

深層学習用ツール Advance/iMarcle と適用事例

山下 貴志* 松澤 邦裕* 松原 聖**

Case Examples of Analysis for Experimental Data with Deep Learning Platform Advance/iMacle

Takashi Yamashita*, Kunihiro Matsuzawa*, and Kiyoshi Matsubara**

近年、社会に最も影響力のある技術的なトピックスのひとつは AI である。アドバンスソフトでは、まず適用の事例が少ない実験データへの AI の適用にも着目し、さらには、CAE 技術を生かした AI 事業の展開を目指している。当社では、2010 年から J-PARC (Japan Proton Accelerator Research Complex、大強度陽子加速器施設、茨城県東海村) において、CAE 技術を活かすことのできる分野のひとつとして、実験データを解析するシステムの開発を行ってきた。今回、AI が実験データ解析の代替手段と成り得るかどうかを検証することを試みた。その過程で、当社独自の深層学習支援ツール Advance/iMacle を開発し、J-PARC の実験データ群に対して適用し、非常に良好な結果を得ることができた。本稿では、この結果を報告するとともに、当社の AI に関するサービスについて述べる。

Keywords: AI, 機械学習, 深層学習, ディープラーニング, ニューラルネットワーク

1. 背景

AI については、その起源となった 1960 年代の第一次 AI ブーム、および、1980 年代の第 2 次 AI ブームを経て、2012 年以降においては深層学習の技術が AI の実用化に一気に火をつけた。現在のブームの基本技術となるニューラルネットワークは、1960 年代にその原理が提唱され、1980 年代に逆誤差伝播法により実用化され、近年の計算機の高速化により深層学習という形で脚光を浴びるようになってきた。それらのブームとなった時期の谷間にも、AI 的ないくつかの手法について多様な研究がなされてきた。例えば、クラスタリングでは AI と同様の利用方法が可能な SVM (サポートベクターマシン) 等の成功があげられる。

また、AI のツールでは、老舗である CAFÉ やオープンソフトウェアが普及してきた。本分野で

最近普及しているツールとして、機械学習ライブラリである scikit-learn があり、R 言語等のライブラリにも機械学習が含まれている。また、近年ではデファクトスタンダードになりつつある TensorFlow、国産のツールである Chainer まで多種多様なツールが普及しつつある。

2. これまでの CAE 分野への AI の適用

2.1. 概要

CAE への AI の適用を考えるにあたり、適用が考えられるシーンをいくつか考えてみる。例えば、シミュレーションを行う場合に、まず、困難にあたるのがデータ作成の方針を立てることである。このような場合に一番手っ取り早いのは、周りの誰かに聞いて昔に行った類似したデータを持ってくることである。そうすれば、いろいろな設定やパラメータも、まず真似して開始することができる。このデータを自動的に持ってくることであれば、ユーザーは大いに助かることは間違いない。つぎに考えられる AI の登場場面は、メッシュの生成である。これは、多くの研究レベルでい

*アドバンスソフト株式会社 第 3 事業部

3rd Computational Science and Engineering
Group, AdvanceSoft Corporation

**アドバンスソフト株式会社 代表取締役社長
President, AdvanceSoft Corporation

くつもの AI 的なアプローチが行われている。しかし、大きな前進はなく、徐々に進んでいる程度と認識している。

データ準備が完了して計算の実行に移ると、また、別の問題が発生する。例えば、計算がうまくいかない場合にどうすればいいかわからないことが多い。入力パラメータが間違っていることもあるし、メッシュを修正しなくてはならない場合、本当はうまくいっている場合、そもそも原理的に無理な計算をやっている場合等のいろいろなケースが考えられる。これを解決するためには、通常は経験者に聞きながら解析するのが一番速い方法だと考えている。

最後に、結果が出てきても、本当に妥当な結果であるのかどうかを確認しなければならない。しかし、結果の評価が一番困難な部分である。膨大な量のデータから、明確には定義できない関連する部分を抽出する必要がある。このように、CAE の多くのシーンで AI の活用がある。また、このような課題はいまだに多く存在している。

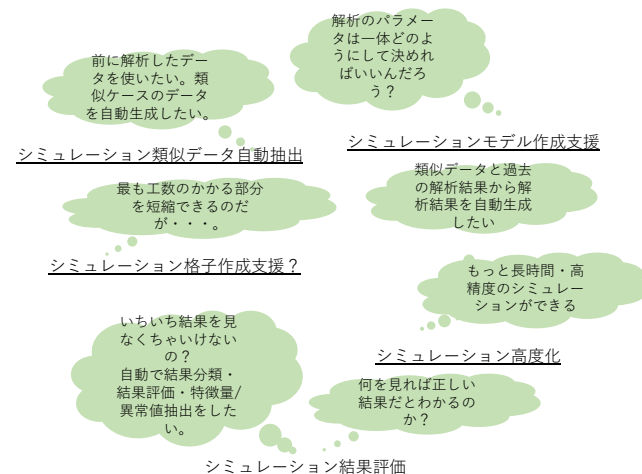


図 1 CAE と AI

2.2. 第 2 次 AI ブームでの取り組み

1980 年代中頃からの第 2 次 AI ブームと呼ばれていた頃に、著者らは汎用 3 次元流体解析ソフトウェア α -FLOW の開発において、流体解析に AI を適用する試みを実施した[3][4][5]。そこでは、当時の手法に従って、専門家からヒアリングし、それを知識として体系化し、それをルールという形

で記述することを実施した。当時はナレッジエンジニアとかナレッジエンジニアリングという言葉があった。ここで実施したのは、CAE の支援をルールベースのエキスパートシステムという形で、例えば、計算がうまくいかない場合の支援等を行うことであった。当時は、下記に示すような知識の体系、具体的な知識、システム構成を実現した。

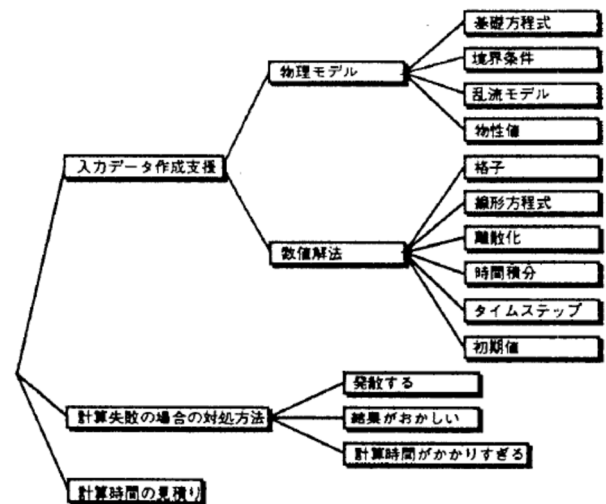


図 2 流体解析における知識の枠組みの一部[3]

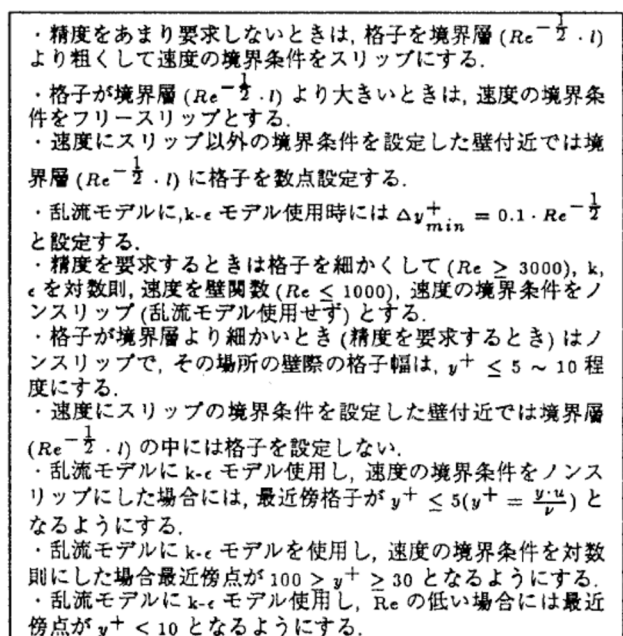


図 3 流体解析に関する知識の一部[3]

しかし、その結果、CAE の知識をルールベースにすることは難しく、ヒアリングを繰り返したところで、その当時体系化した知識では対応できない場合が多いことを実感した。ヒアリングを繰り返

返すと、ヒアリングしている者はどんどん専門家の知識に近づく一方で、エキスパートシステムはまったく専門家に近づいていかないというジレンマがあった。この現象は、おそらくこの手法の限界であったと考えている。

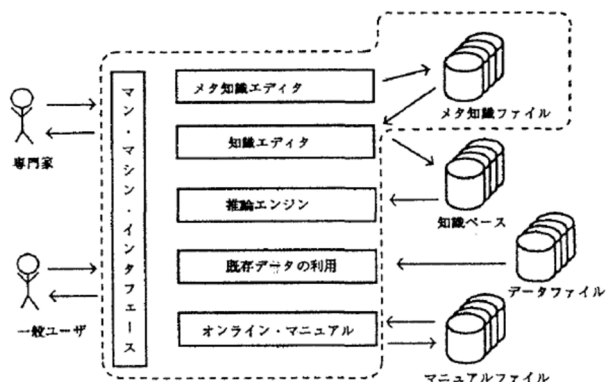


図 4 エキスパートシステムの構成[3]

2.3. アドバンスソフトの取り組み

当社は、2002 年の創業以来、CAE を中心に事業展開を行ってきた。この事業においても CAE に関連する AI の引き合いがあり、いくつかのお客様からの受注業務を実施してきた。これらの実績から、当社の CAE 技術を活かすことのできる分野で AI の事業化を進めていく。

現状において当社での取り組みを始めるにあたり、今後最も利用が進む技術である深層学習に特化するものとした。我々の技術を生かす事業としては、CAE に AI を応用するケース、AI に CAE の技術を応用するニーズが大きいと考えている。例えば、前者については、既存の研究の中では、台風の進路予測に観測データでは、深層学習に利用するには観測データが少なく、シミュレーションを利用してデータ数を増やし、学習している例もある。また、後者では、ツール的高速化の面で、また最適化アルゴリズム等で当社の技術を生かすことができる。AI を実用化するためには、その枠組みであるツールの活用および学習データの収集方法の 2 点が重要であり、後者と前者の技術がそれぞれ対応している。

3. これまでの AI 関連技術とシミュレーション

3.1. 概要

30 年前は、主としてルールベースにより推論を行うエキスパートシステムが AI の中心であった。これは人間の思考を模擬していると考えられることから AI と呼んでいた。また、ニューラルネットについては、脳の仕組みを模擬したということで AI と呼ばれていた。1990 年代になりファジー制御を AI と呼ぶ人がいたが、これは AI 分野においても制御分野においても少し違和感があったと考えている。ただし、推論が AI の分野であるという考えに立てば、AI もしれない。

このように AI はさまざまな分野で利用され、研究されていることから、その定義もさまざまである。関連する分野は、AI 的なモデル、確率・統計的なモデル、情報処理技術のモデルの 3 つに分けられると考えている。

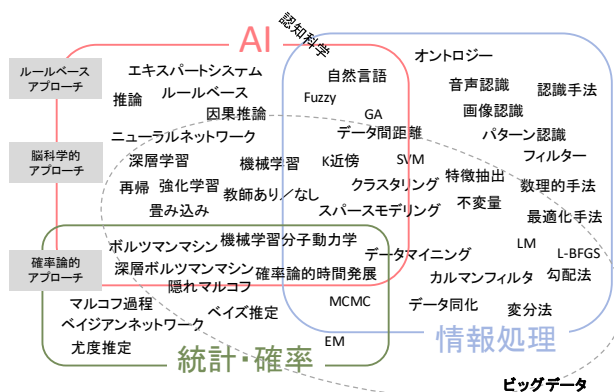


図 5 AI の分類

この 3 つに分類した場合には、1990 年後半から流行したデータマイニングは、AI ではなく情報技術と位置付けている。しかし、データを採り出して利用することは推論であり、AI と呼ぶべきかもしれない。また、その後大成功を収めている SVM は最適化技術の情報技術だと考えている。株価予測も AI と情報技術の両方を混在して利用されているが、そもそも分類すること自体がナンセンスかもしれない。また、一方でボルツマンマシンは AI と統計の重なる領域であると考えている。また、隠れマルコフモデルは情報技術であるが、教師なし機械学習の代表的な例ということで

AI と呼ばれるかもしれないし、クラスタリングは情報処理であるが、ビッグデータと合わせ AI と呼ばれることもあるが、明らかに情報処理の技術と呼ぶべきものも含まれている。

AI の定義は、多種多様である。例えば、人工知能学会の web には、AI とは学習と推論が代表的であると述べている。最も AI に分類される機械学習が AI かというところではない場合もある。例えば、機械学習の中の隠れマルコフモデルは推論という意味では AI ではないが、明らかに機械学習という面から AI である。このような確率論的なモデルは AI というより確率統計の世界である。また、大きなデータ処理、特に、クラスタリングは AI と勘違いされることもある。一方で、機械学習のうち深層学習は間違いなく AI である。これは脳神経に類似した学習なので AI であると考えられる。自然言語の理解も間違いなく AI だと思う。ただ、いずれの手法も実用に適用するための過程は、決してスマートなものではなく、泥臭い努力を積み重ねた結果であると思う。

3.2. ルールベース・アプローチ

1980 年代の第 2 次 AI ブームでは、当時は計算機能力が低かったため、ニューラルネットワークなどの実用化より、ルールベースのシステムが先に実用化された。ルールベースのシステムは、手続きに従って処理されないという意味では画期的な手法であり、1960 年代および 1970 年代にいくつかの診断システムが実用化された。このような考え方の基づくプログラムは、現在では当然のように日常生活に組み込まれている。

1980 年代中頃に訪れた AI ブームでは、バックプロパゲーションの手法を適用されることでニューラルネットワークが復活した。合わせて、この時代にはエキスパートシステム全盛期であった。また、推論についてもいくつかの手法が提唱された。キーワードでは、演繹推論・機能推論・述語論理・仮説推論等である。

この時代に、人工知能については日本でも 1982 年から 1992 年にかけて 570 億円を投じた第 5 世代コンピュータのプロジェクトが実施され、日本

での学術振興と人材育成に貢献した。この時代の新しい概念として「知識表現」があった。これは従来の計算機におけるデータ表現とは異なり、人間の考えているデータ表現を計算機で利用しようという方法であった。この知識表現は、現在では主流のプログラミング言語となったオブジェクト指向型の言語のもとになっていると考えており、この時代の成果であると思う。自然言語と関連して日本語においてもオントロジーの研究が開始された時代であった。また、この時期にファジー推論が研究され、実用化された。

3.3. 脳科学的アプローチ

脳科学的アプローチは、1940 年代に提唱されたニューラルネットワークの考え方を起源とし、1950 年代にパーセプトロン等の考え方で具体化されてきた。そのような研究成果をもとに、圧倒的な計算機処理速度の進化を最大限に発揮して 2010 年を前後してディープラーニングが提唱され、効果があることが分かった。2015 年以降については、ご存知のようにディープラーニングの一人勝ちの状態であり、日本政府も本分野に関連したテーマに大きな予算をつけており、民間で最も着目するテーマとなっている。

先にも述べたように、これらの研究は、冬の時代においても継続された地道な研究をもとにしている。パーセプトロンから派生したホップフィールド型のネットワークには、確率論が導入され 1980 年代のボルツマンマシンとなり、2010 年事には、深層ボルツマンマシンとなり。これらは現在のディープラーニングの事前学習の基本的な技術となっている。その中で、畳み込みプーリング等を利用したディープラーニングでは、分散並列、GPU の処理で高速化され、情報処理技術である耐故障技術も利用されている。また、BFGS 等の最適化技術が学習の収束性向上に寄与している。もちろん、歴史の長い特徴量抽出や不変量の抽出・フィルターの技術を基盤とした部分も多い。したがって、ディープラーニングを中心とした機械学習・人工知能技術は、これまで研究され続けた情報系の学問の集大成といえるのではないかと。

また、現在同様にブームであるビッグデータは、人工知能と重なる分野でもあり、広く応用範囲があり、大きな実用化が可能である。

3.4. 確率統計論的アプローチと情報科学的アプローチ

第2次 AI ブームのあと、AI はその時代から長い長い冬の時代を迎えることになる。2000 年になり、サポートベクターマシン等の手法の有用性が確認されて実用化が開始されたが、これを AI と呼ぶ人はいない。しかし、統計的・確率論的なアプローチは続けられ、これが現在の AI ブームの基礎となっていることは否めないと思う。

研究者毎に分類は異なっているが、パターン認識には、①確率統計的な手法、②データ間距離等を用いた分類の手法、に分類され、手法によっては最適化を含む手法も同時に利用されることが多い。後者は機械学習に利用される。さらに、主成分分析等の不偏量を求める手法は、①および②に含まれる部分もあるが、ひとつの強力な手段として利用されている（古くからの統計処理および検索情報からのマーケティング・音声認識等での常套手段として利用されている）。

参考文献[2]の第5章「データマイニングに必要な10のアルゴリズム」には、①に分類できる EM アルゴリズム（尤度推定におけるパラメータ決定の一手法）・ナイーブベイズ（単純ベイズ分類機；同時確率に独立性を仮定する手法）等の方法が紹介されている。また②に分類できるものとして代表的な手法であるサポートベクターマシン（平面でのデータ分割の非線形問題への拡張）・アプリアルゴリズム（組み合わせも含めた頻出パターンの分析と抽出；アソシエーション分析）・k 平均法アルゴリズム（クラスタリングした場合のデータとクラスタ中心の距離総和最小問題）・k 近傍分類（既存データに対するデータ距離に基づく分類手法）およびそれらの制御に利用できるブースティング（メタな手法；弱い学習を強くする手法）について紹介がある。（参考文献[2]には、統計ツール R を利用したデータ分析を記述してあるため、手法の整理というより、そこで利用可能な手

法が示されている）

このうち、①については、[1]に詳しく記述がある。この手法は、尤度推定を用いる手法とベイズ推定を使う手法に大きく分類できる。前者については確率密度関数の分布型を決めその尤度が最大となるパラメータを求める手法である。前者のうち、パラメータを効率よく求める手法として[2]に記述されている EM アルゴリズム等があげられる。後者の手法については、確率密度関数を求めることに相当し、[2]の k-近傍分類等が相当する。また、②については、サポートベクターマシンは1960 年代に線形にデータを分離する手法（超平面でデータを分離する原理）として提唱された手法であり、非線形への適用手法が研究され現在でも多く利用されている手法である。本手法については、フリーで利用できるライブラリも普及しており、その他の手法については、データ間距離または出現頻度を基本として組み合わせた手法となっている。

3.5. アドバンスソフトと AI

第2次 AI ブームから30 年が経過し、AI は格段に強力になってきた。アドバンスソフトでは、AI、情報処理、確率論的なモデルのいずれも経験をしたことがあり、これらの手法を組み合わせ、問題解決の手法を提供できると考えている。特に、大規模シミュレーションの事業領域に大きな実績があるため、大規模化や高速化等は得意な部分である。また、AI、情報処理、確率論的なモデルを利用せずとも、シミュレーションで解決できる問題もある。これらの問題に対して、総合的にお客様に解決策を与えることが当社の事業と考えている。

シミュレーションへの AI の適用は材料分野を中心に広がってきているが、従来の CAE とはなかなか相容れないものがある。しかし、データの再利用や、データの作成、および、結果の評価・結果の分類には、AI・情報処理・確率論的な手法が利用できるのではないかと考えている。

当社では AI に関する事業を3 つの位置付けで考えている。

1 つ目は、30 年前と同じく、CAE 利用支援に AI を適用し、CAE がより世の中に受け入れられ、役に立つように発展させることである。

2 つ目は、CAE の最終目的である設計の最適化に AI が適用できないかというテーマであり、現在も多くの研究が続けられている。設計の最適化に対しては、当社で販売している第一原理計算ソフトウェア Advance/PHASE では材料インフォマティクスの機能を提供している。当社のその他のソフトウェアへ、お客様のニーズに合わせ、最適化機能を（これは AI ではない可能性もあるが、）装備していきたいと考えている。

3 つ目は、AI 発展への貢献である。AI のアルゴリズムとシミュレーションのアルゴリズムは大きな共通点があることから、私たちの技術が AI 自身の発展に貢献できないかということである。当社は、これまで関連する確率論や統計またはデータ処理のソフトウェアの開発も手掛けてきた。また、高速化や大規模化の技術を蓄積してきた。AI 分野は、シミュレーションで培った技術を適用できるひとつの場所であると考えている。

4. 最近の AI 関連技術

4.1. 畳み込みニューラルネットワーク

4.1.1. ルールベース、機械学習、ディープラーニング

機械学習とディープラーニングの主な違いは、データの特徴を人間が機械に指定するか、それとも機械が自動的に「学習」するかかどうかという点にある。ここで、些か大雑把ではあるが、データ分析の方法を、「ルールベース」、「機械学習」、および「ディープラーニング」の 3 つに分けるとすると、それぞれの手法を用いた場合のデータ分析フローは図 6 のようになる。

ルールベースは、機械学習やディープラーニングのような学習方法を用いない、言わば普通のデータ解析手法に相当する。ルールベースによるデータ解析では、人間がデータの特徴を理解し、予め必要な情報やルールを記述したプログラムを作成することで、機械にデータを処理させる。それに対して機械学習では、人間がデ

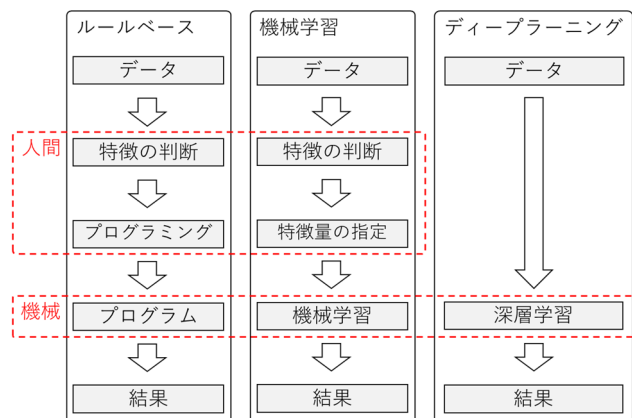


図 6 ルールベース、機械学習、およびディープラーニング

ータの特徴を理解する必要があるという点ではルールベースと同様であるが、その特徴を機械に指定して学習させることで、データを処理するモデルを自動的に構築する。さらに、機械学習の一部であるディープラーニングでは、通常の機械学習と異なり、人間がデータの特徴を指示する必要がなく、データの特徴を機械が自ら学習することでデータを処理するためのモデルが作成される。このディープラーニングの「データのどの部分にどのような意味があるのか?」という情報を与えることなく学習するという機能によって、人間が認識していない、あるいは、人間が認識できないデータの類似性・相違性を生かしたデータ解析が可能となる。

ディープラーニング（通常の機械学習も含む）を用いた主な分析手法は、大まかに分けると図 7 のようになる。ここでは、一般によく用いられる手法のみ記載した。また、機械学習やディープラーニングには強化学習と呼ばれる学習方法も存在するが、ここでは触れない。ディープラーニングの学習方法は、まず、正解情報である教師データを与える「教師あり学習」と教師データを与えない「教師なし学習」の 2 つに分けられる。それぞれは、教師あり学習は「分類」と「回帰」、教師なし学習は「クラスタリング」と「アソシエーション」と呼ばれている。教師あり学習／分類は、与えられたデータを指定されたクラスに分類する方法であり、代表的な例としては、手書き文字

画像から数字を判別するような用途に用いられる。教師あり学習／回帰は、与えられたデータからある値を予測する方法であり、「駅からの距離、築年数、専有面積などのデータからマンションの販売価格を予想する」といった用途に用いられる。一方、教師なし学習は、主に、データの傾向やその構造などの特徴を抽出するために用いられる。教師なし学習／クラスタリングは、与えられたデータを分類するという点では教師あり学習／分類と同様だが、教師データを与えずに、データに含まれる特徴からどのようなグループに分類できるかを判断させる。教師なし学習／アソシエーションは、与えられたデータの中から関連性を抽出する方法である。アソシエーション分析は、元々は販売時点情報管理（POS System）のデータ分析のために考案された手法であり、商品の購入履歴から「どの商品がどの商品と一緒に購入されるか」といった分析に用いられる。

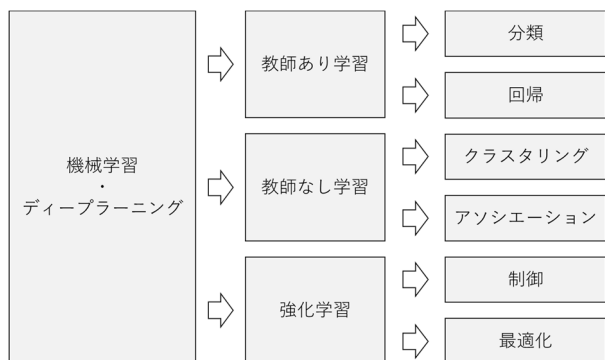


図 7 機械学習・ディープラーニングにおける教師あり学習・教師なし学習の大まかな用途。

4.1.2. ニューラルネットワーク

ニューラルネットワークの学習は、ネットワーク各層の重みとバイアスを最適化することで行われる。ここでは、ニューラルネットワークの概要と、その学習フローの概要について説明する。

図 9 に、教師あり学習の場合のニューラルネットワークの学習フロー概略を示す。ここでは、一番左側の層を入力層（Input Layer）、一番右側の層を出力層（Output Layer）、入力層と出力層の間の層を中間層（Hidden Layer）と呼ぶ。通常、

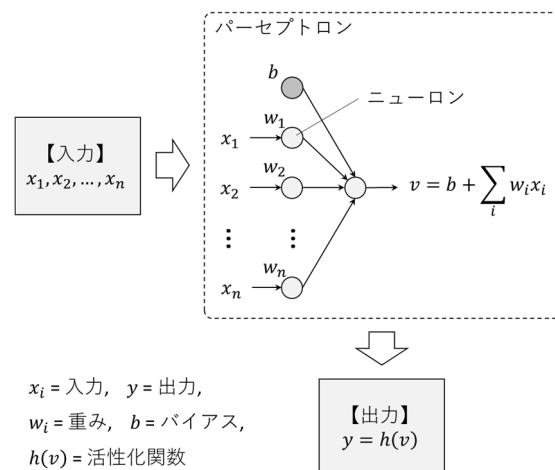


図 8 パーセプトロン

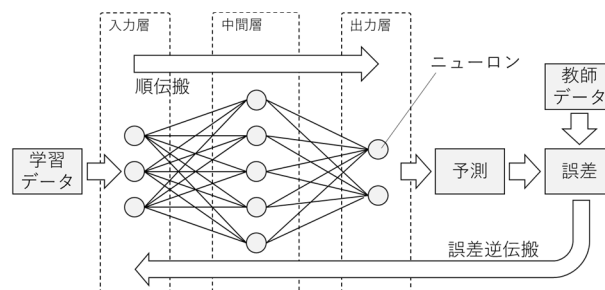


図 9 ニューラルネットワークの学習フロー（教師あり学習の場合）

ネットワークを構成する各層は、重みとバイアスをパラメータとして所有する（実際のネットワーク構成では重みやバイアスを持たない層も存在する）。学習前の段階では、各層の重みとバイアスにはランダムな値が与えられ、ニューラルネットワークにデータを処理させても期待する予測結果は得られない。ニューラルネットワークにデータの特徴を学習させるため入力層にデータが入力されると、データは複雑に接続されたニューロンのネットワークを伝わって中間層から出力層へと伝わり、出力層における全結合と活性化を介して予測結果（分類の場合、それぞれのケースの「確率」）が出力される。予測結果は教師データと比較され、教師データとの「ズレ」から誤差が評価される。評価された誤差は、誤差逆伝搬則に従ってネットワークを出力層から入力層に向かって伝播し、各層の重みとバイアスが更新される。この入力から誤差逆伝搬までのフローを繰り返

すことで、与えられた学習データと教師ラベルに従って分類できるようにネットワーク各層の重みとバイアスが十分に調整され、与えられたデータから結果を予測できるようにネットワークが「学習」することになる。

4.1.3. 畳み込みニューラルネットワーク

ディープラーニングの特徴である「データの特徴を機械が自動的に学習する」という機能を持たせるために、ディープラーニングで用いるニューラルネットワークは機械学習と異なる構造の中間層を持つ。機械学習の場合、中間層の数は高々数層で構成される。それに対してディープラーニングでは、畳み込み層 (Convolution Layer) やプーリング層 (Pooling Layer) など、さまざまな機能を持った層が幾層にも重なって多層化、すなわち、深層化した構造の中間層を持つ。この深層化した中間層を用いることで、評価したいデータがどのような物理的意味を持ち、どのような点にどのような特徴があるのかという情報を学習機に一切教えることなく、ネットワーク自身が必要な特徴を自動的に学習する。これが、この技術がディープラーニング (深層学習) といわれる所以である (従来の機械学習を「浅い機械学習」と呼んで区別する場合もある)。

畳み込みニューラルネットワークでは、全結合層のみで構成された全結合ニューラルネットワークと異なり、畳み込み層やプーリング層によるデータ処理がネットワークに加わる。図 10 に、畳み込みニューラルネットワークの構成イメージを示す。図 10 では、簡単のため、1 次元データを n 個の多クラス分類する場合のデータフローを表している。また、ここでは、畳み込みニューラルネットワークの機能を、データの特徴を抽出するための特徴抽出 (Feature Extraction) フェーズと、抽出された特徴量 (特徴マップ) を処理してデータをクラス分類する分類 (Classification) フェーズの 2 つに分けて考える。

特徴抽出フェーズは、畳み込み層とプーリング層を中心として構成される。畳み込み層は、入力されたデータに対してフィルター処理をかける

ことで、元のデータに含まれた特徴を抽出する機能を持つ (抽出されたデータを特徴マップと呼ぶこともある)。畳み込みによるフィルター処理では、ある大きさを持ったフィルターを元データ全体に対してスライドさせながら適用することで、データの個々の数値だけではなく、隣り合ったデータ同士が関連した特徴をデータ全体にわたって抽出 (強調) することができる。この際に用いるフィルターは、機械学習の場合はフィルターは人間が定義したものを使用するが、ディープラーニングではフィルター自体も学習の過程で調整され、データの特徴をより強く抽出するフィルターが自動的に生成される。また、通常、畳み込み処理では複数のフィルターが用いられ、処理したデータはフィルター毎に次の層に渡される。図 10 の場合、畳み込み 1 層あたり 4 枚のフィルターを用いているため、畳み込み処理によってデータ量が処理前の 4 倍に増大している。この増大したデータに対しては、通常、プーリング層による圧縮処理を施す。プーリング層は、畳み込み層によって抽出された特徴を残しつつ、情報量を削減 (データサイズを圧縮) する機能を持つ。プーリングには、一定の範囲から最大値のみを取り出す最大プーリング (Max Pooling) や、一定の範囲の平均値を取り出す平均プーリング (Average Pooling) など幾つかの種類があり、用途に応じて使い分けられている。畳み込みニューラルネットワークでは、この畳み込み層によるフィルター処理とプーリング層によるデータ圧縮を繰り返すことで、人間がデータの特徴を指示することなく自動的に学習する機能をニューラルネットワークに持たせている。

特徴抽出フェーズで処理されたデータ (特徴マップ) は、分類フェーズで処理される。この段階では、通常、特徴抽出フェーズで出力されたデータを全結合層によって平坦化するとともに、クラス分類する数にまでデータ数を減少させる。その後、全結合層から出力されたデータに対して活性化関数を適用して、それぞれのクラスに分類される確率を得る (図 10 では、出力 1 から出力 n まで n 個の確率の値が出力される)。得られた確率

のうち、最も数値の高いクラスがニューラルネットワークによる予測結果となる。

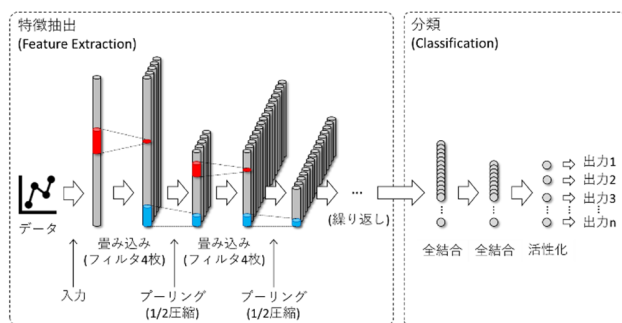


図 10 畳み込みニューラルネットワーク

5. 深層学習用ツール Advance/iMacle

アドバンスソフトでは、オープンソースのライブラリ（TensorFlow や scikit-learn 等）を利用した AI アプリケーションの受託開発や受託解析などを請け負っている。そのような用途に向けて、さまざまな環境で動作して、かつ目的に応じて細部まで自由にカスタマイズできる道具として、アドバンスソフト独自の深層学習用ツール Advance/iMacle を開発・整備している。

Advance/iMacle は、他社の AI 関連ライブラリと比較すると小規模ではあるが、軽量なシステムである利点を生かして、さまざまな環境に組み込むことが可能である。Advance/iMacle の主な特徴は以下の通りである。

- 機械学習のうち、ニューラルネットワークによる深層学習に特化したツールである。
- 当社で著作権を持つソフトウェアであるため、お客様のニーズに応じたカスタマイズが可能である。お客様には、必要に応じて、ソースプログラムを公開することが可能である。
- お客さまの GPU および並列計算機にチューニングして、高速化することが可能である。
- 最小限度の機能に絞り込んだ比較的軽いツールである。
- Windows、Linux のマルチプラットフォームで動作する。

表 1 に、Advance/iMacle の主な機能（深層学習関連）を示す。

表 1 深層学習用ツール Advance/iMacle 機能

項目	内容	
ニューラルネットワーク	機能 (層)	全結合層 畳み込み層 プーリング層 ドロップアウト層 正規化層 活性化層
	活性化関数	Step関数 Sigmoid関数 SoftMax関数 ReLU関数
	最適化	SGD法 Momentum法 AdaGrad法 Adam法
	検証	Hold-out k-fold cross validation Leave-one-out
	その他	アンサンブル学習 データ拡張 荷重減衰 学習率減衰
使用環境	開発言語	Python
	計算機	Windows Linux Mac

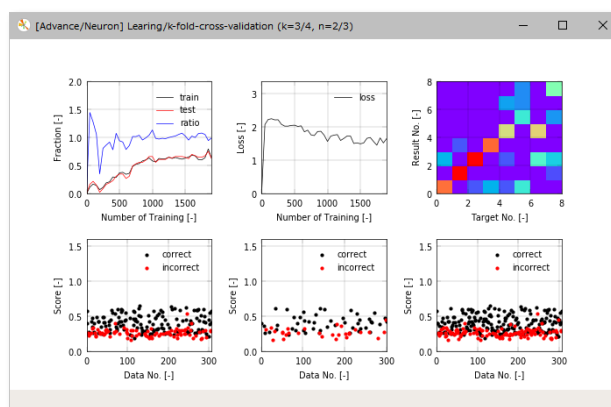


図 11 Advance/iMacle 実行例

6. Advance/iMacle 適用事例

ここでは、Advance/iMacle を使用したディープラーニングの適用例として、畳み込みニューラルネットワークの実験データへの適用事例の一部をご紹介します。ただし、実験の目的や解析結果

の詳細に関わる内容については公開できないため、簡単な適用結果のみ示す。

6.1. 中性子回折実験

本適用事例では、大強度陽子加速器施設（J-PARC, Japan Proton accelerator Research Complex）に物質・生命科学実験施設（MLF, Materials and Life Science Experimental Facility）の BL19 工学材料解析装置「匠」で実施した中性子回折実験の測定データを使用した。

J-PARC/MLF の BL19「匠」は、材料工学や機械工学に関わる材料研究のために開発された、飛行時間型中性子回折装置である。中性子回折パターンに表れる Bragg 反射の位置や強度などのプロファイルの詳細に解析することで、材料の内部応力や集合組織など、新材料の設計や構造物の信頼性評価に役立つさまざまな情報を得ることができる。また、匠は飛行時間法を用いているため、複数の格子面からの回折ピークを同時に測定できる。さらに、中性子入射軸に対して ± 90 度水平方向に散乱した中性子を検出するための検出器が「北側検出器(North)」と「南側検出器(South)」の2方向に設置されており、直交する2方向のひずみ成分を同時に測定できるという利点がある。

図 12 に、中性子の飛行時間測定の詳細を示す。J-PARC、工学材料解析装置「匠」や中性子飛行時間法について興味のある方は、J-PARC のウェブサイトや参考文献等を参照されたい。

6.2. 使用データ

本実験で測定した飛行時間スペクトルの一部を図 13 に示す。本適用事例では、測定したデータのうち、616 個の飛行時間スペクトル（ヒストグラム）を解析に用いた。

使用した測定データは、試料や測定位置などの測定条件が全て異なり、通常、人間が見て判別したり、ルールベースによる解析をしたりすること等によって測定条件を判定することは難しい。

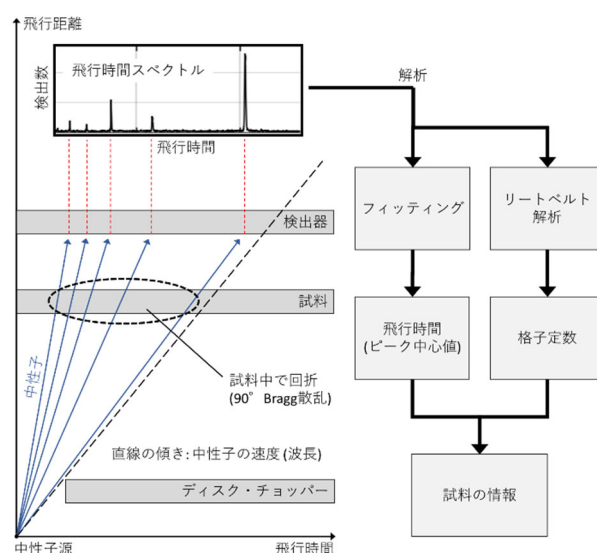


図 12 回折中性子の飛行時間測定の詳細

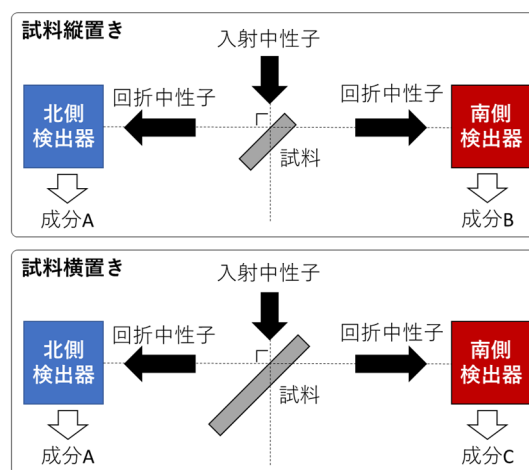


図 13 試料の設置方向と検出器の関係

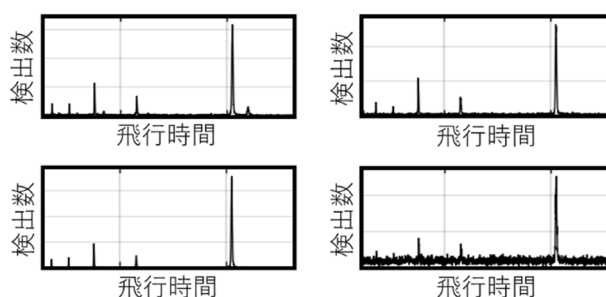


図 14 使用した中性子飛行時間スペクトルの一部。使用した 616 個の測定データは、全て測定条件が異なる

表 2 使用データ、学習方法等

項目	設定
使用データ数	616 ヒストグラム
学習方法	教師あり学習／分類・解析
ネットワーク	畳み込みニューラルネットワーク
検証方法	k 分割交差検証法(シャッフル付き)
階層数	24 層(重み・バイアス付きは 10 層)

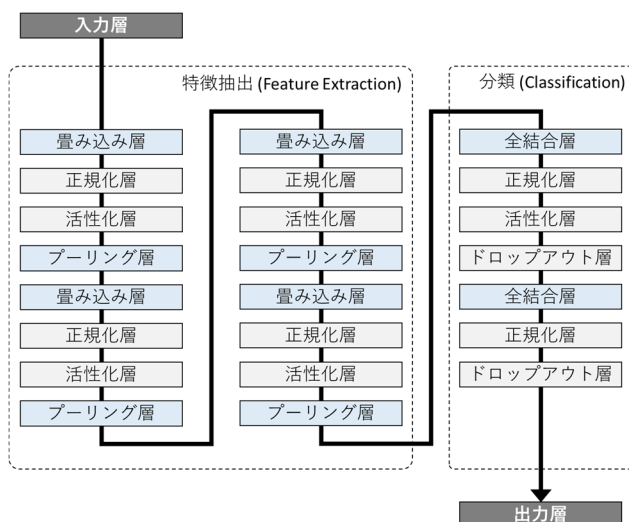


図 15 本解析事例で使用した畳み込みニューラルネットワークの構成の一例 (多クラス分類の場合)

6.3. 学習・検証方法

図 15 に、本適用事例で使用したニューラルネットワークの構成の一例 (多クラス分類の場合) を示す。学習器の構成は、一般的な畳み込みニューラルネットワークと同様に、畳み込み層とプーリング層を中心としたデータ処理を繰り返し行う特徴抽出フェーズと、全結合層を中止とした分類フェーズで構成されている (正規化層や活性化層などの詳細については、深層学習関連の書籍等を参照されたい)。

図 16 に、本適用事例における学習・検証フローの一例 (多クラス分類の場合) を示す。ここでは、最初に学習データと教師データ (教師ラベル) からなるデータセットから一部のデータを隔離し、残りのデータに対してシャッフル付き k 分割交差検証法を用いて学習させた。複数の弱学習器

を用いる場合、通常、ブースティングやバギングと呼ばれる手法がよく用いられるが、ここでは単純にシャッフル付き k 分割交差検証法で学習させた各学習器の予測 (分類であれば各クラスに分類される確率、回帰であれば予測値) の合計 (平均) を予測結果とすることで、過学習の防止と予測精度の向上を試みた。

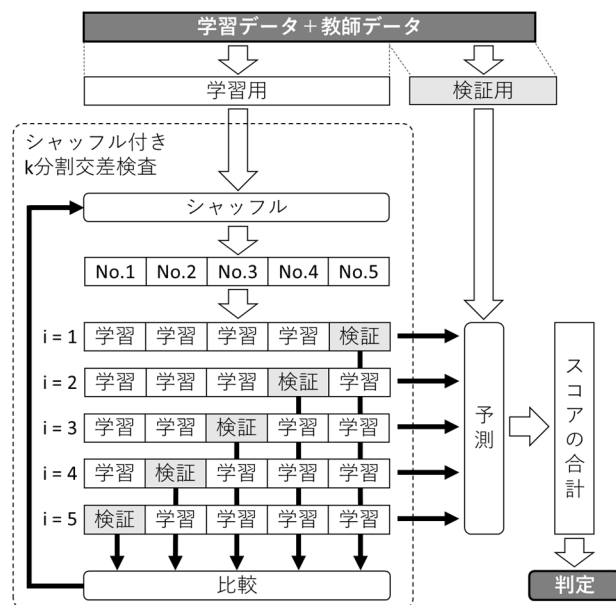


図 16 本解析事例における学習・検証フロー (多クラス分類の場合)

6.4. 適用結果 (1) : 多クラス分類

ここでは、実験データを、

- (1) 試料 (参照試料 or 測定試料)
- (2) 検出器 (北側検出器 or 南側検出器)
- (3) 設置方法 (縦置き or 横置き)

の 3 つの測定条件で表 3 のようにクラス分けし、判別することを試みた。

図 17 に、多クラス分類の結果を示す。図 17 のうち、左図は学習中の正答率、中央図は学習中の誤差関数、右図は学習後の検証用データに対する予測結果を表す。右図の予測結果は、横軸に教師データ (正解)、縦軸に学習器による予測値を取っており、見ての通り、ほとんどのデータについて正しい予測結果が得られていることが分かる。前述したように、本適用事例で使用した実験データから、人間が目で見たり、ルールベースによる

解析で測定条件を判別したりすることは難しい。それに対して、学習器は非常に高い確率で測定条件を正しく予測しており、これは人間が見ても分からないデータの特徴をニューラルネットワークに学習させることができていることを示す。

表 3 多クラス分類の条件

番号	測定条件		
	試料	検出器	設置
0	参照試料	北側検出器	縦置き
1	評価試料	北側検出器	縦置き
2	参照試料	南側検出器	縦置き
3	評価試料	南側検出器	縦置き
4	参照試料	北側検出器	横置き
5	評価試料	北側検出器	横置き
6	参照試料	南側検出器	横置き
7	評価試料	南側検出器	横置き

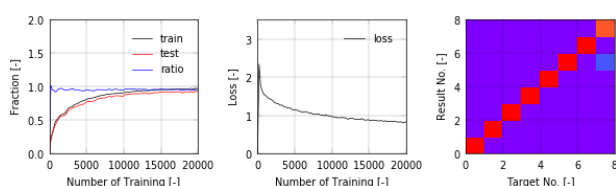


図 17 多クラス分類の結果

6.5. 適用結果 (2) : 回帰分析①

ここでは、実験データを解析することで求めた値を教師データとして、その値を予測する回帰分析の結果を 3 例示す。これらの例では、教師データをどのように求めたか（どのようなフィッティング関数を用いたのか？飛行時間スペクトルのどの部分に対してフィッティングを適用したのか？など）を教えることなく、ただ正解となる教師データ（解析結果）のみを与えて、ニューラルネットワークが正しい予測値を与えるよう自動的に学習させた。ただし、教師データに用いた飛行時間等の値については、その値に測定試料の情報が含まれているため、実験の趣旨や測定試料が何であるのかが分からないよう数値を隠匿した状態で示す。

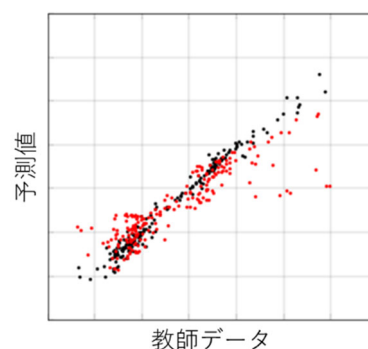


図 18 フィッティングで求めた、ある格子面からの回折ピークの飛行時間（中心値）を教師データとして学習させた場合の回帰分析結果（黒点は学習に使用したデータに対する予測結果、赤点は道のデータに対する予測結果を表す）

回帰分析①：飛行時間

回折中性子の飛行時間スペクトルに対して、特定の格子面からの回折ピークへのガウス関数フィッティングを行って飛行時間（ピーク中心値）を求めた後、その値を教師データとしてニューラルネットワークに学習させ、飛行時間の値を予測させる回帰分析を行った。

図 18 に、回折ピークの飛行時間の回帰予測結果を示す。図中、横軸は教師データ（正解値）、縦軸は学習器による予測値、黒点は学習に使用したデータに対する予測結果、赤点は学習に使用しなかった未知のデータに対する予測結果を示す。見ての通り、予測結果は概ね教師データ（解析結果）を再現する傾向を示している。

回帰分析②：格子定数

回折中性子の飛行時間スペクトルに対して、リートベルト解析（結晶構造を仮定し、その結晶構造に関するパラメータを最小二乗法によって精密化することで結晶構造を決定する解析方法）を行って格子定数を求めた後、その値を教師データとしてニューラルネットワークに学習させ、格子定数の値を予測させる回帰分析を行った。

図 19 に、格子定数の回帰予測結果を示す。飛行時間の回帰分析結果と同様に、図中、横軸は教

師データ（正解値）、縦軸は学習器による予測値、黒点は学習に使用したデータに対する予測結果、赤点は学習に使用しなかった未知のデータに対する予測結果を示す。飛行時間の回帰分析と同様に、予測結果は概ね教師データ（解析結果）を再現しており、リートベルト解析を行うことなく、測定データから格子定数の大まかな値が予測可能であることが示唆される。

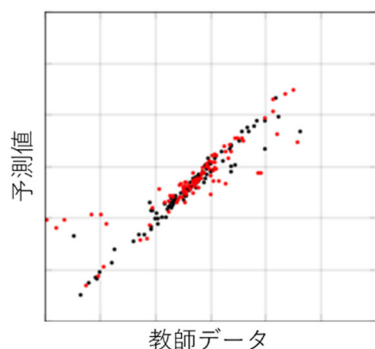


図 19 リートベルト解析で求めた、試料の格子定数の値を教師データとして学習させた場合の回帰分析結果（黒点は学習に使用したデータに対する予測結果、赤点は道のデータに対する予測結果を表す）

回帰分析③：フィッティング誤差

回折中性子の飛行時間スペクトルに対して、特定の格子面からの回折ピークへのガウス関数フィッティングを行って飛行時間（ピーク中心値）を求めた後、そのフィッティング誤差の値を教師データとしてニューラルネットワークに学習させ、フィッティング誤差を予測させる回帰分析を行った。

図 20 に、フィッティング誤差の回帰予測結果を示す。飛行時間や格子定数の回帰分析結果と同様に、図中、横軸は教師データ（正解値）、縦軸は学習器による予測値、黒点は学習に使用したデータに対する予測結果、赤点は学習に使用しなかった未知のデータに対する予測結果を示す。

飛行時間や格子定数の回帰分析結果と比較して、誤差の大きい領域については予測値が 45 度の線から外れる傾向が見られている。これは、学

習に用いたデータが誤差の小さい領域に集中しており、誤差の大きいデータが少なく、うまく学習できていない可能性が考えられる。しかし、全体としては誤差の大まかな大小関係が予測できている傾向が見て取れる。

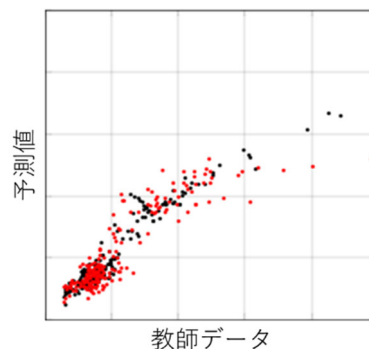


図 20 回折ピークに対するフィッティング誤差の値を教師データとして学習させた場合の回帰分析結果（黒点は学習に使用したデータに対する予測結果、赤点は道のデータに対する予測結果を表す）

7. 今後の展望

7.1. AI 技術の展望

ディープラーニングは既に社会に広く浸透している技術だが、それを実験データに応用した事例はまだ少ない。これは、ひとつには、ディープラーニングが所謂「ブラックボックス」であるためだと考えられる。確かに、実験データの解析に従来から使用されている最小二乗法などのフィッティングツールと比較して、ディープラーニングによる分析はニューラルネットワークが「どのようにして何を学習したのか？」が不透明であり、入力と出力の間にあるべき物理的意味合いを理解することが困難だ。しかしながら、一方では、人間の主観に依らない客観的な判断という利点があり、これは、ともすれば主観が入りがちな我々人間の判断をサポートする機能として有用であろう（無論、ニューラルネットワークの構成や学習方法によって「誤った学習」をする可能性があるため、ニューラルネットワークによる予測結果を無条件に正しいと信じることはできない

点に注意しなければならない。

本稿の Advance/iMacle 適用事例では、通常は自明である測定条件の判別や、解析で求めることができる物理量等の予測についてのみ示した。これらは、直接、材料科学におけるマテリアルズ・インフォマティクスのような、より高度な AI 技術の応用に直結する内容ではないが、ディープラーニング的な手法をデータ解析に応用することで、従来のルールベースによるデータ解析とは異なる利点があることを示唆している。ここでは、ディープラーニングをデータ解析の「道具のひとつ」として見た場合の利用方法について、いくつか考えてみたい。

(1) 解析条件の判定

本稿の Advance/iMacle 適用事例では、既知である測定条件を教師データとしてニューラルネットワークに学習させることで、人間による判別が難しい測定条件を精度よく予測できることを示した。これを応用することで、解析に必要な測定条件を自動的に判別、もしくは、誤った条件指定に対して警告を行うことが可能だろう。例えば、さまざまな試料で測定した実験データを用意し、どの実験データがどの空間群（結晶構造）の試料で測定したものであるか学習させれば、リートベルト解析に必要な空間群を自動的に判定、あるいは、候補を提示するような、誤ったデータ解析を行うことを防止する保護機能が実装できるであろう。

(2) フィッティングの相補機能

実験データをルールベースで解析する場合、データに対するフィッティングが頻繁に用いられる。しかし、通常、実験で得られるデータには測定機器に由来する装置関数やバックグラウンド関数など、さまざまな関数が畳み込まれている。そのため、データが複雑な場合、フィッティングに用いるべき関数形が自明ではなく、データに対するフィッティングが困難なケースもある。それに対して、ディープラーニングの場合、データのどの部分にどのような特徴があるのか指示する

必要はなく、本稿の Advance/iMacle 適用事例で示したように、通常であればフィッティング等を用いて解析して求める回折ピークの飛行時間や格子定数などの物理量を、ニューラルネットワークに学習させることで予測することが出来る場合がある。これは、ある意味では関数形が未定義な状態で行うフィッティングと考えることができ、フィッティングの相補的な機能として有用であろう。

(3) 測定データの同一性評価

統計量を測定するような実験の場合、同じ試料に対して長時間の測定を行い、そのデータを足し合わせることで十分な統計量を稼ぐことが良く行われる。しかし、実験によっては、試料の状態が不変と見なして良いか明らかではない場合がある。例えば、超高真空下で試料の熱処理を行い、試料表面に吸着した水などの不純物を除去しても、試料温度が室温に下がって 2 時間程度で試料表面は水で覆われたような状態になってしまう。また、水以外の残留気体分子の影響も時間経過とともに現れてくる。これら表面への吸着物の影響は、どのような測定にも影響を与えるわけではない。しかし、それらの影響がないと思わる測定方法であっても、本当に試料の状態が同一と見なして良いのかどうか判断することが難しいことがある。そのようなケースにおいて、経過時間を教師ラベルとしてデータを多クラス分類させる、あるいは、教師なし学習によってデータをクラスタリングさせることで、測定データが本当に同一測定と見なして良いのかどうか、人間の主観によらない客観的な評価が可能であろう。

8. アドバンスソフトが AI で貢献できること

近年では、当社が長年にわたって事業展開している CAE 分野においても、AI 技術に関連したさまざまな要望が数多く寄せられるようになってきた。そのような状況において、当社では、従来からの科学技術計算ソフトウェアの開発を基礎とした科学技術計算に関するさまざまなソリューションとともに、ディープラーニン

グを中心とした AI 関連サービスを事業展開している。

当社の AI サービスの一部を以下に列挙する。

- AI 導入のコンサルティング
- 深層学習用ツール Advance/iMarcle を用いた受託解析・受託開発
- シミュレーションによる学習 (教師) データ生成
- 第一原理計算ソフトウェア Advance/PHASE を用いたマテリアルズ・インフォマティクス

紙面の都合上、個々の詳細については割愛するが、当社の強みである CAE 技術を基盤とすることで、他社にはできない、当社独自の AI サービスが提供できると考えている。もし AI 技術に関する課題をお持ちであれば、是非とも当社までご相談いただきたい。

9. まとめ

数年後に現在の AI のブームが終わり、AI 分野は何度目かの冬の時代を迎えるに違いない。これは、AI に対する世の中の期待が非常に大きいことに対応している。しかし、それは冬の時代ではなく、現在、研究開発されている技術が確実に実用化される時代であると考えている。当社は AI 技術と CAE 技術の融合を実現し、お客様にその技術・サービスを継続的に提供していきたい。

参考文献

- [1] 杉山将、「統計的機械学習—生成モデルに基づくパターン認識—」、オーム社、2009.
- [2] データサイエンティスト養成読本編集部、「データサイエンティスト養成読本—ビッグデータ時代のビジネスを支えるデータ分析力が身につく！—」、技術評論社、2013.
- [3] 松原聖、「AI モジュールの検証」、第 4 回計算流体力学シンポジウム、p.61、1992.
- [4] 富士総合研究所編、「汎用流体解析システム-FUJI-RLC/ α -FLOW (5 章 AI モジュール)」、

丸善、1993.

- [5] R.Takahashi, K.Matsubara, K.Kato, H.Koike, "Implementation of a Consultative Expert System for Advanced Fluid Dynamic Analysis Code: α -FLOW", ICHMT 2nd International Fourm on Expert Systems and Computer Simulation in Engineering, Univ. of Erlangen, 4.L, 1992.

10. AI 技術セミナー「CAE 分野における AI 技術適用可能性」のご報告

去る 2019 年 10 月 15 日 (火)、当社がこれまで培ってきた CAE 技術に AI 技術を融合し、新たなシミュレーション技術の開拓を目指す試みの一環として、AI 関連技術の過去や現在における取り組みと今後の展望を俯瞰するための AI 技術セミナーを開催した。

本セミナーでは、国立情報学研究所・情報学プリンシプル研究系の宇野毅明教授を招待講演の講師にお迎えして、AI の利用を始める前につかんでおくべき AI やデータ解析に対する基本的な考え方、近年何が進歩したのか、できることは何か、できないことは何か、気をつけるべきことは何か、といったことについてご講演いただいた。



図 21 宇野毅明教授ご講演

また、本セミナーでは、当社の研究顧問である井田喜明東京大学名誉教授から AI を取り入れた地震・火山現象の解析事例についての講演を行うと

ともに、当社の AI 関連サービスの紹介として、主に本原稿の内容を中心とした説明をさせていただきました。

本セミナー当日は、多種多彩な業界から多くの皆様に来場いただき、活発な議論を行っていただいた。この場をお借りして、ご参加いただいた皆様に心より御礼申し上げます。

※ 技術情報誌アドバンスシミュレーションは、アドバンスソフト株式会社ホームページのシミュレーション図書館から、PDF ファイルがダウンロードできます。(ダウンロードしていただくには、アドバンス/シミュレーションフォーラム会員登録が必要です。)