

# グラフニューラルネットワークを用いた 非晶質系動力学予測システム開発

～材料シミュレーションの究極的な未来予測モデルに向けて～

情報科学研究科

○准教授 しば はやと  
芝 隼人

## キーワード

AI for Science、グラフニューラルネットワーク、材料データ科学



## 研究概要

近年データサイエンスが著しい発展を遂げる中、シミュレーション結果を予測する手法の研究開発が盛んにされています。微分方程式の差分化による数値的求解に大きな計算機リソースを用いる代わりに、データサイエンスの手法を用いた予測結果を利用して、これまで重複して繰り返されていた計算の量そのものを減らしていこうというのが大きな目標です。

この目標のもと、私たちは近年、非晶質材料の「動力学=未来」を予測する手法の開発を行っています。非晶質材料は構造に明らかな特徴を有しておらず、原子配置（構造）からどの原子が動きやすいか、壊れやすいかを予測することが困難です。近年、そのような予測タスクに深層学習の手法が非常に有力であることがわかってきました。

我々は、グラフの辺上で原子間位置関係の変化を直接学習させるグラフニューラルネットワーク BOTAN (BOnd TArgeting Network) を最近開発しており、非晶質材料において長時間を隔てた未来を予測する世界最高のモデルの一つとなっています。このモデルの特徴、そして世界で提示されている類似モデルとの比較でみた現状を紹介いたします。

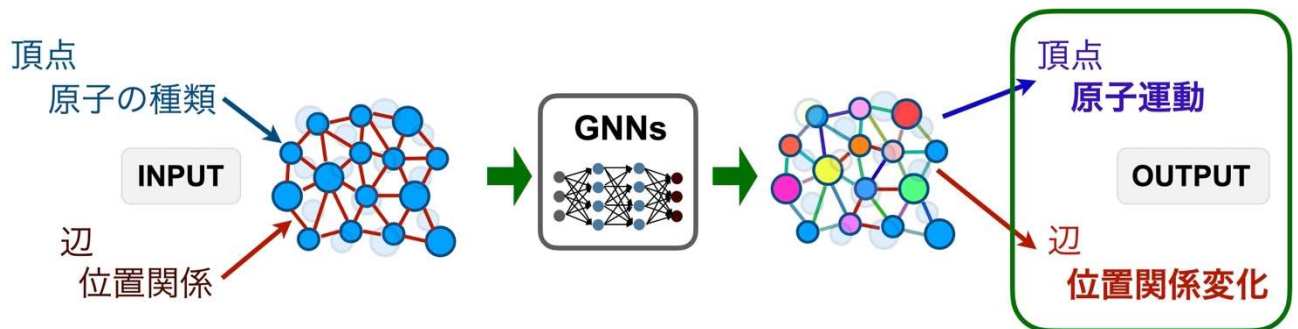


図1：BOTANモデル。原子の構造（原子の種類、位置関係）を入力として、そこから原子運動、原子間の位置関係変化を出力として、入出力間の関係を学習するグラフニューラルネットワークである。

## アピールポイント

データサイエンスが実用化されるには、データが大量に入手可能であることが条件となっていて、多くの社会実装を目指すデータサイエンスの課題ではスモールデータ問題がつきものの悩みとなります。シミュレーションにより巨大で信頼性の高いデータを得ることは、データサイエンスを用いた材料開発の次なる突破口であり、実社会のDX推進の次の鍵を握るでしょう。日本のスーパーコンピュータ文化の中心地・神戸から、シミュレーションとデータサイエンスの協調による新たなサイエンスを発信したいという意気込みで、今年4月から神戸情報科学キャンパスで活動を開始しています。

