

AIで導く次世代のサイエンス (1)

～ AI + Science = ? ～

2024年度 秋イベントが
神戸国際会議場で開催されました。

当日午後、科学技術計算分科会と
教育環境分科会が2つの会場で
会場参加とオンライン配信形式で行われ、
多数の方々に参加していただきました。

開催趣旨説明

南里 豪志氏 (九州大学)

例年、この「秋イベント」を過ぎた頃に
スパコンの「TOP500」が発表されます。
「TOP500」のうち世界一位の
性能が気になるのですが、
我々が日頃使っている計算機
に近いのは上位500台の平均
性能です。

大量の数値
解析結果

AIによる
機械学習

AIによる
計算されて
いない結果
の予測

この結果を
使って何が
出来るのか

● AIを使ったサロゲートモデルと科学の組み合わせ

このような今までは違う視点で、
新しい発見に繋がるのではないかと
期待もありますし、当然、計算の精度が
十分かどうかなど課題も多くあります。
今回の講演では、AIと科学を組み合わせる
取り組みを紹介していただきます。

講演1
実験・計算科学・データ科学を組み合わせた
材料研究(放射性廃棄物材料の例)

大窪 貴洋氏 (千葉大学)

本日は放射線廃棄物を安全に
処理をする話をします。
放射性廃棄物は放射能の
半減期が5万年ぐらい
あるので、最新の科学技術
で新しい材料を作ったり、安全性
を予測したりすることが重要です。



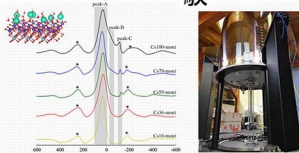
● 科学系というより
工学系な感じです。

廃棄物はガラスと固めて地中に
埋めますが、そのガラスの周りは
粘土鉱物で囲います。こうすると
セシウムが溶け出した場合、粘土
鉱物にくっつくので、外に漏れ出す
のを防ぐ効果があります。ただ、
人工的に作られた粘土鉱物と、自然
のものでは差があるので、その場合
にどのような現象が起きるのかを
シミュレーションで説明します。

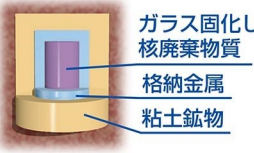
実験結果からセシウムの吸着サイト
が分かりますが、よく分からない実験
値も含まれます。これを理論計算や、
機械学習で解釈をしますが、粘土の
モデルの解析計算はかなり高コスト
なので、機械学習によるケミカル
シフトの逆解析を行いました。

まず元素の周りの構造から機械学習
モデルとしてケミカルシフトを予測
するデータを作ります。局所構造の
表現力は、精度を上げると汎化性が
下がるので、調整しながらモデルを
作りました。これにより、実験結果
から得られたケミカルシフトに対応
する原子座標が、瞬時に決定出来る
ようになります。

多成分系の放射性廃棄物ガラスは
原子の周りの構造から、働く力を計算
してポテンシャルを検証をします。
訓練データを学習させることにより、
精度の良いモデルを構築出来ました。



● セシウムの個体NMR実験結果から
Cs NMRスペクトルを解析します。



● 地中に貯蔵する放射性
廃棄物の地層処理



● 構築した学習モデルを逆解析に利用

講演2
高性能計算と人工知能で加速する
脳シミュレーション

五十嵐 潤氏 (理化学研究所)

2024年のノーベル物理学賞でも
話題になり、注目されている
人工ニューラルネットワークは、
脳・神経科学とともに発展
をつづけてきました。現在も
両分野では、AIとの比較による
脳の理解や、脳を模倣したAIなどの
取り組みが盛んに行われています。



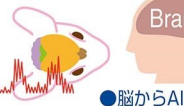
● 人間の脳のシミュレ
ーションを主に行って
います。

人間の脳と最新の大規模言語モデル(LLM)
を比較すると、脳の結合数とLLMのパラ
メータ数は近づきつつあり、知的性能も近づ
いていきます。一方、脳は省エネルギー性能が
LLMより極めて優秀で、次世代のAIの開発
に役立つ可能性があります。

しかし、膨大な数の結合を介した神経細胞の
相互作用を調べるのが難しく、脳の仕組み
はよくわかっていないのが現実です。LLMも
同様で、膨大なニューロンの相互作用を理解
することが難しく、脳もLLMも、その中身を
調べる取り組みが盛んに行われています。

日本では、2016年に京による18億個の神経
細胞からなる脳のシミュレーションが実現し、
現在は富岳による450億神経細胞からなる人間の
脳の半分規模のシミュレーションへと発展して
います。また、実際の脳の詳細な結合データを導入
したマウスの脳のシミュレーションで、運動時に
みられるような大脳皮質、橋、小脳の間の信号伝播
が発生し、脳の中の詳細な相互作用を捉えられる
ようになってきています。

現在、脳のシミュレーションの詳細化を目指し、AIと
ITCによる膨大な脳の計測データをモデルに導入する
取り組みが行われています。脳全体の神経活動計測、遺伝
子解析、結合データ計測が行われ、データ量が爆発的に
増えています。これらについて、時系列データを扱う
LLM、組織分類を行うLLM、脳のデータ同化、脳シミュ
レータのコード生成を、スパコン上で実行する計画が
始まっています。
今後、AIとITCを活用した、詳細な脳のシミュレ
ーションが実現すると期待されています。



● マウスの脳波の疑似的な
シミュレーションの実行。

● 脳からAIに寄っていく、AIから脳に寄っていく。

スパコンによる
大規模言語モデル
複雑な構造物として
のパラメータ数は
近づいている
脳は圧倒的に
省電力

AIで導く次世代のサイエンス (2)

～ AI + Science = ? ～

講演3
気象・気候分野におけるAI for Science
Aは気象・気候研究に役に立つのか？

中野 満寿男氏 (海洋研究開発機構)

気象シミュレーションAIが役に立つかどうかのお話ですが、結論から言うと、まだ良く分かりません。

世界の雲の画像から「どの雲が台風になるかわかると嬉しいね」の発想から、画像解析による台風の発生個数を調べると、割とよく数値が一致して、これがAI活用の始まりです。

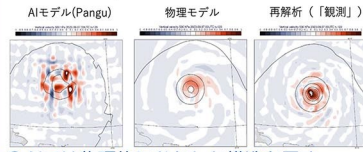
今までの物理気象モデルは、流体の運動方程式を解くんですが、地球の大気の中でも重要な雲を良く解きたいんです。そのために、NICAMというモデルの計算を地球シミュレータで開始し、富士岳での計算を進めると、どんどんとメッシュを細かく出来て、精度が上がって来ています。

2010年の終わりからAIが注目されるようになって、AI気象モデルも進化して気象予測が当たるようになりました。

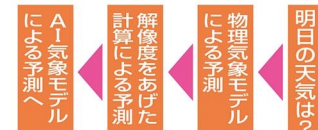
最初は深層学習を使ってましたが、2020年ぐらいからビッグテックの参入により、我々も衝撃を受けるくらい予測精度が上がりました。それまで高い精度の物理気象モデルで評価されていたヨーロッパの気象庁も、AI気象モデルの開発を始めています。

色々な学者がAIを使い始めた結果、AIモデルでは、捉えなければならぬ現象が捉えられないことや、物理的な不整合を表示してしまう事があることが分かりました。

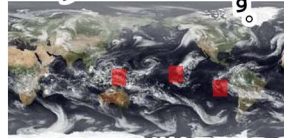
それでも、何とか使おうという研究も始まっていて、細かいところが苦手なら、大規模な変化をAIで捉えた上で、細かいところは物理モデルで補完しながら使っていくという研究も始まっています。



●AIでは物理的におかしな構造を示す場合があるので、利用は手探り状態です。



●気象予報の今までの推移



●台風とそれ以外を見分けるAIの画像解析例。

●台風がくる所出身なので、気象に興味を持ちました。

講演4
産業界でのAI活用
サロゲートモデルでエンジニアリングを加速

宮本 裕平氏 (みずほリサーチ&テクノロジーズ株式会社)

本日はサロゲートモデルとは何かとか、エンジニアリングにどのように使えるのかとか、少しビジネス寄りの話をいたします。

サロゲートモデルとは数値解析の結果を学習させて、機械学習により数値解析を代理させる手法です。機械学習の中でも、教師あり学習の分野で、結果の数値をAIで予測する「回帰」というAI代理モデルということになります。

この手法の非常に良い点としては、予測が高速である事です。学習データを作るのに莫大な電力や計算時間がかかってしまうのがデメリットです。また予測結果が物理的な要請を満たさなかったり、期待した精度が出せずに代理としての信頼が無いこともあります。ただ、その特徴を理解した上で、産業界に活用する方法が考えられています。

サロゲートモデルは万能では無いので、それぞれのフェーズに対応して使い分ける必要があります。

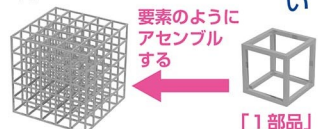
●企画段階での利用→単純なサンプルを複数用意し、検討の幅を広げられる。

●CAEによる検討時間の短縮→計算全部ではなく部分的な計算にAIを採用する。

●対象が大規模過ぎる→非線形性が高い部分をAIにより処理をするなど。

●計測・実験結果を反映→物理モデルを学習・推論する方法など。

今後、サロゲートモデルの利用はデータ作成は夜間などにしておいて「非線形な補完装置」として、人件費の削減などを進めるとか、全部の予測に使うのではなく、一部の代理として検討材料に使うなどが期待されています。



●対象が大規模な場合には、1部品を要素として組み上げる例



●精度に課題はあるが「意思決定支援」としてのサロゲートモデルの活用例。



●サロゲートモデルの予測の流れ

●最近は数値解析と機械学習の組み合わせにも興味があります。

講演5
EPCとAIを活用した材料探索・シミュレーション技術の開発

吉本 勇太氏 (富士通株式会社)

近年、EPCとAIを駆使した材料探索技術やシミュレーション技術による、材料開発サイクルの大幅な短縮が期待されています。今回はその取り組みにおける3つのツールを紹介いたします。

①スクリーニング用NNP生成ツール

大量の材料の構造候補からAIで絞り込みを行い、人が気づくことが難しい有望な材料候補を選び出します。また、通常の量子化学計算を三千倍高速化するAIシミュレーション技術を搭載しています。

Atmonia社との共同研究において、カーボンフリー物質であるアンモニアの触媒探索を行い、新たなアンモニア合成触媒の同定に成功しました。

②分子動力学用NNP生成ツール

候補構造を絞り出した後に、候補を詳細に解析するツールです。既存のデータセットにない外挿領域の探索空間を効率的に拡張します。また、機械学習ポテンシャルの構築時に効率的に計算リソースを選ぶことが出来るようになっていきます。

③因果発見技術

膨大なデータの中から、原因と結果を結びつける因果関係の法則を発見するツールです。条件ごとに特徴的な因果関係を網羅的に抽出します。それにより、条件に応じた因果グラフを作成することによって、ユーザの次のアクションを支援することが出来ます。

今後もEPCとAIを活用した材料探索プラットフォームの深化を進め、脱炭素化社会の実現に向けたコア技術の開発を進めていきます。



●分子動力学用NNP生成ツールの利点 (スクリーニング)



●スクリーニング用NNP生成ツールの機能



●弊社の開発動向を紹介いたします。