資料4

人工知能とシミュレーション

Computational Science からScience by Computationへ

国立研究開発法人産業技術総合研究所
人工知能研究センター
センター長　辻井潤一

話の流れ

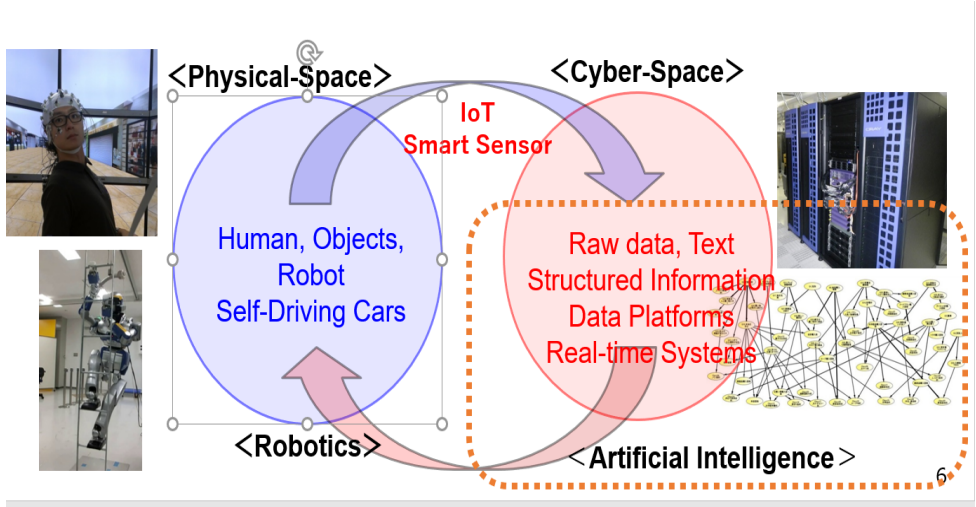
- 背景
  - モデリングと人工知能
- 研究の例
  - データ解析とシミレーション
  - シミュレーションによるデータ生成
  - AI for Science
  - NECとの連携ラボ
- 終わりに

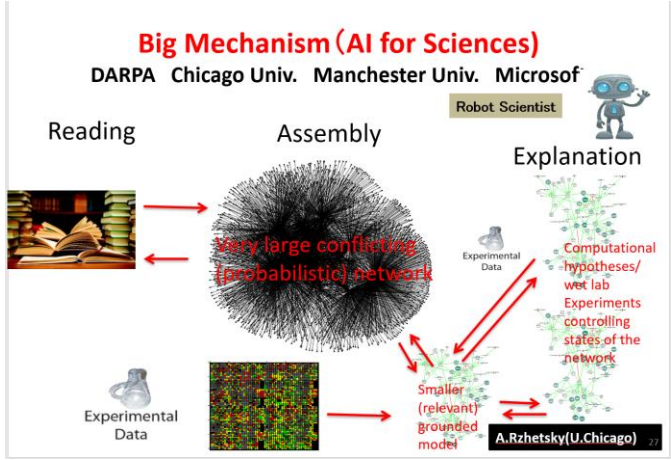
話の流れ

- **背景**
  - **モデリングと人工知能**
- 研究の例
  - データ解析とシミレーション
  - シミュレーションによるデータ生成
  - AI for Science
  - NECとの連携ラボ
- 終わりに

AI in Digital Transformation

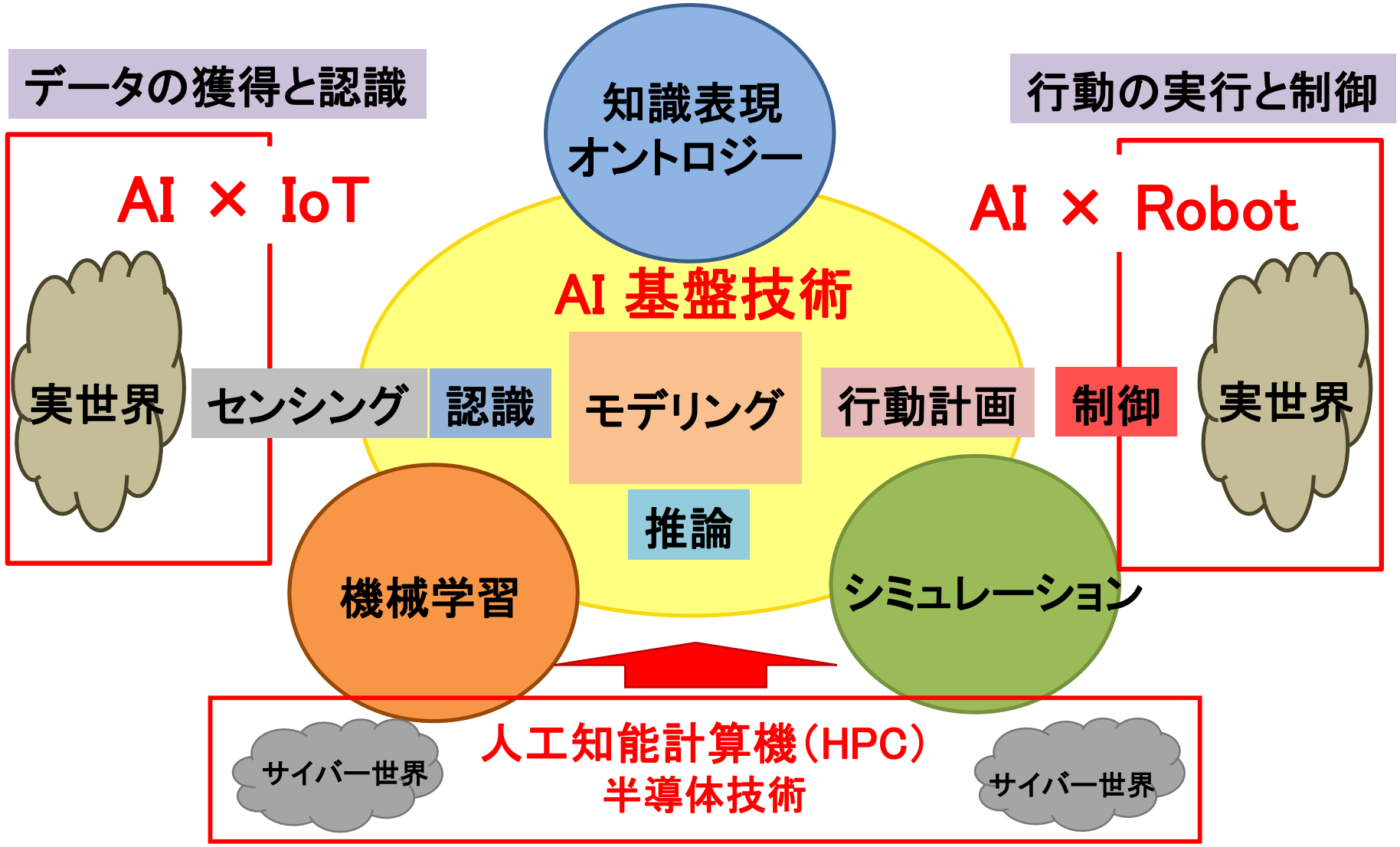
- **Society 5.0 : Next Stage of Human Society**
  - Digital Twin, Cyber-Physical System, Industry 4.0, Connected Factory, Connected Health, Precision Medicine, Robot Co-Workers, Connected Logistics, …
- **5th Paradigm in Science/Engineering**
  - Computational Science (Simulation) + 4th Paradigm (Big Data Analytics) -> 5th paradigm (**Simulation + ML + Knowledge**)





実世界に埋め込まれるAI

～インターネットから実世界へ～

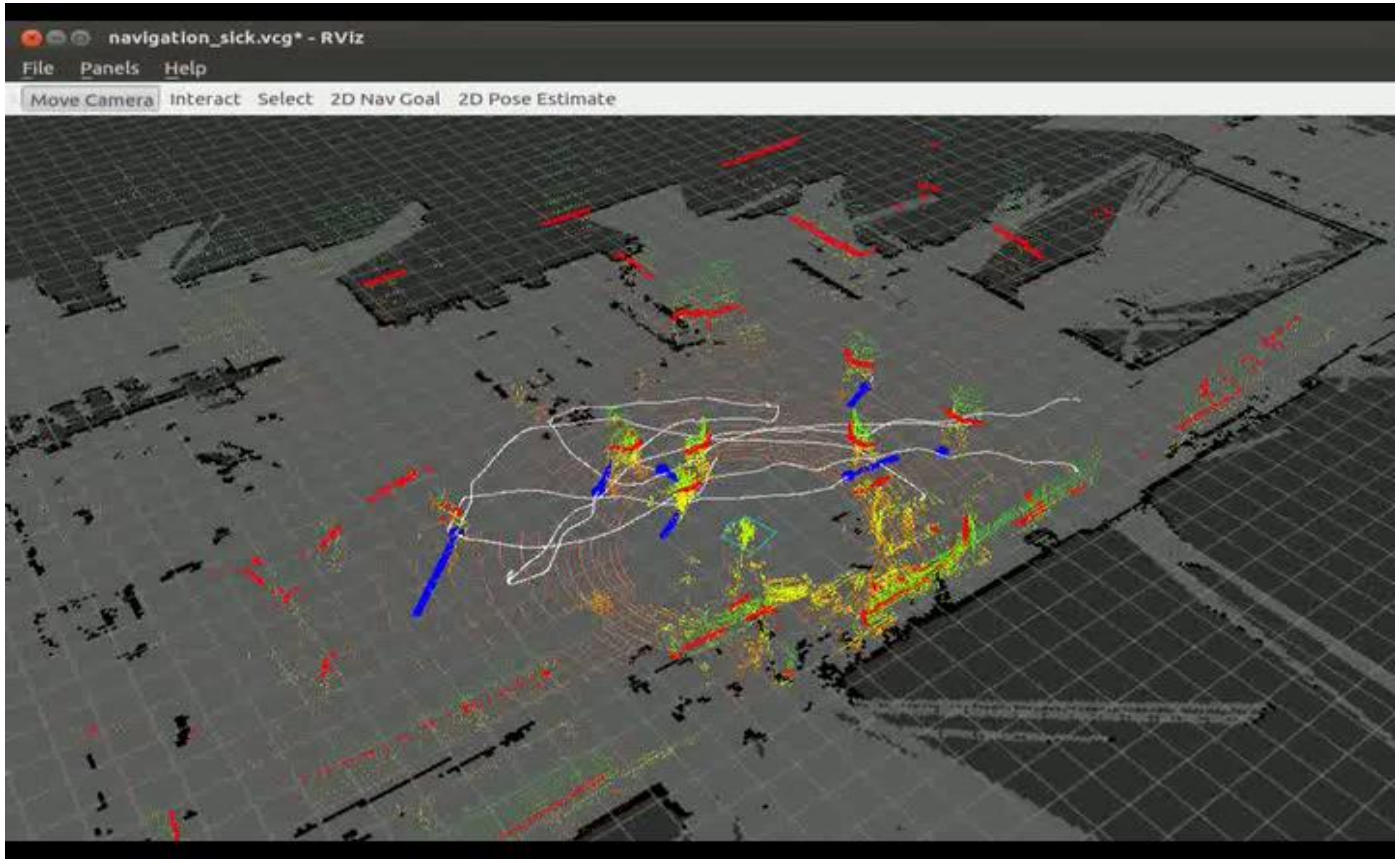


研究事例の紹介

【車輪型自律移動ロボット】（観測・データ収集、行動計画・制御）

（自律移動ロボットによる環境と人のモデリング）

- ✓ 人を検出・追跡して動作モデルを構築
- ✓ 自動運転技術への応用



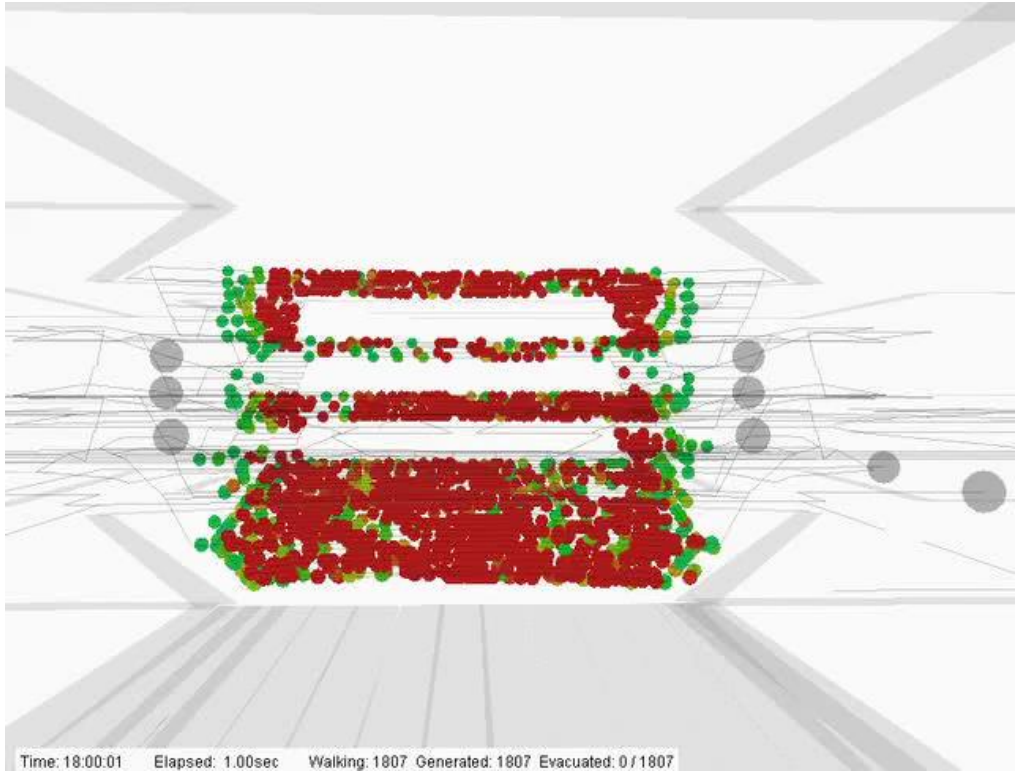
話の流れ

- 背景
  - モデリングと人工知能
- **研究の例**
  - **データ解析とシミレーション**
  - シミュレーションによるデータ生成
  - AI for Science
  - NECとの連携ラボ
- 終わりに

研究事例の紹介

【人流観測・シミュレーション技術による避難誘導支援】

- リアルタイム人流計測により、多数の人の行動を高精度計測。
- 人流シミュレーションにより、適切な誘導法の立案を支援。

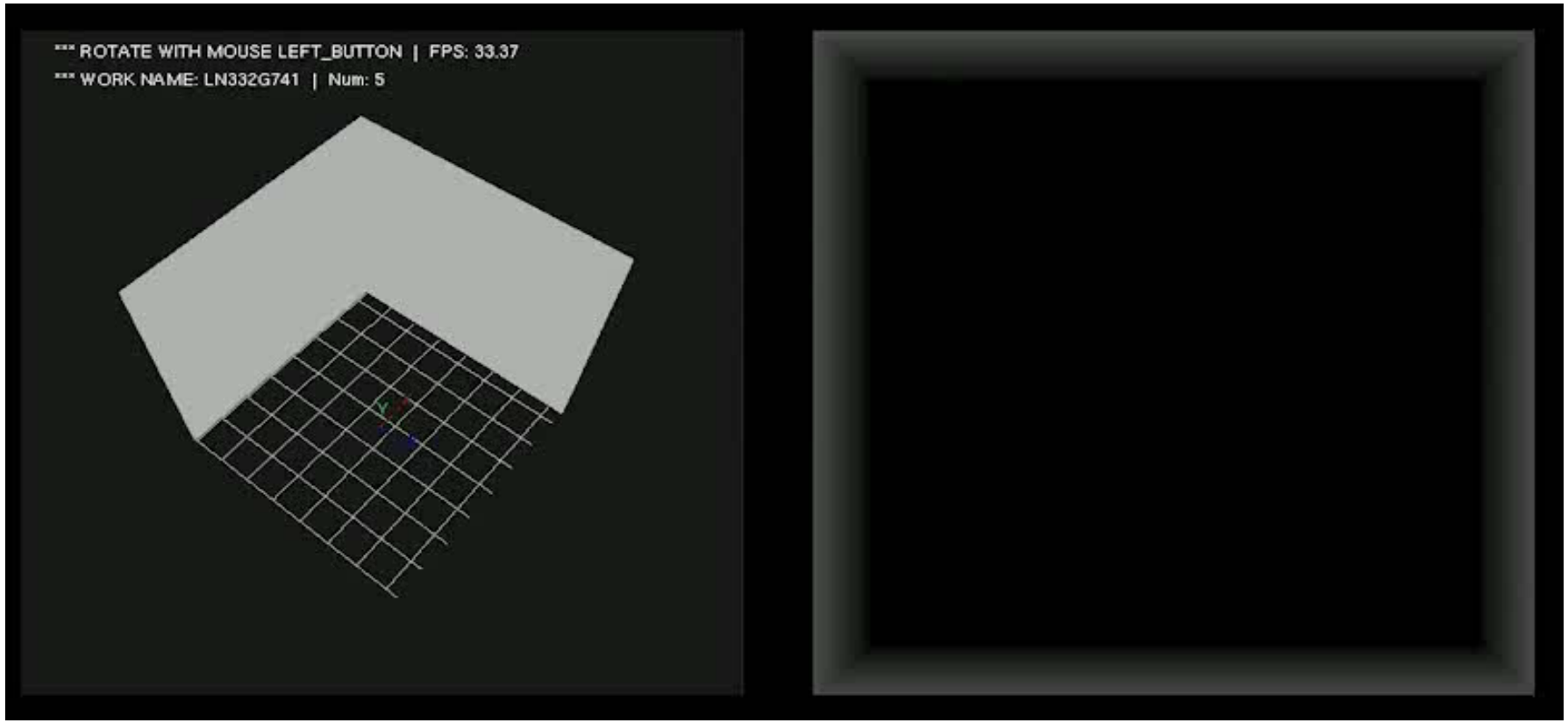


話の流れ

- 背景
  - モデリングと人工知能
- **研究の例**
  - データ解析とシミレーション
  - **シミュレーションによるデータ生成**
  - AI for Science
  - NECとの連携ラボ
- 終わりに

From Simulation to a Real Robot

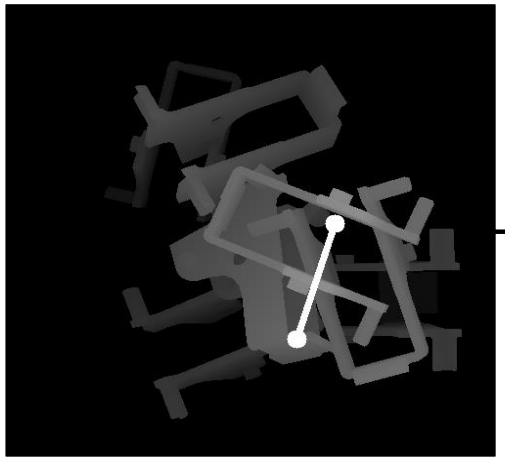
Data Generation by Simulation



Base Engine for Simulation : PhysX
Recognition of interaction among objects
Real-time Simulation

Learning of the best picking positions

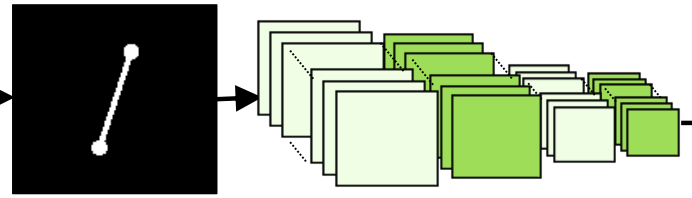
Depth images +
Picking positions

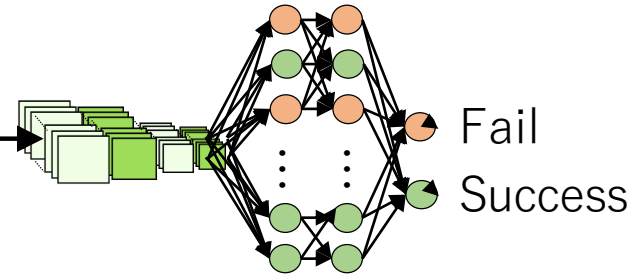


Depth Images

Convolution Layers + Pooling Layers

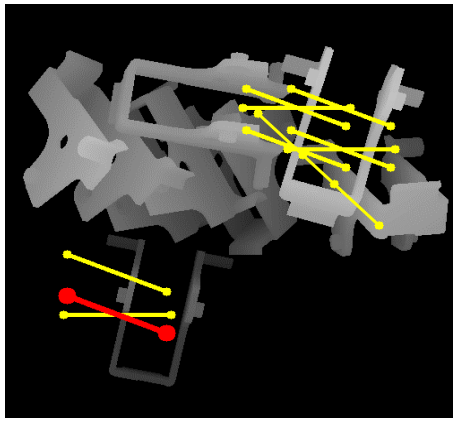
Picking positions

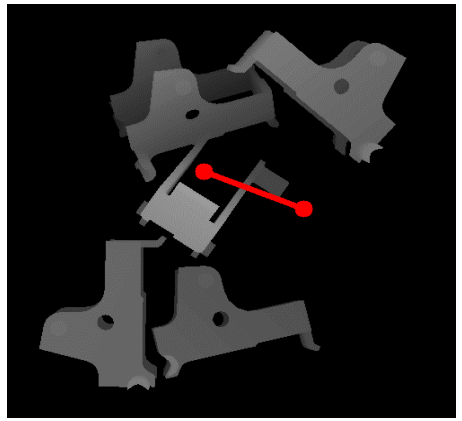


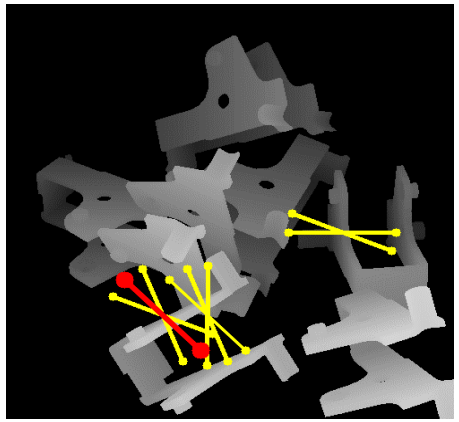


Learning Times ：17hrs
Traning data：64,800 samples

Red：Best
Yellow：90%







From Simulation to a Real Robot

Research Topics

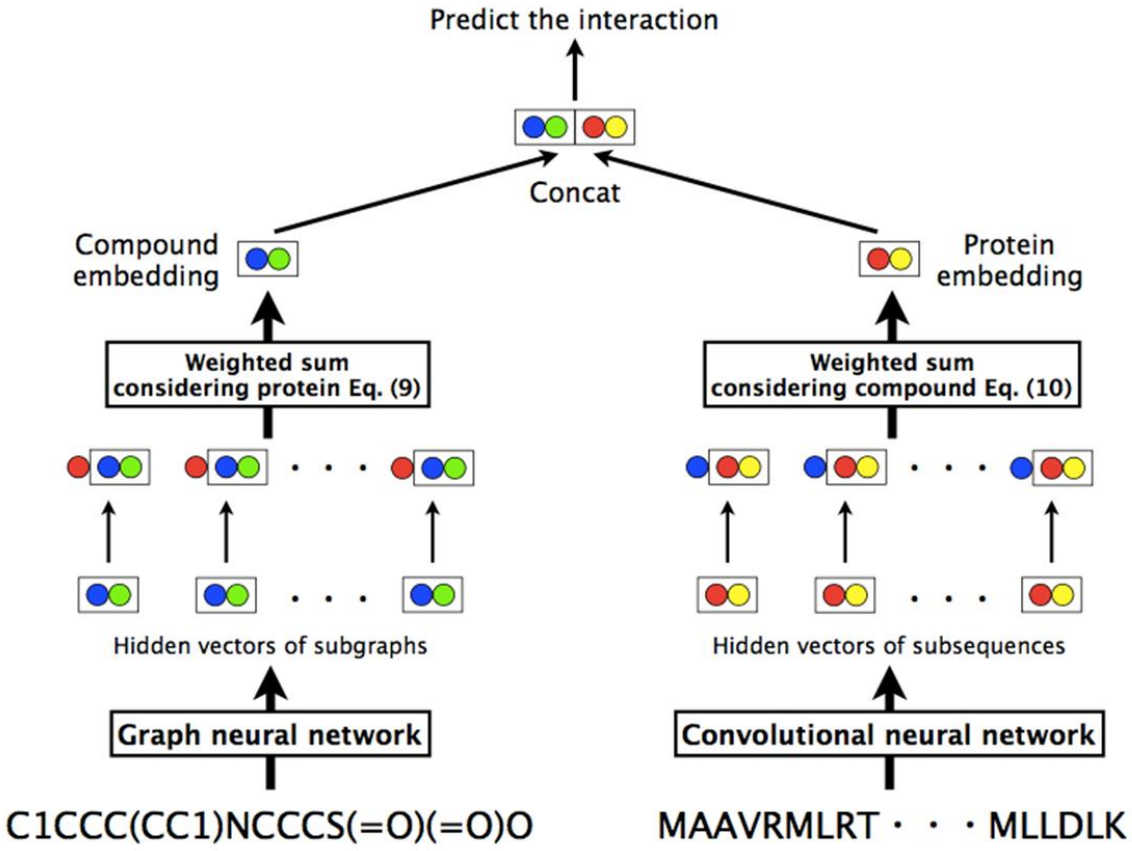
- Treatment of incomplete Visual Information
- Re-training by Real Trial Data

話の流れ

- 背景
  - モデリングと人工知能
- **研究の例**
  - データ解析とシミレーション
  - シミュレーションによるデータ生成
  - **AI for Science**
  - NECとの連携ラボ
- 終わりに

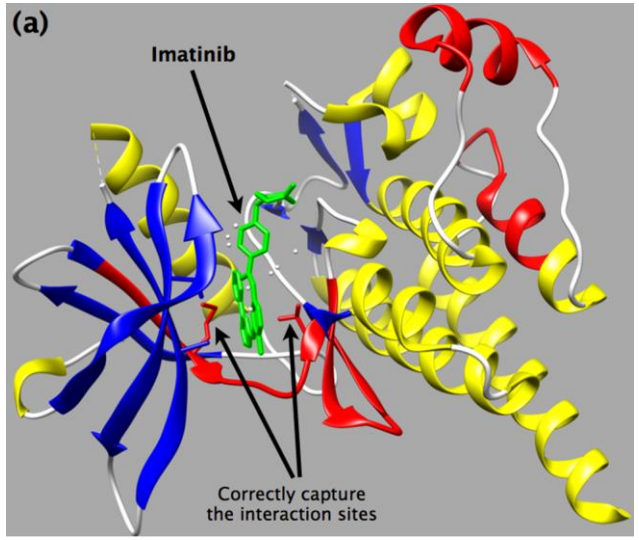
①-(3)機械学習・確率モデリングの高度化

- グラフニューラルネットワークと CNN の組み合わせによる化合物－タンパク質の相互作用予測



化合物（構造式）　　タンパク質（アミノ酸列）

相互作用予測部位の可視化



2018.8.29
AIST プレスリリース

話の流れ

- 背景
  - モデリングと人工知能
- **研究の例**
  - データ解析とシミレーション
  - シミュレーションによるデータ生成
  - AI for Science
  - **NECとの連携ラボ**
- 終わりに

産業技術総合研究所 人工知能研究センター
NEC-産総研 人工知能連携研究室 での取り組み

NEC-AIST
AI Cooperative
Research Laboratory

高度化する社会ニーズを満たすために
出口を見据えた基礎原理研究から産業応用研究開発まで

シミュレーション技術とＡＩの融合領域

シミュレーションと機械学習（AI）を融合

シミュレーションと自動推論（AI）を融合

シミュレーションと自律型AI制御を融合

基礎原理の探求

実世界で信頼できるAI

人間と協調できるAI

実世界で信頼できるAI

特殊・極限・不測事象を知る予測

過去データを超えたリアルタイム意思決定

多数AIシステム間挙動調整技術

具体例

PJ1

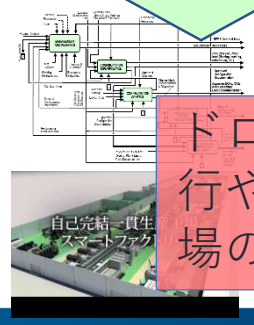
PJ2

PJ3

産業応用研究開発

高度・高効率な自動製品設計・自動生産計画

プラント運転支援ガイダンス



ドローン運行や複数工場の協調

1．ロバスト及び外挿的データ同化技術

NEC-AIST
AI Cooperative
Research Laboratory

●現実の系

(例) 入力データ x:
- 生産台数
- 品種
- …

→ 現実の系 → 出力 y: 生産効率

●シミュレーション系

(例) 入力データ $\hat{x}$:
- 生産台数
- 品種

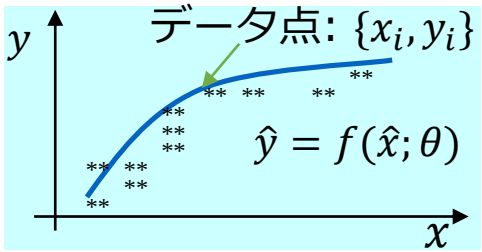
→ シミュモデル
$\hat{y} = f(\hat{x};\theta)$
パラメタθ：故障頻度
→ 出力 $\hat{y}$: 生産効率

●ロバストデータ同化技術

(例) 入力データ $\hat{x}\ (= x)$:
- 生産台数
- 品種

→ シミュモデル
$\hat{y} = f(\hat{x};\theta^*)$
パラメタθ^*：故障頻度
→ 出力 $\hat{y}$: 生産効率

推定したいパラメタ



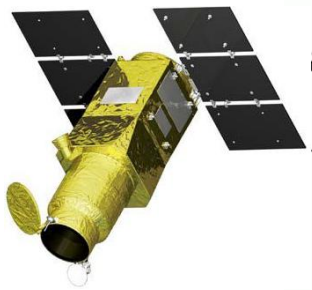
$\hat{y} = y$ となるように最適なパラメタθ^*を自動で決める
データの外れ値・偏りに頑健なパラメタθ^*の推定
データのない外挿領域を見越したパラメタθ^*の推定

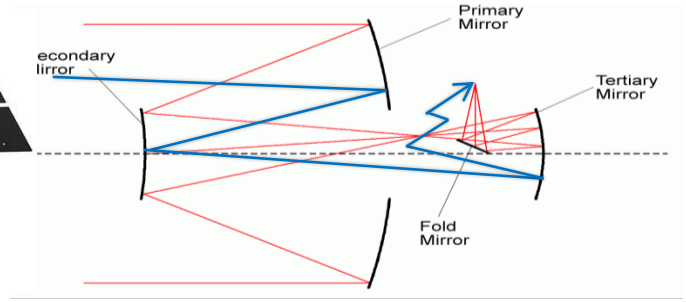
2.特殊・希少な事象や設計解の導出技術

NEC-AIST
AI Cooperative
Research Laboratory

具体例：宇宙望遠鏡において、稀ではあるが性能低下を引き起こす
「迷光（ゴースト）」を人工知能が効率的に探索し発見

機械学習原理に基づくアルゴリズムを用い、極めて効率的に迷光(光源と経路)を設計者に示す。⇒**設計時間短縮・高信頼設計・非熟練設計者の設計支援**





機械学習による効率的探索 ⇄ **光学シミュレーション**

迷光探索
迷光の原因となる光源と光路を効率的に探索・発見

構造・光学設計 ⇄ **解析**

探索手法を提案し、実モデルで効果検証

ロバスト設計
迷光を発生させない設計の支援

話の流れ

- 背景
  - モデリングと人工知能
- 研究の例
  - データ解析とシミレーション
  - シミュレーションによるデータ生成
  - AI for Science
  - NECとの連携ラボ
- **終わりに**

Computational ScienceからScience by Computationへ

- シミュレーション：対象の合理的な理解にもとずくモデリング
  - Circumscribeされた要因
  - 原理の把握と演繹による全体の再現
  - 完全な理解
- データからのモデリング：対象の観察にもとづくモデリング
  - 関与する要因の完全な観察
  - 観察データからの帰納による全体の再現

- モデリングの対象
  - Circumscribeできない要因
  - 部分的な観察
  - 演繹と帰納
  - 観察ー＞モデル化（仮説）－＞観察のサイクル