

# 理研AIP-富士通連携センターの これまでの成果報告

岡本 青史

理研AIP-富士通連携センター 副連携センター長

富士通株式会社 フェロー

2021年度

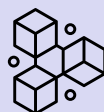
AIPシンポジウム成果報告会

目的：人が幸せになるAI、自律成長と人との協調による課題解決  
期間：2017年度～2021年度（5年間）



## 想定外を想定するAI

環境の不確実な変化に対しても、  
的確な未来予測に基づき、より良い判断を支援



## 三位一体による研究の推進

### ロバストな機械学習

限られた少量データでも学習可能

- 超音波医学
- Stratification Learning
- 因果推論

### シミュレーション・AI融合

入手困難なデータを効率的に生成

- Materials Informatics

### 大規模知識構造化

多業種に展開可能な知識を構築

- 化学知識構造化



AIのコア技術を開発し  
多数の著名国際会議に採択



社会課題解決へ挑戦、医学分  
野での表彰やプレスリリース

## 論文発表

84件

### 主な論文発表

AAAI 2019, 2020

ISUOG 2019, 2020, 2021

CLear 2022

Physical Chemistry 2020

EMNLP 2019

ベジエ単体によるパレートフロント推定

胎児心臓超音波スクリーニング

ポスト非線形因果モデルに基づく多変数因果探索技術

材料組成の最適化事例

固有表現抽出と言い換えのmulti-task学習手法

## プレスリリース

4件

材料設計におけるAIの有用性を実証 (2018年)

AIを用いた胎児心臓超音波スクリーニング (2018年)

AIを用いた超音波検査における影の自動検出 (2019年)

説明可能AIを用いた超音波画像診断支援 (2022年)

## 受賞

4件

ISUOG2019 World Congress Short Oral Presentation Award

第25回日本胎児心臓病学会 里見賞 (2019年)

第2回日本メディカルAI学会 奨励賞 2件 (2020年)

## 社会実装

AI化学文書検索基盤 FUJITSU Digital Laboratory Platform SCIDOCSSとして商品化  
Materials Informaticsにおける材料成分最適化ソリューションとしてサービス化を検討中  
胎児心臓超音波スクリーニングでの商品化に向けて研究継続  
パレートフロントのベジエ単体近似手法を本田技研工業様のエンジン設計に適用

ロバストな機械学習

# 超音波医学



## 新生児死亡原因の20%を占める先天性心疾患を超音波検査支援で早期発見

### 先天性心疾患（胎児）

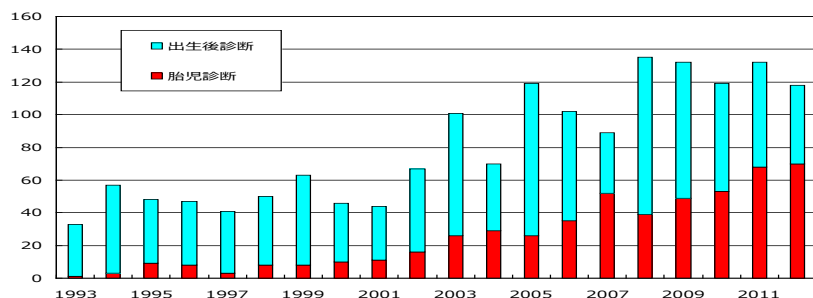
先天性心疾患は新生児死亡の多くを占める

先天性心疾患 / 全出生児 = 1%

重症先天性心疾患 / 新生児死亡 = 20%

先天性心疾患は治療でき、出生前の診断により治療成績がさらに良くなる

出生前診断率は近年上昇しているが不十分



二心室疾患の胎児診断率  
(神奈川県立こども医療センター)

### 心不全（成人循環器）

高齢化の進展 → 心不全患者が著しく増加

超音波検査を用いた心機能評価が益々重要に

超音波検査を用いた心機能評価には検査者間や施設間でばらつきが発生

超音波検査を用いた心機能評価の自動化・標準化への期待



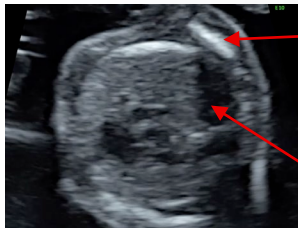
急性心筋梗塞・心不全の入院患者数  
(国立循環器病研究センター)

## 超音波画像解析の臨床応用の課題を克服し、医師による、より正確な異常判定を支援

### 音響陰影の自動検出

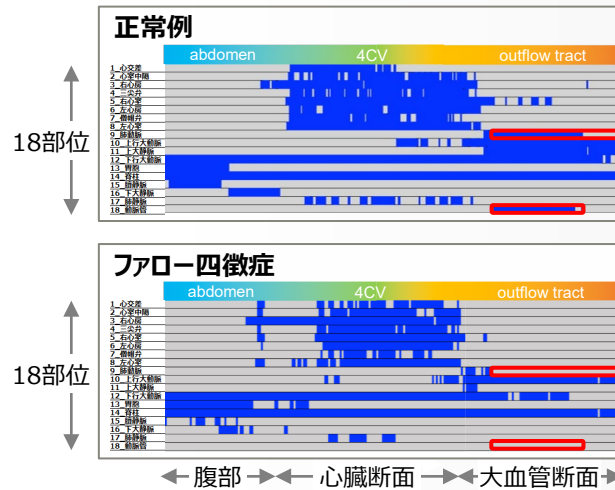
ラベルなしデータで学習し、音響陰影を自動検出する技術を開発

再走査の指示、異常検知性能の向上が期待できる



骨など  
(超音波を完全に反射するもの)  
音響陰影

### 異常判定の説明性 世界初



部位検出データの一覧表示による可読性向上

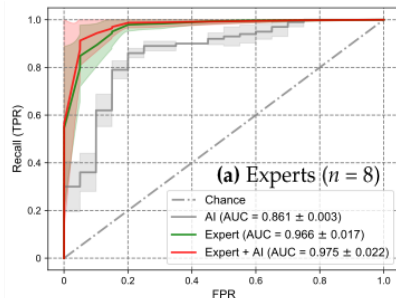
肺動脈・動脈管について正常胎児との明確な違い (赤枠)

グラフチャート図と異常スコアによる説明性向上

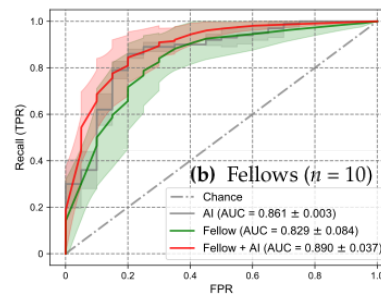
技術の併用により、全検査者レベルで判定精度が向上

### 異常判定支援のヒト比較試験 (AUC平均)

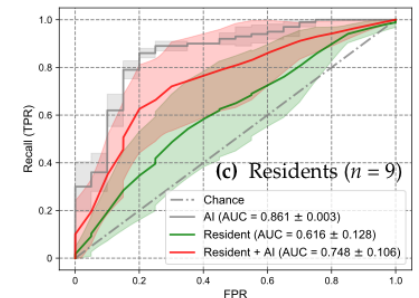
専門医 0.966 → 0.975



一般医 0.829 → 0.890



研修医 0.616 → 0.748



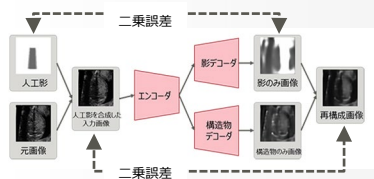
心エコー診断支援に必要な部位・音響陰影検出、評価指標測定、異常検知の技術を総合的に開発、胎児心臓超音波スクリーニングでの商品化に向けて研究継続

## プレスリリース

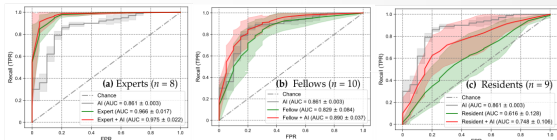
AIを用いた胎児心臓超音波スクリーニング (2018年9月)



AIを用いた超音波検査における影の自動検出 (2019年7月)

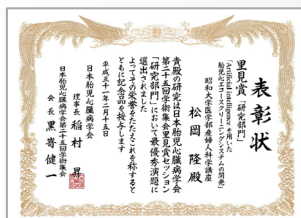


説明可能AIを用いた超音波画像診断支援 (2022年3月)



## 受賞

第25回日本胎児心臓病学会  
里見賞 (2019年2月)



ISUOG2019 World Congress  
Short Oral Presentation  
Award (2019年10月)



第2回日本メディカルAI学会  
奨励賞 2名 (2020年2月)

## 論文誌上梓

Applied Sciences

- 心臓の異常検知
- 影検知

Biomolecules

- 心室中隔セグメンテーション
- 胸郭セグメンテーション

Biomedicines

- 医用超音波AIレビュー論文
- 異常検知説明性の向上

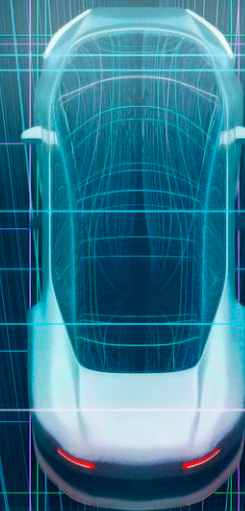
## 書籍出版

医学系雑誌 9誌に寄稿

- これだけでわかる！医療AI
- 超音波画像AI診断 など

ロバストな機械学習

# Stratification Learning





データの幾何学的構造を活用、環境変化の把握や少数データでの効率的学習を実現

## Stratification Learning (滑層分割学習)

多様体仮説

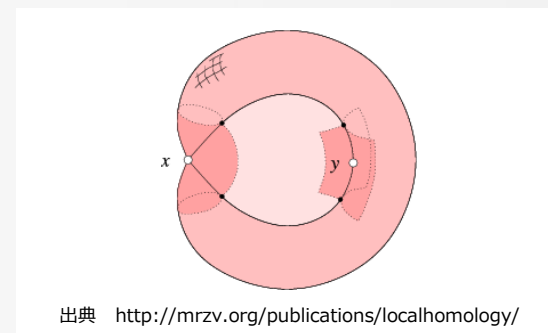
高次元データは、ある低次元多様体の周囲に分布する

滑層分割仮説

高次元データは、低次元多様体の貼り合わせ構造の周囲に分布する

### Stratificationの構造が分かれば

環境変化による滑層分割構造の変化を把握できる  
 高次元データを低次元に分割して効率よく学習できる  
 より少ない訓練データ(投資)で再学習できる



出典 <http://mrzv.org/publications/localhomology/>

### Stratification Learningを用いたロバストな多目的最適化手法の開発

工業製品設計

様々な制約条件により最適設計案の空間は滑層分割されている

SNS記事分析

記事に付いたタグによってデータ空間が滑層分割されている

### 多目的最適化問題のパレートフロントをベジエ単体で近似、ロバストな最適化を実現

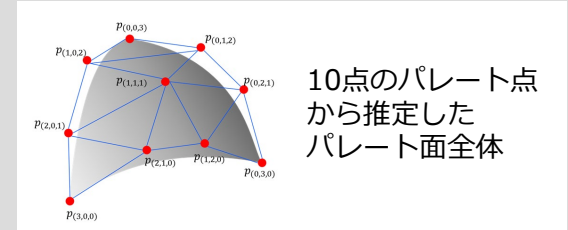
#### 多目的最適化問題の限れたパレート面\*1上の点からパレート面全体を推定する ベジエフィッティング手法の開発

定理：ベジエ単体は単体的なパレートフロントを任意精度で近似可能

$\phi: \Delta^{M-1} \rightarrow \mathbb{R}^M$ :  $C^0$ -埋め込み,  $X^* := \phi(\Delta^{M-1})$ ,  
 $b: \Delta^{M-1} \rightarrow \mathbb{R}^M$ : ベジエ単体(写像),  $B := b(\Delta^{M-1})$  と表す.  
 このとき

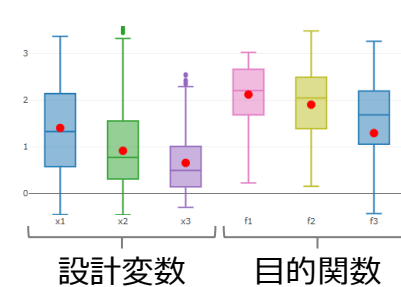
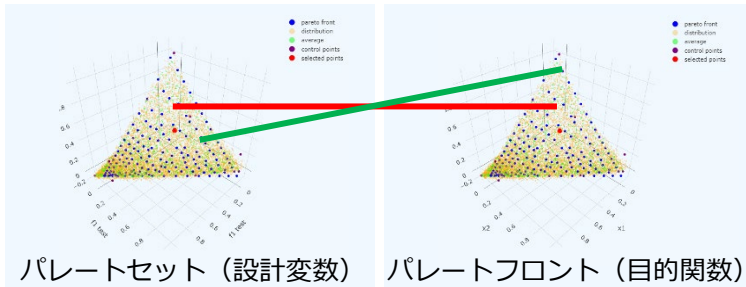
$$\lim_{i \rightarrow \infty} d_H(X^*, B^{(i)}) = 0$$

なるベジエ単体の無限列  $\{b^{(i)}\}$  がとれる. ただし  $d_H$  はハウスドルフ距離.



世界初

#### パレート面とパレートセット\*2の組み合わせを同時に推定し、ロバストな最適設計を可能に



パレートフロント、パレートセット、  
その対応関係を一気に構築

各設計変数値での目的関数値とロバスト  
度合いを確認しながら選択可能

\*1: パレート面: 最適な目的関数値の組み合わせの候補

\*2: パレートセット: 最適な設計変数値の組み合わせの候補

設計変数や目的関数の数が大きい高次元最適化問題に対して滑層分割仮説に基づきロバストな最適設計を実現する世界初の技術を開発、本田技研工業様と効果を確認

## 論文発表

### ■ AAI2019

多目的最適化問題パレートフロントのベジエ単体近似手法（骨格推定法）

### ■ AAI2020

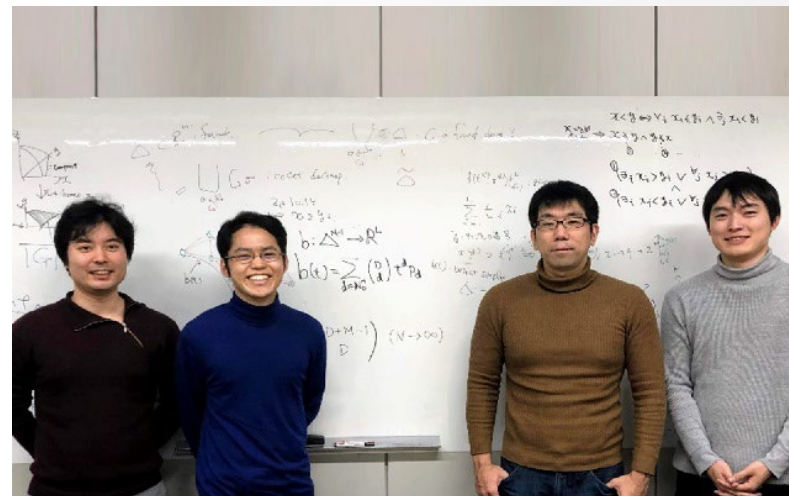
ベジエ単体フィッティング法の漸近リスクを理論的に評価

### ■ SAE2022（採択済）

パレートフロントのベジエ単体近似手法をエンジン設計に適用

## 社会実装

本田技研工業様のデータでロバスト性を考慮した設計が可能であることを確認



富士通研究紹介サイトに掲載

<https://www.fujitsu.com/jp/about/research/article/202002-aaai-20.html>

ロバストな機械学習

# 因果推論



データから因果関係を探索し、新たな科学的発見やビジネス課題の解決を実現

## 統計的因果探索の課題

### 識別性保証モデルの構築

どんな因果構造を仮定すれば識別可能か  
(無限のサンプルがあれば因果方向を一意に識別できる)

### モデル推定アルゴリズムの構築

有限なサンプリングでの精度確保

## 従来手法 (LiNGAM)

変数間の因果関係が線形であることを仮定するが、現実問題の多くは非線形  
仮定と現実のギャップによる精度やロバスト性の低下、ユーザの技術受容性低下

## 想定応用分野

ものづくり、創薬などにおける最終性能への設計パラメータの影響の推定  
経済学、社会学における複雑なシステムダイナミクスの解明

## ポスト非線形因果モデルに基づき、ニューラルネットワークで因果構造グラフを推定

### ポスト非線形因果モデル [ Zhang and Hyvärinen, 08 ]

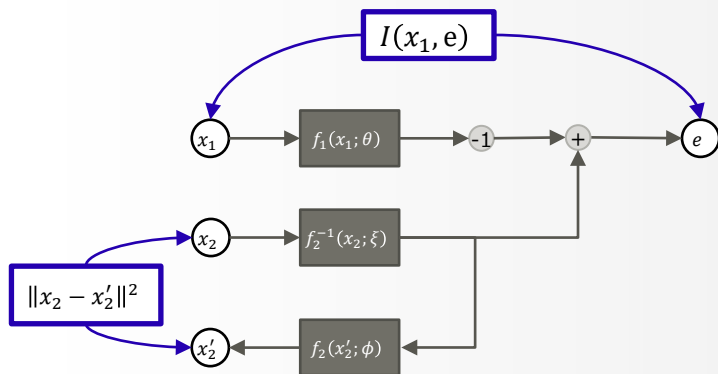
$$x_2 = f_2(f_1(x_1) + e)$$

$f_1, f_2$ は非線形関数、 $e$ はノイズ (=未知の原因因子)  
 ただし、以下の条件を満たすものとする  
 [条件1]  $f_2$ は可逆、 [条件2]  $e$ と $x_1$ は独立

識別性の保証されたモデルで、最も自由度の高いモデルの一つ

#### 2変数間の非線形な因果方向推定

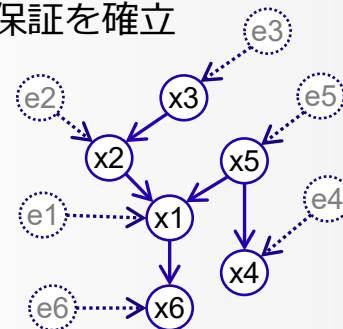
- $f_1, f_2, f_2^{-1}$ をそれぞれNNでモデル化
- 誤差を以下で定式化してNNを学習
  - [条件1] 再構成誤差  $\|x_2 - x'_2\|^2$  の最小化
  - [条件2] 変数の従属度合い  $I(x_1, e)$  の最小化



#### 多変数間の非線形な因果構造グラフ推定

- $n \rightarrow 1$ モデル推定反復により推定した因果順序から因果グラフを推定
- 枝刈り手法の導入により、因果順序から生成した完全グラフ中の冗長な枝を削除
- ANMにおけるモデル復元性定理を転用し、提案手法での理論保証を確立

#### 因果構造グラフ



## ポスト非線形因果モデルに基づく世界初の非線形因果探索技術を開発

### 論文発表

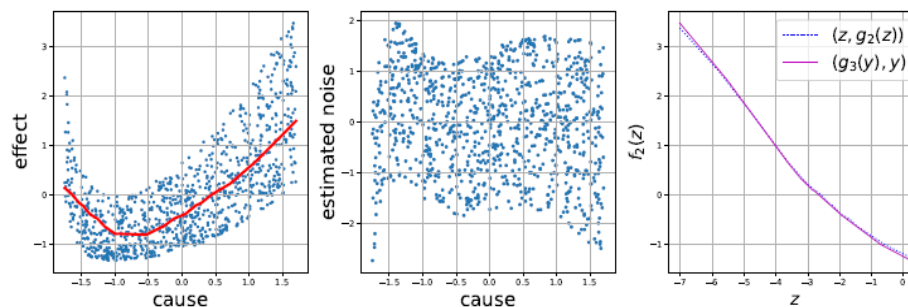
#### ■ ICASSP2020

オートエンコーダーを用いた  
ポスト非線形因果モデルの推定

#### ■ CLear2022 (採択済)

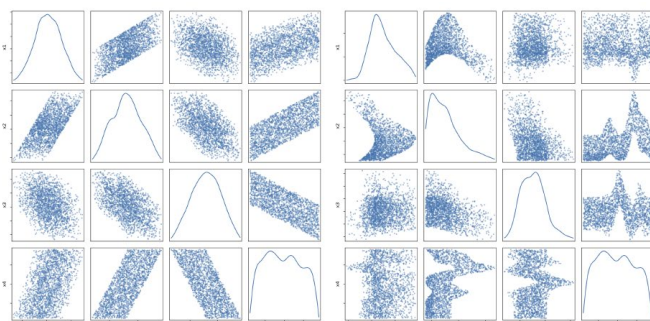
ポスト非線形因果モデルに  
基づく多変数因果探索技術

### 非線形因果の方向を正しく推定



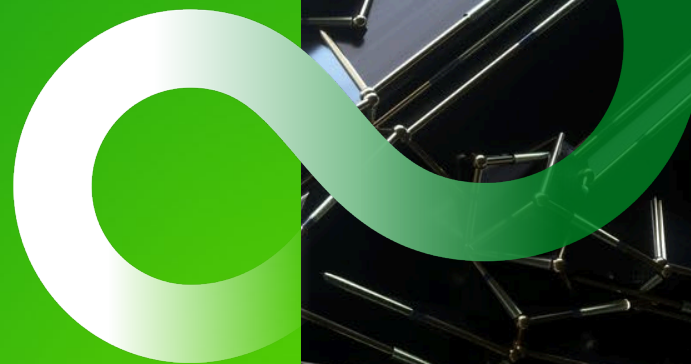
中央図：推定した独立成分  $(x, e)$  をプロット  
右図： $f_2$ の可逆性検証プロット

### 複数の変数間の因果グラフを効率的に探索



線形（左）でも非線形（中央）でも正しい因果グラフ（右）を推定

# シミュレーション ・ AI融合





新材料の組成や合成条件を最適化、試行錯誤を低減し材料開発期間を大幅に短縮

## マテリアルズ・インフォマティクス

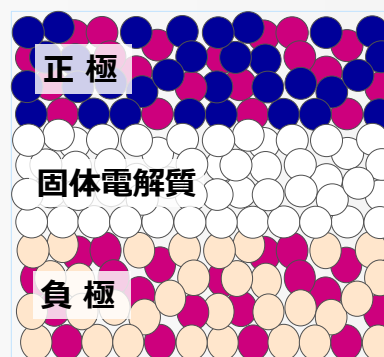
### データ科学を活用した材料開発プロセスの高効率化手法を開発

所望の特性を持つ材料の組成だけでなく、その合成条件まで最適化  
企業の利用を想定した高効率で高速な手法の開発

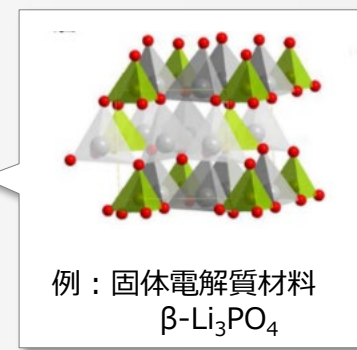
シミュレーションは精度とコストのバランスを重視：最後は実験で詰めることが大前提

### Li 2次電池用固体電解質

- 全固体電池のキー材料
- 世界中で高イオン導電率化に向け開発競争
- Liイオン電池の小型化・大容量化、長寿命化、急速充電を可能に
- 富士通研究所には実験データの蓄積あり



電池主要部分模式図



例：固体電解質材料  
 $\beta\text{-Li}_3\text{PO}_4$

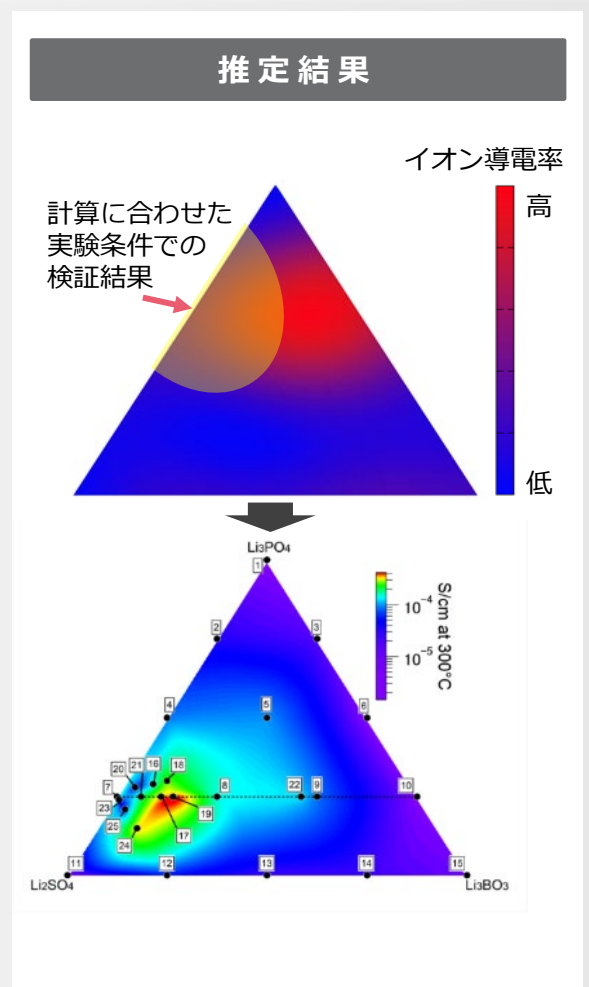
「第一原理計算×ベイズ最適化」により、Li2次電池用固体電解質のイオン導電率をあらゆる組成のもとで予測し最適な組成を推定

### 高イオン導電率を実現できる材料の最適組成を特定の合成条件下で推定

- 15種類の組成についてのみ第一原理計算を行い、それ以外をベイズ推定
- 実際に化合物を合成し、推定が正しいことを検証
- 第一原理計算の計算回数を数十分の一に抑制 **世界初**

### 実験家の知見を加えて、材料の最適組成を再推定

- 実際には材料組成を変えると最適な合成条件は変化する
- 組成ごとに最適な合成条件を実験家が選択し、再推定した結果、材料の最適組成が変化
- 化合物を合成する過程で、未知の結晶相を発見



Li 2次電池用固体電解質の最適な組成・合成条件を推定する技術を開発、  
材料成分最適化ソリューションとしてサービス化を検討中

### プレスリリース

材料設計におけるAIの  
有用性を実証 (2018年3月)

### 論文誌上梓

- Bulletin of the Chemical Society of Japan (2019)

Liイオン導電率最大化組成の予測

- The Journal of Physical Chemistry (2020)

材料組成の最適化事例

### 社会実装

マテリアルズインフォマティクスにおける  
材料成分最適化ソリューションとしてサー  
ビス化を検討中



# 大規模知識 構造化

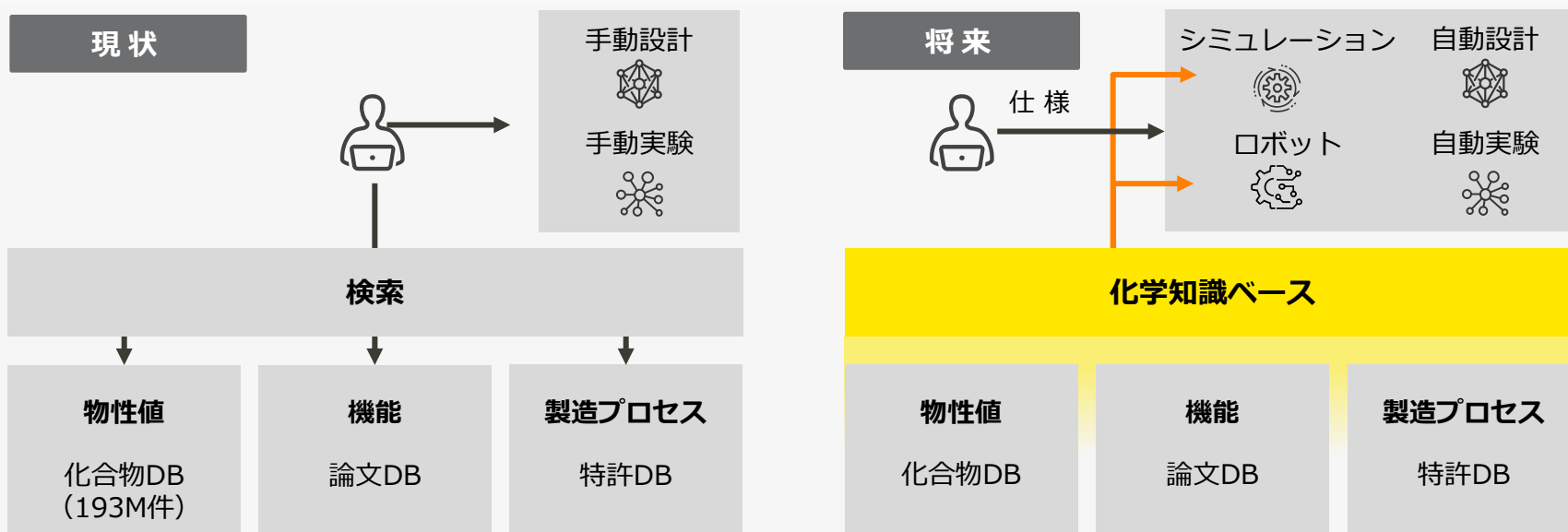


膨大な化合物の物性値や機能、製造プロセスを知識ベース化、新素材開発を支援

### 化学知識構造化

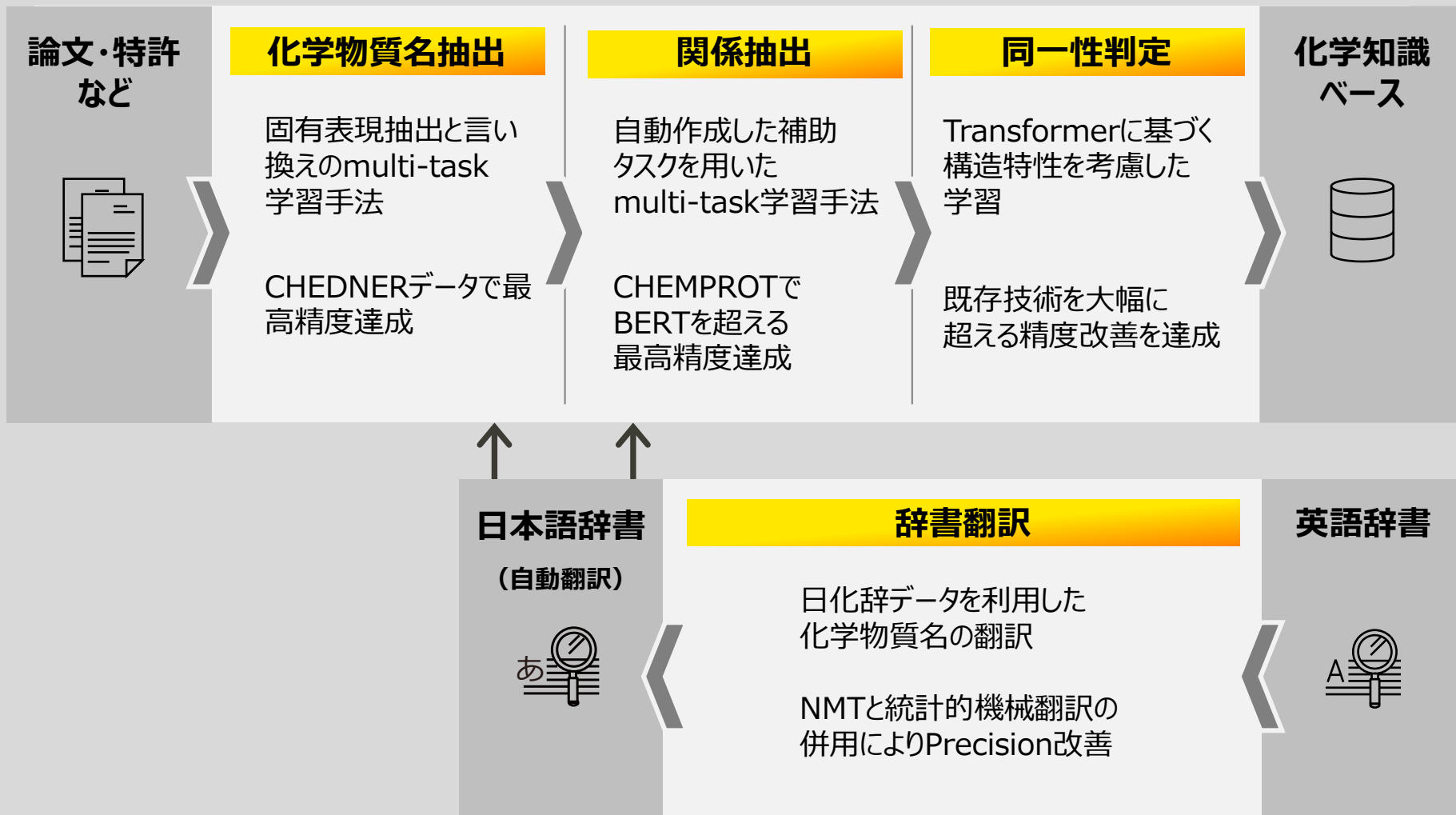
新素材開発の設計・実験を支援するために、分散した知識源から化学知識ベースを自動構築する自然言語処理技術を開発

- 化合物DBにはChemical Abstracts Serviceが幅広く使われている(無機・有機物登録数：1億9300万\*)
- 現状、化合物DBを起点に新素材開発者が機能や製造プロセスを人手で調査



\* : <https://www.cas.org/cas-data/cas-registry>で確認 (2022/2/24時点)

論文・特許から化合物の知識を抽出・構造化するための自然言語処理技術を開発



論文・特許から化合物の物性値や製法を抽出して知識ベース化する  
自然言語処理技術を開発し、AI化学文書検索基盤SCIDOCSSとして商品化

### 論文発表

#### ■ LREC2018

自然言語処理とLinked Dataを用いた化学物質情報の可視化

#### ■ EMNLP2019

固有表現抽出と言い換えのmulti-task学習手法

#### ■ AAACL/IJCNLP2020

Transformerを用いた化合物構造の予測

#### ■ RANLP2021

テキスト・アノテーション作業者の専門性を考慮した自動割当て  
複数事前学習モデルを用いた生物医学分野の関係抽出

### 社会実装

#### AI化学文書検索基盤

#### FUJITSU Digital Laboratory Platform SCIDOCSSとして商品化

The screenshot displays the search interface of the FUJITSU Digital Laboratory Platform. It is divided into two main sections: search criteria and search results.

**Search Criteria (Left Panel):**

- Search Method: Keyword search (selected) or Text document search.
- Keyword Search: Includes a text input field, a dropdown for search type (set to 'Must contain'), and buttons for adding/removing keywords. Current keywords: 'リチウムイオン二次電池', 'バンダー', '不飽和'.
- Compound Name Search: Includes a text input field, a dropdown for search type (set to 'Must contain'), and buttons for adding/removing names. Current name: 'エチレン'.
- Chemical Structure Search: Includes a dropdown for search target.
- A large blue '検索' (Search) button is at the bottom.

**Search Results (Right Panel):**

- 676件中 1~10件を表示 (676 items, showing 1-10 items).
- Sorting options: 関連度順 (Relevance) and 昇降 (Ascending/Descending).
- Display count: 10件 (10 items).
- Table with 5 columns: 関連度 (Relevance), 名称 (Name), 著者・権利者 (Author/Right holder), 公表日 (Publication date), 要約 (Summary).

関連度	名称	著者・権利者	公表日	要約
1位	リチウムイオン二次電池正極用バンダー組成物、リチウムイオン二次電池正極、及びリチウムイオン二次電池	日本合成化学工業株式会社	2018/04/12	(57)【要約】【課題】リチウムイオン二次電池を形成した場合に常温下及び低温下での充放電のサイクル特性が良好となるリチウムイオン二次電池
2位	電池電極用組成物	日本エイアンドエル株式会社	2011/09/01	(57)【要約】【課題】活物質の脱落が少ない電池電極を得ることによって、より高性能な二次電池を提供する。【解決手段】平均分子量50000~120000の積アクリル酸
3位	リチウムイオン蓄電デバイス用の電極バンダー組成物	ピーピーシー・インダストリアルズ・オハイオコーポレーション	2018/06/07	(57)【要約】【課題】リチウムイオン電池の電極バンダーを提供すること。【解決手段】(a)有機希釈剤中に分散したポリビニルピロリドン、(b) (メタ) アクリルアミドマ分分散剤
4位	リチウムイオン二次電池用バンダー組成物、リチウムイオン二次電池電極用スラリー組成物、リチウムイオン二次電池多孔膜用スラリー組成物、リチウムイオン二次電池用電極、及びリチウムイオン二次電池	日本ゼオン株式会社	(該当情報なし)	(57)【要約】本発明は、スラリー組成物の安定性及び電極の生産性を確保しつつ、リチウムイオン二次電池に優れたサイクル特性および高温保存特性を発揮させることができる

検索画面 (Search screen) and 関連度ランキングでの検索結果表示 (Search results display by relevance ranking) are labeled below the respective panels.

<https://www.fujitsu.com/jp/solutions/business-technology/tc/sol/scidocss/>

おわりに

協力いただいた理研AIPや  
大学、研究機関の皆様  
ありがとうございました



**Thank you**

