

計算科学ロードマップ

- AI for Science ロードマップについて

第58回 HPCI計画推進委員会 - 令和6年4月17日（水曜日）

東京大学 藤堂 眞治

理化学研究所 佐藤賢斗

計算科学ロードマップ – 概要

● 計算科学ロードマップ

- これまで「今後のHPC技術の研究開発のあり方を検討するWG」(2011-2012)、「将来のHPCIシステムのあり方の調査研究「アプリケーション分野」(2013-2014)、「今後のHPCIを使った計算科学発展のための検討会」(2015/01-2017/06)、「HPCIC計算科学フォーラム」(2017/07-)の活動を通じて、計算科学ロードマップの編纂・公開を行ってきた
 - 2012/03「計算科学ロードマップ白書2012」
 - 2014/03「計算科学ロードマップ2014」
 - 2017/06「計算科学ロードマップ2017」
 - 2023/12「計算科学ロードマップ2023」(第0版)
- 計算科学分野の広がりに合わせて、対象とする分野を拡大してきた
 - 戦略5分野 → 社会科学を追加 → 重点課題10分野+脳科学・人工知能

● 計算科学ロードマップ2023

- 2023/12 第0版公開 <https://cs-forum.github.io/>
- HPCでデータサイエンスをどう取り入れるか、急速に変化する時代に来ている
 - あらゆる分野で人工知能・AIの利用が進んでいる
 - 「脳科学・人工知能」を2つに分け、従来の分野の横串として「人工知能」分野を追加
- 「人工知能」以外の節について2023/12に第0版を公開
 - 「人工知能」に関しては「AI4Scienceロードマップ」として別途執筆・公開の上、「計算科学ロードマップ」にマージ
 - 現在統合作業中

AI for Scienceロードマップ – 概要

- **概要: 科学研究における人工知能の活用**

- 近年、スーパーコンピュータの性能の目覚ましい向上と共に、人工知能（AI）は科学技術の進展とその応用範囲において、世界中で革新的な変革
- この進化は、日本においても、科学研究の多岐にわたる分野での発展の可能性を示唆
- 我々は、AI技術を科学研究に応用し、これらの領域における新たな課題の解決と将来のイノベーションの推進に向けた取り組みをAI for Science ロードマップとして要約
- ロードマップに基づく将来必要とされるスーパーコンピュータのAI計算性能の推定、AIガバナンスに関する課題を明らかにすることで、日本の将来のAIの基礎及び応用研究を強化

- **発起人:**

- 横田 理央 (東京工業大学 教授), 下川辺 隆史 (東京大学 准教授), 近藤 正章 (慶應義塾大学 教授), 藤堂 眞治 (東京大学 教授)
- (理研R-CCS) Mohamed Wahib, 富田 浩文, 佐藤 賢斗, 黒田 明義

- **対象分野: HPCIコンソーシアム計算科学ロードマップに記載の11分野を対象**

- 素粒子・原子核, ナノサイエンス・デバイス, エネルギー・材料, 生命科学, 脳・神経科学, 創薬・医療, 設計・製造, 社会科学, 地震・津波, 気象・気候, 宇宙・天文

- **執筆者: 59人 (発起人 8人含む)**

- HPCI 課題からAIなどのキーワード検索から抽出した研究者
- HPCIC 計算科学ロードマップの各分野の執筆者
- 2023年度 富岳創出加速プログラム PI
- RIKEN R-CCS

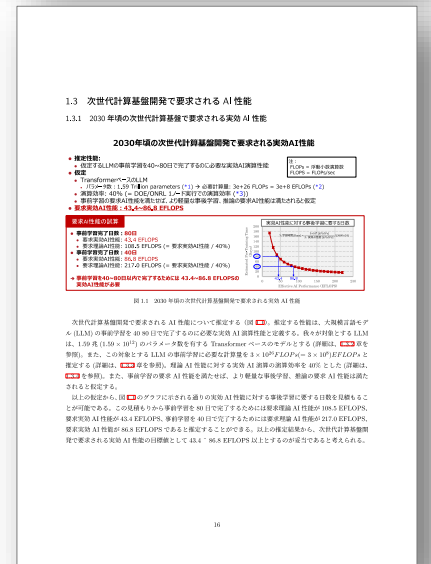
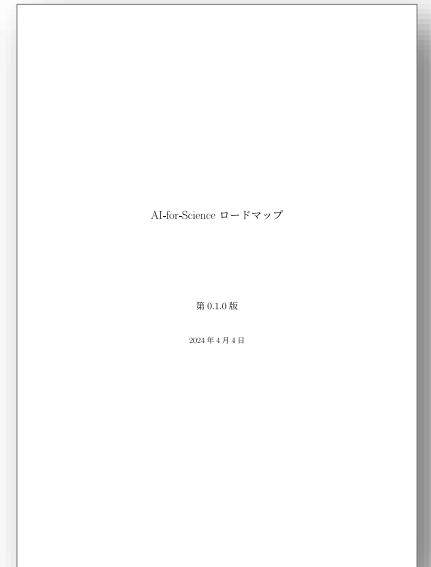
計算科学ロードマップ: アウトラインと各分野の取りまとめ役

● アウトライン

- 第1章 序論
- 第2章 各計算科学分野の課題
 - 2.1 素粒子・原子核 ~ 2.12 人工知能, 2.13 計算機要求性能まとめ
 - (加筆部分) 2.12 人工知能の節にAI for Science ロードマップの要約版を加筆。
→ 各分野のロードマップの要約、2023年頃の要求AI計算性能、AIガバナンス
- 第3章 アプリケーションの分類
- 第4章 各課題の詳細
- 第5章 各課題の詳細: AI for Science - 科学研究における人工知能の活用
 - (加筆部分) 5.1 素粒子・原子核 ~ 5.11 宇宙・天文の節に各分野の詳細なロードマップを加筆

● 各分野の取りまとめ

- (1) 素粒子・原子核: 野村 悠祐 (慶應義塾大学 准教授)
- (2) ナノサイエンス・デバイス: 松下 雄一郎 (東京工業大学 特任准教授)
- (3) エネルギー・資源: 中嶋 隆人 (R-CCS TL)
- (4) 生命科学: 杉田 有治 (R-CCS TL)、松永 康佑 (埼玉大学 准教授)
- (8) 脳・神経科学: 五十嵐 潤 (R-CCS 上級研究員)
- (5) 創薬・医療: 本間 光貴 (R-CCS 副部門長)、池田 和由 (R-CCS 上級研究員)
- (6) 設計・製造: 安藤 和人 (R-CCS 上級テクニカルスタッフ)
- (7) 社会科学: (執筆者不在のため未選出)
- (9) 地震・津波: 堀 高峰 (JAMSTEC センター長)
- (10) 気象・気候: 中野 満寿男 (JAMSTEC 副主任研究員)
- (11) 宇宙・天文: 宮武 広直 (名古屋大学 准教授)



各科学分野におけるAIの活用領域の拡大

2. ナノサイエンス・デバイス

- 材料研究におけるAI活用:機械学習ポテンシャル分子動力学
- データ科学と分光実験の融合による材料解析フローの構築
- 量子コンピュータを用いた機械学習モデル構築と物性計算への展開
- 新材料開発におけるAI活用
- データ駆動型アプローチによる強相関量子物質の解析
- 量子多体問題の数値解法とその活用
- 実験データの統合解析
- 非晶物質ダイナミクスへのAI活用-GNNから生成モデリングへ

3. エネルギー・資源

- シミュレーションとインフォマティクスによる材料設計と材料探索
- 機械学習ポテンシャルを用いた分子系の高精度分子動力学シミュレーション
- 人工ニューラルネットワークによる量子多体系の記述
- ハイパフォーマンス・コンピューティングと人工知能が加速する量子化学

4. 素粒子・原子核

- 核子多体系の構造・反応計算
- 人工ニューラルネットワークを用いた量子多体問題の解析

5. 生命科学

- 機械学習に基づく生体分子の立体構造解析
- 機械学習を用いた生体分子の反応座標探索
- 「世界モデル」を組み込んだ強化学習による医学・生物学研究の遂行
- フラグメント分子軌道計算とAI/データ科学
- 差分シミュレーションを用いた分子動力学力場の最適化
- AIを用いた粗視化分子動力学(CGMD)の力場開発
- 機械学習ポテンシャルの発展と展望
- 生体高分子ダイナミクスを記述するための次元削減
- VAEを拡張したタンパク質ダイナミクスの表現学習

6. 創薬・医療

- 医療における言語モデルとマルチモーダル基盤モデル
- タンパク言語モデルの現状と課題
- ゲノム配列を扱う大規模言語モデル
- 遺伝子発現データのための基盤モデル
- 生成モデルによる分子設計
- 化合物-タンパク相互作用予測
- タンパク質立体構造予測
- 医療におけるAIの説明可能性と介入シミュレーション

7. 設計・製造

- CNN-AEによる流れの特徴抽出とその応用
- 3D 生成 AI の構造最適設計への応用

8. 社会科学 (2024年度以降に執筆予定)

9. 脳科学・人工知能

- 神経科学とAI技法 そして大規模詳細神経回路シミュレーション

10. 地震・津波

- 地震学の逆問題における PINN の活用事例と大規模問題への適用可能性
- データサイエンス的手法による大規模シミュレーションの高速化

11. 気象・気候

- サロゲートモデルリング: 雲微物理過程へのAIの適用、重力波パラメタリゼーション、Navier-Stokes乱流に対するRC学習
- 気象への応用: 全球数値気象モデル (GCM) エミュレーション、AI データ同化融合・降水ナウキャスト、リザーバー計算・気象予測への応用
- データセット・モデル共有・相互比較・分析のためのプラットフォーム

12. 宇宙・天文

- 深層学習による高エネルギー天体现象の研究
- 天文ビッグデータからの宇宙論的情報の抽出

AI for Science ロードマップでのニーズ事例（一部を抜粋）

【エネルギー・資源】AIによる量子化学ソフトウェア開発および実験の加速（例1）

研究背景: 量子化学による新材料の発見

量子化学計算によって得られたビッグデータを分析することによって、より高性能・高機能な新しい分子や材料の発見に役立つ。

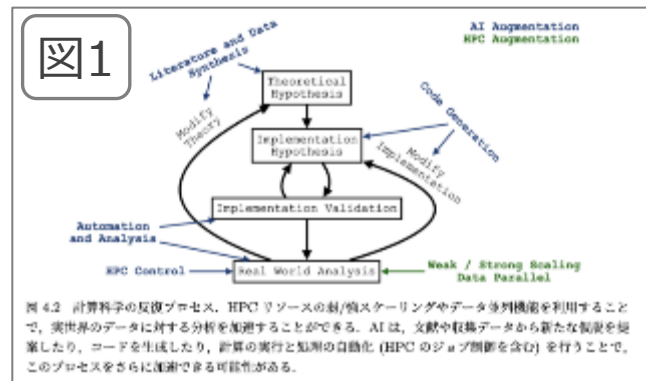
AI4S ロードマップ: AIによる開発・実験の加速（図1）

基盤モデルと計算科学: 新しい量子化学方法論の開発や新材料の設計・探索に基盤モデルを統合し、作業を加速。

AIの活用: 既存の文献やデータに基づき、量子化の理論やコードの革新的な最良案を提案し、開発時間を短縮。

インタラクティブな開発プロセス: AIを使用して計算実験を実行し、量子化学データ抽出を行うインタラクティブなプロセスの構築。

量子化学計算においてAIを活用することで新材料の発見を加速



【設計・製造】3D形状生成AIの構造最適設計への応用（例2）

研究背景: 構造の形状や寸法、材料の最適化

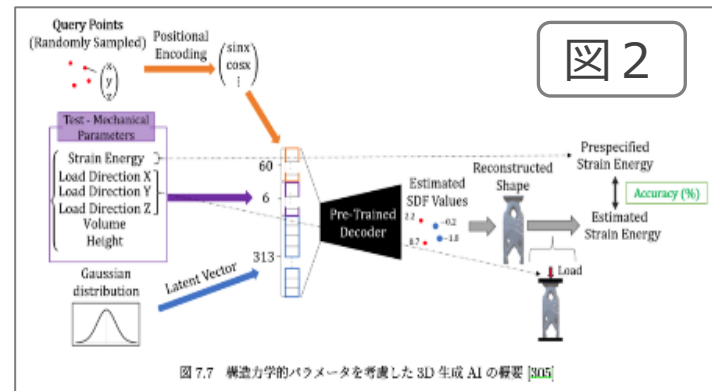
航空宇宙、自動車、建築、機械などのさまざまな工学分野に応用可能。2022年以降に急速に発展している3D生成AIを用いたデータ駆動のアプローチが期待されている。

AI4S ロードマップ: 3D形状生成AIによる構造最適化技術の確立

より複雑な3D形状データセットの作成: 数百万要素から数億要素メッシュの解析が必要。

大規模言語モデルと3D形状生成AIの統合: 構造に対する要件を言語入力とする大規模言語モデルを用いた3D形状パラメータ制御（図2）と、生成された3D形状の自然言語理解の研究が必要。

大規模言語モデルと3D形状生成AIによる構造最適設計の「民主化」



【設計・製造】AIによる流れの特徴抽出とそのものづくりへの応用（例3）

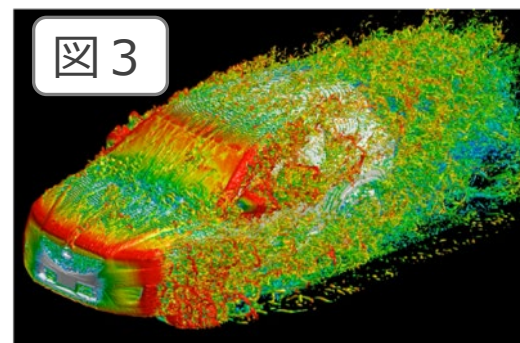
研究背景: モード分解による流れ場の特徴抽出

流れの制御技術は、流動抵抗や騒音の低減、熱伝達や混合の促進を通じて、あらゆるものづくり産業の省エネルギー化・低環境負荷化を実現。

AI4S ロードマップ: 自動車形状周辺の高レイノルズ数の乱流の再現（図3）

設計・製造の現場で行われる自動車形状周辺の高レイノルズ数の乱流シミュレーションの再現に適用する場合、並列計算機上での大規模分散学習が必要なため、より実効AI性能が高い計算機が必要となる。

高い実効AI性能により詳細なシミュレーションが可能となりものづくり産業において高省エネルギー化を実現



将来のLLMパラメータ数の推定

- 仮定：2016年~2022年と同様のペースで必要計算量/パラメータ数が増加すると仮定
- 将来のLLMパラメータ数の予想
 - 2028年頃: 9.0×10^{25} FLOPs (グラフより) \rightarrow 0.85 Trillion parameters (式3より)
 - 2029年頃: 1.5×10^{26} FLOPs (グラフより) \rightarrow 1.10 Trillion parameters (式3より)
 - 2030年頃: 3.0×10^{26} FLOPs (グラフより) \rightarrow 1.59 Trillion parameters (式3より)

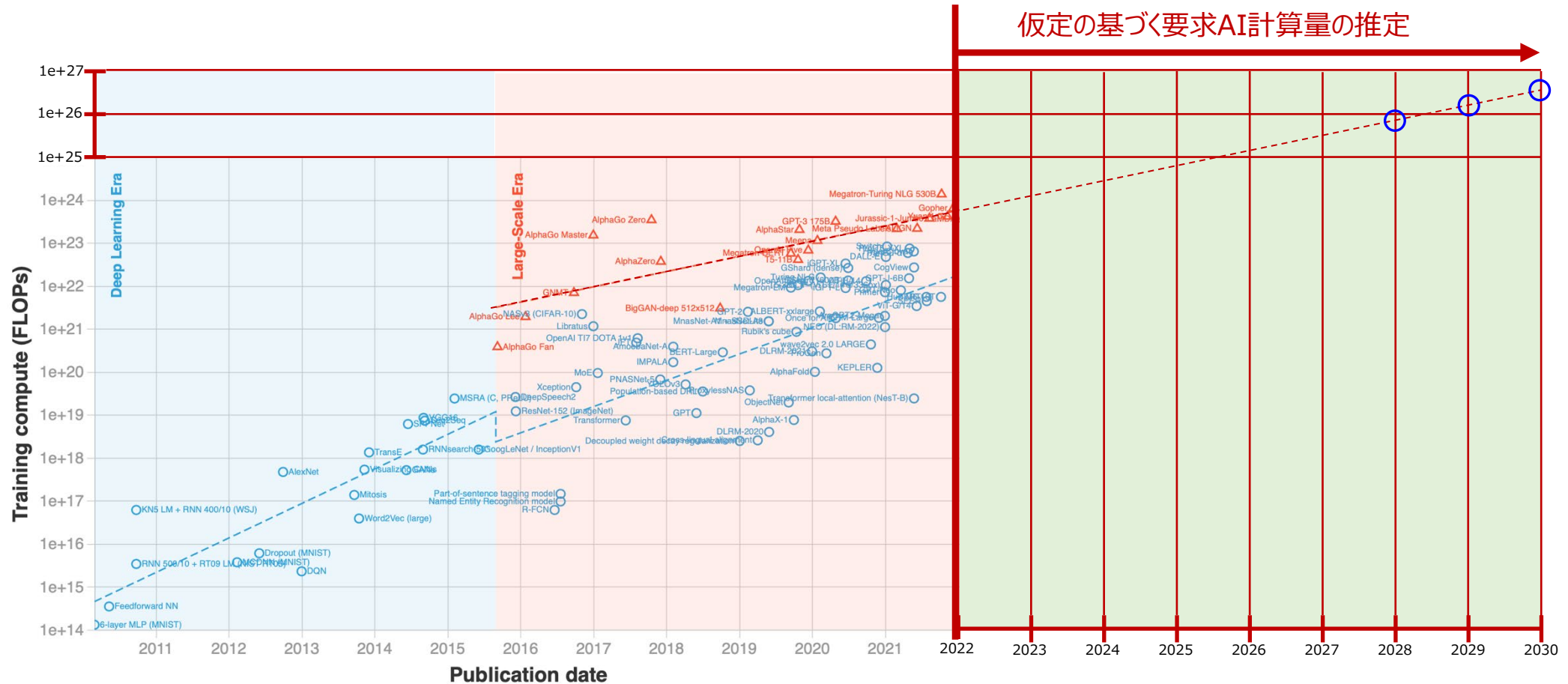


Figure 3: Trends in training compute of n 102 milestone ML systems between 2010 and 2022. Notice the emergence of a possible new trend of large-scale models around 2016. The trend in the remaining models stays the same before and after 2016.

Source: arXiv:2202.05924v2 [cs.LG] 9 Mar 2022

2030年頃の次世代計算基盤開発で要求されるAI性能 (実効AI性能: 43.4~86.8 EFLOPS)

● 推定性能:

- 仮定するLLMの事前学習を40~80日で完了するのに必要な実効AI演算性能

● 仮定

- TransformerベースのLLM
 - パラメータ数: 1.59 Trillion parameters (*1) → 必要計算量: $3e+26$ FLOPs = $3e+8$ EFLOPs (*2)
 - 演算効率: 40% (= DOE/ORNL 1ノード実行での演算効率 (*3))
 - 事前学習の要求AI性能を満たせば、より軽量な事後学習、推論の要求AI性能は満たされると仮定

注:

FLOPs = 浮動小数演算数

FLOPS = FLOPs/sec

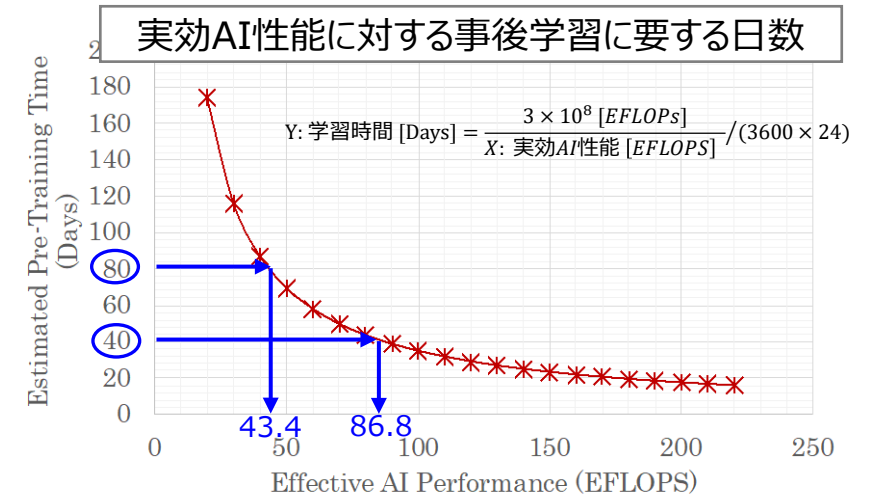
要求AI性能の試算

● 事前学習完了日数: 80日

- 要求実効AI性能: 43.4 EFLOPS
- 要求理論AI性能: 108.5 EFLOPS (= 要求実効AI性能 / 40%)

● 事前学習完了日数: 40日

- 要求実効AI性能: 86.8 EFLOPS
- 要求理論AI性能: 217.0 EFLOPS (= 要求実効AI性能 / 40%)



1.59 兆パラメータのLLMの事前学習を40~80日以内で完了するためには
43.4~86.8 EFLOPSの実効AI性能が必要

*1: スライド「将来のLLMパラメータ数の予測」を参照, *2: スライド「必要計算量(FLOPs)の推定」を参照, *3: スライド「DOE/ANL Aurora&Polarisにおける学習時間の推定に用いた演算効率」や「DOE/ORNL Frontierでの演算効率」を参照

AIガバナンスについて

- **AI技術による革新的な研究成果**

- このように、AIの急速な発展は科学の様々な分野で革新的な研究成果を生み出すと期待

- **AI技術利用によるリスク**

- AI技術の進歩は人類にとって大きな恩恵をもたらす一方で新たな課題もひこ、ハルシネーション、プライバシー侵害、セキュリティリスクなど、新たな課題も生じる可能性

- **AIガバナンス*の必要性**

- これらの課題に対処するため、効果的なAIガバナンスの枠組みの確立が急務
 - * AIガバナンスとは、AI技術の開発と利用を適正に管理・監督するための方針やルール、メカニズムの総称。AIの倫理的な使用を保証するガイドラインの策定、AIによって生じるリスクの評価と管理、そしてAI技術の利用に関する透明性と説明責任の確保などが含まれる。
- AI技術の急速な発展に伴い、ガバナンスメカニズムを策定し、実施することは容易ではなく、国際標準や公平性等、いくつかの課題がある。

AIの持つ潜在的なリスクを科学者自身が理解・管理しながら、AI活用による科学への貢献を最大化するためのバランスを見つけることが、AIガバナンスでは求められる。

参考資料①

必要計算量(FLOPs)の推定 [1]

● スケーリング則

- LLMの学習において、 C FLOPs回の演算が可能な場合に、学習可能な最大のモデルサイズ(パラメータ数: N_{opt})と最低限必要な学習データ(トークン数: D_{opt})に以下の関係が成り立つ。

$$N_{opt} = A \times C^a$$

$$D_{opt} = B \times C^b$$

● a, b, A, B の推定

- 文献[1](Table 2)の調査では, a, b の値は共に約0.5と推定
- 文献[1](Table 3)の値から $A = 9 \times 10^{-2}$ と $B = 1.85$ とする

Table 2 | Estimated parameter and data scaling with increased training compute. The listed values are the exponents, a and b , on the relationship $N_{opt} \propto C^a$ and $D_{opt} \propto C^b$. Our analysis suggests a near equal scaling in parameters and data with increasing compute which is in clear contrast to previous work on the scaling of large models. The 10th and 90th percentiles are estimated via bootstrapping data (80% of the dataset is sampled 100 times) and are shown in parenthesis.

Approach	Coeff. a where $N_{opt} \propto C^a$	Coeff. b where $D_{opt} \propto C^b$
1. Minimum over training curves	0.50 (0.488, 0.502)	0.50 (0.501, 0.512)
2. IsoFLOP profiles	0.49 (0.462, 0.534)	0.51 (0.483, 0.529)
3. Parametric modelling of the loss	0.46 (0.454, 0.455)	0.54 (0.542, 0.543)
Kaplan et al. (2020)	0.73	0.27

● モデルサイズが N の LLM の学習に必要な計算量 (C_{req}) とトークン数 (D_{req}) の関係、およびスケーリング則の算出式

$$\text{式1} \quad C_{req} = \left(\frac{N}{A}\right)^{\frac{1}{a}} = \left(\frac{N}{9 \times 10^{-2}}\right)^2$$

$$\text{式2} \quad D_{req} = B \times \left(\frac{N}{A}\right)^{\frac{b}{a}} = \frac{185}{9} \times N = 20.56 \times N$$

→ 1パラメータあたり約20トークンの学習が必要

$$\text{式3} \quad N_{opt} = A \times C^a = 0.09 \times \sqrt{C}$$

$$\text{式4} \quad D_{opt} = B \times C^b = 1.85 \times \sqrt{C}$$

Table 3 | Estimated optimal training FLOPs and training tokens for various model sizes. For various model sizes, we show the projections from Approach 1 of how many FLOPs and training tokens would be needed to train compute-optimal models. The estimates for Approach 2 & 3 are similar (shown in Section D.3)

Parameters	FLOPs	FLOPs (in Gopher unit)	Tokens
400 Million	1.92e+19	1/29,968	8.0 Billion
1 Billion	1.21e+20	1/4,761	20.2 Billion
10 Billion	1.23e+22	1/46	205.1 Billion
67 Billion	5.76e+23	1	1.5 Trillion
175 Billion	3.85e+24	6.7	3.7 Trillion
280 Billion	9.90e+24	17.2	5.9 Trillion
520 Billion	3.43e+25	59.5	11.0 Trillion
1 Trillion	1.27e+26	221.3	21.2 Trillion
10 Trillion	1.30e+28	22515.9	216.2 Trillion

● C_{req} の算出の例

- 1 Trillion parameters ($N=1 \times 10^{12}$): $C_{req} = 1.23 \times 10^{26}$ FLOPs ($\doteq 1.27 \times 10^{26}$ in Table 3)
- 2 Trillion parameters ($N=2 \times 10^{12}$): $C_{req} = 4.94 \times 10^{26}$ FLOPs
- 4 Trillion parameters ($N=4 \times 10^{12}$): $C_{req} = 1.98 \times 10^{27}$ FLOPs
- 10 Trillion parameters ($N=10 \times 10^{12}$): $C_{req} = 1.23 \times 10^{28}$ FLOPs ($\doteq 1.30 \times 10^{26}$ in Table 3)

DOE/ANL Aurora&Polarisにおける学習時間の推定に用いた演算効率

- ANLでのLLMモデル学習時間の推定に用いた **40%** を演算効率として使用

60K GPUs 2K GPUs

Training Models on Aurora/Polaris

AuroraGPT set of models (1.5B, 7B, 13B, 70B, 200B, 1T, ...)

Aurora BFP16 HGEMM ~ 180 TF per tile x (127,488 tiles) ⇒ 22.9 EF/s

Model Size (# of Parameters in Billions)	Training Tokens (Trillions)	Training F/P/T	Total Training Compute (Flops in BF16)	Total Training Compute (EF-days)	Aurora Time (Days)	Aurora Time (Hours)	Polaris Time (Days)	Polaris Time (Hours)
1.5	1	6	9E+21	0.10	0.01	0.25	1	36
1.5	2	6	1.8E+22	0.21	0.02	0.49	3	71
1.5	3	6	2.7E+22	0.31	0.03	0.74	4	107
7	1	6	4.2E+22	0.49	0.05	1.14	7	167
7	2	6	8.4E+22	0.97	0.10	2.29	14	333
7	3	6	1.26E+23	1.46	0.14	3.43	21	500
70	2	6	8.4E+23	9.72	0.95	22.88	139	3,333
70	3	6	1.26E+24	14.58	1.43	34.31	208	5,000
70	4	6	1.68E+24	19.44	1.91	45.75	278	6,667
200	6	6	7.2E+24	83.33	8.17	196.08	1,190	28,571
200	10	6	1.2E+25	138.89	13.62	326.80	1,984	47,619
200	15	6	1.8E+25	208.33	20.42	490.20	2,976	71,429
1000	10	6	6E+25	694.44	68.08	1633.99	9,921	238,095
1000	20	6	1.2E+26	1388.89	136.17	3267.97	19,841	476,190
1000	30	6	1.8E+26	2083.33	204.25	4901.96	29,762	714,286

We assume about **40%** efficiency for LLM BFP16 flops utilization relative to HGEMM measurements

Slide courtesy: Rick Steven at the TPC (Trillion parameter consortium) workshop, Feb., 2024

DOE/ORNL Frontierでの演算効率 [1]

- Training performance in 1 GCD (= 191.5 TFLOPS) in the sentence
 - 1.76B: 77 TFLOPS per GCD (**Efficiency: 40.2%**)
- Training performance in 385 GCDs (= 73.7 PFLOPS) in Figure 6
 - FORGE-S (1.44B): 63 TFLOPS per GCD (Efficiency: 32.6%)
 - FORGE-M (13B): 63 TFLOPS per GCD (Efficiency: 32.6%)
- Training performance in 1,024 GCDs (= 196.1 PFLOPS) in Figure 9
 - FORGE-S (1.44B): Projected 60 PFLOPS (Efficiency: 30.6%)
 - FORGE-M (13B): 47 PFLOPS (Efficiency: 24.0%)
 - FORGE-L (25.6B): Projected 42 PFLOPS (Efficiency: 21.4%)
 - 175B: 32 PFLOPS (Efficiency: 16.3%)

→ 将来AI向けハードウェア、ソフトウェア、アルゴリズムの高度化により演算効率が大規模モデル&大規模実行において 40% となると仮定

Note that on a single device (1 GCD), the performance will be higher, and about 77 TFLOPS is obtained for a 1.76B parameter model of similar architecture as FORGE-S (the difference is that the hidden size is increased to 2304). This indicates that it is possible to achieve around $U=40\%$ of the MI250X peak performance for this model.

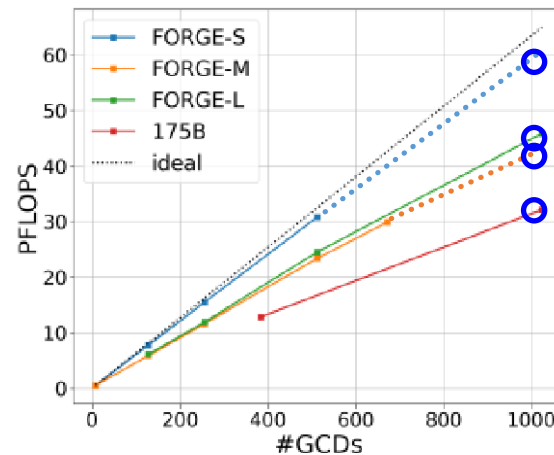


Figure 9: Scalability of training FORGE models and 175B parameters up to 2048 GCDs on Frontier. (left) aggregated performance in PFLOPS. (right) TFLOPS-per-GCD and time for training FORGE-S1 with a batch size of 16.8M. The per GCD batch size is adjusted accordingly.

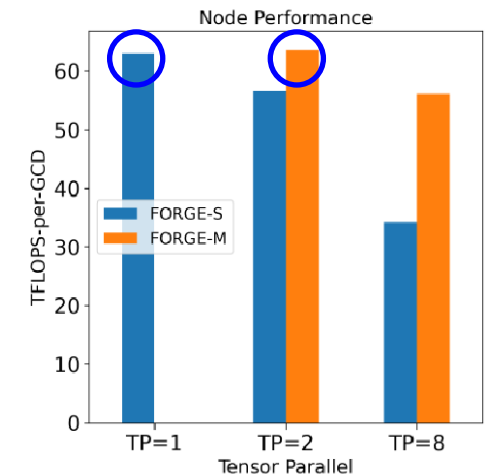


Figure 6: Assessing computation performance (TFLOPS-per-GCD) by training FORGE-S and FORGE-M at different tensor parallel (TP) levels on a single node, and training GPT-175B on 385 GCDs with various parallelism techniques (TP, PP, DP).

参考資料②

AI for Scienceロードマップ 詳細のまとめ (一部)

執筆者一覧 (AI for Science 部)

全体取りまとめ		
佐藤 賢斗	理化学研究所 計算科学研究センター	チームリーダー
横田 理央	東京工業大学 学術国際情報センター	教授
下川辺 隆史	東京大学 情報基盤センター	准教授
Mohamed Wahib	理化学研究所 計算科学研究センター	チームリーダー
近藤 正章	慶應義塾大学 理工学部	教授
黒田 明義	理化学研究所 計算科学研究センター	技師
素粒子・原子核		
取りまとめ		
野村 悠祐	慶應義塾大学 理工学部	准教授
執筆者		
野村 悠祐	慶應義塾大学 理工学部	准教授
吉田 聡太	宇都宮大学 大学教育推進機構 基盤教育センター	助教
ナノサイエンス・デバイス		
取りまとめ		
松下 雄一郎	東京工業大学 科学技術創成研究院 フロンティア材料研究所	特任准教授
執筆者		
今田 正俊	早稲田大学 理工学術院総合研究所	研究員教授
井戸 康太	東京大学 物性研究所	助教
大窪 貴洋	千葉大学大学院 工学研究院	准教授
奥野 幸洋	富士フイルム株式会社 解析技術センター	主席研究員
芝 隼人	兵庫県立大学大学院 情報科学研究科	准教授
田村 亮	物質・材料研究機構	チームリーダー
星 健夫	自然科学研究機構 核融合科学研究所	教授
松下 雄一郎	東京工業大学 科学技術創成研究院	特任准教授
エネルギー・材料		
取りまとめ		
中嶋 隆人	理化学研究所 計算科学研究センター	チームリーダー
執筆者		
中嶋 隆人	理化学研究所 計算科学研究センター	チームリーダー
藤本 和士	関西大学 化学生命工学部 化学・物質工学科	准教授
山地 洋平	物質・材料研究機構	グループリーダー
William Dawson	理化学研究所 計算科学研究センター	研究員

生命科学		
取りまとめ		
杉田 有治	理化学研究所 計算科学研究センター	チームリーダー
松永 康佑	埼玉大学大学院 理工学研究科	准教授
執筆者		
大出 真央	大阪大学 蛋白質研究所	助教
清田 純	理化学研究所 情報統合本部	チームリーダー
杉田 有治	理化学研究所 計算科学研究センター	チームリーダー
田中 成典	神戸大学大学院 システム情報学研究科	教授
松永 康佑	埼玉大学大学院 理工学研究科	准教授
望月 祐志	立教大学 理学部 化学科	教授
森 俊文	九州大学 先端物質化学研究所	准教授
森 貴治	東京理科大学 理学部第一部 化学科	准教授
八木 清	理化学研究所 開拓研究本部	専任研究員
Diego Ugarte La Torre	理化学研究所 計算科学研究センター	特別研究員
Jaewoon Jung	理化学研究所 開拓研究本部	専任技師
Yaokun Lei	理化学研究所 数理創造プログラム	研究員
脳・神経科学		
取りまとめ		
五十嵐 潤	理化学研究所 計算科学研究センター	上級研究員
執筆者		
五十嵐 潤	理化学研究所 計算科学研究センター	上級研究員
加沢 知毅	東京大学 先端科学技術研究センター	特任研究員
創薬・医療		
取りまとめ		
本間 光貴	理化学研究所 生命機能科学研究センター	チームリーダー
池田 和由	理化学研究所 計算科学研究センター	上級研究員
執筆者		
池田 和由	理化学研究所 計算科学研究センター	上級研究員
奥野 恭史	京都大学大学院 医学研究科	教授
小島 諒介	京都大学 医学研究科	講師
寺山 慧	横浜市立大学 理学部理学科 生命医科学研究科	准教授
本間 光貴	理化学研究所 生命機能科学研究センター	チームリーダー

設計・製造		
取りまとめ		
安藤 和人	理化学研究所 計算科学研究センター	上級テクニカルスタッフ
執筆者		
安藤 和人	理化学研究所 計算科学研究センター	上級テクニカルスタッフ
西口 浩司	名古屋大学大学院工学研究科	准教授
深淵 康二	慶應義塾大学 理工学部	教授
社会科学		
地震・津波		
取りまとめ		
堀 高峰	海洋研究開発機構	センター長
執筆者		
縣 亮一郎	海洋研究開発機構	研究員
市村 強	東京大学 地震研究所 附属巨大地震津波災害予測研究センター	教授
平原 和朗	理化学研究所 革新知能統合研究センター	嘱託職員
堀 高峰	海洋研究開発機構	センター長
気象・気候		
取りまとめ		
中野 満寿男	海洋研究開発機構	副主任研究員
執筆者		
荒川 隆	東京大学 情報基盤センター/株式会社 CliMTech	客員研究員/代表取締役
大塚 成徳	理化学研究所 計算科学研究センター	研究員
澤田 洋平	東京大学 大学院工学系研究科	准教授
中野 満寿男	海洋研究開発機構	副主任研究員
本田 匠	北海道大学大学院理学研究院	特任助教
松岡 大祐	海洋研究開発機構	グループリーダー
三好 建正	理化学研究所 計算科学研究センター	チームリーダー
八代 尚	国立環境研究所	主任研究員
米田 剛	一橋大学 大学院経済学研究科	教授
宇宙・天文		
取りまとめ		
宮武 広直	名古屋大学 素粒子宇宙起源研究所	准教授
執筆者		
大里 健	千葉大学 先進科学センター	助教
西道 啓博	京都産業大学 理学部 宇宙物理・気象学科	准教授
宮武 広直	名古屋大学 素粒子宇宙起源研究所	准教授
森脇 可奈	東京大学大学院 理学系研究科 附属ビッグバン宇宙国際研究センター	助教

【エネルギー・資源】 AIによる量子化学ソフトウェア開発および実験の加速

● 研究背景: 量子化学による新材料の発見

- 量子化学は、電子の挙動や結合の性質、化学反応のメカニズムなど、微視的な視点から化学現象を解き明かす学問で、主に実験的には測定が困難な物質の特性をシミュレーションによって検証
- 量子化学計算によって得られたビッグデータを分析することによって、より高性能・高機能な新しい分子や材料の発見に役立つ
- しかし、実験サイクルに膨大な時間を要するため開発・実験の加速が課題となる
 - 実験サイクル：新規コードの記述 → 計算実験の設定と実行 → パフォーマンスと精度向上のためのデータ分析 → 新しい仮説の策定 → 新規コード記述 → …

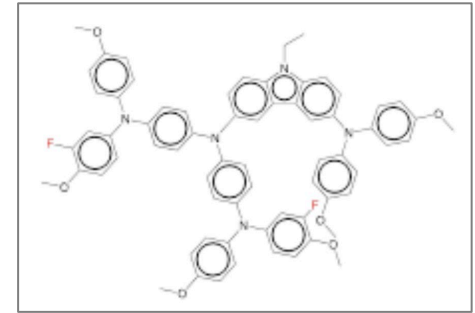
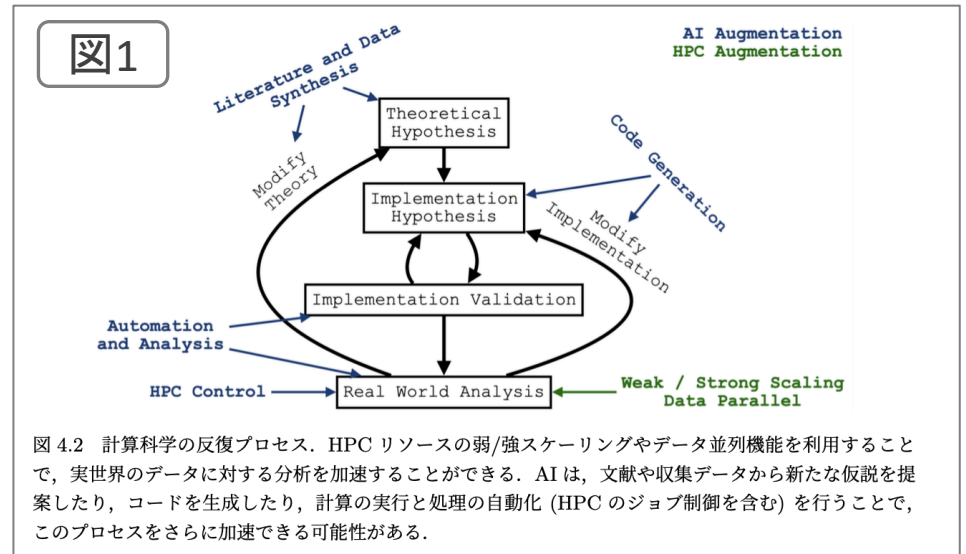


図4.1：新規正孔輸送材料の候補化合物

● AI4S ロードマップ: AIによる開発・実験の加速 (図1)

- **基盤モデルと計算科学**: 新しい量子化学方法論の開発や新材料の設計・探索に基盤モデルを統合し、作業を加速。
- **AIの活用**: 既存の文献やデータに基づき、量子化学の理論やコードの革新的な最良案を提案し、開発時間を短縮。また、既存実験データを量子化学データで補完したAIで新材料探索を加速。
- **インタラクティブな開発プロセス**: AIを使用して計算実験を実行し、量子化学データ抽出を行うインタラクティブなプロセスの構築。

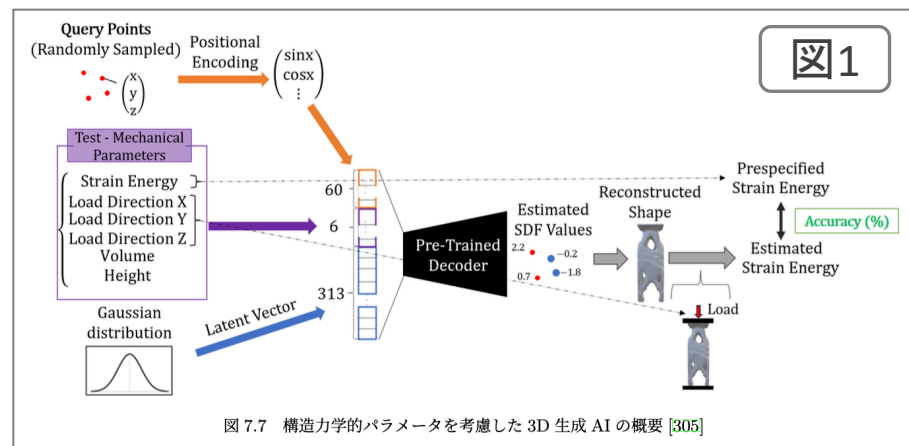


量子化学計算においてAIを活用することで新材料の発見を加速

【設計・製造】3D形状生成AIの構造最適設計への応用

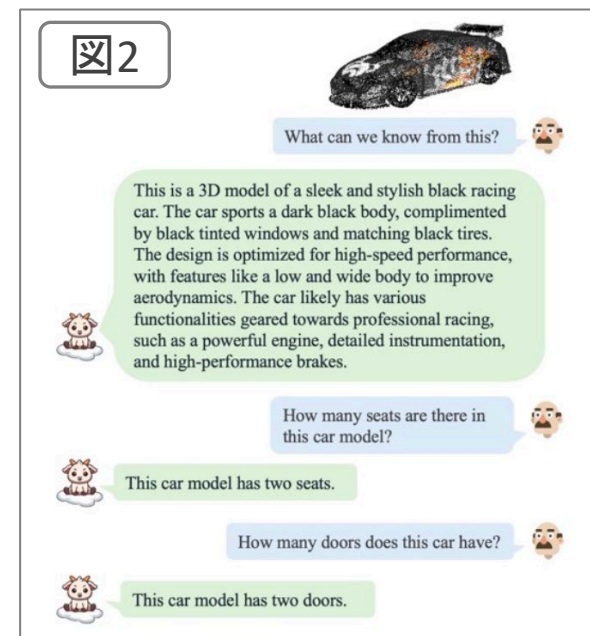
● 研究背景: 構造の形状や寸法、材料の最適化

- 構造最適化とは、ある目的関数を最大化または最小化するように、構造の形状や寸法、材料などの設計変数を決定する手法
- 航空宇宙、自動車、建築、機械などのさまざまな工学分野に応用
- これまで、自動車の衝突問題のように非線形性の強い現象に対する構造トポロジー最適化手法は確立されていなかったが、2022年以降に急速に発展している3D生成AIを用いたデータ駆動のアプローチが期待されている。



● AI4S ロードマップ: 3D形状生成AIによる構造最適化技術の確立

- より複雑な3D形状データセットの作成: 既往研究では約6667ケースの構造解析において1ケースあたり約100万要素のメッシュの構造解析に留まるため、より高度な3D形状に対応するため数百万要素から数億要素メッシュの解析が必要。
- 大規模言語モデルと3D形状生成AIの統合: 非専門家でも力学的に正しい3D生成を行えるようにするため、構造に対する要件を言語入力とする大規模言語モデルを用いた3D形状パラメータ制御 (図1) と、生成された3D形状の自然言語理解 (図2) の研究が必要。

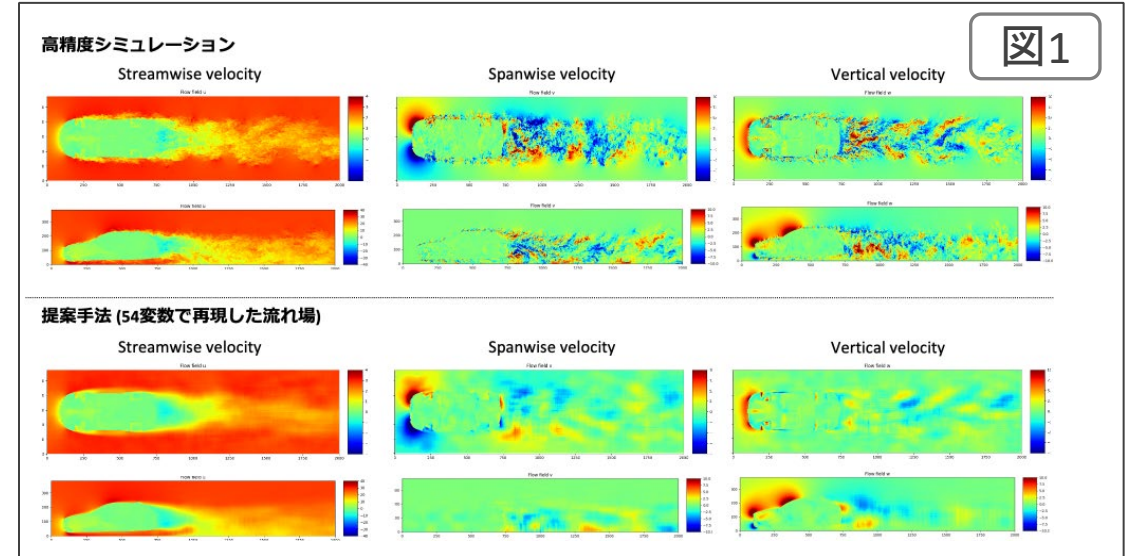


大規模言語モデルと3D形状生成AIによる構造最適設計の「民主化」

【設計・製造】AIによる流れの特徴抽出とそのものづくりへの応用

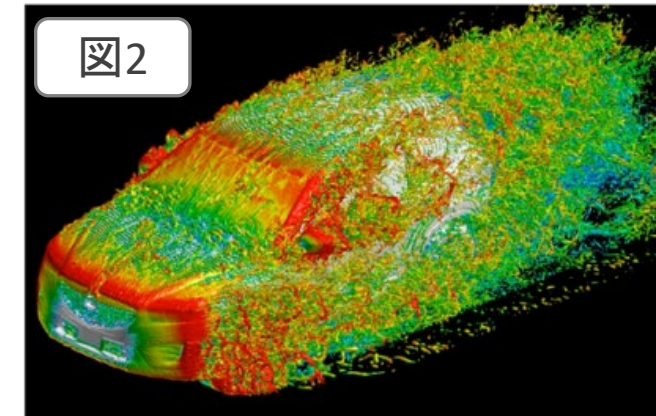
● 研究背景: モード分解による流れ場の特徴抽出

- モード分解とは、流れ場をモードと呼ばれる物理的に重要な流れ構造に分解するための手法で、複雑な流体現象を説明
- 流れの制御技術は、流動抵抗や騒音の低減、熱伝達や混合の促進を通じて、あらゆるものづくり産業の省エネルギー化・低環境負荷化を実現
- AIを活用することで高速に3D形状のモード分解を高速に実行 (図1)



● AI4S ロードマップ: 自動車形状周辺の高レイノルズ数の乱流の再現 (図2)

- 設計・製造の現場で行われる自動車形状周辺の高レイノルズ数の乱流シミュレーションの再現に適用する場合、並列計算機上での大規模分散学習が必要
- 乱流場は本性的に多数のモードを含んでおり、それらの学習には膨大なネットワークパラメータを必要とする。そのため誤差関数の収束までにかかる学習の計算コストは膨大
- レイノルズ数の乱流場において発生する空間的スケールの小さな渦を解像するためには膨大な格子数のシミュレーションを行う必要があり、これを学習データとして扱う際には膨大なメモリが必要
- このため、より実効AI性能が高い計算機が必要となる。



高い実効AI性能によりものづくり産業において更なる省エネルギー化を実現

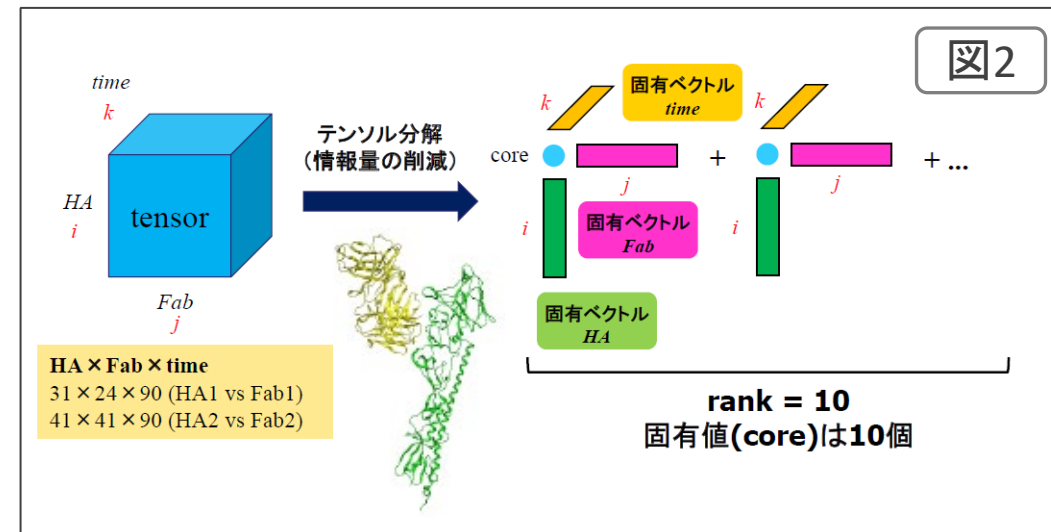
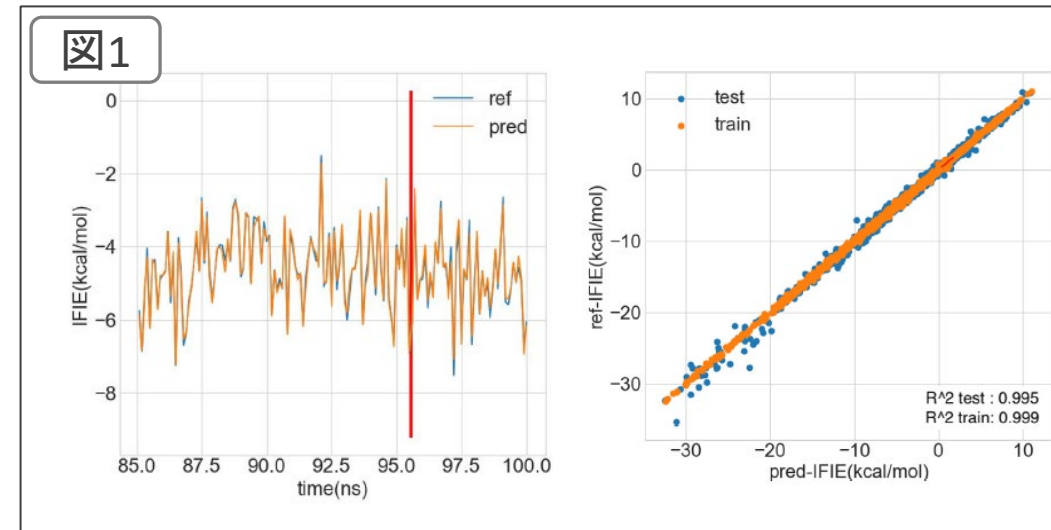
【生命科学】FMO計算とAIの融合による高速化と解析の自動化

● 研究背景: FMO法による創薬の加速

- FMO法はタンパク質などの生体高分子の電子状態計算を可能とし、GPU等の高度なHPC技術により高速高精度計算が達成される。
- 例えばインシリコ創薬で必要となる化合物-タンパク質あるいはタンパク質間の相互作用情報をIFIE（フラグメント間相互作用エネルギー）という形で精確に提供できる。
- 生体分子の構造ゆらぎを考慮した解析が必要なため、MD法との接続や膨大な出力データからの情報抽出にAIの活用が望まれる。

● AI4S ロードマップ: AIによるFMO解析の加速・高度化

- 計算系技術要素：①積分計算のGPU処理による高速化、②大規模ジョブの自動処理、③粗視化シミュレーションとの接続
- AI系技術要素：①NNやDL等による機械学習(サロゲート化含む)、②SVD/CPDなどのテンソル分解、③IFIEからの情報抽出やその予測、MD力場の構築など、④インシリコ創薬の高度化。
- 図1：MD構造の変化に伴う化合物-残基間相互作用（IFIE）の機械学習による予測。図2：時間変化するインフルエンザウイルス抗原抗体間IFIEのテンソル分解（CP分解）による情報圧縮。



FMO計算においてAIを活用することでインシリコ創薬を加速

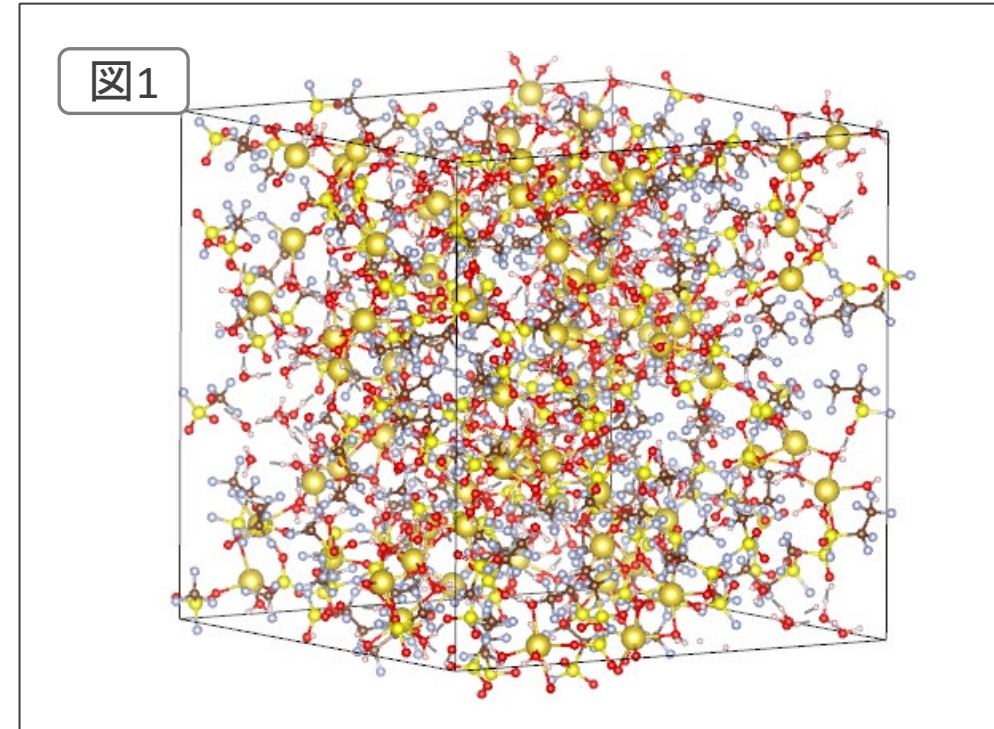
【ナノサイエンス・デバイス】機械学習ポテンシャル分子動力学計算

● 研究背景: 分子動力学計算による材料開発

- 分子動力学計算は、実験では観測しにくい現象を可視化し、材料開発の現場では日常のツールである。
- 複雑な分子の挙動から、分子動力学計算によって得られた結果を分析し、機構解析を行うことで新たな知見を得、材料開発のガイディングプリンシプルを示すために非常に有益である。
- しかし、分子動力学計算の結果は、原子間の相互作用を規定する力場パラメータに依存し、素材の微妙な違いがもたらす物性の定量性が問題になる場合が多い企業での材料開発では、その信頼性が問題になることが多い。

● AI4S ロードマップ: AI活用による分子動力学計算の高精度化

- 第一原理計算などより高精度な計算結果を教師データとし、その結果を学習することで高精度な分子動力学計算用力場を構築。
- これにより、精度が高く大規模な計算が可能となり、企業での材料開発が加速されることが期待できる。(図1例)
- 今後、分子動力学計算の高速化にも生成モデル等の活用等が期待される。



機械学習ポテンシャル分子動力学計算による
水系Na電池電解質の溶媒構造の解析例

分子動力学計算においてAIを活用することで新材料開発を加速