

# グラフニューラルネットワークと生成モデルを用いた非晶質動力学予測システム開発

課題代表者 芝 隼人 (兵庫県立大学 大学院情報科学研究科)

参加者 下川辺 隆史・華井 雅俊 (東京大学情報基盤センター)

川崎 猛史・別所 秀将・西垣内 大祐 (名古屋大学)



## 1. 研究背景

近年、深層学習が飛躍的発展したことにより、数値シミュレーションの結果を直接予測する手法が充実し、複雑な計算を経て得られるシミュレーション結果を高精度に予測できるようになった。最近では、時間発展型の様々なシミュレーションに対する深層学習予測手法が発展し、シミュレーションを代替できる可能性に期待が持たれている。

本課題では、これらの予測手法の中でも最も長時間の「未来予測」である、ガラス（非晶質）の動力学予測を取り上げる。ガラスは「液体を急激に冷やして固まった物質」であり、極めてゆっくりと緩和する。しかし、構造は乱れているため、どのように状態が変わっていくかのヒントを最初の状態から得ることが難しいが、最近、深層学習手法の適用により、初期状態から動力学を予測する手法が整備されてきた。

下川辺と芝は 2022年度 JHPCN 課題「時空間発展するシミュレーションを予測する代理モデルの開発 (jh220052)」において、ガラス動力学の予測のためのグラフニューラルネットワーク (GNN) モデル "BOnd TArgeting Network" (BOTAN) を開発した。また、同じく2022年度、東京大学情報基盤センター 萌芽共同研究課題 ("AI for HPC") において、川崎を中心とするメンバーによりBOTANの利活用の展開を試みてきた。本課題では、これらの研究成果を統合・発展させて、BOTANの将来に向けた利活用を提示する。

## 2. 研究手法

### BOnd TArgeting Network (BOTAN)

H. Shiba, M. Hanai, T. Suzumura, and T. Shimokawabe,  
J. Chem. Phys. 158, 084503 (2023)

ガラスを構成する粒子運動、そして粒子同士のお互いの位置変化（相対運動）を、グラフの頂点と辺上でそれぞれ学習する、新しいタイプのGNN。モデルは数万パラメータをもち大規模であることから、最新のGPUの利用を必要とする。

ガラスの内部で起こる歪み変形と粒子運動の情報を同時に学習し内部で相補させることで、構造緩和時間 (>億MDステップ) での粒子運動分布を忠実に予測する。ガラス動力学予測の State of the art を大幅に更新した。

公開コード

[https://github.com/h3-Open-BDEC/pyg\\_botan](https://github.com/h3-Open-BDEC/pyg_botan)

## 3. 研究計画

### (A) 学習モデルの高精度化・汎用化

2022年度はガラスのGNNおよび関連深層学習モデルが世界的に注目され、様々な新しいモデルによる予測性能更新が行われた。今年度、本課題では、性質的に異なった改良を行っているこれらのモデルを組み合わせることでそれぞれの長所を活かす。またGNNモデルの多変数の予測などへと展開し、精度および機能向上を達成する。

### (B) 生成モデルによる動力学サンプリング手法の開発

BOTAN は、ガラスのシミュレーションの状態をまるごと教師付き学

習することによって、内部の集団運動と構造変化を初期の粒子配置のみから瞬時に把握する手段として利用可能である。この数年発展が著しい生成モデルの活用し、GNNの予測結果を拘束条件として利用する中で、ガラスのある状態から別の状態に遷移した状態を作り出すAIシステムの構築の実施可能性を探り、萌芽的モデルを提案する。

### (C) 非晶質物質材料の剪断予測システムの開発

ガラスは材料物質としても重要である。例えば、金属でガラスを作成すると高強度が得られやすく工学的にも重要だが、外力変形に対して脆いという欠点を抱える。外力下での破壊は、乱れたガラス構造の背後にある隠れた「欠陥」構造に駆動されると考えられ、その予測が破壊予測の第一歩である。BOTAN は大域的な粒子の変形を捉えやすい特性から、その欠陥の所在の予測に強さを発揮しうる。前述のAI for HPC 課題で作成した剪断系のデータセットの学習を展開し、BOTANの利活用の拡大を図る。

