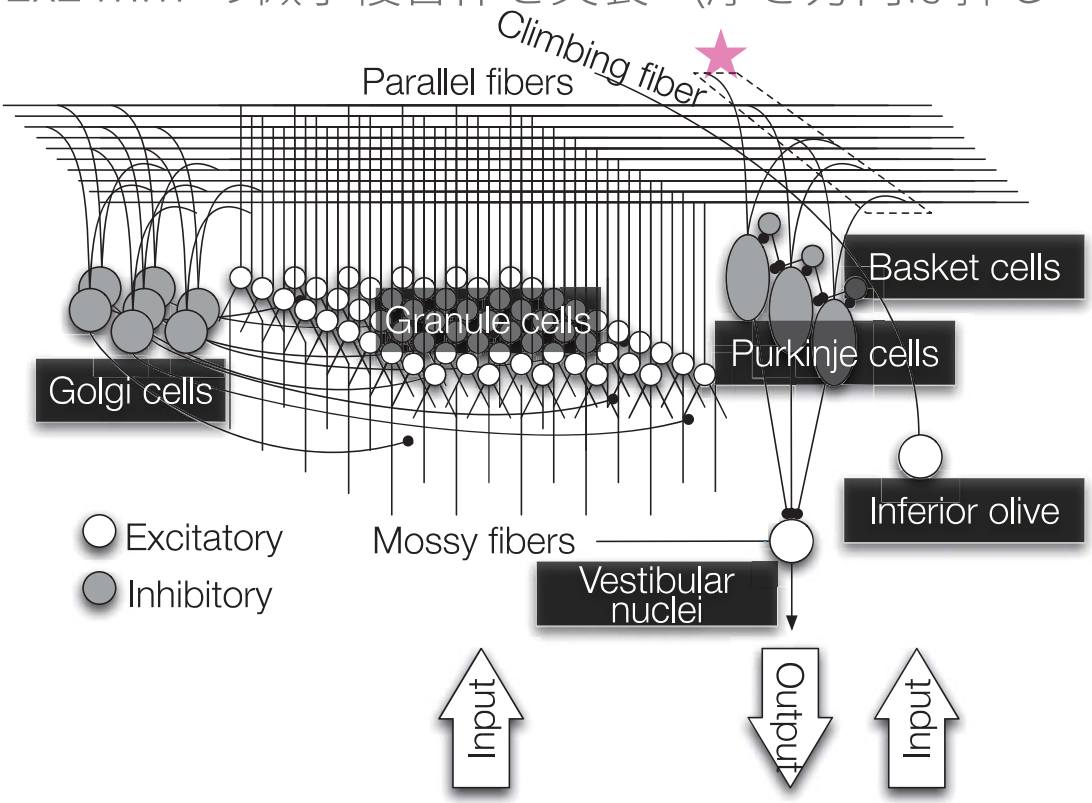


フィードバック誤差学習 (Kawato 1987)

2. 人工小脳の開発

実装する小脳回路

2x2 mm^{2}の微小複合体を実装　(厚さ方向は押しつぶす)



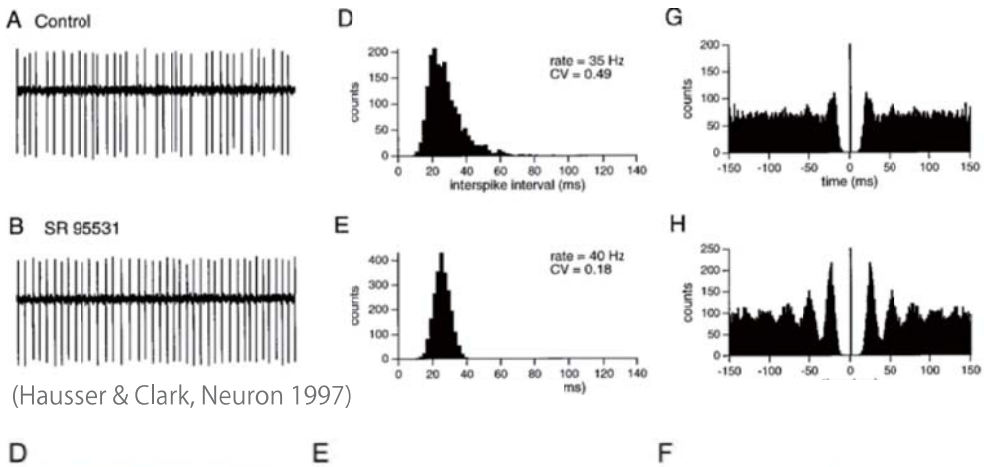
2 x 2 mm^2
1048576 GR
1024 GO
32 PKJ
32 BS
1 IO
1 VN

ニューロンモデルはスパイキングニューロン (積分発火型)

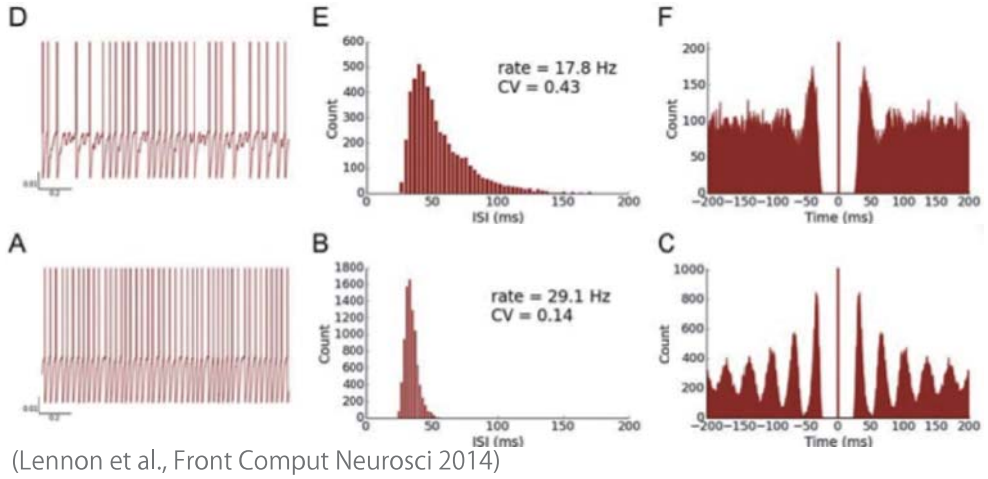
シミュレーションのコード概要

```
for ( int nt = 0; nt < NT; nt++ ) {
  for ( int i = 0; i < N; i++ ) {//ニューロン
    シナプス入力の計算 ( i ); 入力
  }
  for ( int i = 0; i < N; i++ ){//ニューロン
    膜電位の更新 ( i );        状態
    スパイク生成 ( i );        出力
  }
}
```

分子層ネットワークダイナミクス



(Hausser & Clark, Neuron 1997)



(Lennon et al., Front Comput Neurosci 2014)

2.1. 小脳神経回路シミュレーション

小脳と運動学習

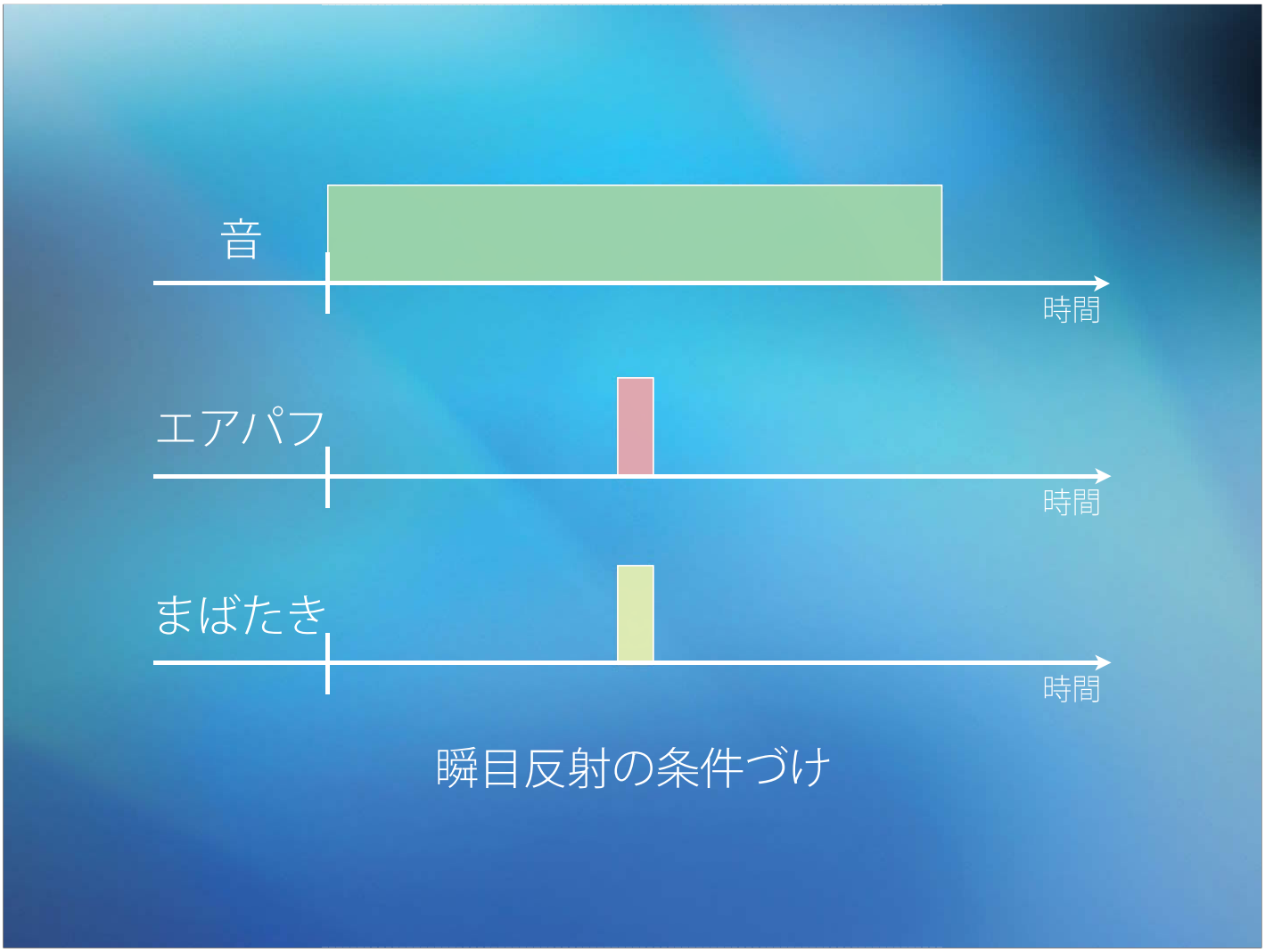
・運動制御・運動学習において重要

・損傷→運動失調・運動学習障害

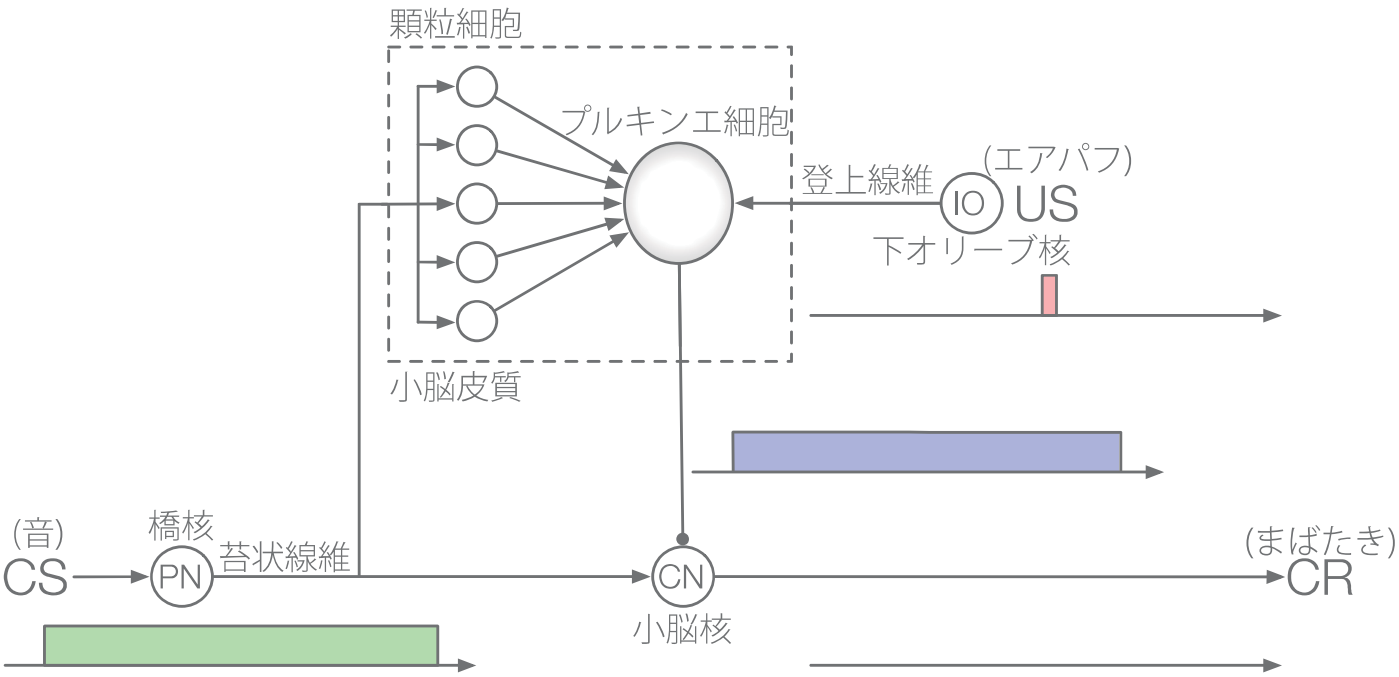
運動制御 = ゲイン + タイミング

運動の大きさ　　運動の開始と終了

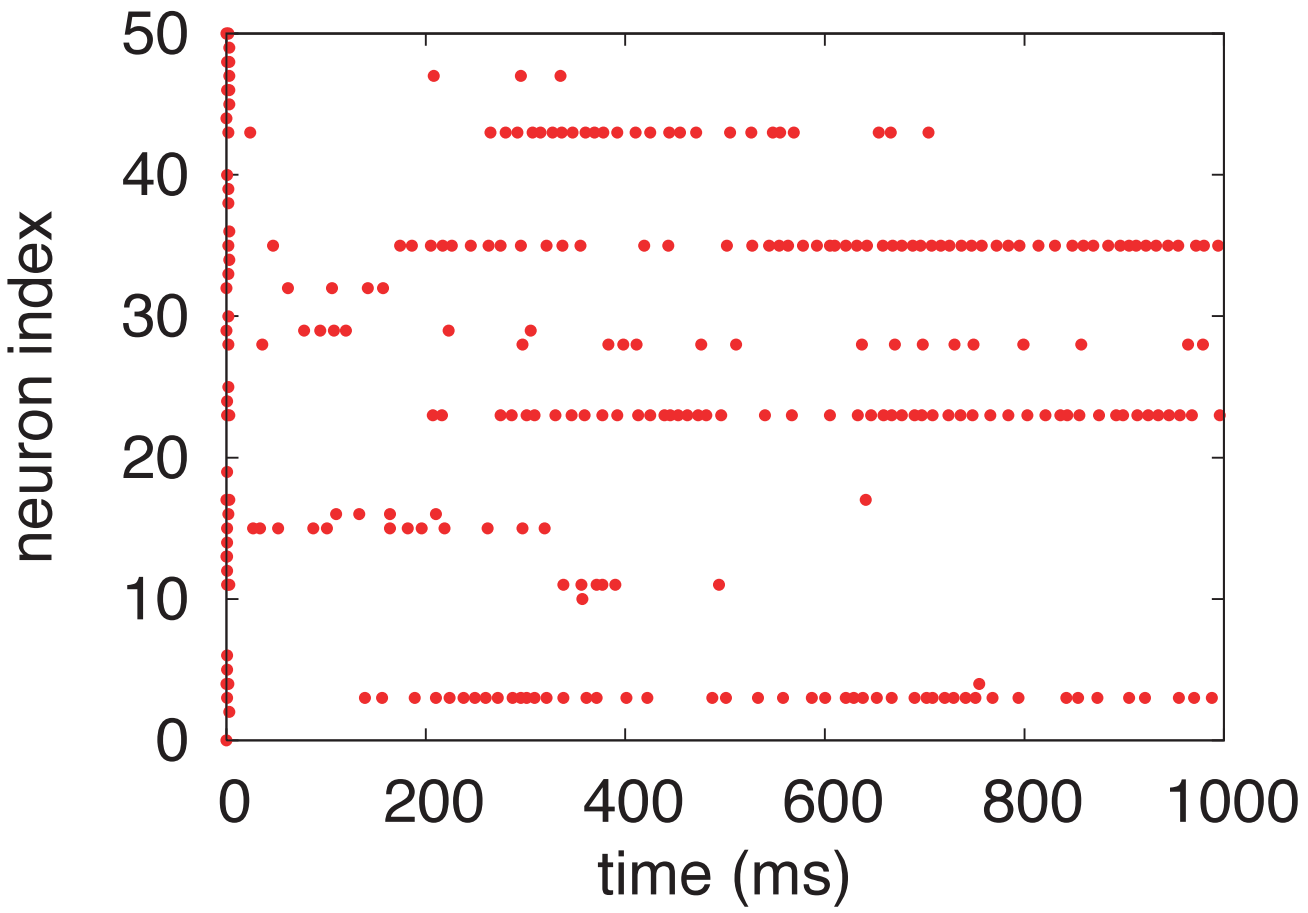
適切なパラメータを発見・記憶として保持 = 運動学習

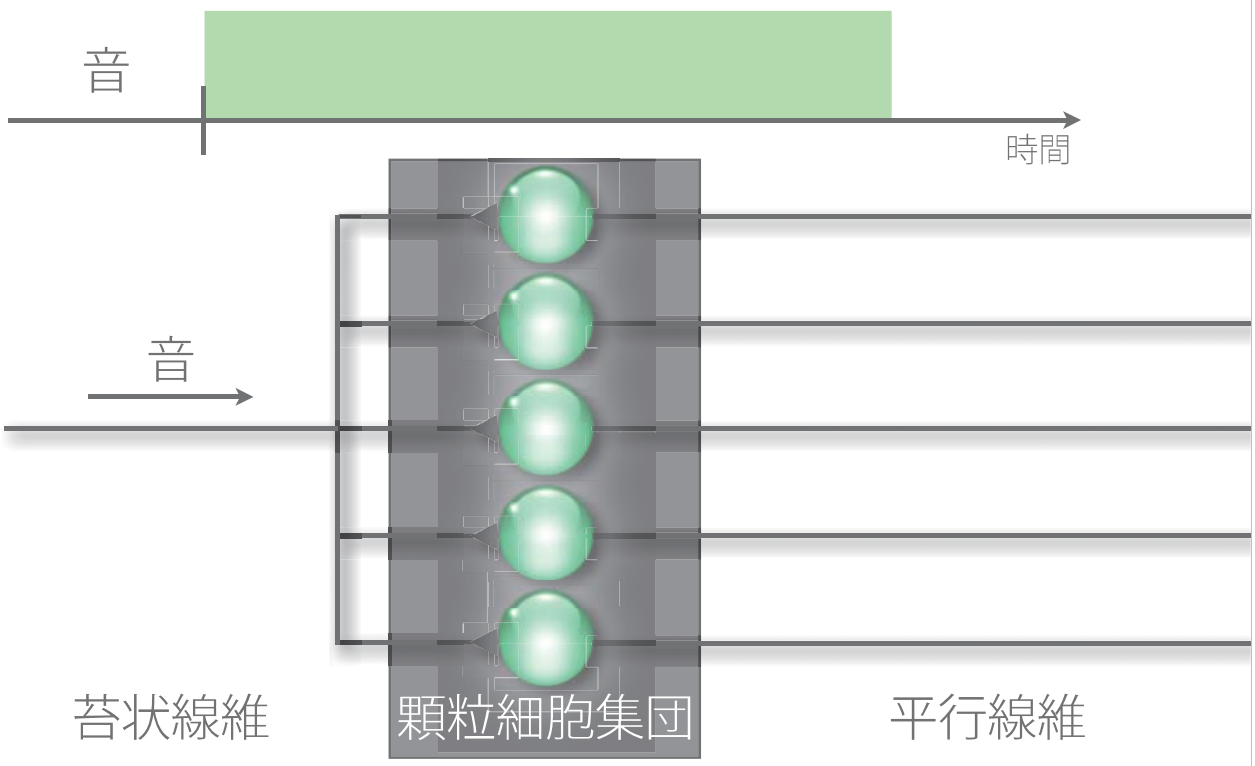


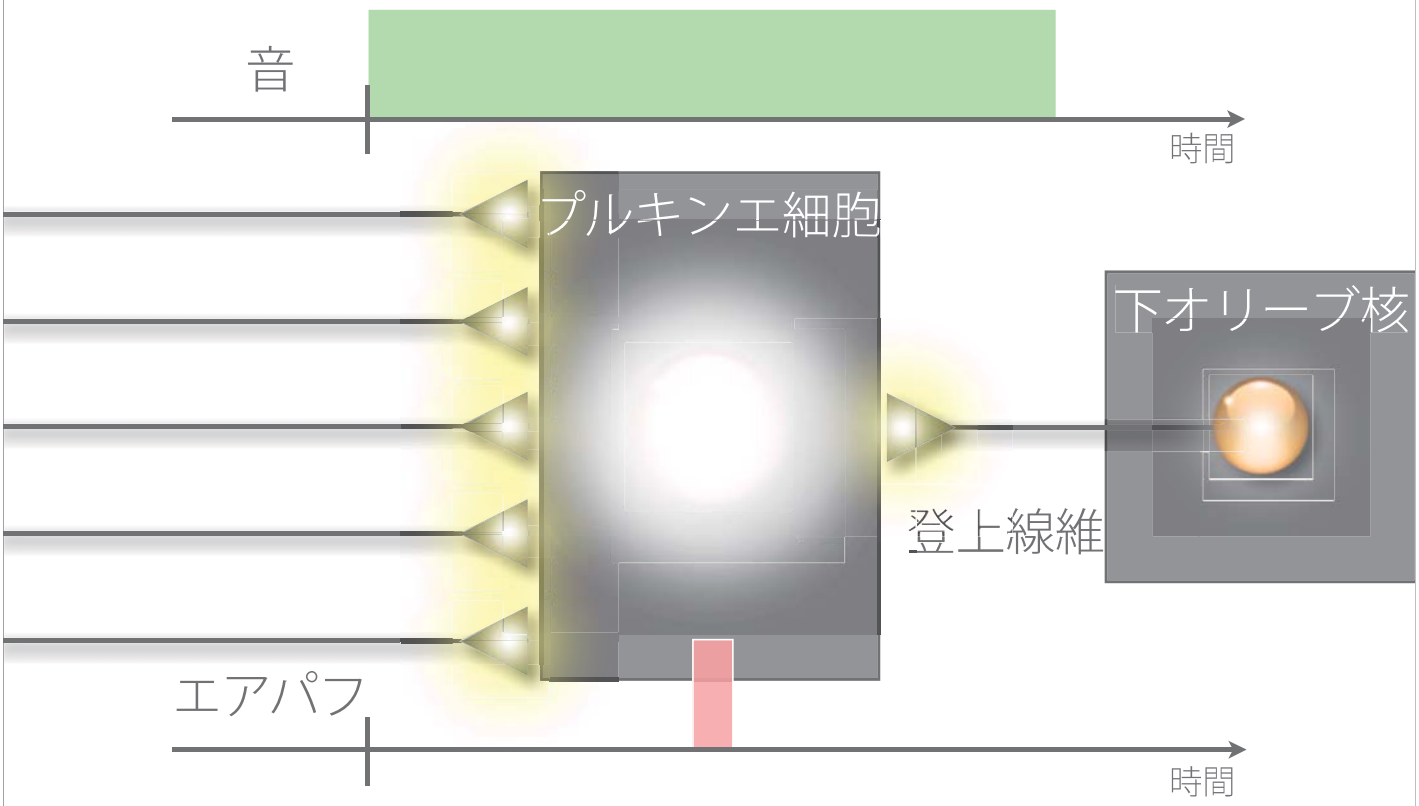
瞬目反射条件づけの小脳回路



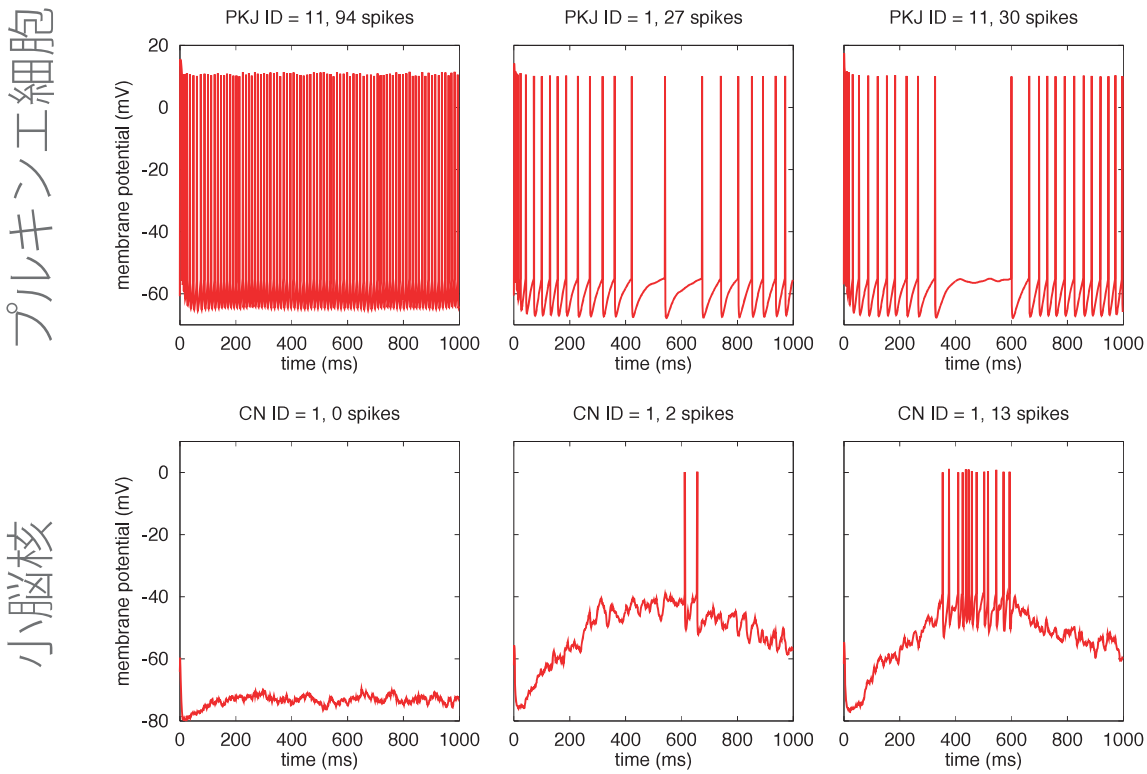
顆粒細胞の発火パターン







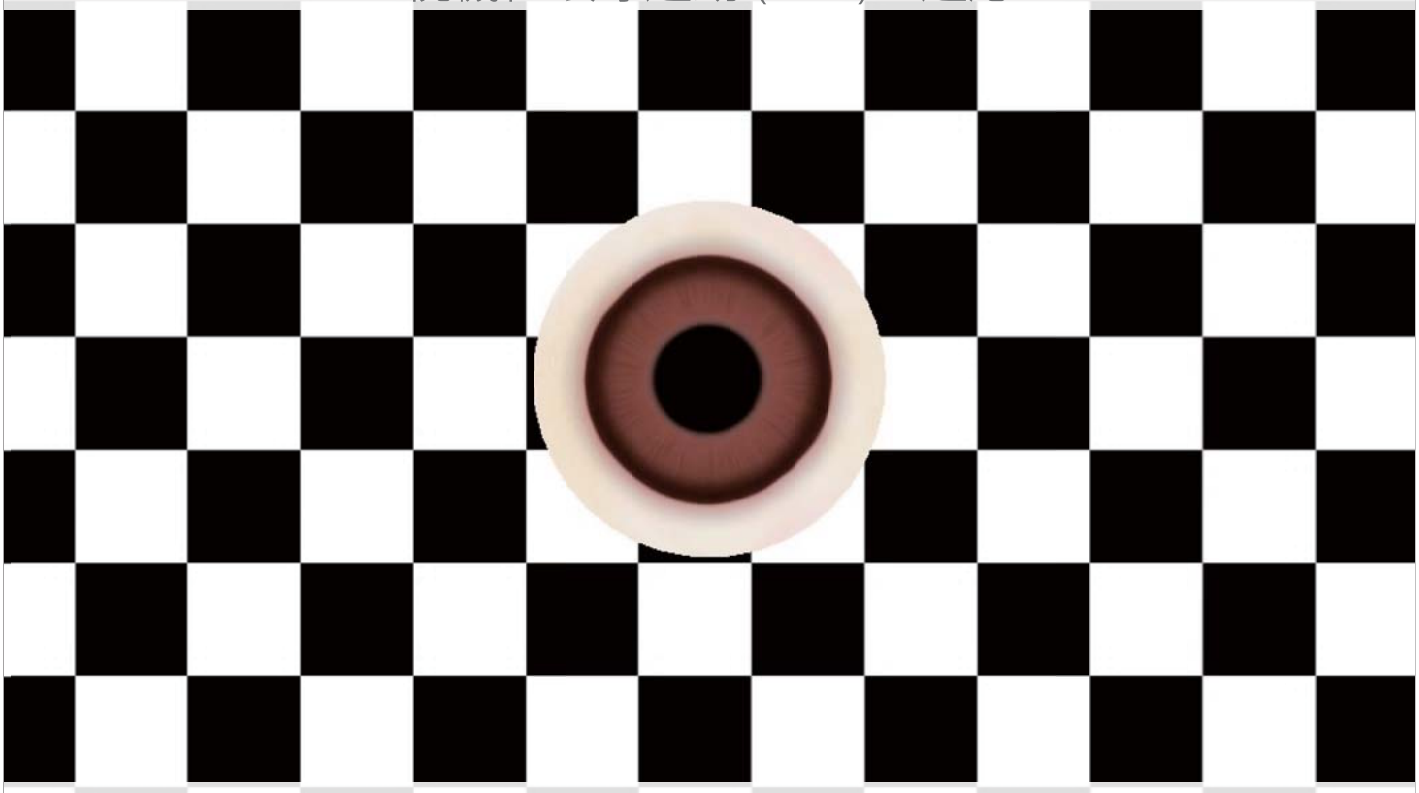
シミュレーション結果



(Yamazaki and Tanaka 2007)

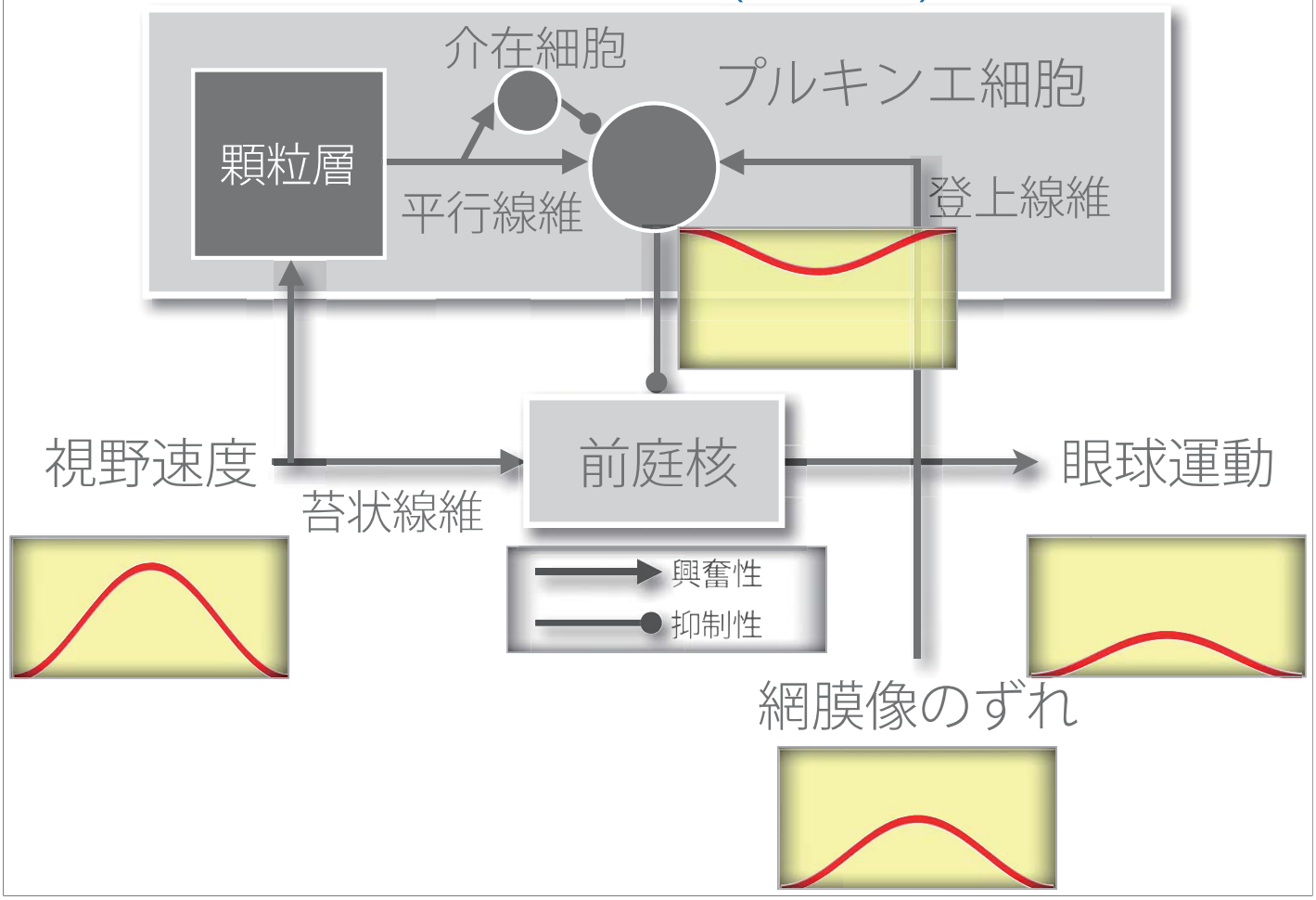
小脳によるゲイン学習の例

視機性眼球運動 (OKR)の適応

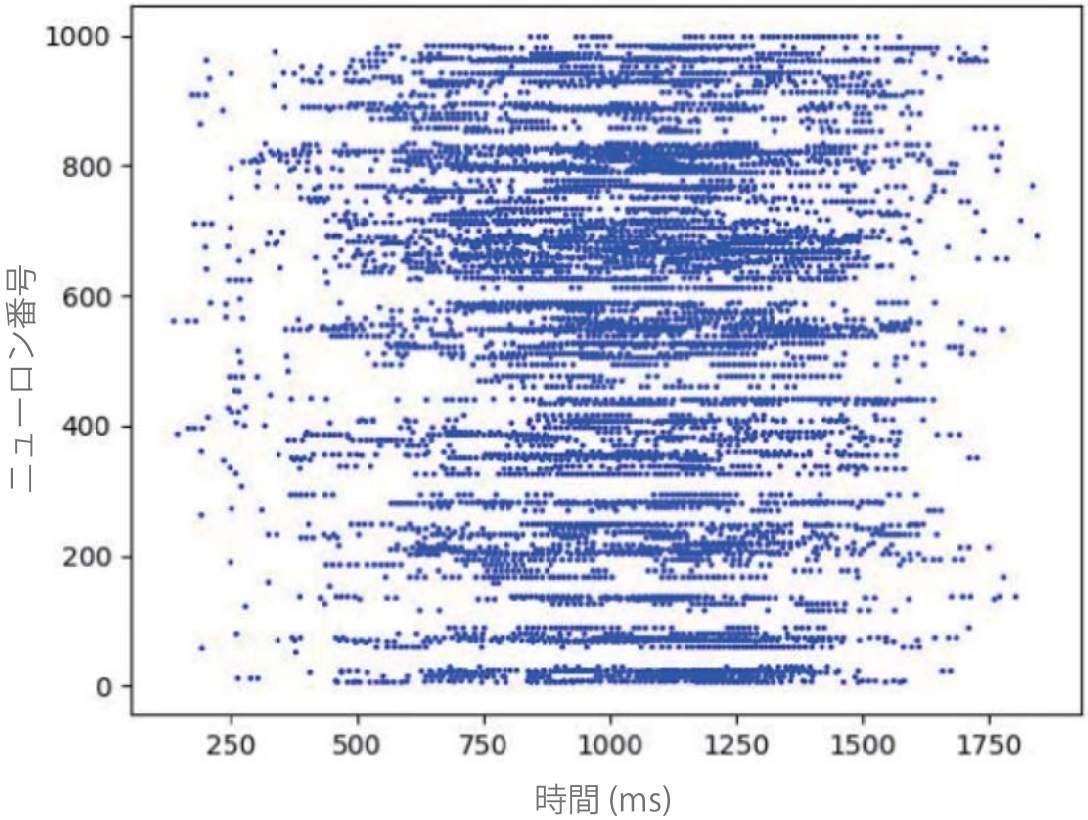


眼球の回転の大きさ = ゲイン

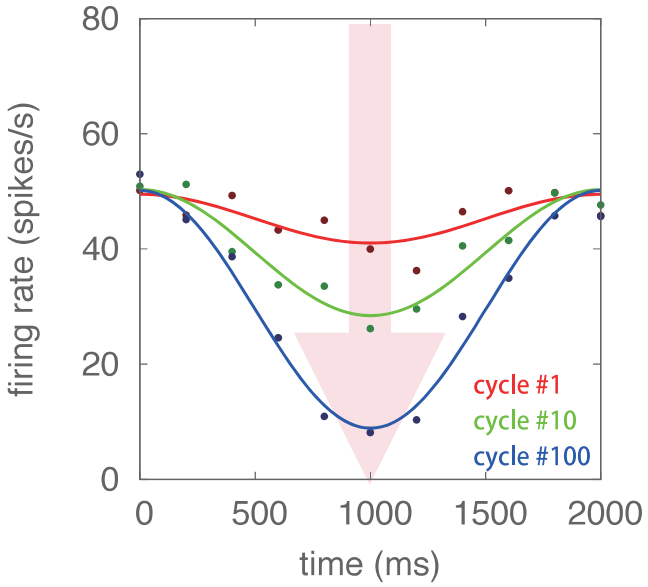
伊藤仮説 (1979)



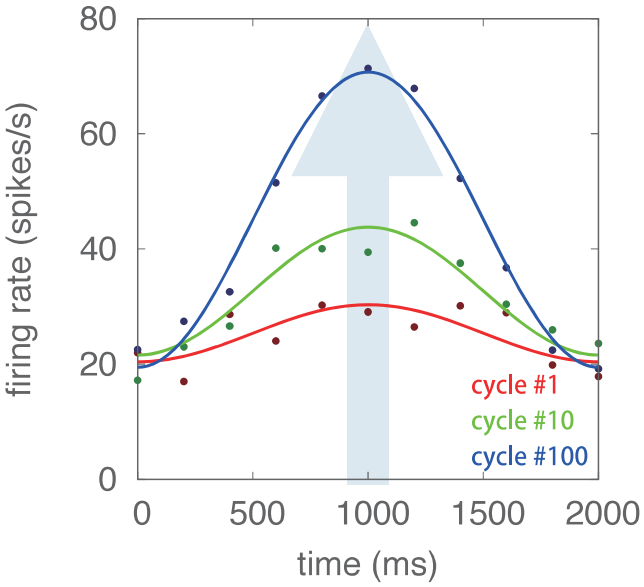
顆粒細胞のダイナミクス



OKRのシミュレーション結果



プルキンエ細胞



前庭核

2.2. ネコスケール人工小脳の開発

ネコスケール人工小脳

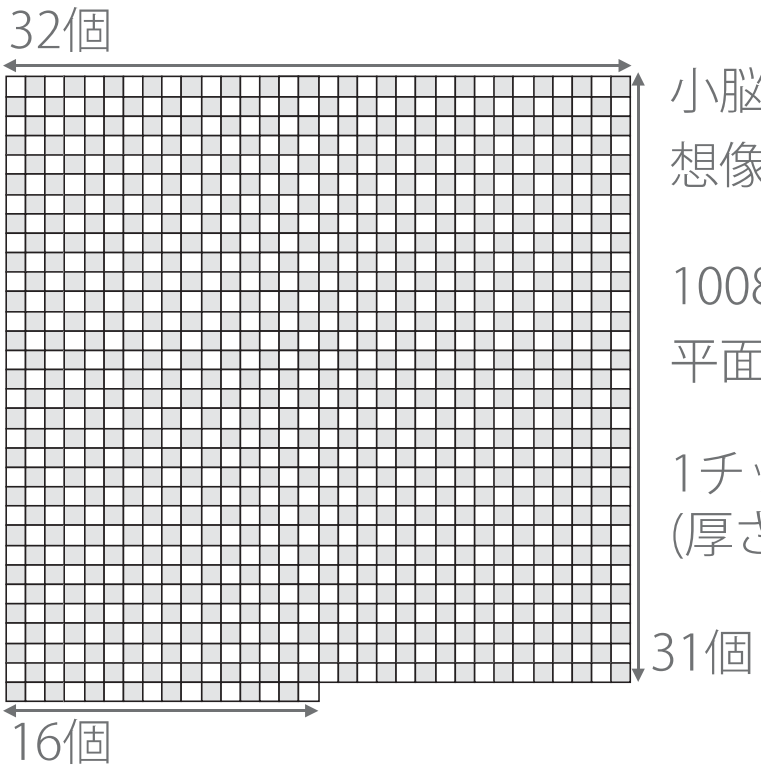
1,008 PEZY-SCチップ (252/320ノード)を利用
・4月上旬の時点で単精度ピーク性能2.6PFlops
・実行効率 2.6%

10億 (= 10^9) ニューロンからなる小脳回路を実装
・ニューロン数でネコ1匹分の小脳相当
・面積換算で 62×64 mm^2

実時間シミュレーション
・1秒間の小脳の神経活動を1秒以内でシミュレート
・Δt = 1 ミリ秒

もちろん世界最大
最高速
最も精緻

実装の実際 (1/4)



小脳を広げて平らにすることを想像する

1008チップをタイル上に並べて平面を作る

1チップに2x2 mm^{2}の回路を実装
(厚さ方向は押しつぶす)

1008 = 32 x 31 + 16

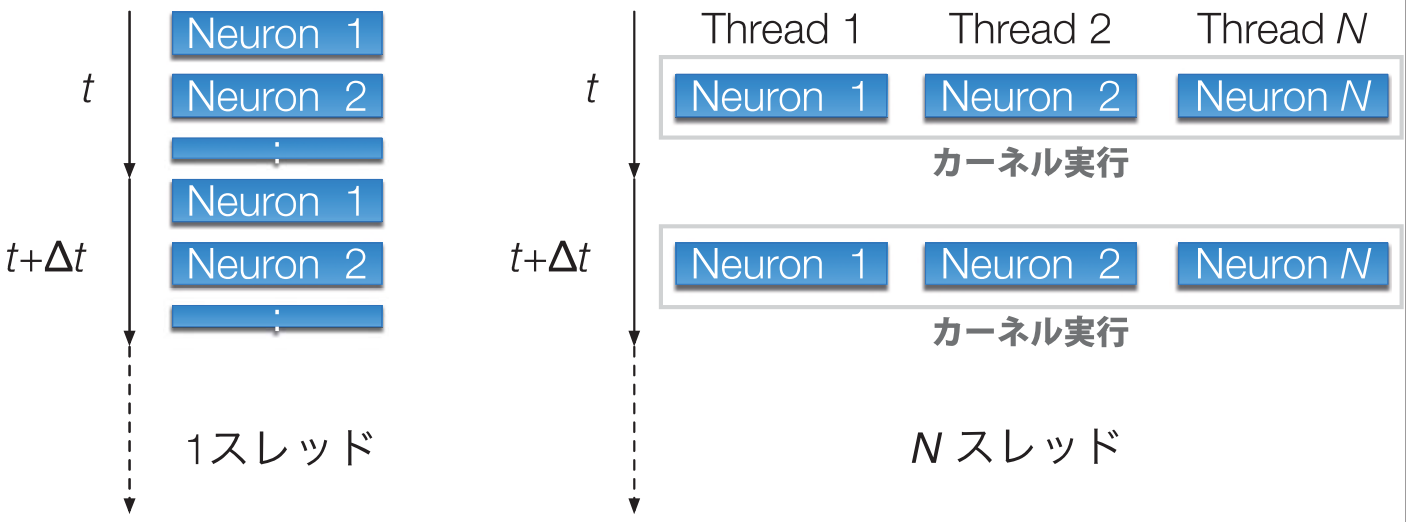
シミュレーションのコード概要

```
for ( int nt = 0; nt < NT; nt++ ) {
  for ( int i = 0; i < N; i++ ) {//ニューロン
    シナプス入力の計算 ( i ); 入力
  }
  for ( int i = 0; i < N; i++ ){//ニューロン
    膜電位の更新 ( i );      状態
    スパイク生成 ( i );      出力
  }
}
```

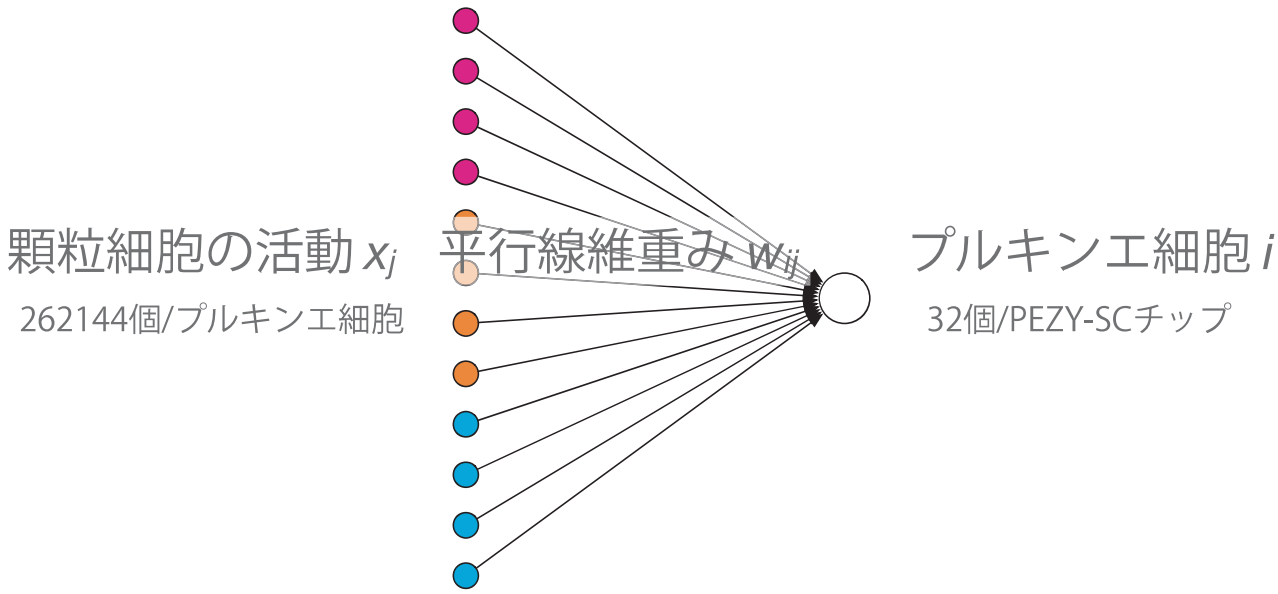
```
for ( int nt = 0; nt < NT; nt++ ) {
    シナプス入力の計算 ();
    膜電位の更新 ();
    スパイク生成 ();
}
```

カーネル呼び出し
ニューロンで並列

カーネル＝ニューロンの並列計算



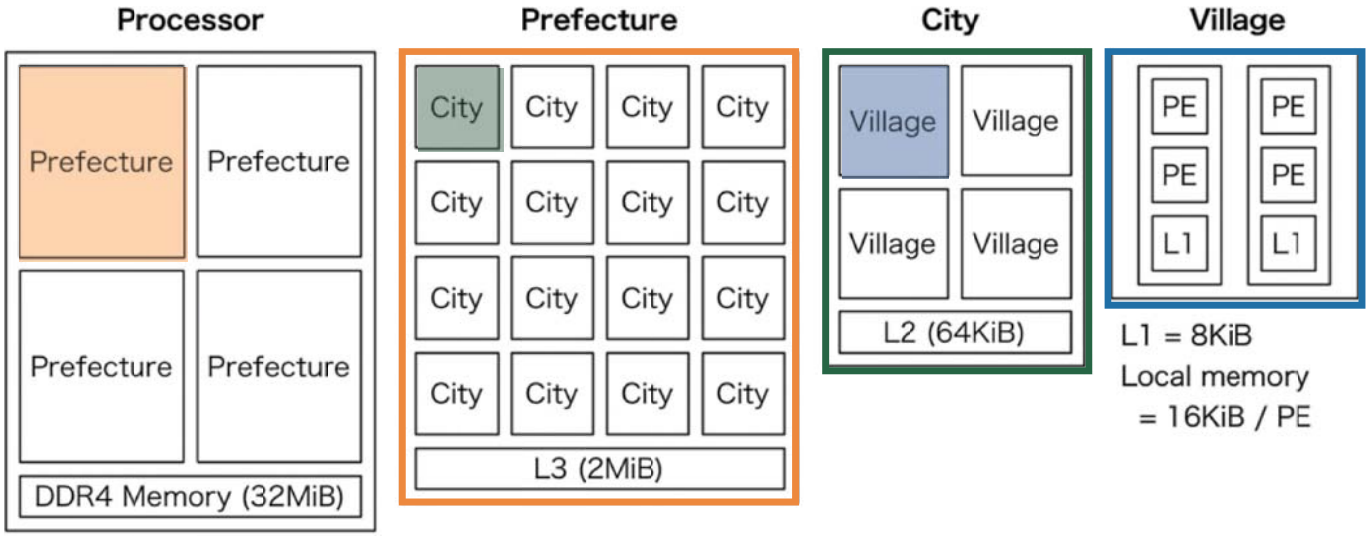
プルキンエ細胞へのシナプス入力



$\mathrm{syn}(i) = \sum_j w_{ij} x_j$ を計算　(積和の計算)

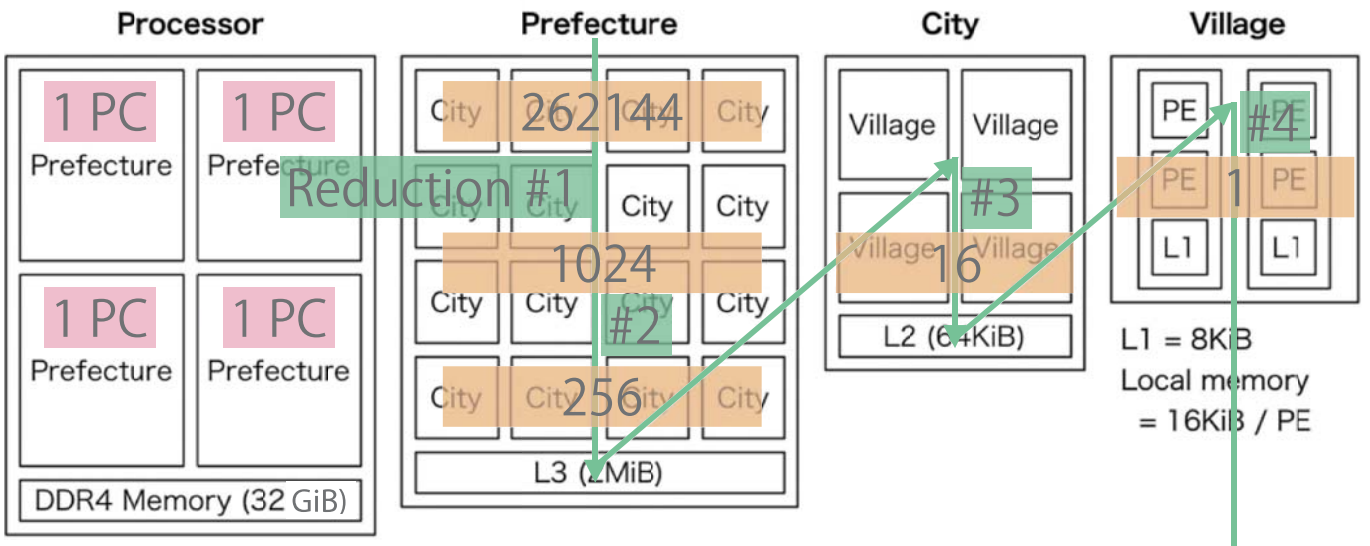
W_{ij} の値を変える＝シナプス可塑性

PEZY-SCチップの構成



PE: 計算コア (Processing Element)

リダクションの高速化



PC = Purkinje cell

Compute $\mathrm{syn}(i) = \sum_{j} w_{ij} x_j$

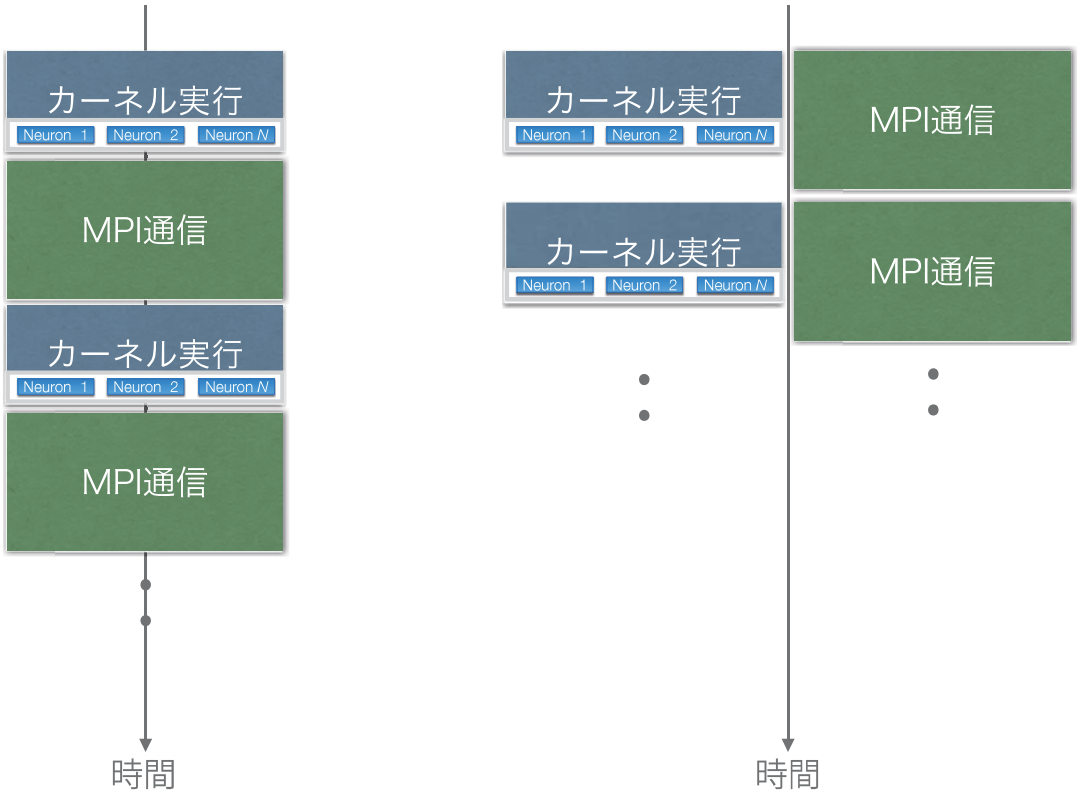
$0 \leq i < 32$ $\quad 0 \leq j < 262144$

syn(i)

Repeat 8 times

キャッシュ階層の利用

計算と通信のオーバーラップ



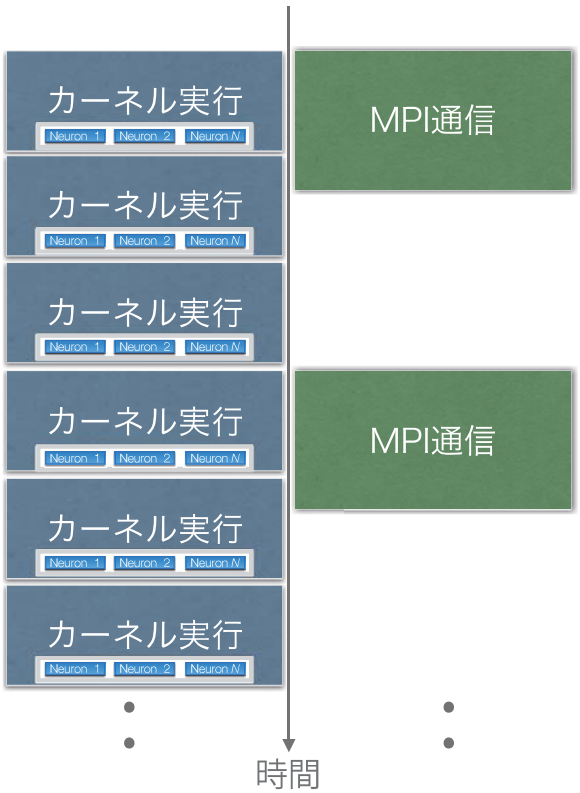
スパイクの配列をダブルバッファリング

通信そのものの削減

Noisy delayed spike transmission
Yamazaki, Igarashi, Makino, Ebisuzaki (2017)

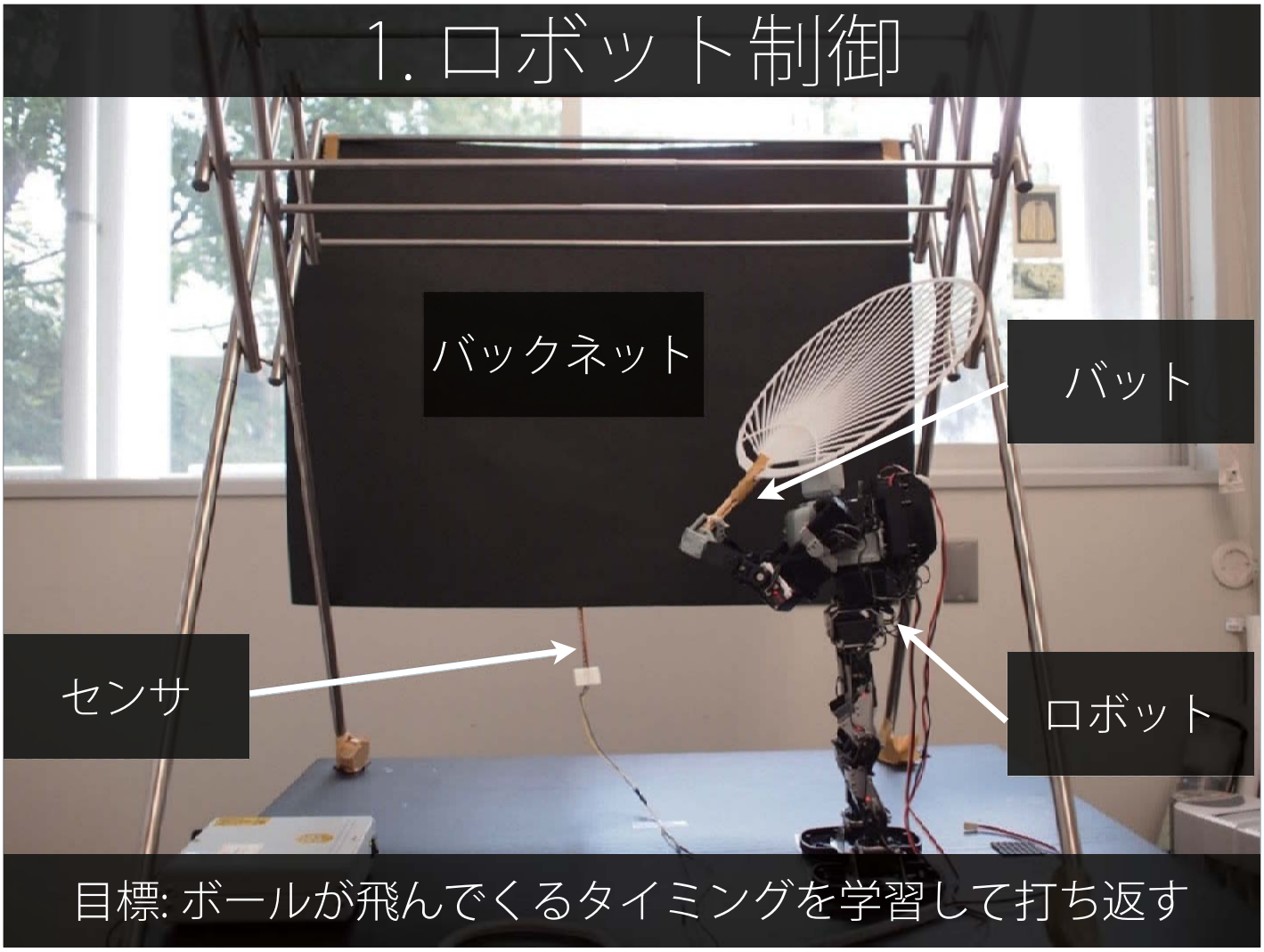
ニューロンの計算*N*ステップ毎に1回通信

通信回数を1/*N*に

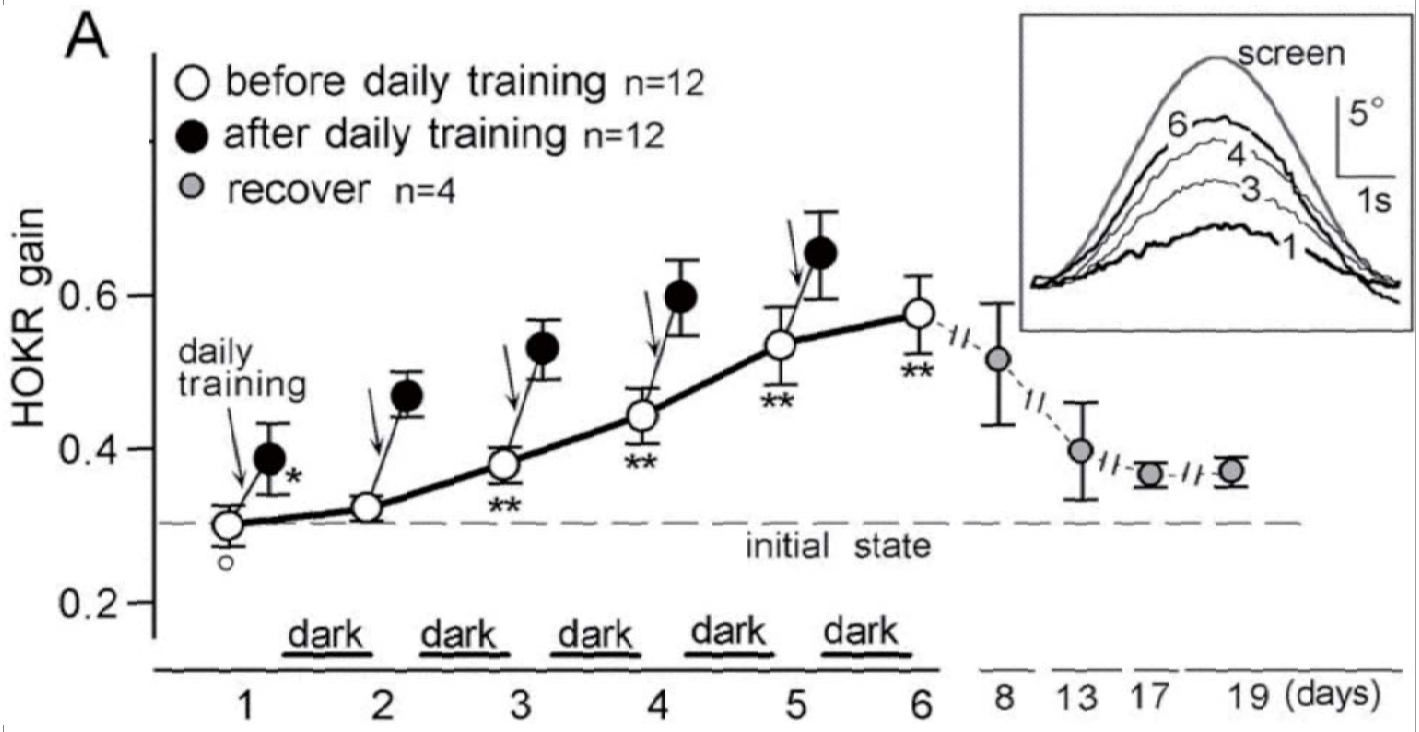


こういう工夫を積み上げてリアルタイムに近づける

2.3. リアルタイムシミュレーションの御利益



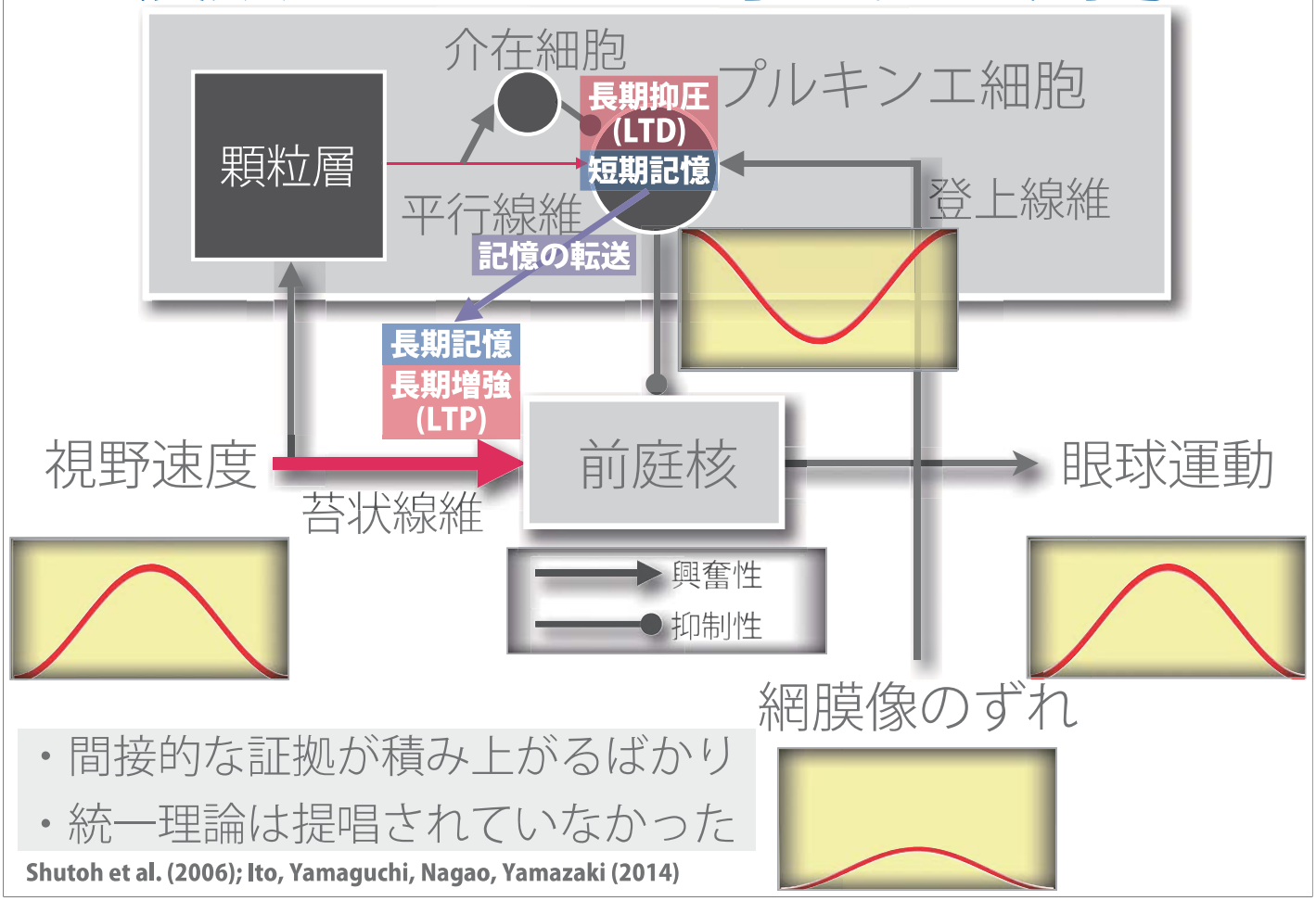
2. 長時間かかる脳内現象の再現



記憶の形成 = 獲得 + 定着

Shutoh et al. Neuroscience (2006)

複数のシナプス可塑性が関与



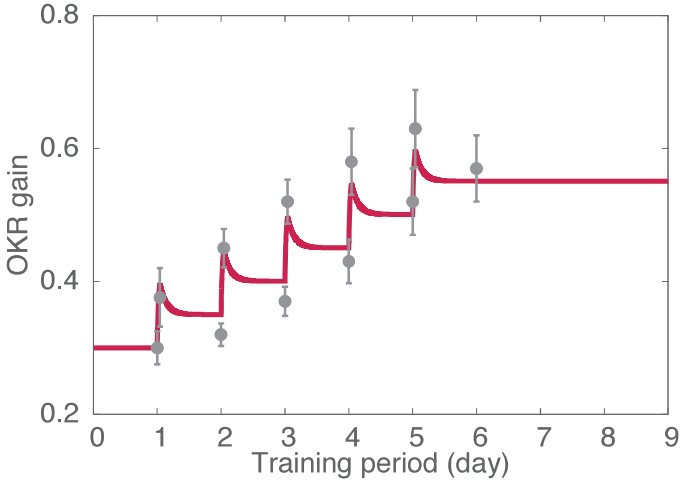
- 間接的な証拠が積み上がるばかり
- 統一理論は提唱されていなかった

Shutoh et al. (2006); Ito, Yamaguchi, Nagao, Yamazaki (2014)

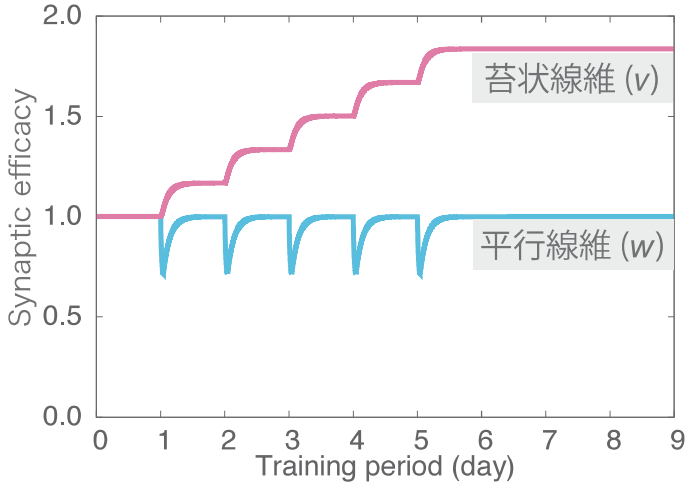
小脳学習における記憶定着の理論

Yamazaki et al. PNAS (2015)

ゲインの変化



シナプス結合の変化

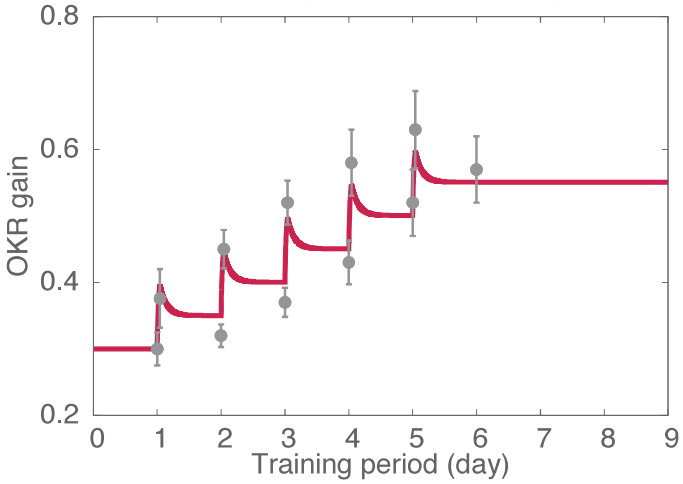


- 記憶の定着はトレーニング後に起こる
- 破壊実験や薬理実験の結果も再現成功

1週間のトレーニングを再現

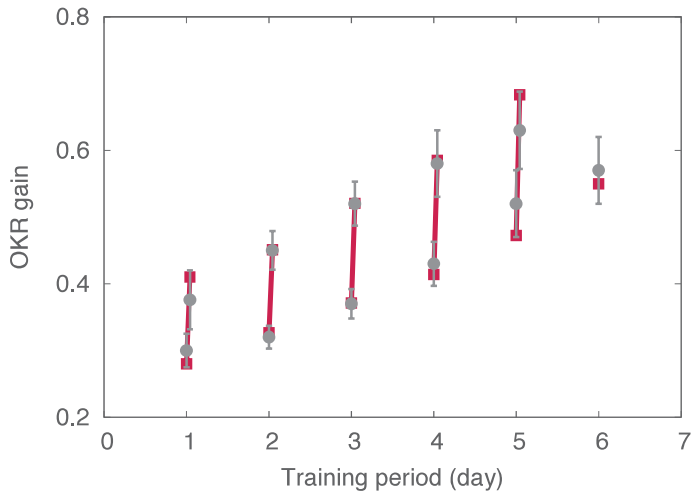
OKRゲイン

理論 (数学モデル)



Yamazaki et al. PNAS (2015)

シミュレーション



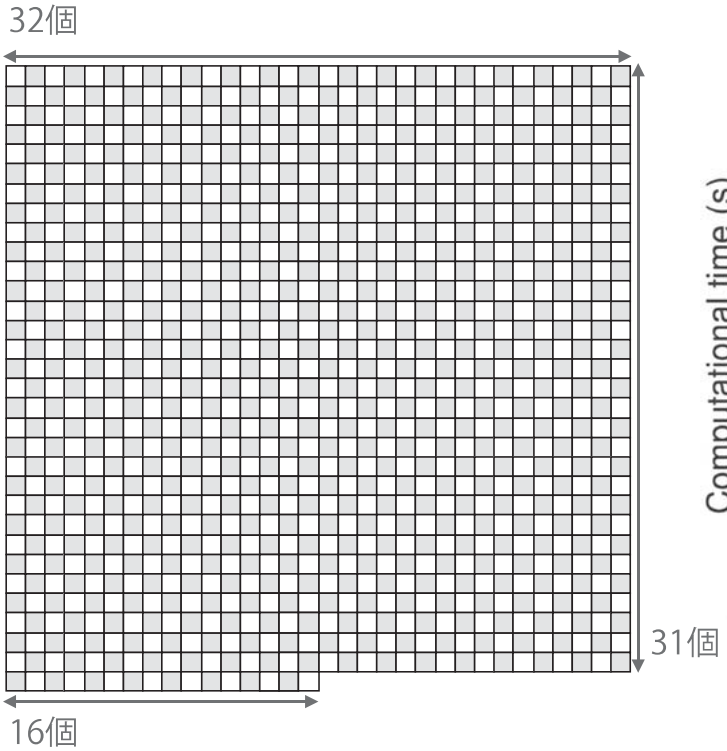
Gosui & Yamazaki, Front Neuroanat (2016)
(Modified)

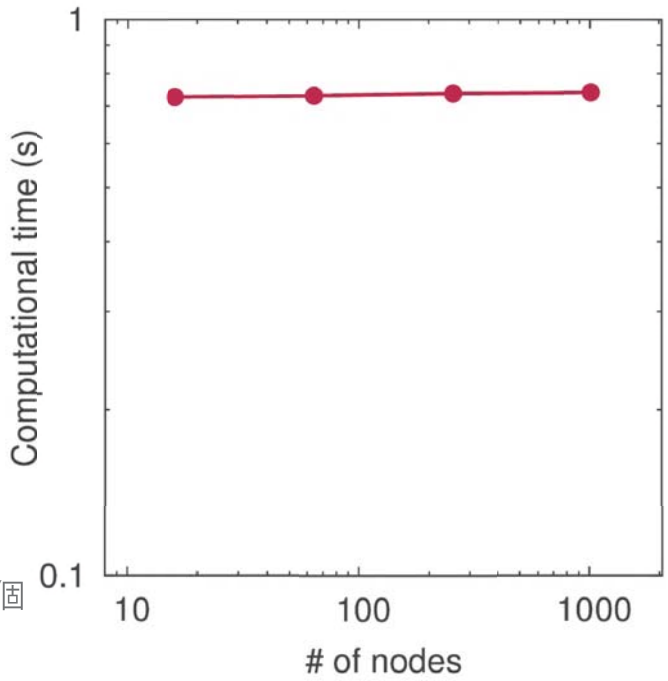
1週間のトレーニングのシミュレーションが1週間でできる

3.ヒトスケール小脳の開発に向けて

ネコからヒトへ

隣接する8チップのみとの通信 → 弱スケーリングは良好





基本的にこのまま規模を大きくしていけば良い

Confidential

人工小脳の最終形態

脳機能の一部を人工脳で補完する

運動の補完
リハビリテーション
QoLの向上

人工知能はカンブリア爆発を起こすか？

松原 仁（公立はこだて未来大学）

人工知能は
カンブリア爆発を起こすか？

松原 仁（公立はこだて未来大学）
人工知能学会前会長
2017年10月27日

1

ニュース！！

* 10月19日に新しいAlphaGo Zero の論文がNatureに発表された
* 囲碁のルールだけから（人間の棋譜や知識など一切使わずに）強化学習で強くした（たった3日間、TPU4台だけ）
* モンテカルロ法は使っていない
* 従来のAlphaGoに圧勝する強さになった（当然どの人間よりも圧倒的に強い）

人工知能

* Artificial Intelligence AI
* 明確な定義はない（知能を定義することが人工知能の目標？）
* 人間のような知性を持った人工物（コンピュータ、ロボット）を作ることを目標とする（工学的な目的）
* コンピュータを題材にして知能について研究する（科学的な目的）
* 個人的には鉄腕アトムを作りたい

3

人工知能の歴史（1）

* 第二次大戦後にコンピュータをいろいろな用途に使おうとした （数値だけでなく記号も処理できる）
* 1950年頃 チューリング（イギリス）シャノン(アメリカ)
  コンピュータにもチェスが指せることを示した
  映画 イミテーション・ゲーム
* 1956年 ダートマスの会議で人工知能という名前をつけた(マッカーシー)

人工知能の歴史(II)

* 1950年代　夢はバラ色？　すぐにでもコンピュータは人間に追いつくと思っていた　ほら吹きサイモン：あと10年でチェスで世界チャンピオンに勝つ！？　最初の人工知能ブーム
* 1960年代　反動の暗黒時代　機械翻訳で「精神は尊い」が「ウオッカはおいしい」に？　人工知能の冬の時代

人工知能の歴史(III)

* 1970年代　復活の動き　　エキスパートシステム
* 1980年代　AIバブル　すぐにでも実用になりそうな予感がした　多くの電機の会社が「人工知能部」を設けた
* 2回目の人工知能ブーム
* 国の「第五世代コンピュータ」プロジェクトがなされた
* 1986年に人工知能学会が設立された
* 1990年代　バブルがはじける　やはりすぐには実用にならなかった　2回目の冬の時代

人工知能の歴史（Ⅳ）

* 2010年代　3回目の復活
* 人工知能ブームの再来
* 機械学習　特に　深層学習(deep learning)
* 背景にビッグデータ、IoTの存在（学習の材料がある）
* 大量のデータの中に言語化しにくい知識がある！
* 再度多くの企業が本格的に人工知能研究に参入
* 2015年　経産省　産総研　AI研究センター　スタート
* 2017年　文科省　理研　AI研究センター　スタート

（自己紹介代わりの研究紹介）

* コンピュータは創造性を持たせるための研究の一環として小説を書かせよう
* 「きまぐれ人工知能　作家ですのよ」プロジェクトを2012年から実施している
* コンピュータに星新一のようなショートショートを創作させることを目指す
* 一昨年の星新一賞（第3回）に人間とコンピュータ共同で創作した作品を応募した（順当に落選したが、一次審査に通った）

9

深層学習（ディープラーニング）

* パーセプトロン、ニューラル・ネットワークのリバイバル
* 脳の神経回路網を模したネットワーク
* パーセプトロン　1960年代　パーセプトロン学習規則
  1(2)層　線形分離可能のものしか扱えない
* ニューラル・ネットワーク　1980年代　逆伝播法
  2(3)層　線形分離不可能なもののうちの良質のもの
* 深層学習　2000年代　　途中の層ごとに学習
  3(4)層から数十層　線形分離不可能で性質が悪いもの

10

深層学習

* 画像認識、音声認識などで圧倒的な性能を示す
* 領域によっては人間を超えている
* 人の顔の認識　98％以上（人間超え）
* 医療画像の認識（一部は医者超え）
* 自動運転
* 機械翻訳
* AIスピーカー
* 現時点では結果がどうして得られたのかの説明ができない（ブラックボックス化している）

11

従来のパターン認識

* パターン（アナログデータ）
* 前処理部
* デジタルデータ
* 特徴抽出部
* 識別部
* クラスに分類

12

特徴抽出

* 特徴抽出の「特徴」は人間が決めていた
* 例：　手書き数字の「2」の特徴
* 人間が決めることで制約を受けている（人間の能力の限界がある）
* ディープラーニングは特徴抽出もコンピュータが行なう
* 人間が見つけられなかった優れた特徴を抽出できる

13

種の進化

* カンブリア紀　5億数千年前
* カンブリア爆発　　生物の多様性が一気に広がった
* なぜこの時期に多様性が広がったのか？
* アンドリュー・パーカー　光スイッチ説
* 生物が「眼」を持ったためという説
* 初めて目を持った生物「三葉虫」が出現して他の生物を見つけて捕食
* 他の生物も（捕まえるため、逃げるため）目を持つように進化

14

深層学習と画像認識

* コンピュータもディープラーニングによって「眼」を持ちつつある（カメラ＝網膜＝は以前からあったが、その後ろの視神経ができつつある）
* これから人工知能の能力も爆発的に進展する可能性がある

15

ディープラーニングの適用

* スマートフォンの音声対話
* コンピュータ囲碁
* 自動運転（運転支援）
* 入出国やコンサートでの個人認証
* 肺がんのレントゲン写真の検査
* 大腸がんの内視鏡検査

16

AlphaGo 1

* メインは D.Silver とAja Huang の二人
* 2016年10月弱いプロ(2段)に5戦5勝 非公式戦を入れると8勝2敗
* 深層学習でプロ棋士の棋譜(3000万局面)を再現する予測器の作成 予測率 57%
* 予測器を初期値としてコンピュータ同士で強化学習させ、元のに80%勝つシステムを作成
* そのシステムを使って3000万局面をデータにしてvalue networkを作成(これが囲碁の評価関数に相当)
* それにモンテカルロ木探索を使ってプレイする

AlphaGo 2

* 機械学習に50個のGPU 一か月
* 対戦は1202個のCPUと176個のGPU
* やはりGoogle の資金力はすごい
* Nature の論文の著者が20人！！
* 「論文のレベルでは絶対イ・セドルに勝てない(すべてのプロ棋士が断言)が、機械学習がその後もすごくうまくいっていれば、もしかするともしかするかもしれない」と当初は思っていた。。。。

AlphaGo 3

* 2016年3月　AlphaGoがイ・セドルに4勝1敗
* コンピュータ側の完勝（イ・セドルに大きなミスはない）
* 世界中の囲碁のプロ棋士、囲碁ファン、人工知能関係者がショックを受けている
* AlphaGoは人間より優れた大局観を持っている(コンピュータには人間に見えない未来が見えていた）
* すでに実力として人間よりもAlphaGoの方が上と思わざるを得ない
* 囲碁も将棋と同じ道を辿ったことになる

その後のコンピュータ囲碁

* 日本のDeepZenGoが趙治勲に1勝2敗（2016年）
* 刑天（中国）がカ・ケツといい勝負（2016年）
* Masterが世界中のトッププロ棋士に60連勝負けなし（2016－2017年）
* Master はAlphaGoの改良版
* DeepZenGoも井山に勝利
* 2017年5月にカ・ケツとAlphaGoが対戦して勝利（3回戦）
* AlphaGo自己対戦50局の棋譜公開（とんでもない手の連続で囲碁関係者に大きな衝撃を与える）

絶芸

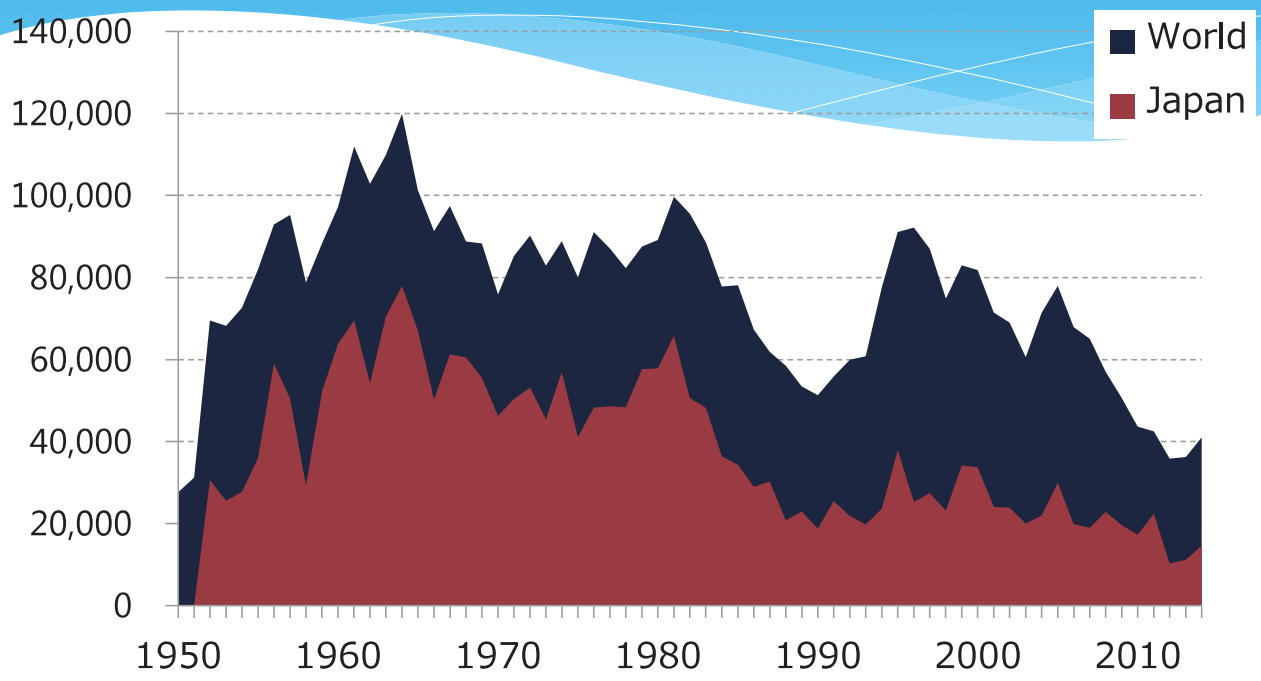
- 中国のテンセント(世界最大のゲーム会社)が作ったコンピュータ囲碁のプログラム
- 深層学習(ディープラーニング)＋モンテカルロ木探索＋強化学習　AlphaGoの仕組みと基本的に一緒
- 昨年AlPhaGoが発表されてから開発を開始
- 開発メンバーは誰も囲碁のルールを知らず
- 1年でトッププロ棋士に勝つレベルに達する
- 人工知能の開発方法論が確立されたということ

定置網漁業

- 定置網漁業の特徴
  - ✓ 受動的な漁法
    - 環境にやさしい漁法
  - ✓ 漁獲選択性はない
    - 色々な魚が獲れる

- めじまぐろの資源管理
  - ✓ 6ブロックでの資源管理
    - 太平洋北部ブロックは上限超過
    - 6月に10日間の禁漁を実施

まぐろの漁獲量の推移

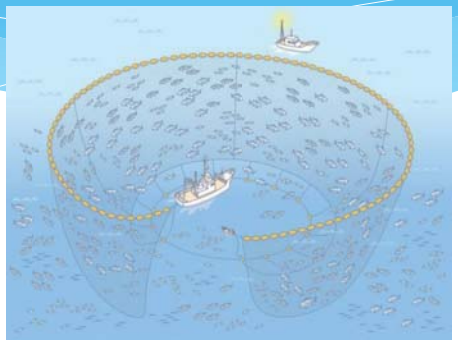


23

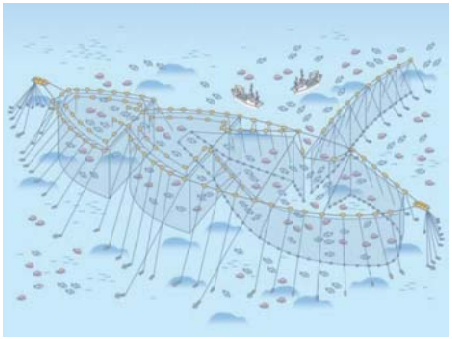
FishStatJ@FAO

めじまぐろの漁獲

* まき網漁業
  - ✓ 2,000トン／年
  - ✓ 能動的漁業
  - ✓ まぐろは 99% 以上

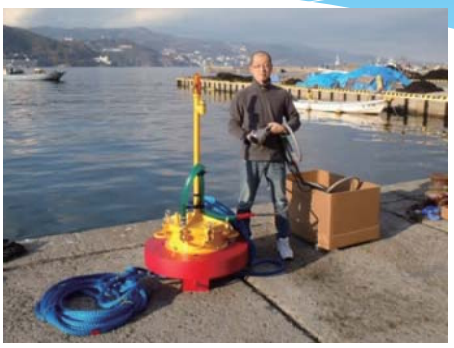


* 定置網漁業
  - ✓ 2,007トン／年
  - ✓ 受動的漁業
  - ✓ まぐろは 1% 未満

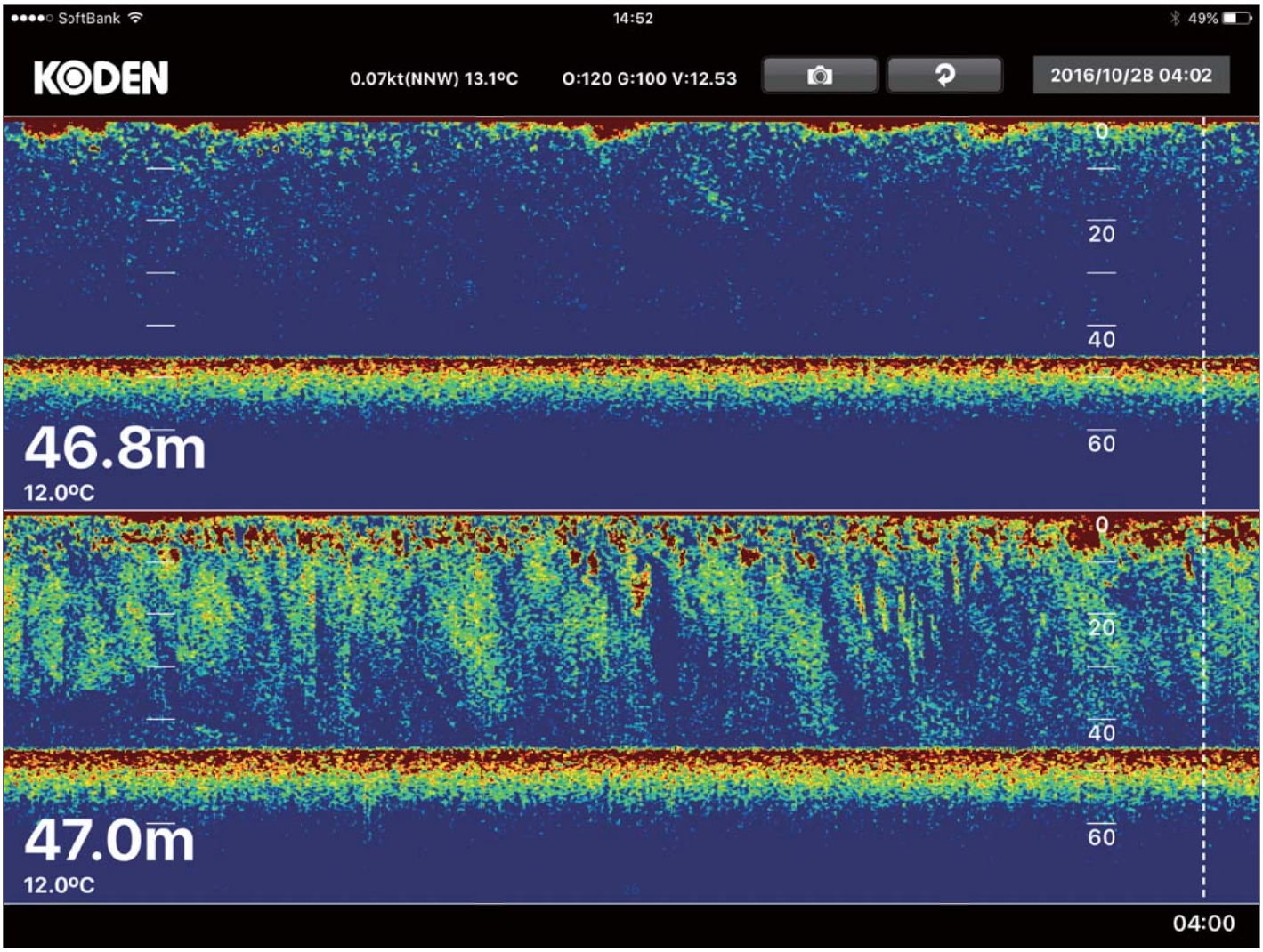


24

定置網魚群探知機



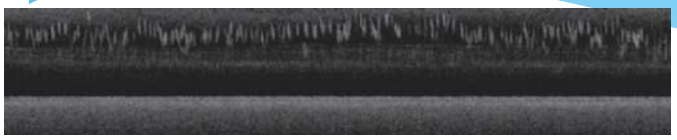
25


SoftBank
14:52
49%
KODEN
0.07kt(NNW) 13.1°C
O:120 G:100 V:12.53
2016/10/28 04:02
0
20
40
60
46.8m
12.0°C
0
20
40
60
47.0m
12.0°C
04:00

27

魚種毎のグレースケール画像

めじまぐろ　2,684kg（10月3日）



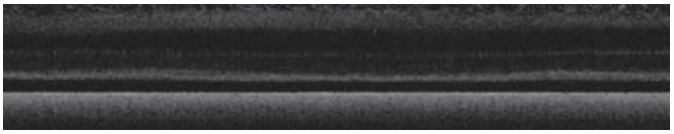
さけ　1,560kg（11月5日）

ぶり　2,835kg（10月6日）

するめいか　2,990kg（11月11日）

かたくちいわし　4,045kg（11月1日）

漁網　133kg（10月22日）



28

魚種判別

- 仮説
  - ✓ 魚群は箱網内を回遊する
  - ✓ 魚種毎の回遊速度がある
  - ✓ 魚種毎の回遊水深がある
- 解析方法
  - ✓ 水深毎に周波数を求める
  - ✓ 水深と周期で判別する

29

資源保護の効果

- 2015年10月の漁獲データに適用
  - ✓ 出漁日数　29日間
  - ✓ 漁獲量　96,170kg（5,911kg）
  - ✓ 仮想休漁　2日間

	保護量	漁獲量
めじまぐろ（5,911kg）	3,365kg	2,546kg
その他（90,259kg）	2,725kg	87,534kg

30

ディープラーニングと人工知能

* ディープラーニングは画像認識と音声認識が得意
* ディープラーニングのための大量のデータを集めるのは一般的に大変
* いまのディープラーニングは（普通の意味において）答えが出た経過を説明できない

31

ご	参	考						
	2017		年	度	活	動	一	覧

■分科会
- システム技術分科会
- 教育環境分科会
- 科学技術計算分科会
- 合同分科会

■ＷＧ
- LA を利用した教育･学習効果の向上 WG
- 学術研究機関のためのサイバーセキュリティ･ガバナンス WG
- クラウド時代のデータ共有技術 WG
- メニーコア時代のアプリ性能検討 WG
- 情報システムの効率的エネルギー活用検討 WG
- 汎用 VR システムの活用研究 WG

■タスクフォース
2017 年度は活動なし

■委員会
- 活動推進委員会

■分科会活動

システム技術分科会

[SS研ICTフォーラム2017] 2017年8月22日(火) 13:30-17:00 / 富士通(株)本社 **「データ利活用で変わるシステムの未来」**	
[講演] **「活用者と提供者を結びつけるデータ流通　データ取引市場とは」** 真野 浩(Every Sense, Inc.)	
[講演] **「データ利活用に向けて大きく変わる我が国の個人情報保護制度」** 上 茂之((株)富士通総研)	
[講演] **「学生ログを活用したより良いキャンパス創り ～学生のメンタルサポートと成績不振者の早期発見～」** 不破 泰(信州大学)	
[パネルディスカッション] **「データ利活用で変わるシステムの未来」** モデレーター　佐藤 聡(筑波大学) パネリスト　真野 浩(Every Sense, Inc.) 上 茂之((株)富士通総研) 不破 泰(信州大学)	

[システム技術分科会2017年度会合] 2018年2月1日(木) 13:30-17:20 / 富士通(株)本社 **「将来における大学・研究機関のデータ管理について」**	
[講演] **「立教大学におけるクラウド活用(メール、ストレージ)事例」** 小川 龍秀(立教大学)	
[講演] **「大規模研究データの保管・配布におけるクラウド利用の課題と期待」** 藤田 直行(宇宙航空研究開発機構)	掲載
[講演] **「教育機関の効果的な安否確認システム運用手法 ～静岡大学の事例～」** 永田 正樹((株)アバンセシステム/静岡大学)	
[パネルディスカッション] **「将来における大学・研究機関のデータ管理について」** モデレーター　佐藤 聡(筑波大学) パネリスト　小川 龍秀(立教大学) 藤田 直行(宇宙航空研究開発機構) 永田 正樹((株)アバンセシステム/静岡大学)	

掲載 は本冊子に原稿が掲載されています

教育環境分科会

[SS 研教育環境フォーラム 2017] 2017 年 8 月 28 日(火) 13:30-17:40 / 富士通(株)本社 **「学習者と教授者を支える教育環境 -LMS の今後を考える-」**	
[講演] **「MOOC における学習評価に関して -学習者による相互評価方式を中心に-」** 福原 美三(日本オープンオンライン教育推進協議会)	
[講演] **「キュレーション学修法を用いた能動的学修スキル育成の実践」** 田名部 元成(横浜国立大学)	
[ワークショップ] **「先生って何してる？どうお手伝いすればいい？」** 話題提供/コーディネーター　喜多 一(京都大学)	

[教育環境分科会 2017 年度会合] 2017 年 10 月 28 日(土) 9:30-12:30 / ANA クラウンプラザホテル神戸 **「学習者と教授者を支える教育環境 -プログラミング教育のための教育環境-」**	
[講演] **「Moodle を用いた初学者用プログラミング環境 -サンプルのコピペ実行を起点とする学習-」** 布施 泉(北海道大学)	掲載
[講演] **「プログラミング学習環境 BitArrow の紹介 -Web ブラウザのみでプログラムが学べる-」** 長 慎也(明星大学)	掲載
[講演] **「「働きがいのある会社」ランキング 1 位の IT 会社の教育の実態について」** 岡田 拓也(Acroquest Technology(株))	

掲載 は本冊子に原稿が掲載されています

科学技術計算分科会

[SS研HPCフォーラム2017] 2017年8月30日(水) 10:30-17:20 / 富士通(株)本社 **「計算科学の新たな可能性」**	
[講演] **「ドメイン特化による高性能・高生産性プログラミング」** 丸山 直也(理化学研究所)	
[講演] **「量子ダイナミクスの第一原理計算と光科学フロンティアへの展開」** 矢花 一浩(筑波大学)	掲載
[パネルディスカッション] **「HPC の社会シミュレーションへの展開」** コーディネーター 田中 輝雄(工学院大学) パネリスト 堀 宗朗(東京大) 藤澤 克樹(九州大) 野田 五十樹(産総研) 上東 貴志(神戸大)	
[講演] **「ポスト「京」開発の取り組み -ARM HPC エコシステムの形成とコンパイラの強化-」** 新庄 直樹(富士通(株))	

[科学技術計算分科会2017年度会合] 2017年10月26日(木) 13:30-20:00 / ANAクラウンプラザホテル神戸 **「拡がるHPC ～新たな鼓動～」**	
[講演] **「マテリアルズインフォマティクスの最前線」** 吉田 亮(統計数理研究所)	掲載
[講演] **「ヒト規模の脳神経回路シミュレーションを目指して: 小脳の場合」** 山﨑 匡(電気通信大学)	掲載
[講演] **「新しい科学を開拓するOakforest-PACS」** 中島 研吾(東京大学)	
[講演] **「富士通のディープラーニング高速化技術のご紹介」** 田原 司睦((株)富士通研究所)	
[懇談会] **「AI はHPC を救うか ?!」** モデレータ 小柳 義夫(神戸大学) パネリスト 黒川 原佳(理化学研究所) 中田 秀基(産業技術総合研究所/筑波大学) 吉田 亮(統計数理研究所) 田原 司睦((株)富士通研究所)	

掲載 は本冊子に原稿が掲載されています

合同分科会

［合同分科会 2017 年度会合］ 2017 年 10 月 27 日（金） 9:00-17:50 / ANA クラウンプラザホテル神戸 **「ヒトの目、キカイの目」**	
［講演］ **「直立姿勢が崩れたときに現れてくる知覚世界」** 東山 篤規（立命館大学）	
［講演］ **「AI を活用したスマート都市監視」** 有山 俊朗（富士通（株））	
［講演］ **「災いのオーラル・ランドスケープ」** 渡邉 英徳（首都大学東京）	
［講演］ **「人工知能はカンブリア爆発を起こすか？」** 松原 仁（公立はこだて未来大学）	掲載
［講演］ **「分野・地域を超え共に社会課題に挑む−「ファシリテーション×データ」を活用したシステムデザイン−」** 神武 直彦（慶應義塾大学大学院）	

掲載 は本冊子に原稿が掲載されています

■WG 活動(発足時の活動方針)

深く掘り下げて検討を行う必要があるテーマについて、期間を定め、限定メンバーで研究活動を行い、成果物を会員にフィードバックする活動体

LA を利用した教育・学習効果の向上 WG [活動期間:2016/01-2017/12]

本 WG では、学習活動によって蓄積された多種多様なデータをもとに分析されている LA(Learning Analytics)の事例を調査し、LA の定義も含めた現状分析を実施する。

事例調査においては、対象となるデータソースの観点、分析目的に照らしたアウトプットの観点で整理し、いかに活用が進んでいるかの実態を把握する。具体的には、LMS、e ポートフォリオなどのデータの種類や収集頻度と、ドロップアウト防止や教材の品質向上といった得たい成果との組合せで事例を整理する。

さらに、分析結果の活用として、データを元にどのようなアクションに結び付けられ、効果が得られているかの観点で評価情報も加え、LA プラットフォームのあり方を研究する。

教育・学習効果の向上を目的として、LA を広く一般化して活用する方策についても検証・研究を実施する。

学術研究機関のためのサイバーセキュリティ・ガバナンス WG [活動期間:2016/04-2018/03]

多様化、悪質化が進むサイバーセキュリティの脅威に対し、学術研究機関単独でのセキュリティ対策は限界となりつつある。今後は各機関が情報やリソースを融通し合いながらオールジャパンで対策を行う、横連携を考慮した体制作り、制度作りを進める必要がある。国立情報学研究所においても作業部会を立ち上げ、検討を進めるという動きがある。

本 WG では、この作業部会での検討状況を睨みつつ、この取組みをより実効性の高いものとすることを目的とする。具体的には、各機関で実行すべきこと、実行できることを中心に議論し、各機関における体制や環境の整備に関する意見交換等を通して提言の取りまとめを行いたい。

クラウド時代のデータ共有技術 WG [活動期間:2017/01-2018/12]

近年、国内外での共同研究が多く行われるようになり、そこで相互に利用するデータ量も非常に大きなものとなってきた。また、以前はコアとなる研究機関にある計算機資源を用いていたものが、複数の研究施設の持つ計算機資源を統合的に活用するスタイルも増えてきた。ここで、複数機関での大規模なデータの共有を効率的に行う方法が一つの課題となっている。同時に、公的資金を用いて行われている実験や研究などの成果を社会に還元することも重要となっており、ここで一般公開すべきデータも大規模となってきている。

これまで、サイト内など閉じた環境においてデータを共有する技術は確立されてきた。しかしながら、多くの研究機関が参画した場合のデータ共有技術は、未だ簡単に導入、運用できるシステムとはなっていないように見受けられる。さらに、近年ではセキュリティの観点から、ネットワーク接続の制限やユーザーの管理などにも配慮する必要がある。こういった様々な制約の中で、効率的かつ十分な性能を持ったデータ共有システムが求められている。

こういった現状を鑑み、本 WG では、いくつかの分野において、データ共有に対する要求を整理し、現在のデータ共有基盤技術の調査を行ったうえで、それぞれの要請に適した技術を提示、また、既存技術の課題と今後の方向性について議論を行うことを目指す。

メニーコア時代のアプリ性能検討 WG [活動期間:2017/01-2018/12]

スーパーコンピュータが本格的なメニーコア時代に突入しつつある中、多くのアプリ研究開発者が大幅に増加したコアの有効利用において様々な困難に直面することが予想される。その問題を解決するためには、コンパイラ等のシステムソフトウェアと協調して性能最適化を行う知識と技術が利用者に求められてくる。そこで本 WG では、FX100 等の既存環境、及び、ポスト FX100 評価環境を対象に、コンパイラ、メッセージ通信ライブラリ、性能解析ツール等の改善点について議論し、そのノウハウの集約と共有を行う。また、メニーコア時代に向けて、アシスタントコアを含むプロセッサコアの有効活用についても検討する。

情報システムの効率的エネルギー活用検討WG [活動期間:2018/04-2020/03]

2011年の東日本大震災以降、電力などのエネルギー消費の問題が顕在化し、特に電力の大需要家である大規模な実験装置を持つ研究機関やIT機器の集約地であるデータセンター(DC)では、電力料金の増加や国の施策であるエネルギー原単位の削減目標などは、達成すべく改善を進めている状況にある。

ただし、手段が目的化した対応がなされていることや、目的(省エネルギー)と目標(業務効率と生産性維持)と手段のバランスを考えず、闇雲に電力削減だけを目的にしてしまっているようなケースが散見され、その活動が本当に省エネルギーの効果があるのか、業務効率や生産性を低下していないかデータに基づいて検討するようなフェーズがないなど、本当の意味での省エネルギーになっていないことが見受けられる。

また、大学・研究機関の特徴として、昔の特殊なシステム導入の名残を残した機器や設備であったり、竣工から年月が経過したDC専用ではない建物をDCとして利用しているケースも多く、スペースと電力量のバランスが合っていない部分やスペースに設置される機器が定型的なサーバ・ネットワーク機器ではないために問題が発生するなど、一般的なDCとは異なる問題点が発生していることがあるが、特異すぎて課題として共有されていない問題も存在する。

上記の状況を考慮して、情報システムの現状を整理して、エネルギー利活用の指針を示すことを目指す。

汎用VRシステムの活用研究WG [活動期間:2018/03-2020/03]

可視化は、実空間において見えているもののほかに、見えないものを視たり、見えない関係を探ったりすることで、人間に示唆や知見を与える。しかし、見る者の興味を強く引き付けるような画像がふんだんにゲームで使われ、また、可視化といえば計算機シミュレーションの結果を画像にすることを指すという限定的な見方があるなど、可視化はある特定の分野で先行しているのが現状である。

他方、UnityやUnreal Engineに代表されるゲーム用の開発エンジンは、Oculus Rift、HoloLensなどの先進的なデバイスを広くサポートすることからVRシステム開発のプラットフォームとして注目を集めてきている。さらにHMDのVR装置やゲーム用の入力/出力デバイスは、先進的であるにもかかわらず、CAVE装置と比べ格段に安価であり、大学や研究機関に限らず、広く一般に普及し始めている。しかし、これら開発用エンジン・先進的デバイスの関連書籍やインターネット上の情報はゲーム開発用の情報ばかりであり、ゲーム開発以外の分野に適用するための情報は不十分である。

ゲーム業界やシミュレーション研究で先行している可視化技術は、幅広く科学技術・教育分野に活用できる可能性を秘めている。

本WGでは、ゲーム分野で使われているが、科学技術・教育分野ではあまり使われていない入力/出力デバイスやプログラム開発基盤を、シミュレーション研究のみならず、工学や生物学、医療、防災を含む人間社会科学など、様々な科学技術分野や教育現場などで活用するためのインフラとする技術情報、および、活用ノウハウを調査し、俯瞰的な情報の提供を目指す。

■タスクフォース活動(発足時の活動方針)

SS研の今後の方向性、他組織との連携、新たな活動機能など従来の枠組みを越えたテーマについて検討し、施策・計画の策定、および必要な施策を講ずる活動体

2017年度は活動なし

■委員会活動(発足時の活動方針)

SS研活動を支援するために必要な事項を検討する活動体

活動推進委員会

SS研に期待されるミッションとあるべき姿について議論し、これからの活動の方向性を示していく。また、活動の制度設計から実際の活動企画、トライアル実施、評価までを行うことで、新しいSS研活動をインキュベートする役割を担う。

サイエンティフィック・システム研究会
Scientific Systems

SS 研ニュースレター選集 vol.18　2018 年 5 月 25 日発行

発行　サイエンティフィック・システム研究会

お問合せ　サイエンティフィック・システム研究会 事務局
〒105-7123 東京都港区東新橋 1-5-2
Tel: 03-6252-2582　E-mail: office@ssken.gr.jp
Website: http://www.ssken.gr.jp/
Facebook: http://www.facebook.com/ssken