

# HPCとAIの連携例

ポスト「京」の利活用促進・成果創出加速に関する  
ワーキンググループ

平成31年4月19日

# ポスト「京」成果創出フェーズで想定されるHPCを用いたAI <健康長寿社会の実現>

## HPCとAIの協調をもたらす分子生命科学・創薬の進化

### <分子シミュレーションの高度化>

- AIによるMDの計算条件（パラメータ）の効率的探索
- AIを用いたMD計算結果の解釈
- MD計算結果のAI学習によるMD過程の自動生成
- MD×AI×実験の融合によるデータ同化の高精度・効率化

### <AIの弱点の克服>

- 実験データの代替えとして、シミュレーション結果をAIの学習に利用（実験データ不足問題の解消）
- AIの予測結果に合致するシミュレーションモデルからAIの学習過程を外装する（AIのブラックボックス問題の克服）

### <分子シミュレーションの未踏領域への連携>

- AI力場
- AIによる化合物構造の自動生成
- ADMET（薬物動態・毒性）のAI予測

### <産学連携コンソーシアム>

- 100社以上の製薬・IT企業からなるAI創薬コンソーシアムを設立し、30種の創薬AIを開発中



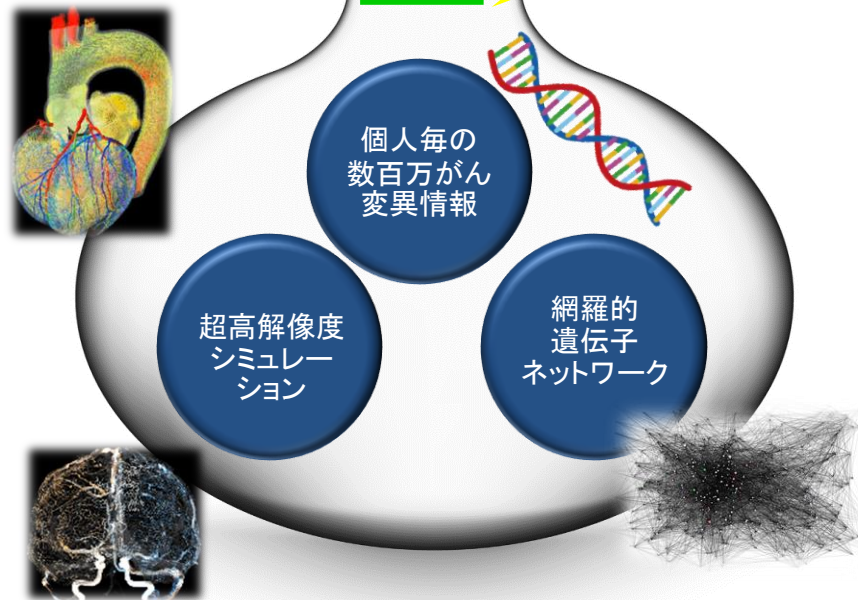
## AIパワード個別化・予防医療 —ビッグデータ・シミュレーションBEYOND—



AIによる  
 予防・診断支援・治療立案

AI

説明可能AIエンジン  
 プランニングエンジン  
 自然言語自動理解

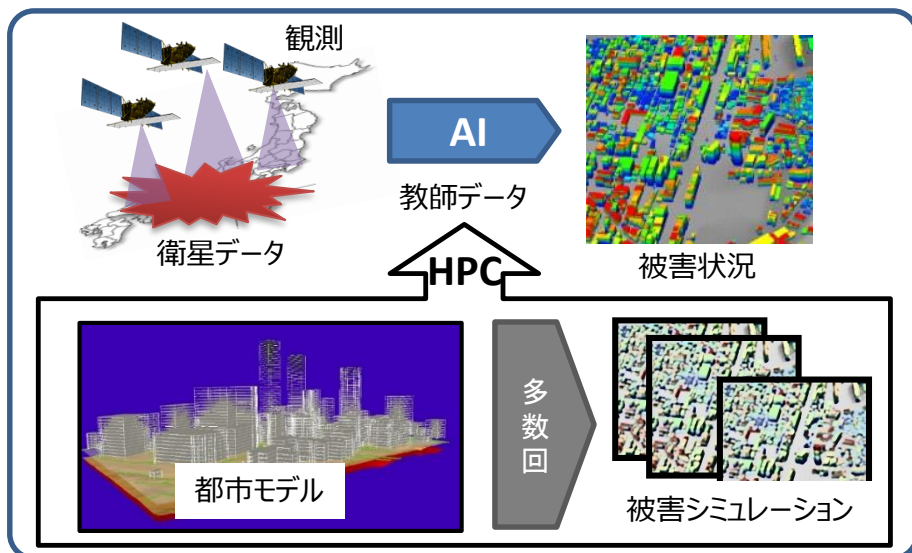


# ポスト「京」成果創出フェーズで想定されるHPCを用いたAI <防災・環境問題>

## 衛星データから被害状況を推定するAI

**背景：**大規模地震・津波災害に対し、効果的な初動体制を敷くためには、衛星コンステレーションを使う広域の被害状況の推定が重要

**方法：**HPCの被害シミュレーションを教師データとしたAIを利用することで、多数の衛星データから、被害状況を高精度・高分解能・短時間で推定。



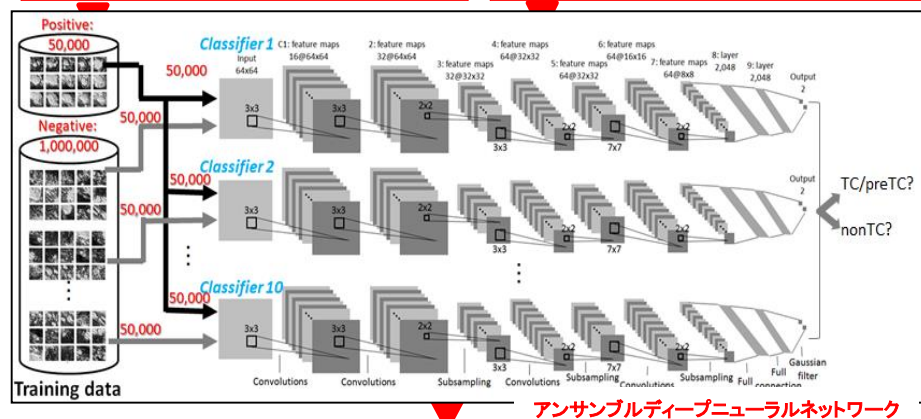
都市毎に超詳細な都市モデルを構築し、地震・津波のHPCシミュレーションを実行。シミュレーション結果を衛星データに変換し、これを「衛星データから被害状況を推定するAI」の教師データを生成。各都市の構造物の特徴を取り込むことで、都市毎にチューンアップしたAIが開発。

## ディープラーニングによる台風の予兆検出

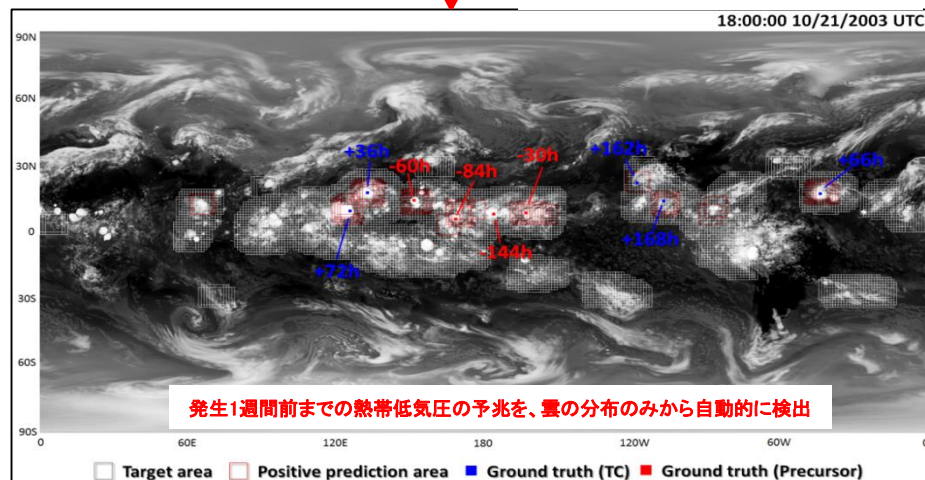
—より早く台風の発生を予測し、安全・安心と経済効果に役立てる—

超大規模シミュレーション結果から熱帯低気圧トラッキングによる教師付き学習データを生成

熱帯低気圧の予兆となる雲のパターンをシミュレーションによって巨大なデータから学習



アンサンブルディープニューラルネットワーク



発生1週間前までの熱帯低気圧の予兆を、雲の分布のみから自動的に検出

# ポスト「京」成果創出フェーズで想定されるHPCを用いたAI ＜エネルギー問題＞

## マイクロな視点からのエネルギー関連材料の探索・開発の加速

第一原理・量子化学計算による詳細で大規模な学習用データセット生成

京 x AI ・小規模データセット(数万規模)  
→ 基本的機械学習技術による材料探索

ポスト京 x AI ・詳細で大規模なデータセット(数百万から数千万規模)

データの質・量ともに飛躍的に増大  
 ・高度AI技術を活用した材料探索の展開  
 ・巨大なデータセットにより高精度な記述子抽出  
 ・内挿から外挿へ  
 ・予測精度の格段の向上

### 新規材料指針の早期獲得

太陽電池・人工光合成

: 可視光応答半導体

二次電池

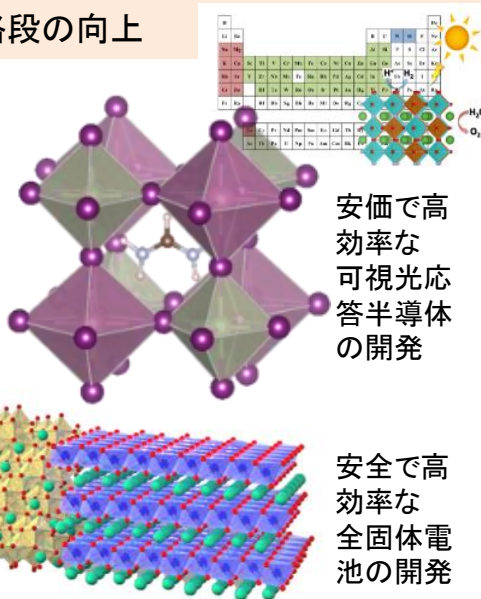
: 固体電解質

燃料電池

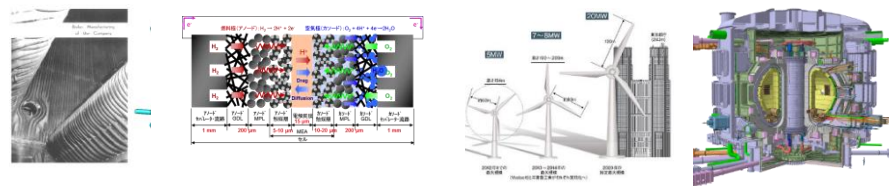
: 白金代替触媒

二酸化炭素

: 吸収液材料



## 革新的クリーンエネルギーシステム（石炭ガス化炉, 燃料電池, 洋上風力発電, 核融合炉）の実現



種々の部分シミュレーションモデル

HPC(標準計算機)とAI(機械学習等)の連携活用に基づく低自由度モデルのパラメータ同定  
 ROM(Reduced Order Modeling)技術に基づく低自由度高精度モデル構築と、統合シミュレーションへの組み込み

各エネルギーシステムのマルチスケール・マルチフィジクス統合シミュレーション(高自由度デジタルツイン)の構築と実機的设计・運用・保全へのポスト「京」の直接活用

HPC(ポスト「京」)とAI(AIマシン)の連携活用に基づく低自由度モデルのパラメータ同定  
 ROMIに基づく低自由度高精度モデル構築

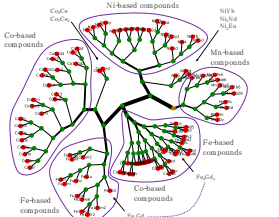
HPC(標準計算機)上の各エネルギーシステムの低自由度高精度モデル(低自由度デジタルツイン)を用いた実機的设计最適化、オンライン運用最適化・保全最適化

# ポスト「京」成果創出フェーズで想定されるHPCを用いたAI <産業競争力の強化>


## エネルギー消費・創成の主役 モータ／発電機用永久磁石の新材料提案

無限の組み合わせから候補材料をAIで抽出  
 ⇒物性値計算で候補を絞り込み、実験で検証へ

**AI解析 with ポスト「京」**  
 カーネルリッジ回帰+アンサンブル学習 (一例)

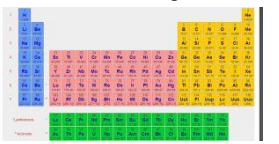


分類後に候補抽出



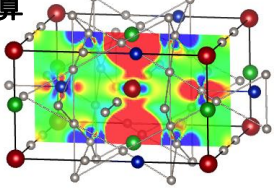
最強磁石をEVモータへ

広大な材料探索空間:  
 三元系 $A_xB_yC_z$ の場合



A, B, C: 元素100種類  
 x, y, z: 0~10程度

**計算 with ポスト「京」**  
 超並列第一原理DFT計算



候補材料物性を計算

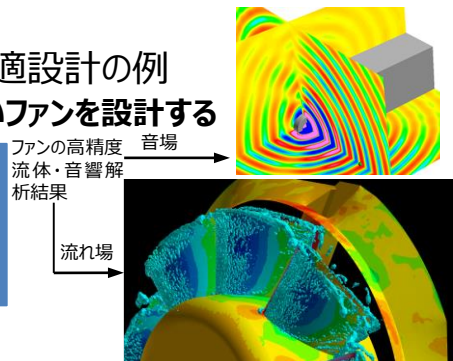
パワー半導体、超伝導、構造材料等でもAI活用

## 近未来型ものづくりを先導する革新的設計・製造プロセスの開発

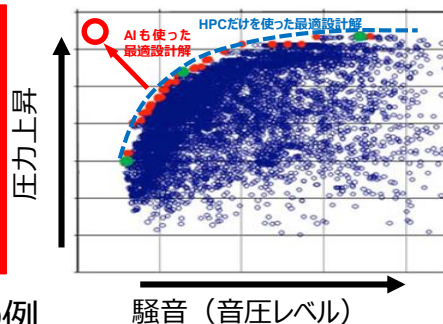
ポスト「京」のHPC能力とAI能力を駆使し、シミュレーションによるものづくりの設計方法を変革し、付加価値の高いものづくりを実現する。

1) 冷却ファンの性能・騒音最適設計の例  
 目的：圧力が高く、騒音が小さいファンを設計する

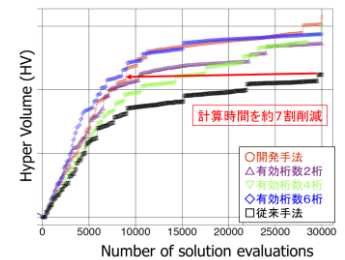
HPC (のみ) を駆使した最適設計:  
 ポスト「京」のHPC能力を駆使して、多ケースの高精度シミュレーションを短時間に実行し、最適設計解を得る。



HPCとAIを駆使した最適設計:  
 ポスト「京」のAI能力を駆使して、設計変数-流れ場/音場-ファンの性能・騒音といった目的関数の因果関係を抽出し、リアルタイムに、設計空間を無制限に拡大した多目的最適化を実現する。



2) 自動車の空力最適設計の例

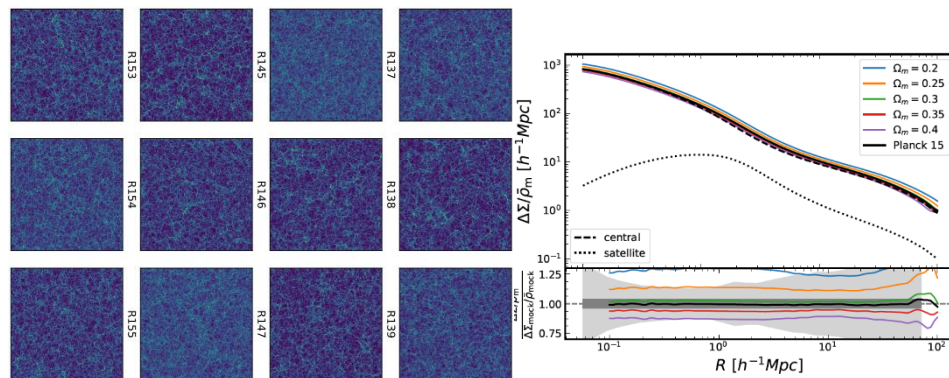


走行燃費と高速走行操縦安定性の両立を目的とした自動車の多目的最適化

# ポスト「京」成果創出フェーズで想定されるHPCを用いたAI ＜基礎科学の発展＞

## 宇宙観測データとエミュレータによる精密宇宙論

宇宙論分野では、広域宇宙観測データを統計解析することにより、宇宙の物質密度などの基本的な「宇宙論パラメータ」を高い精度で測定する研究開発が世界中で行われている。観測データ解析のためには、宇宙の構造形成の大規模シミュレーションを数百から数千回実行して得られる高精度の統計量が必要となる。最新の統計学と機械学習の手法を適用し、大規模シミュレーションのデータを効率よく学習し、様々な理論宇宙モデルに対する各種統計量を高精度で予測できる「エミュレータ」の開発し、多次元空間パラメータ推定を加速する。



多数の大規模シミュレーションによって再現された宇宙の大域的物質分布(左)と、エミュレータにより得られる銀河周辺の物質密度分布(右)。