

# 深層学習を活用したガラスの構造緩和を決定する特徴量を抽出する技術の開発

大阪大学大学院基礎工学研究科 氏名 金 鋼

目的 液体を冷却しても、急冷によって結晶化が阻害されると融点以下の液体状態が維持され過冷却液体になる。この過冷却液体をさらに冷却すると、液体の粘度が急激に上昇しあるガラス転移温度以下でガラスが得られる。したがって、液体の構造と類似し隠されてしまった構造緩和を決定する特徴量の抽出は、ガラス物質科学における分子スケールから流動特性を特徴づけるマルチスケール性の学理深化に直結する。本研究では、グラフ構造の深層学習を活用することによって、異なる2つ温度のガラス形成液体の構造を分類し、さらに物理情報に基づく秩序変数の深層学習と比較をすることにより、深層学習の分類根拠を獲得することを目指した。

内容 本研究ではガラス形成液体のモデルとして3次元2成分soft-sphereモデルを採用し、分子動力学シミュレーションをおこなった。グラフニューラルネットワーク(GNN)はグラフを扱うための深層学習手法であり、グラフとは要素をノード、要素間の関係をエッジとして構成されたデータ構造である。GNNはグラフデータを入力とすることを活かし入力グラフのノードとエッジの情報の更新を繰り返し自ら特徴量を作り出すことができる。得られた粒子配置について粒子をノード、第一配位圏以下の粒子間のつながりをエッジとしてモデル化したグラフ構造を構築した。粒子の種類と粒子間の相対座標をグラフに符号化することで異なる2つの温度の構造分類をおこなった。

結果 各温度の組み合わせのGNNによる正解率から、構造緩和時間の大きく異なる過冷却状態と他の温度の構造は識別できる一方、高温構造同士は識別できないことがわかった。また、局所的な粒子配向を特徴づけるQ6を入力変数とするNNにより同様の分類問題を解くとGNNと同様の正解率で分類できることがわかった。またGNNのノード間の関連度が高い粒子は、Q6が小さい傾向にあることがわかった。以上のことから、GNNはガラス形成液体の温度の違いを、Q6が小さく局所的に結晶秩序の度合いが小さい粒子を根拠に分類していると考えられる。

利用した計算機 SQUID

