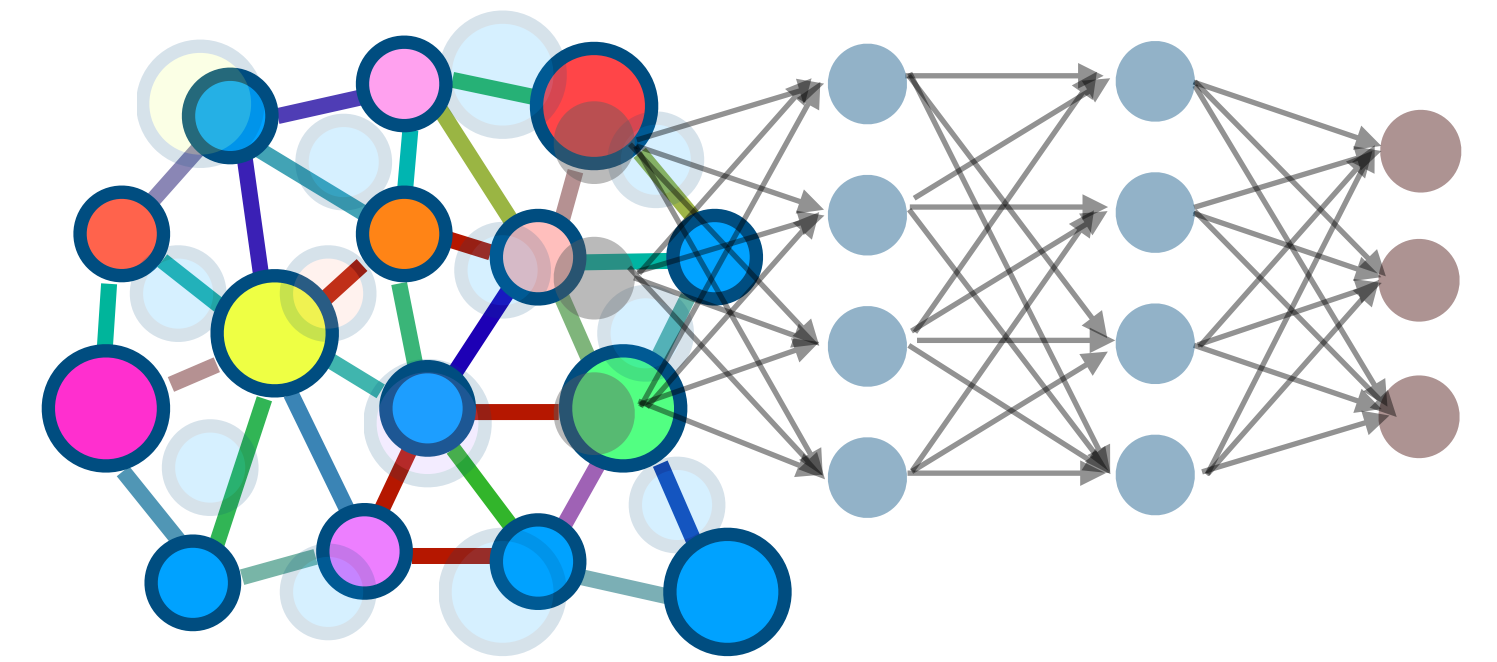


Supercomputing Japan 2024

2024年3月12日 16:00 - 16:30 @ タワーホール船堀



ガラスとグラフニューラルネットワーク

- 究極の長時間ダイナミクスへのデータ駆動科学による挑戦



芝 隼人

専門：計算物性物理・分子シミュレーション

兵庫県立大学 大学院情報科学研究科

E-mail: shiba@gsis.u-hyogo.ac.jp

「富岳」横!



Acknowledgements

Supercomputing + Data Science
Information Technology Center, Univ. of Tokyo



Masatoshi
Hanai



Toyotaro
Suzumura



Takashi
Shimokawabe

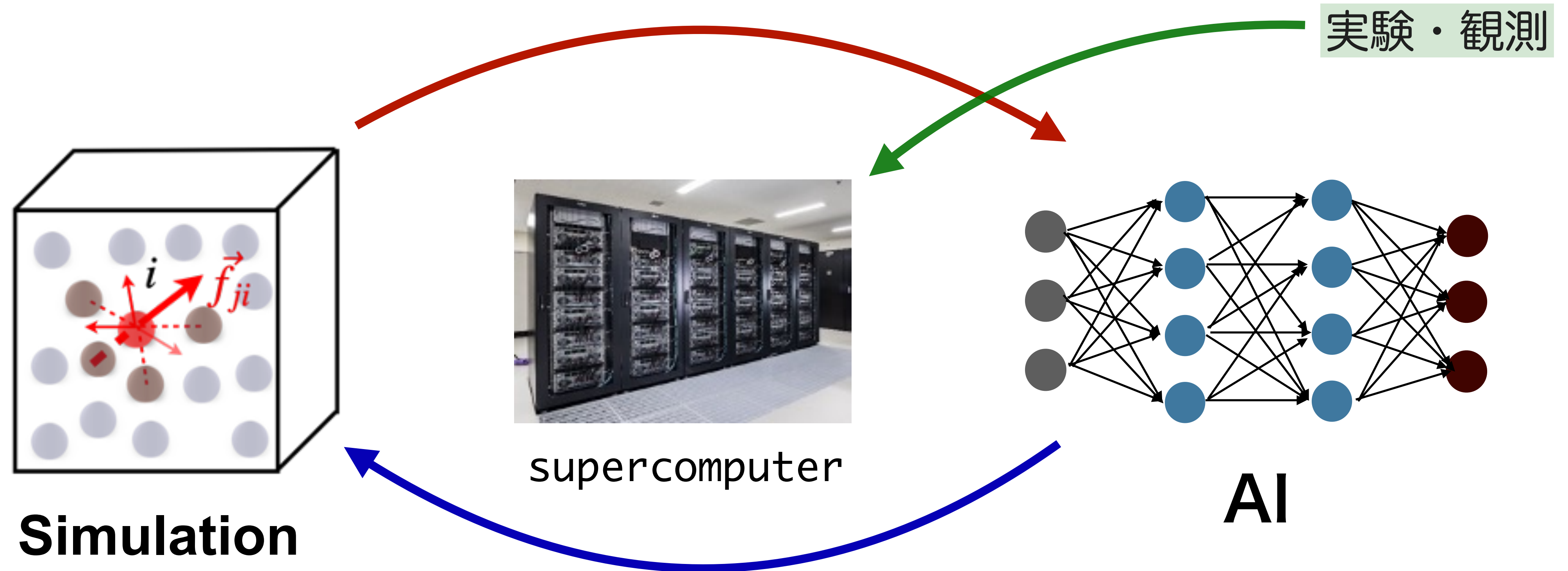


Kengo
Nakajima

Fundings

- ▶ 科学研究費補助金 基盤研究 (S) FY2019-2023
「(計算+データ+学習) 融合によるエクサスケール時代の革新的シミュレーション手法」(h3-open-bdec)
- ▶ 学際大規模情報基盤共同利用・共同研究課題 FY2019-2023 etc...

AI for HPC & HPC for AI



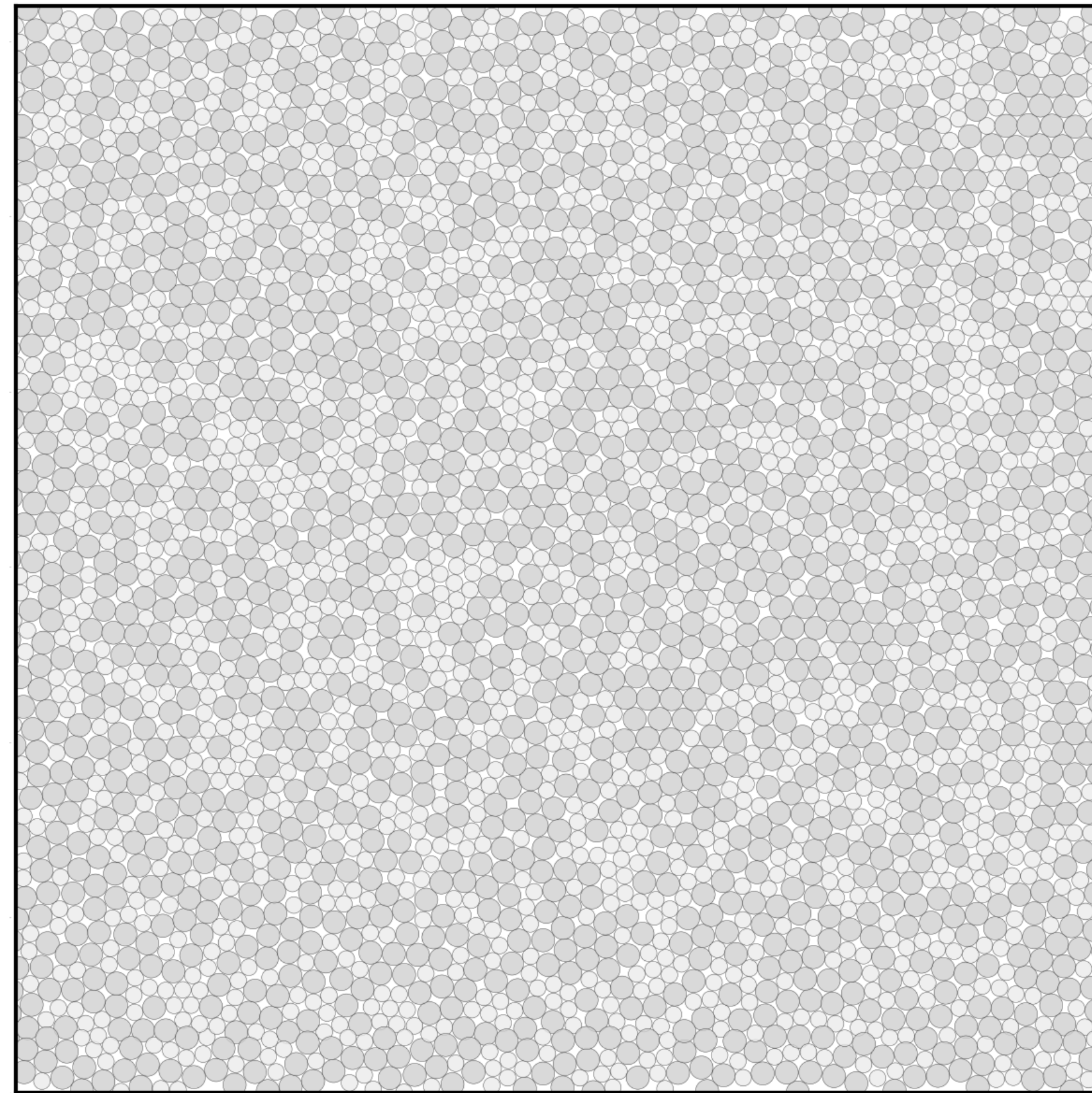
- ▶ AI による帰納的予測の精度向上
- ▶ 予測結果の再利用 または 併用したシミュレーション技術開発
- ▶ (実験・観測とのデータ同化)

本日の話

- 物理学の研究対象としてのガラス — 超長時間のダイナミクス
- ガラスダイナミクスの機械学習予測 — この数年間の発展
- ガラスのGNN での (簡単な) 学習速度測定
 - NVIDIA & AMD GPUs

ガラス = 「流れなくなった液体」？ 「乱れた固体」？

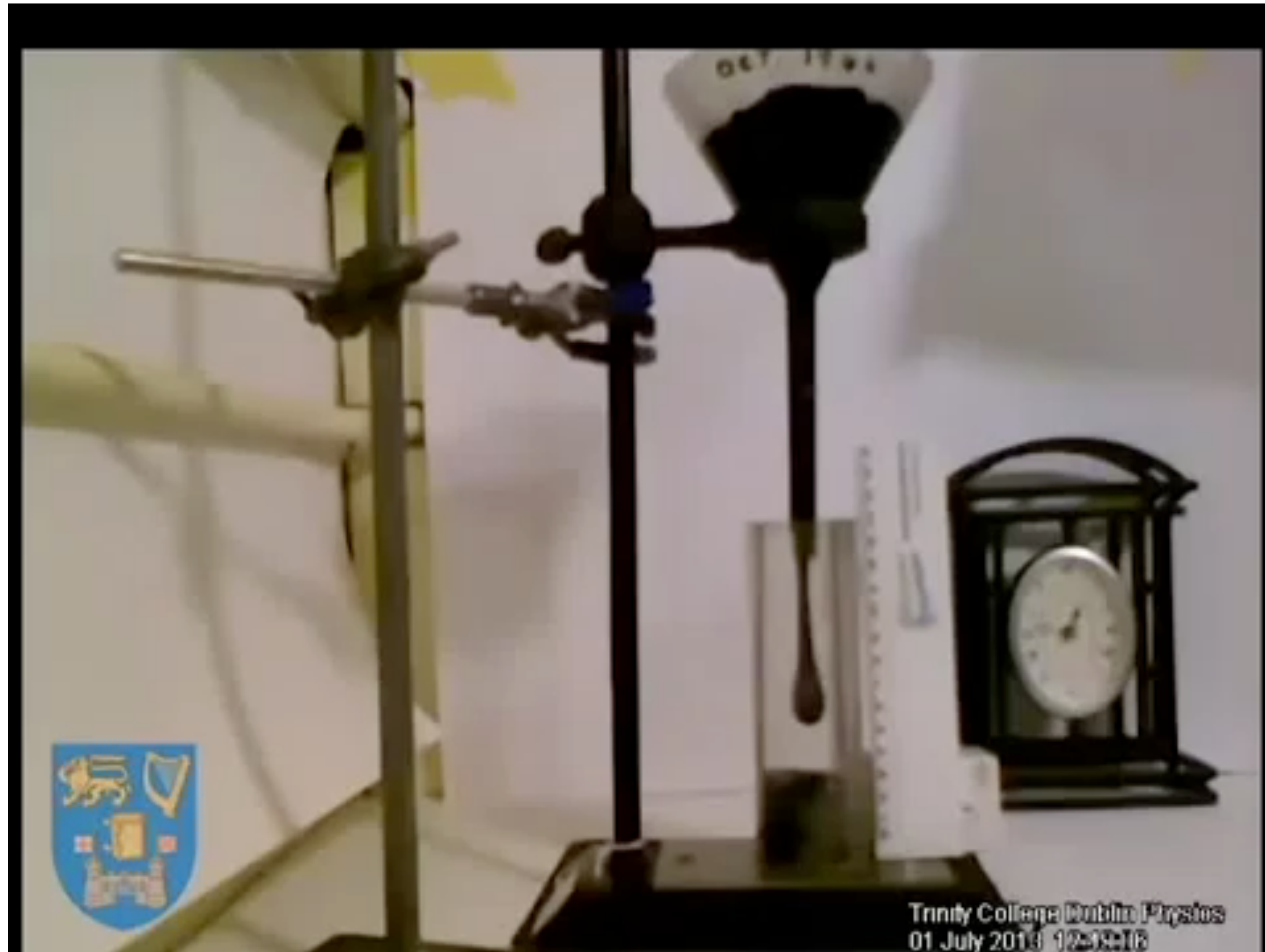
“乱れ” (featureless structure) を扱う難しさ、深遠さ



2021年ノーベル賞 Giulio Parisi 「レプリカ対称性の破れ」

ピッチドロップ実験

@Trinity College Dublin



$\eta \sim 2 \times 10^7 \text{ Pa} \cdot \text{s}$
十数年おきの落下

begun in 1944 by **an unknown colleague of** the Nobel prizewinner Ernest Walton while he was in the physics department of Trinity College (Wikipedia).

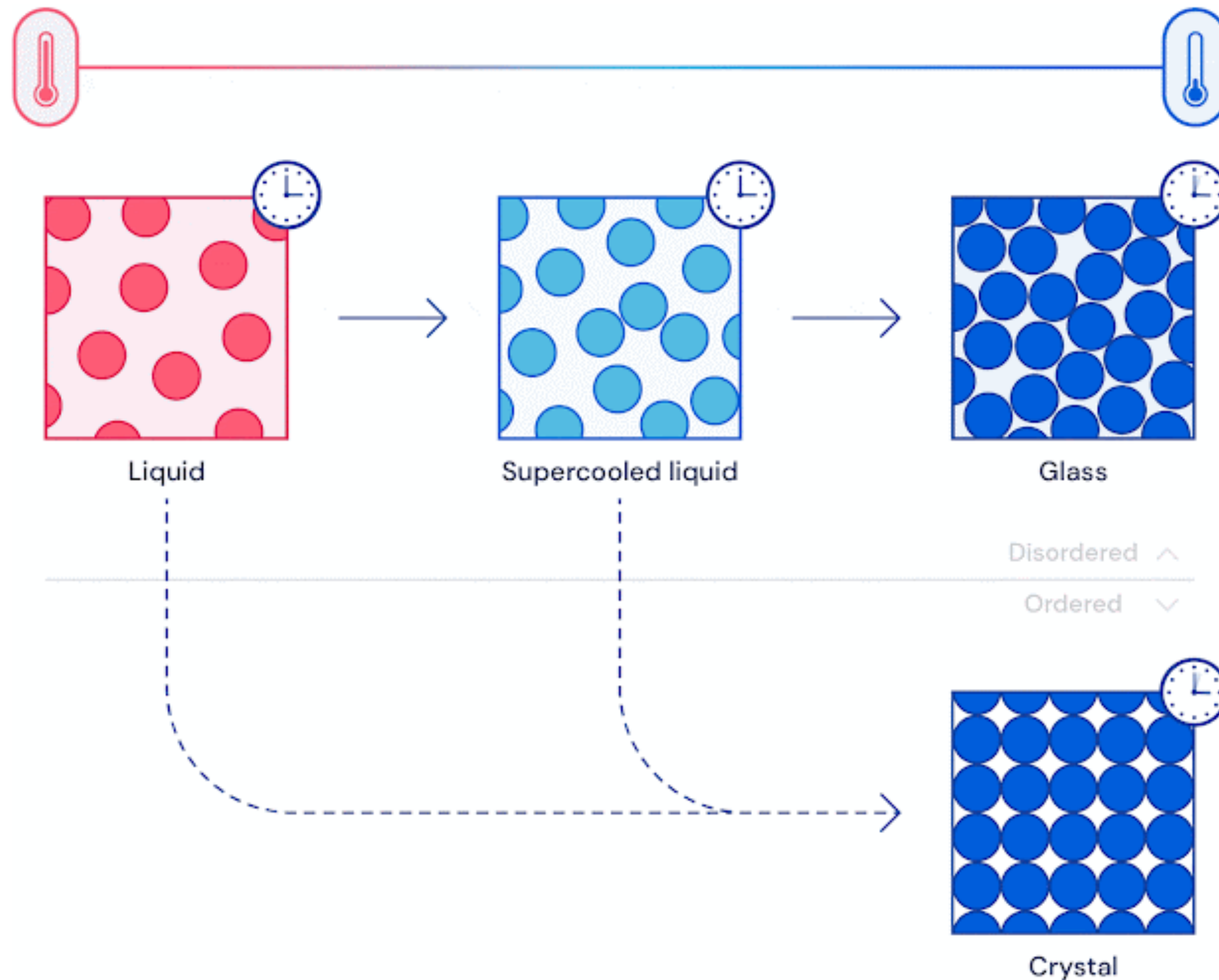
2013 broadcasted by Prof. Shane Bergin

- [Nature News](#)
- [The Independent \(UK\)](#)
- [Radio Lab](#)
- [Wall Street Journal](#)
- [The Register](#)
- [Circa](#)
- [Huffington Post](#)
- [The Slate](#)
- [Irish Times](#)
- [RTE News](#)
- [International Business Times](#)
- [The Atlantic](#)
- [Discover Magazine](#)
- [The Australian](#)
- [Scientific American](#)
- [Times of India](#)
- [NBC Bay Area](#)
- [National Geographic](#)
- [Die Zeit](#)
- [Fox News](#)
- [NewScientist](#)
- [Daily Mail](#)
- [Business Insider](#)
- [Phys.org](#)
- [CNET](#)
- [ScienceNews](#)
- [The Verge](#)
- [GizMag](#)
- [New Scientist](#)

Science & Engineering of glasses

© DeepMind 2020 (V. Bapst *et al.*)

<https://deepmind.google/discover/blog/towards-understanding-glasses-with-graph-neural-networks/>



Glass

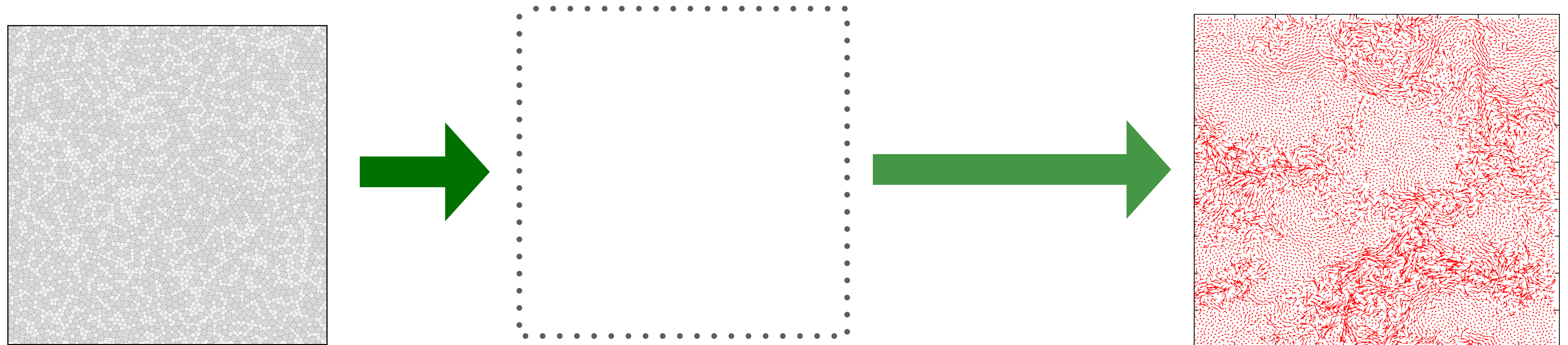
→ **extremely long time**

experiment > hours

simulation ~ μs

ガラス物理の（ひとつの）中心課題

構造（=たった1枚の写真）の中から、究極的に長時間の「未来」が引き出せるか？

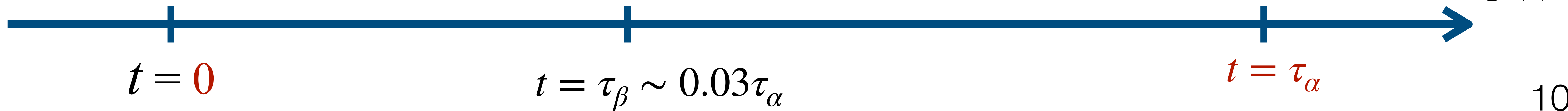


L. Berthier & G. Biroli, RMP (2011)

初期構造
(now)

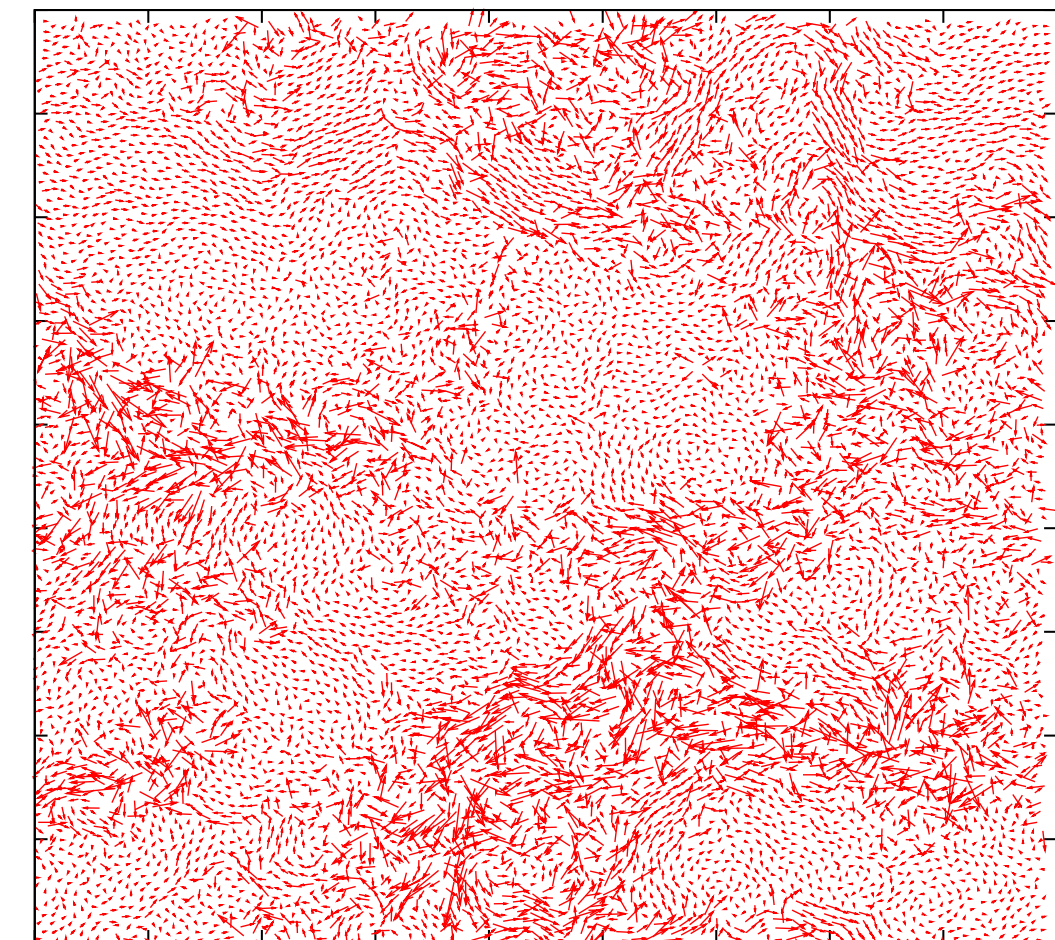
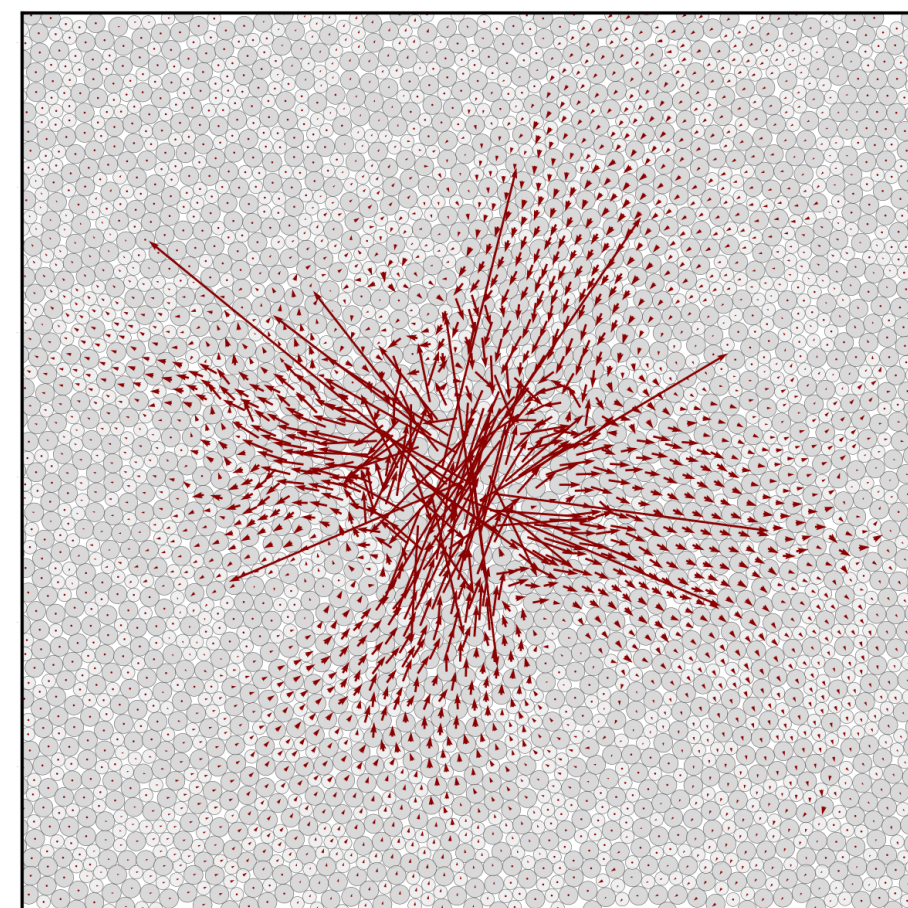
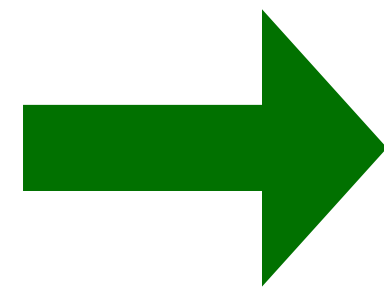
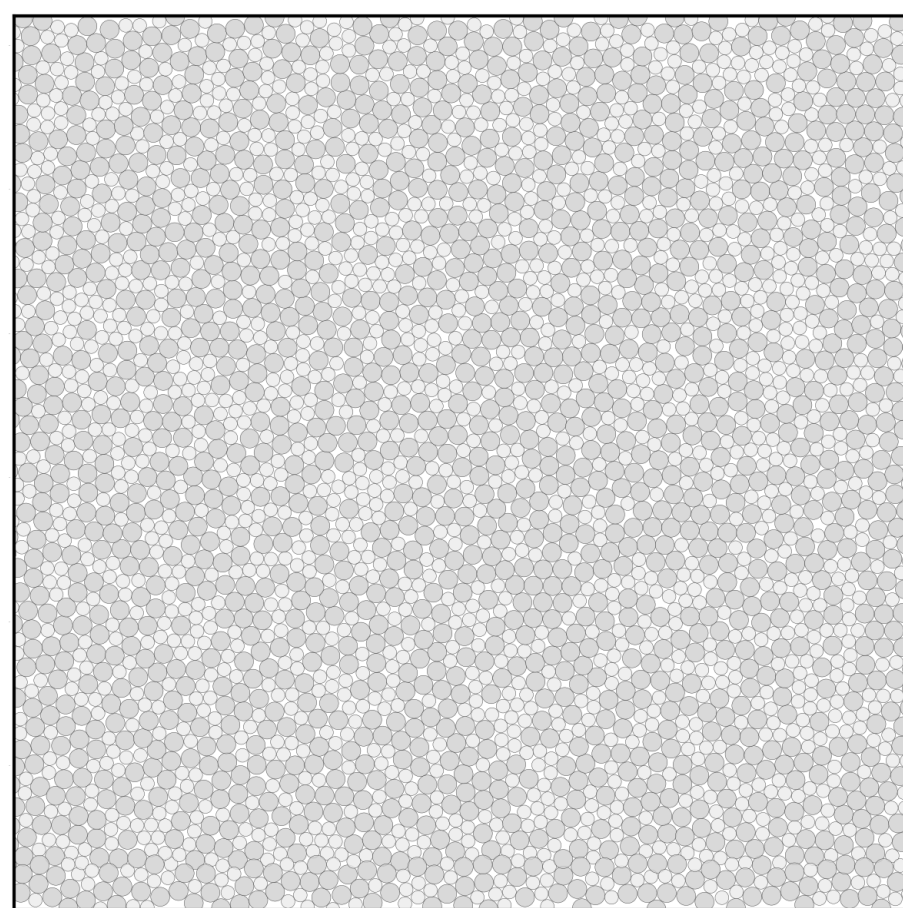
?

不均一運動
(future)



ガラス物理の（ひとつの）中心課題

構造（=たった1枚の写真）の中から、究極的に長時間の「未来」が引き出せるか？



L. Berthier & G. Biroli, RMP (2011)

初期構造
(now)

?

不均一運動
(future)



$t = 0$

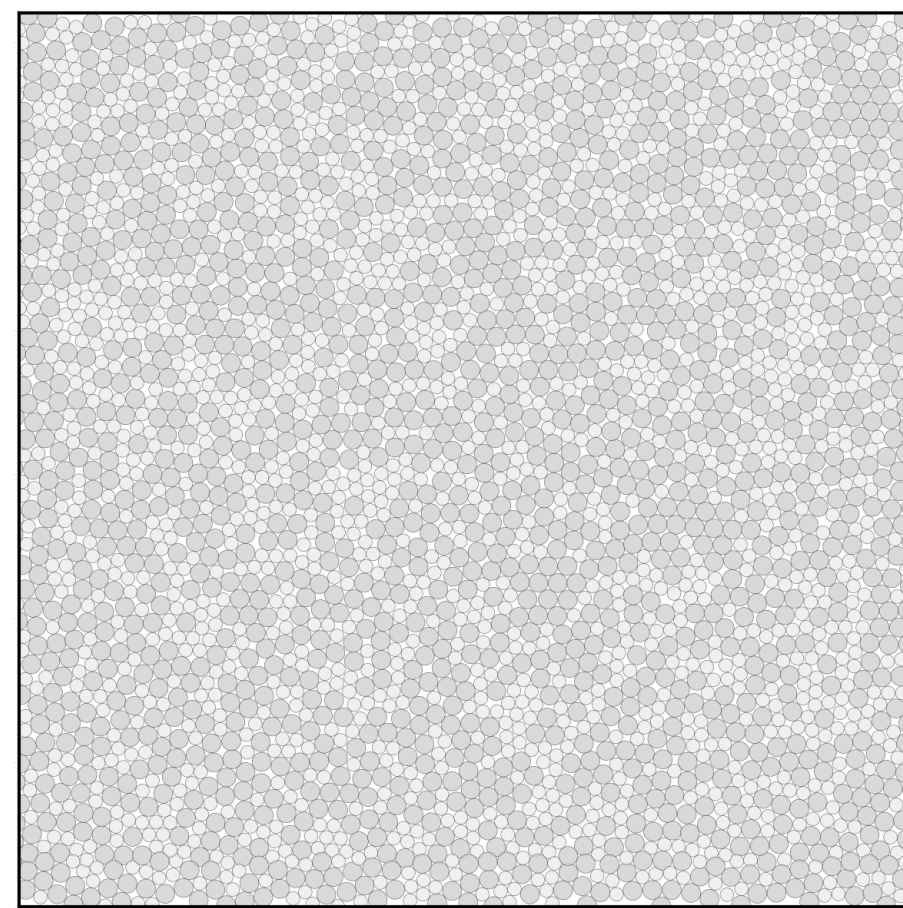
$t = \tau_\beta \sim 0.03\tau_\alpha$

$t = \tau_\alpha$

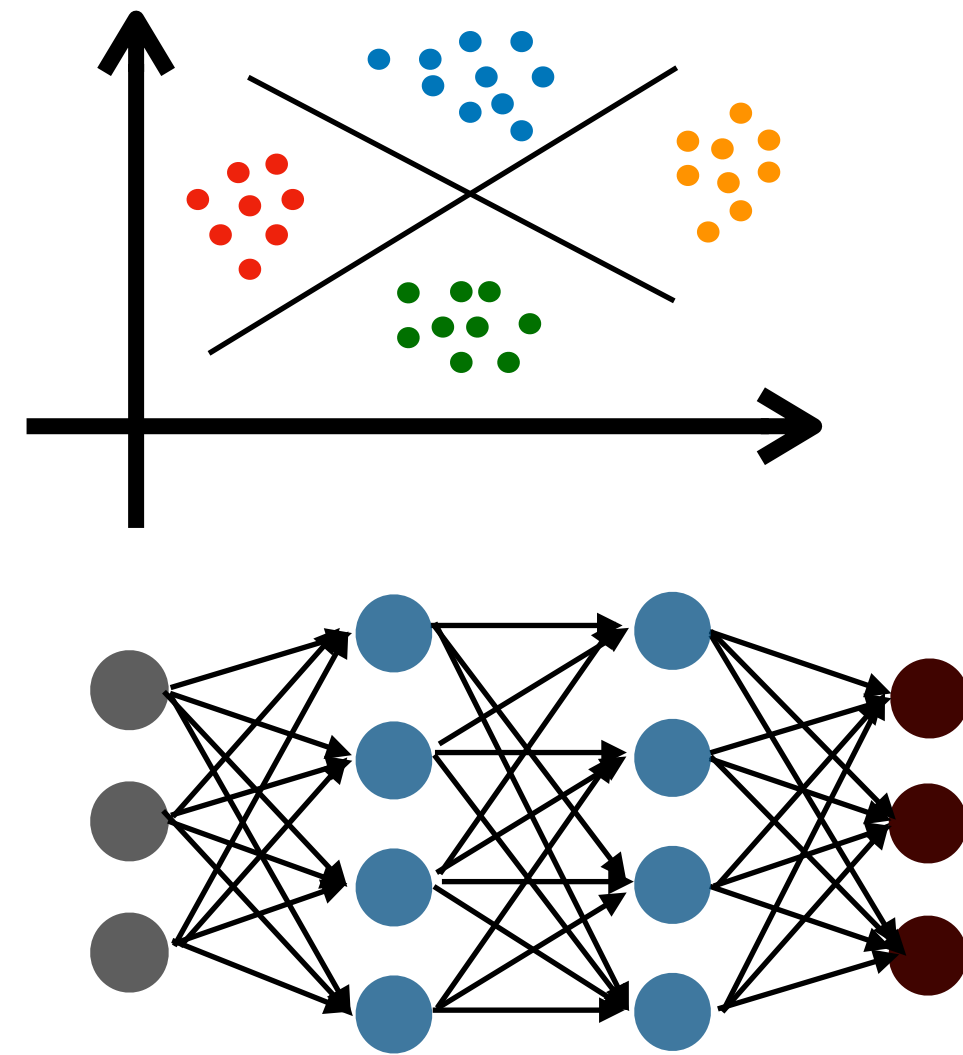
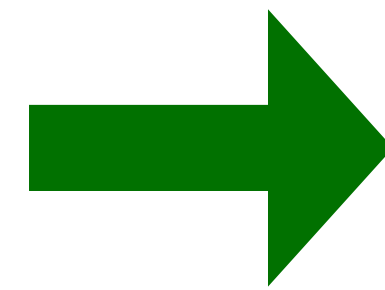
$\log(t)$

ガラスの未来予測の機械学習

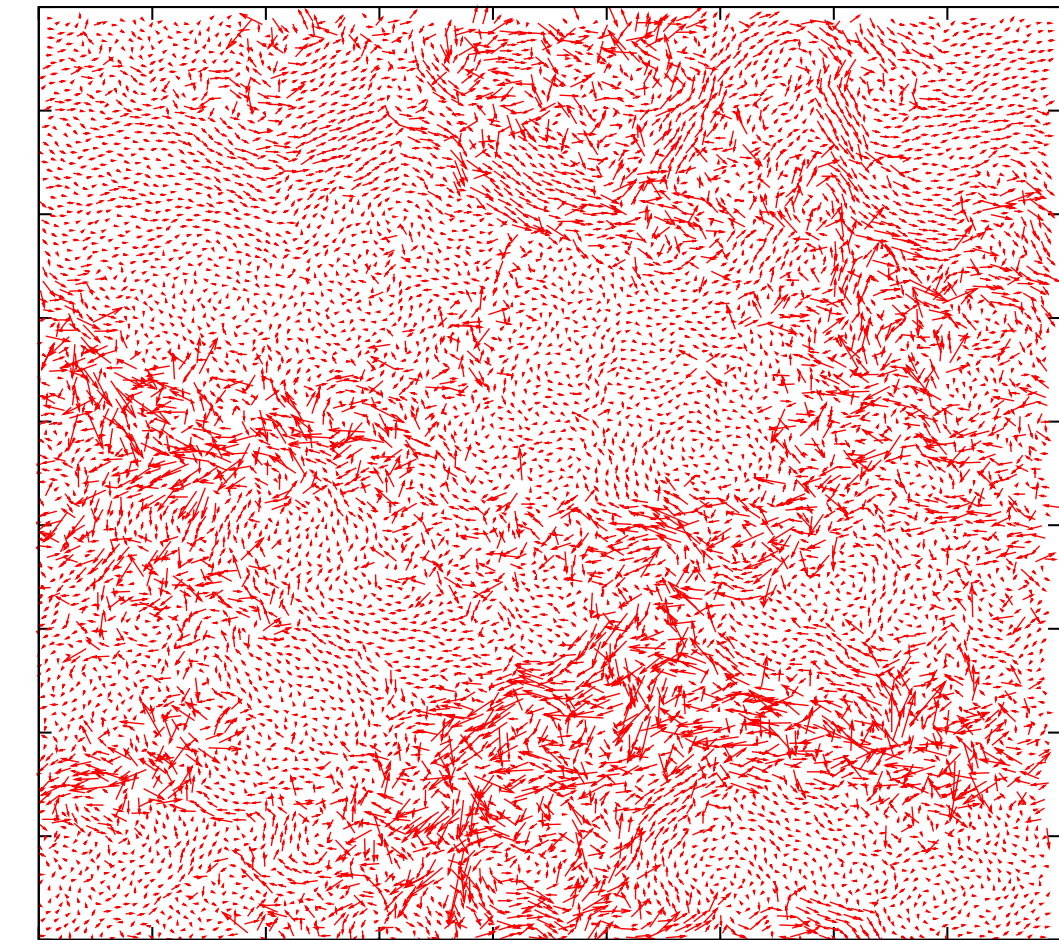
構造 (=たった1枚の写真) の中から、究極的に長時間の「未来」が引き出せる？



初期構造
(now)



SVMs, GNNs,
Physics-based ML etc...



L. Berthier & G. Biroli, RMP (2011)

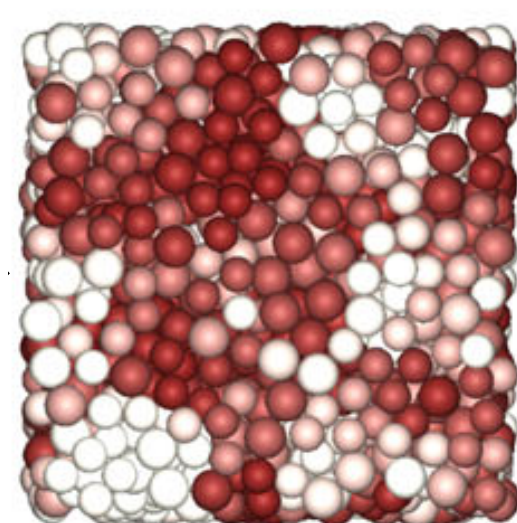
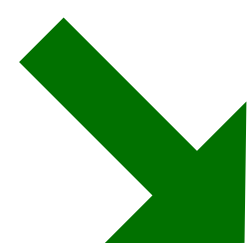
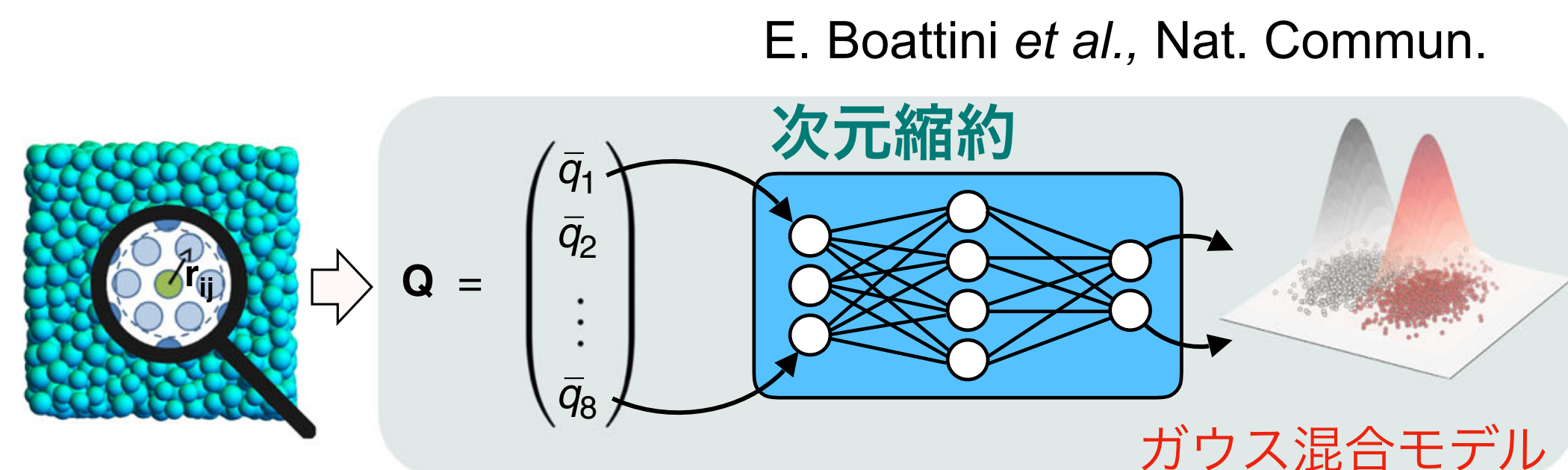
不均一運動
(future)

ガラスへの機械学習

教師なし学習

例一 構造の自動分類 or 抽出

次元縮約, クラスタ解析, GradCAM, etc...

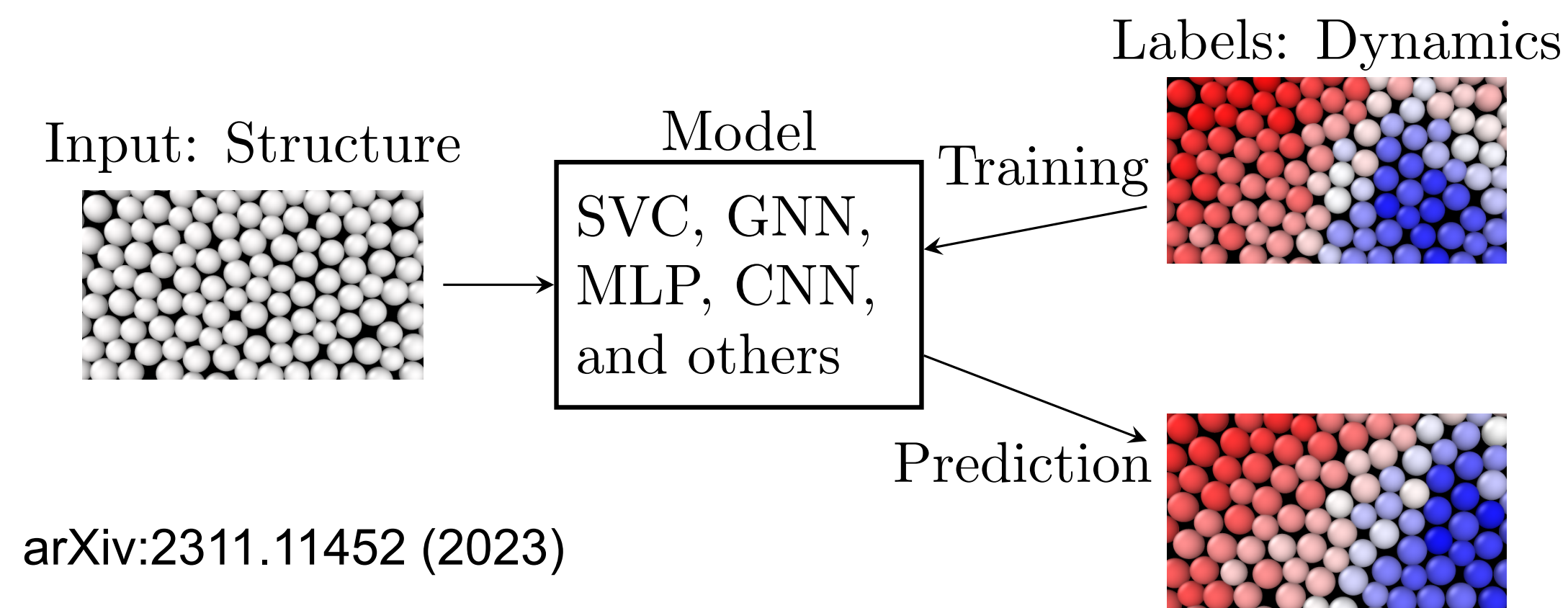


「結晶らしさ」の
強弱の分布抽出

教師つき学習

構造 - 動力学間のフィッティング

例) 粒子運動距離



線形モデル — SVM, LR, etc..

非線形モデル — various NNs

【他、半教師あり学習・強化学習など】

DeepMind の「挑戦」

基礎的な科学の問題への
人工知能によるアプローチ

囲碁 (AlphaGo)

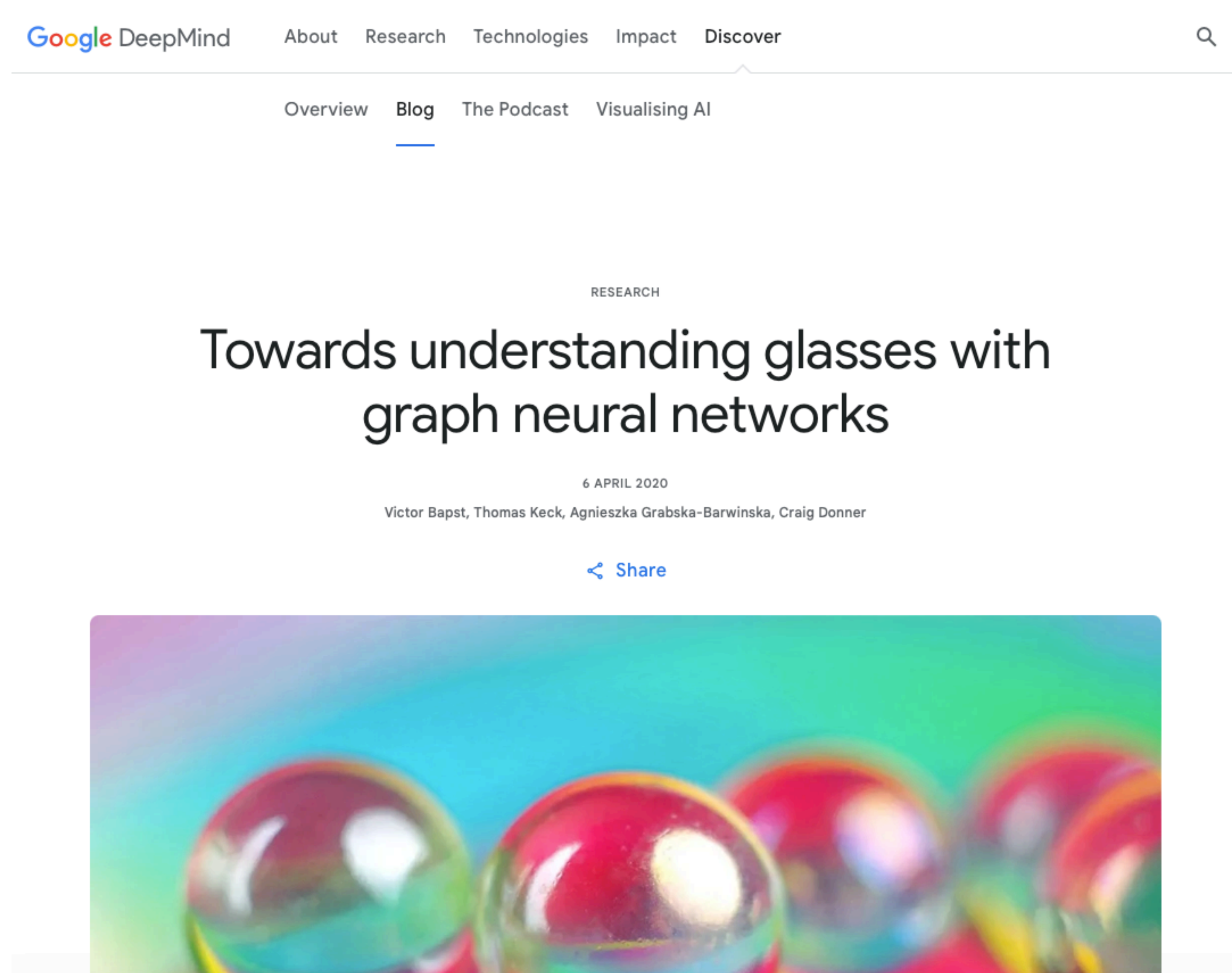
脳科学

タンパク質構造 (AlphaFold)

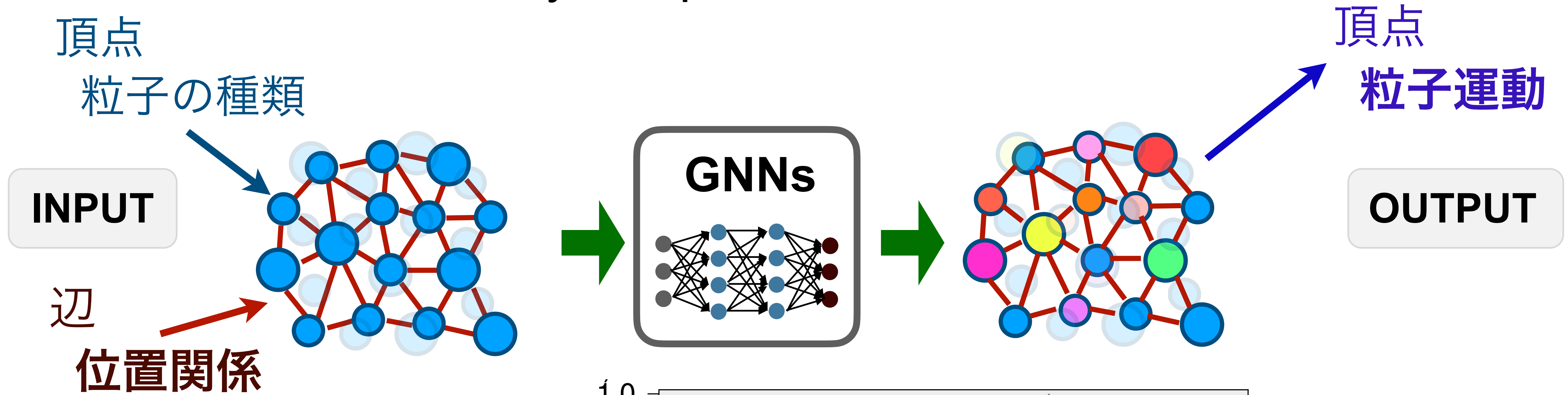
ガラス

行列積演算 (AlphaTensor)

材料データ (GNoME)



GNNs by DeepMind [Nature Physics, 2020]



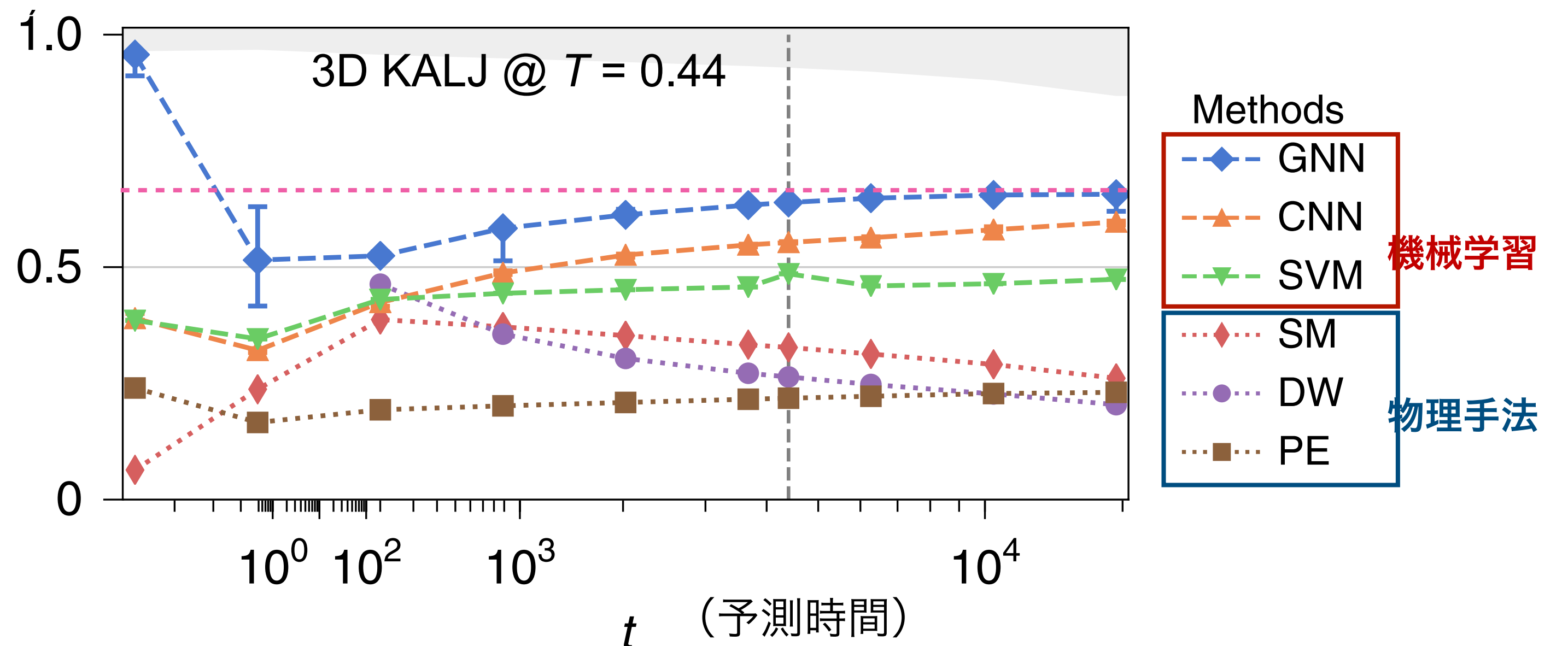
他の手法を圧倒的凌駕

学習モデル

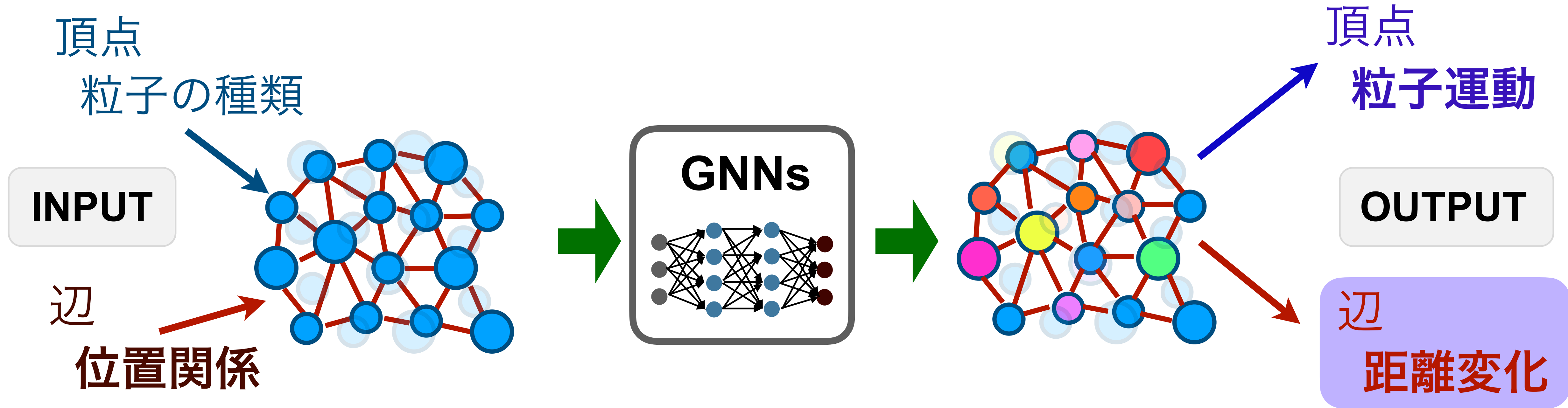
SVM, CNN

物理モデル

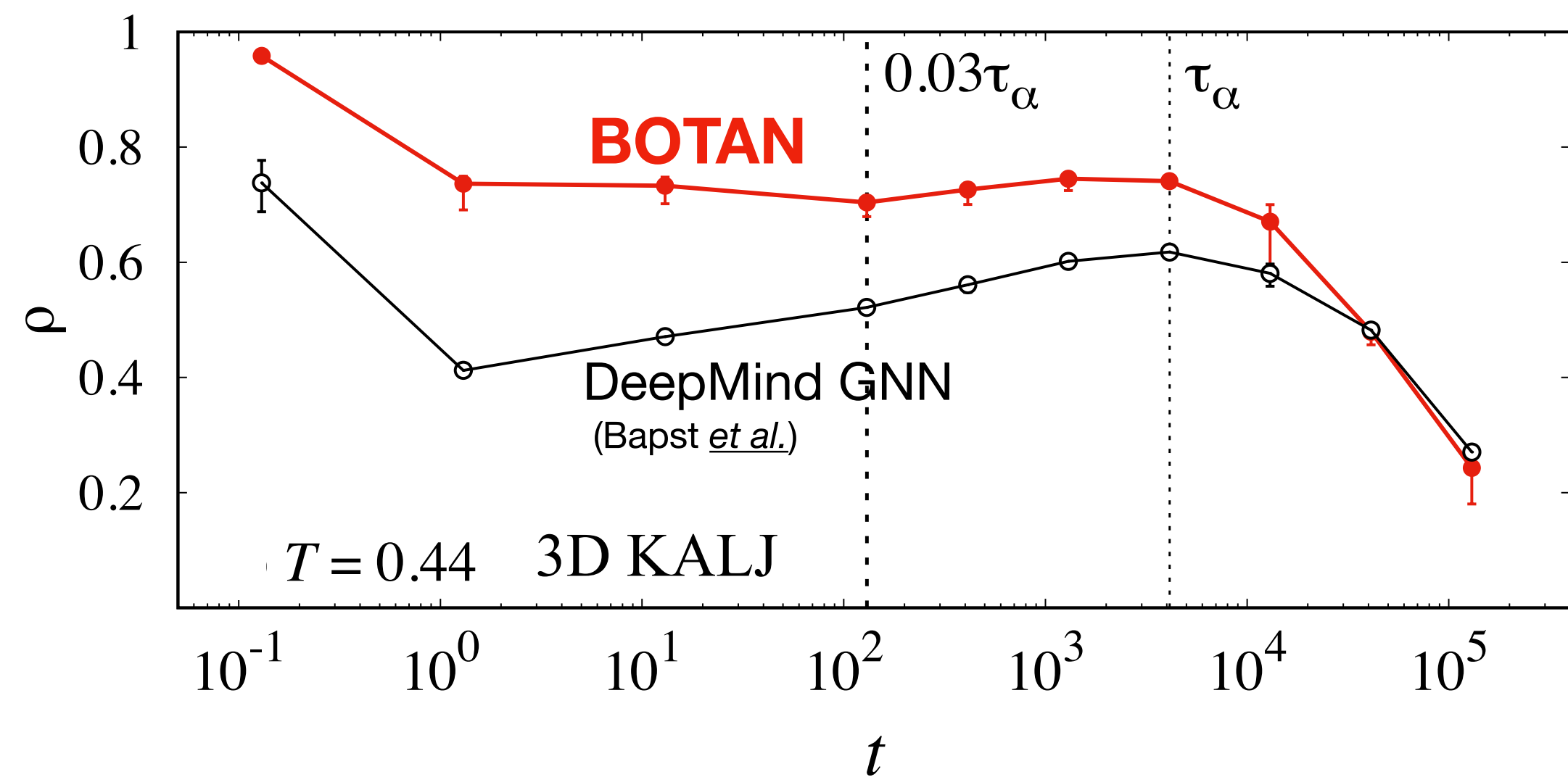
SM = 振動解析



Our GNN — BOND Targeting Network (BOTAN)

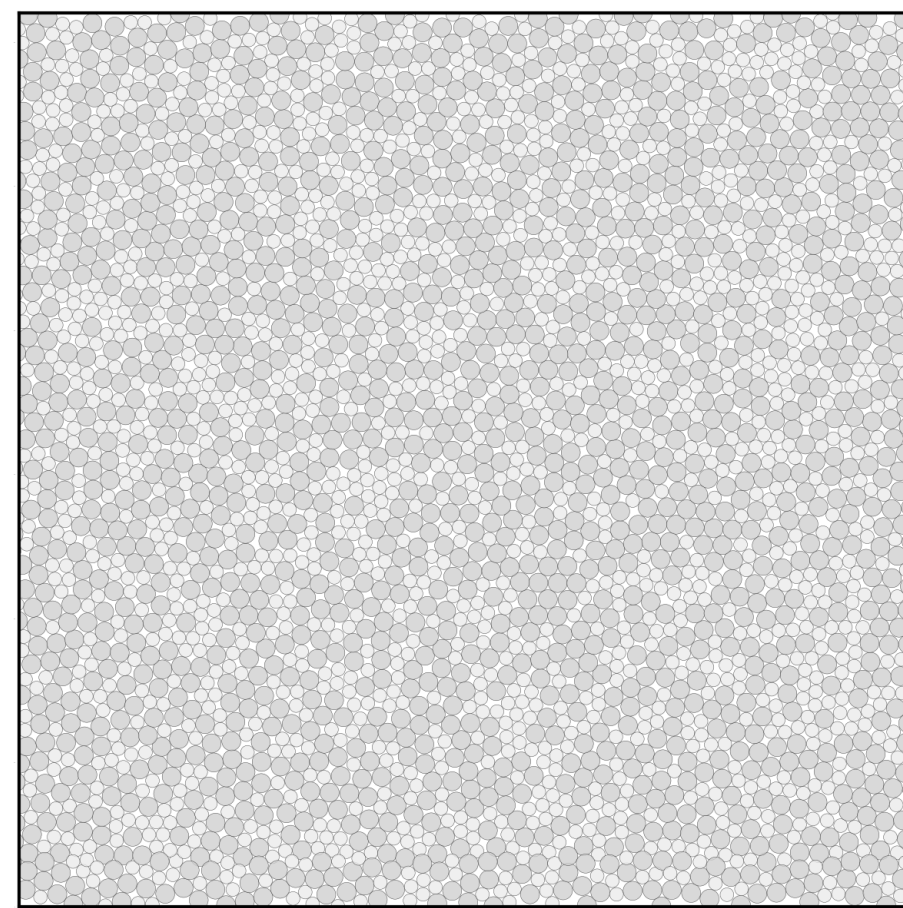


予測精度の「劇的」向上

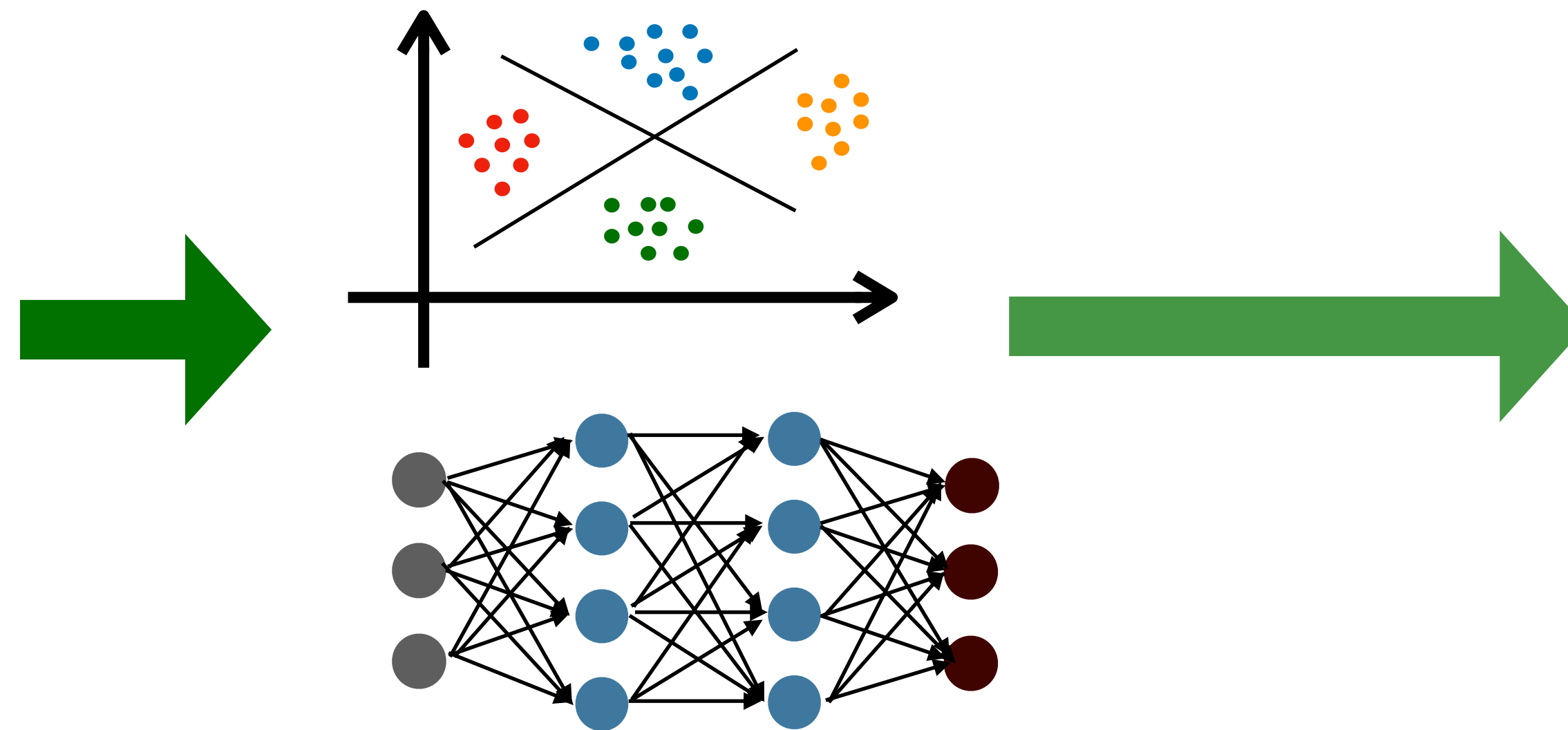


ガラスの未来予測の機械学習

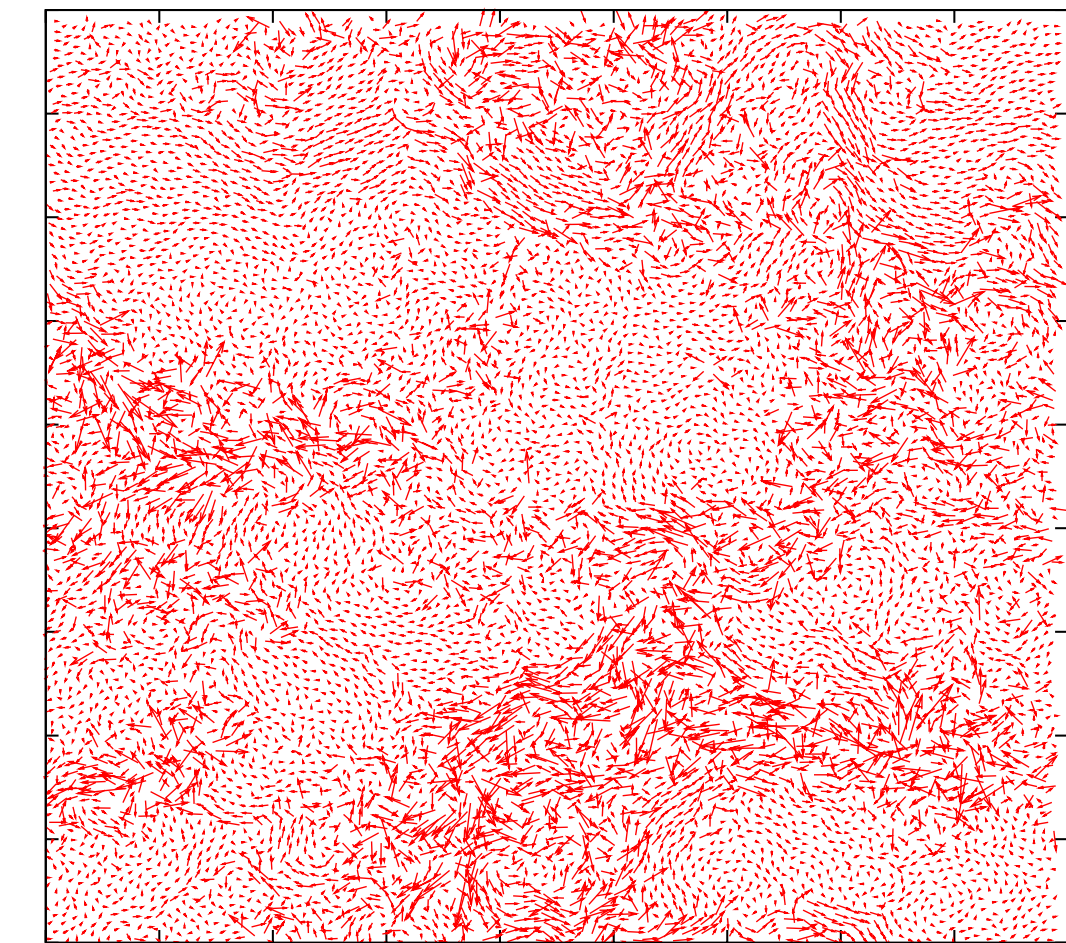
構造 (=たった1枚の写真) の中から、究極的に長時間の「未来」が引き出せる？



初期構造
(now)



SVMs, GNNs,
Physics-based ML etc...



L. Berthier & G. Biroli, RMP (2011)

不均一運動
(future)

→ 深層学習による新しい物理の開拓、予測技術の活用

その後 — “Roadmap” review, preprint arXiv:2311.14752 (2023, submitted)

G. Jung, R. Alkemade, V. Bapst, D. Coslovich, L. Filion, F. Landes, A. J. Liu, F. S. Pezzicoli, H. Shiba, G. Volpe, F. Zamponi, L. Berthier, and G. Biroli

Latest models

supervised machine learning

	model	# params.
GlassMLP [Jung, Biroli, & Berthier]	MLPs with complex (input + loss)	~ 650
Linear Regression [Boattini & Filion]	linear fitting	~ 1000
CNN [Fan & Ma]	CNN (ResNet)	~ $O(10^5)$
SE(3)-equivariant GNN [F. Landes <i>et al</i>]	GNN (node targets)	~ $O(10^6)$
Geo-GNN [Z. Jiang <i>et al</i>]	GNN (node targets) + self attention	~ $O(10^6)$
BOTAN [H. Shiba <i>et al</i>]	GNN (node + edge targets)	~ $O(10^6)$

効率的な特徴抽出

- 様々な物理的制約・拘束条件
 - forward model の利用
- 少ないデータ量 (~ MB)

高い表現力 ↔ 過学習の問題

大量の学習データセット必要
(~ GB)

その後 — “Roadmap” review, preprint arXiv:2311.14752 (2023, submitted)

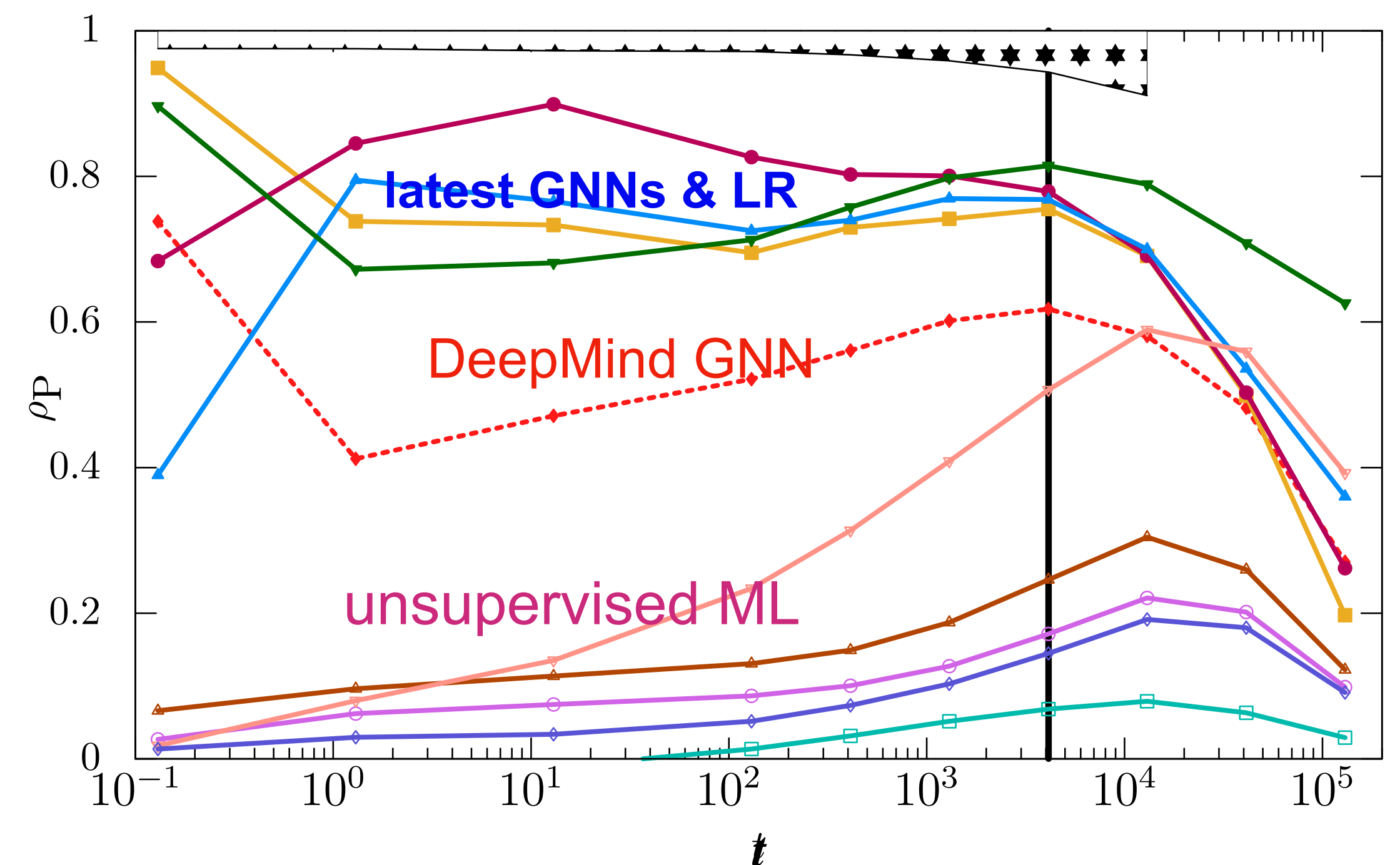
G. Jung, R. Alkemade, V. Bapst, D. Coslovich, L. Filion, F. Landes, A. J. Liu, F. S. Pezzicoli, H. Shiba, G. Volpe, F. Zamponi, L. Berthier, and G. Biroli

Latest models supervised machine learning

	model	# params.
GlassMLP [Jung, Biroli, & Berthier]	MLPs with complex (input + loss)	~ 650
Linear Regression [Boattini & Filion]	linear fitting	~ 1000
CNN [Fan & Ma]	CNN (ResNet)	~ $O(10^5)$
SE(3)-equivariant GNN [F. Landes <i>et al</i>]	GNN (node targets)	~ $O(10^6)$
Geo-GNN [Z. Jiang <i>et al</i>]	GNN (node targets) + self attention	~ $O(10^6)$
BOTAN [H. Shiba <i>et al</i>]	GNN (node + edge targets)	~ $O(10^6)$



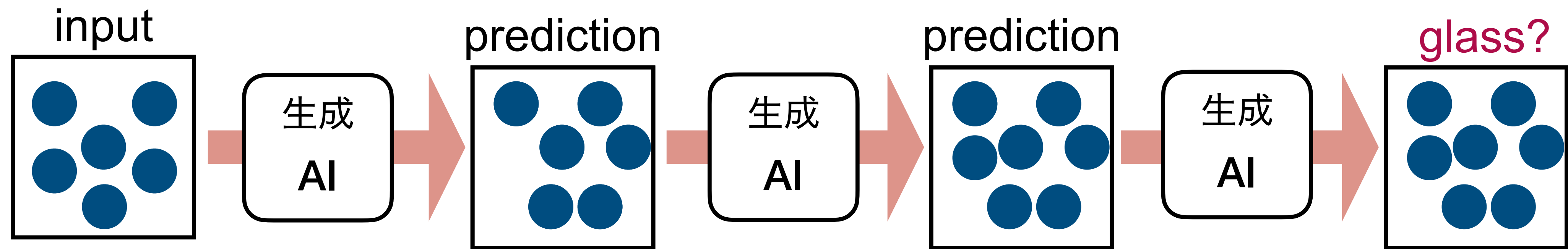
Prediction accuracy (Pearson coeffs.)



Roadmap review — 将来展望

G. Jung, R. Alkemade, V. Bapst, D. Coslovich, L. Fillion, F. Landes, A. J. Liu, F. S. Pezzicoli, H. Shiba, G. Volpe, F. Zamponi, L. Berthier, and G. Biroli, preprint arXiv:2311.14752 (2023, submitted)

- ▶ ガラス動力学の「未来予測」による超長時間のサンプリング?
(超低温ガラス, “ultrastable” glass)



- 2020 年頃からいくつかの生成モデル利用の試み
VAE, 自己回帰モデル
計算量的な困難、扱えるシステムサイズが極めて限定
- 拡散モデル, Flow Matching など最新手法の活用?

GPU 学習速度評価

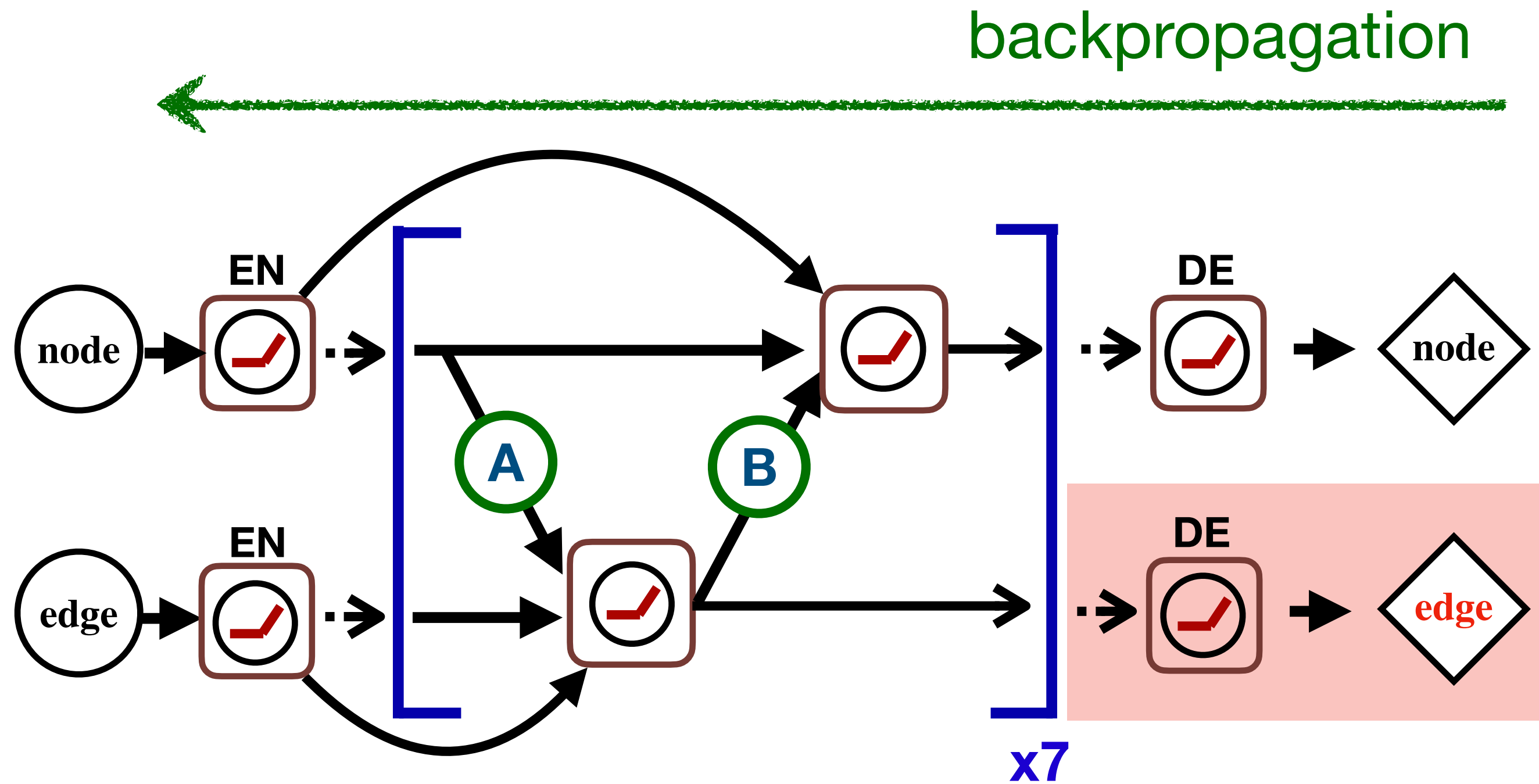
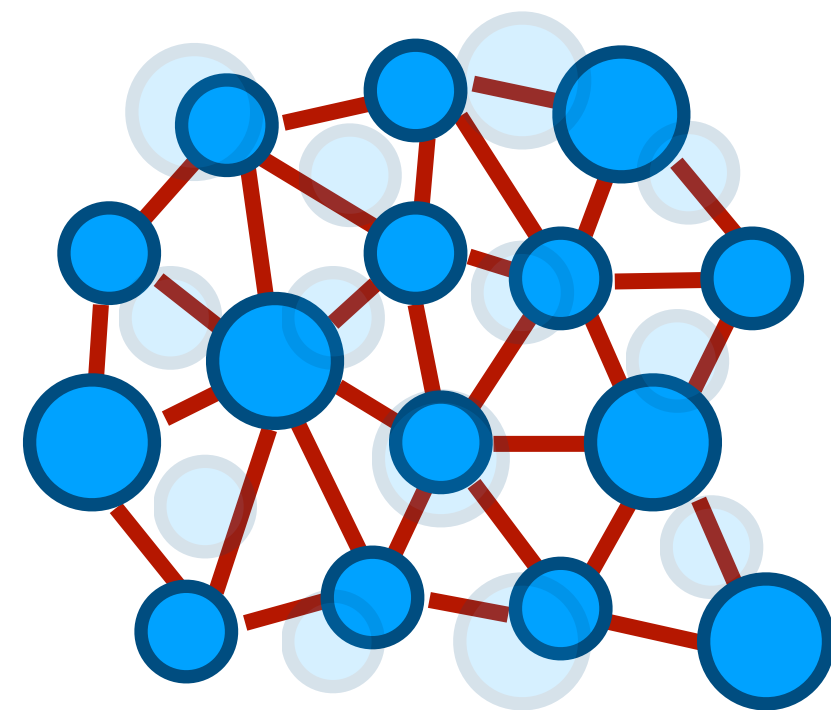
- 1 単体の学習のみ
 - NVIDIA Tesla V100 SXM (32 GB) @ UHyogo
 - NVIDIA A100 SXM (40 GB) on Wisteria-A @ UTokyo
 - NVIDIA A100 PCIe (40 GB) @ UTokyo
 - NVIDIA H100 HBM3 @ ITC, UTokyo
 - AMD Instinct MI100, MI210 PCIe @ ITC, UTokyo
- DataLoader は測定から除外
- 今回は、推論のベンチマークはなし

Bond Targeting Network (BOTAN)

[Shiba *et al.*, JCP 2023]

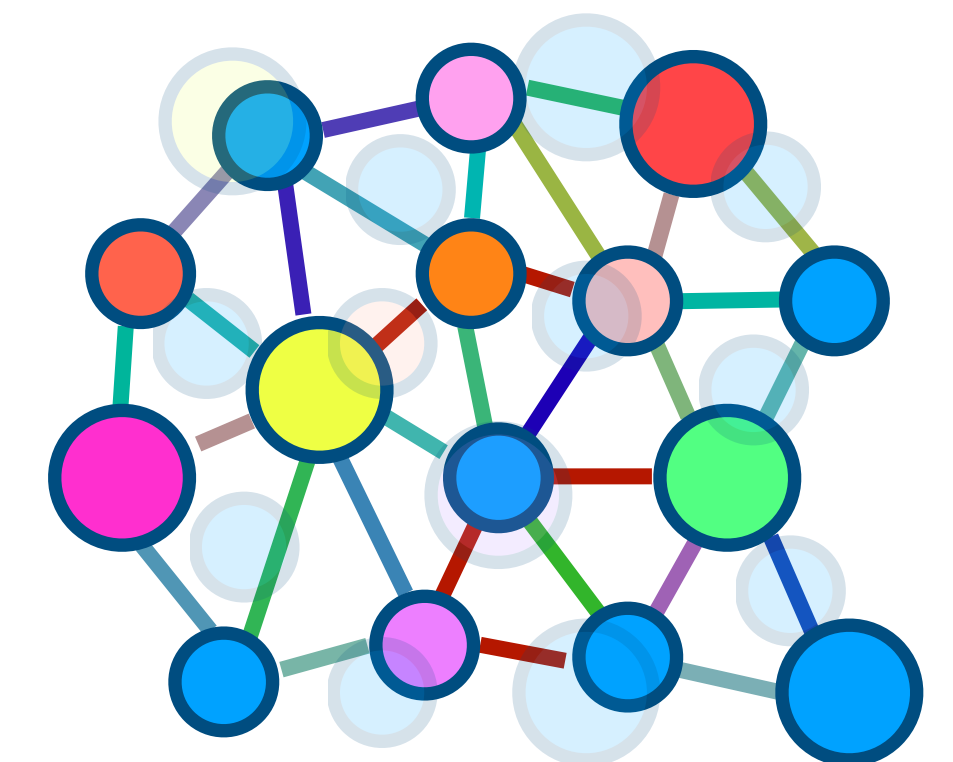
node input

粒子の種類



node output


粒子運動

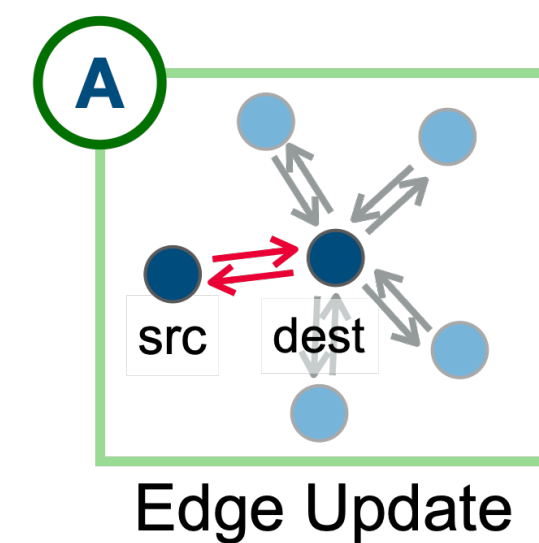


edge input

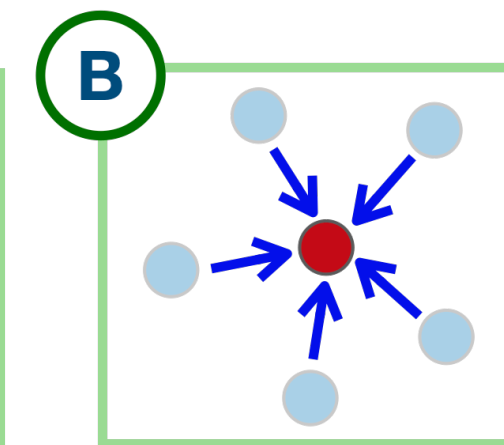
相対位置

(neighbors $r_{ij} < 2.0\sigma_A$)

 = 2-layer MLP



Edge Update



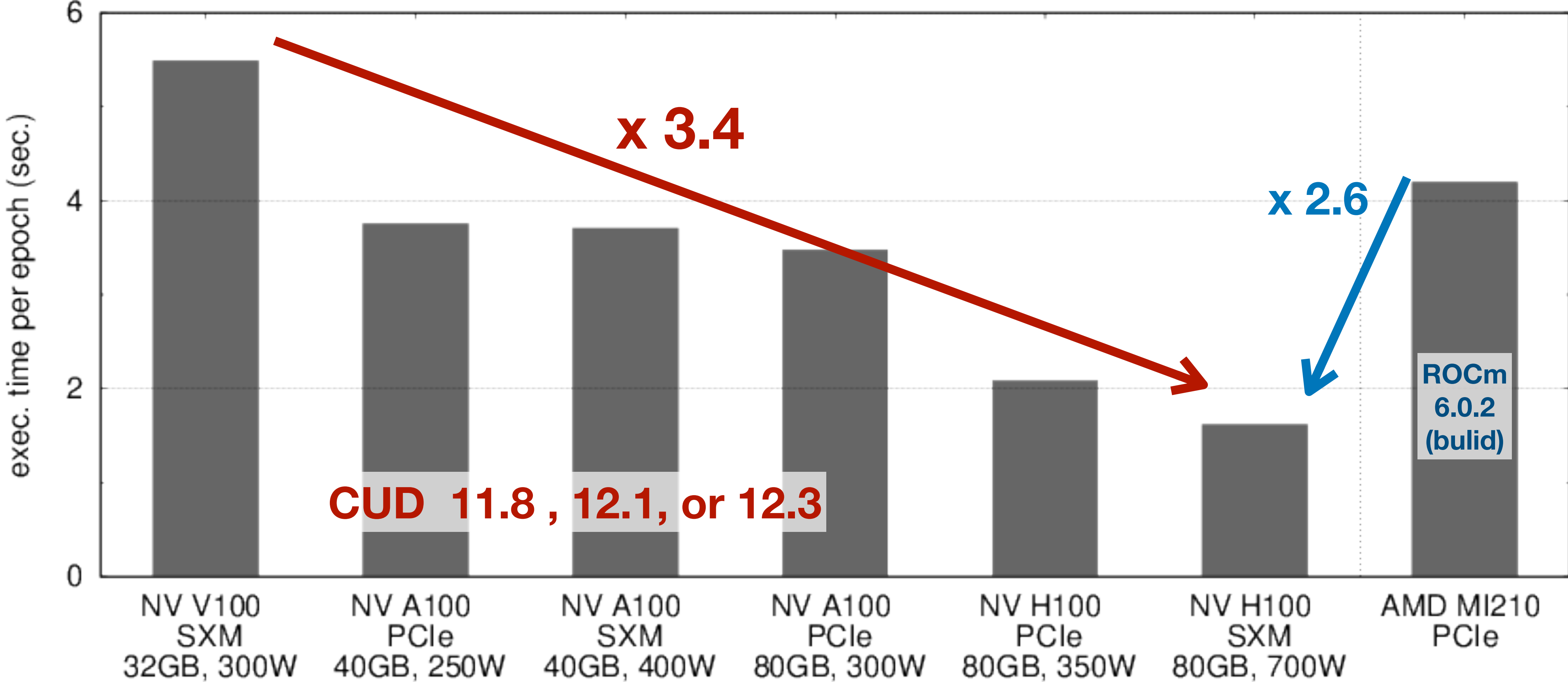
Node Update

edge output

粒子間距離変化

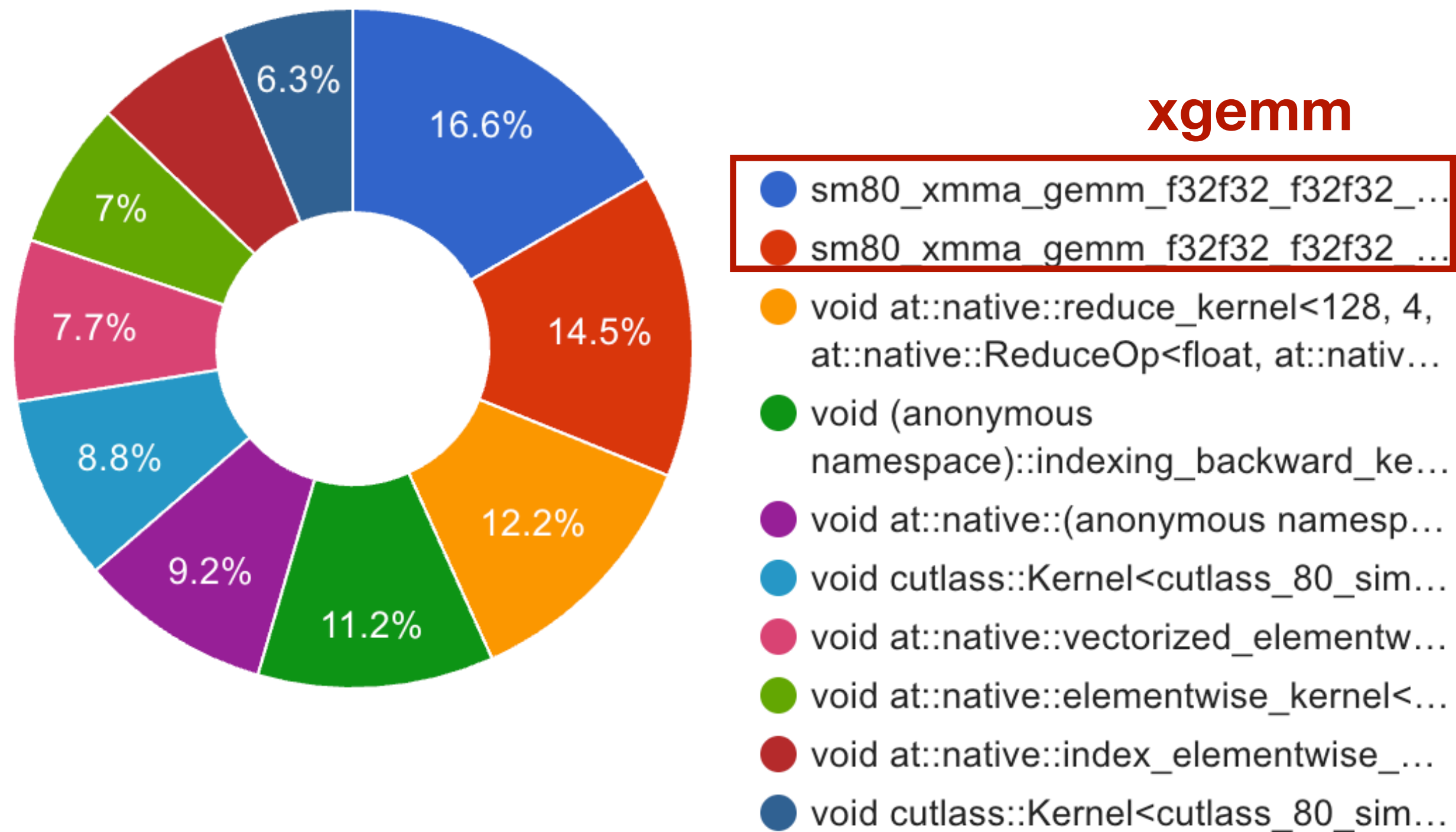
BOTAN GNN (MPNN) Benchmark

PyTorch 2.2.1 + PyTorch Geometric 2.5

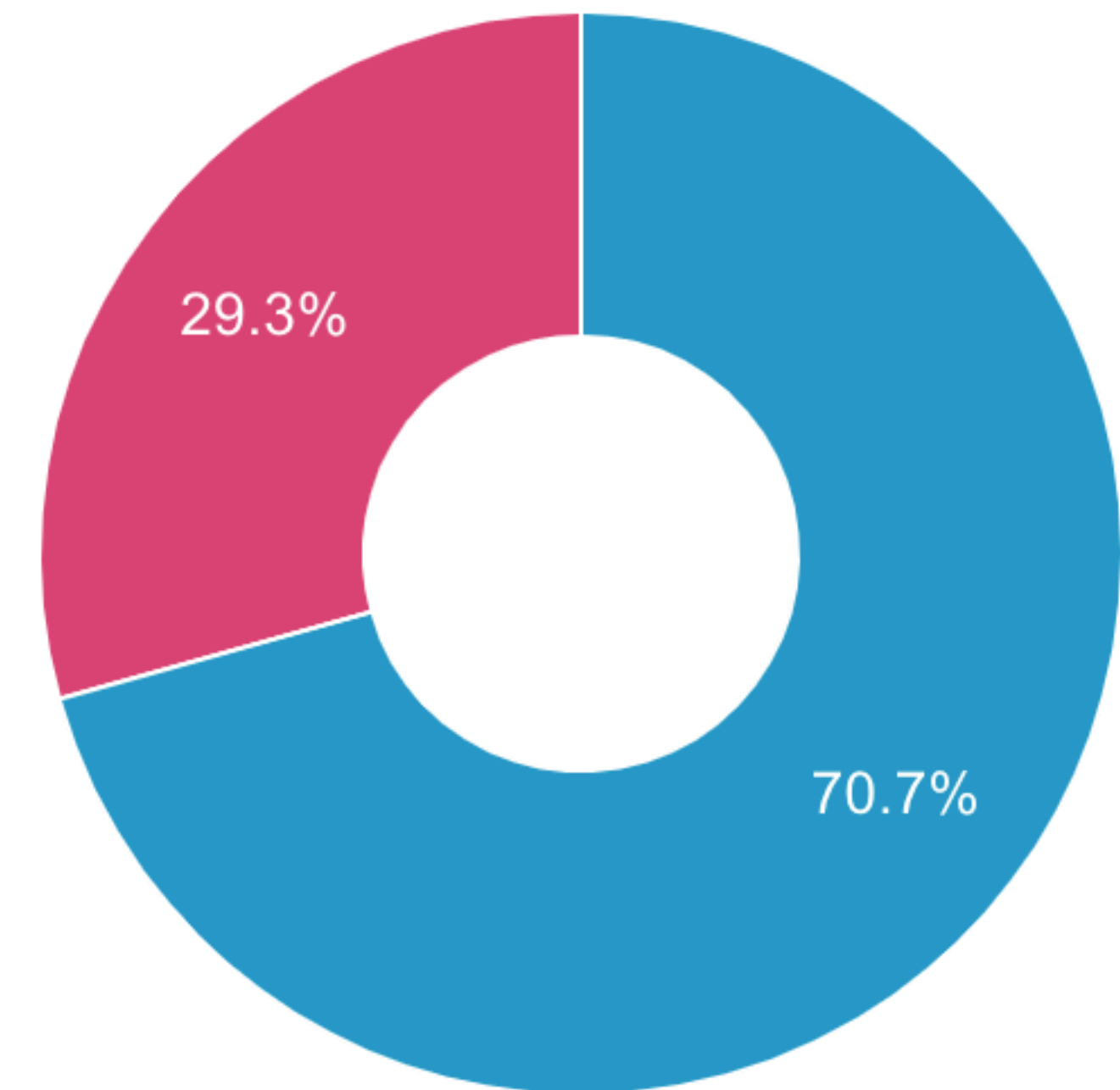


NVIDIA H100 (HBM3) benchmarking

Total Time (us)



Tensor Cores Utilization



NV H100 (HBM3)

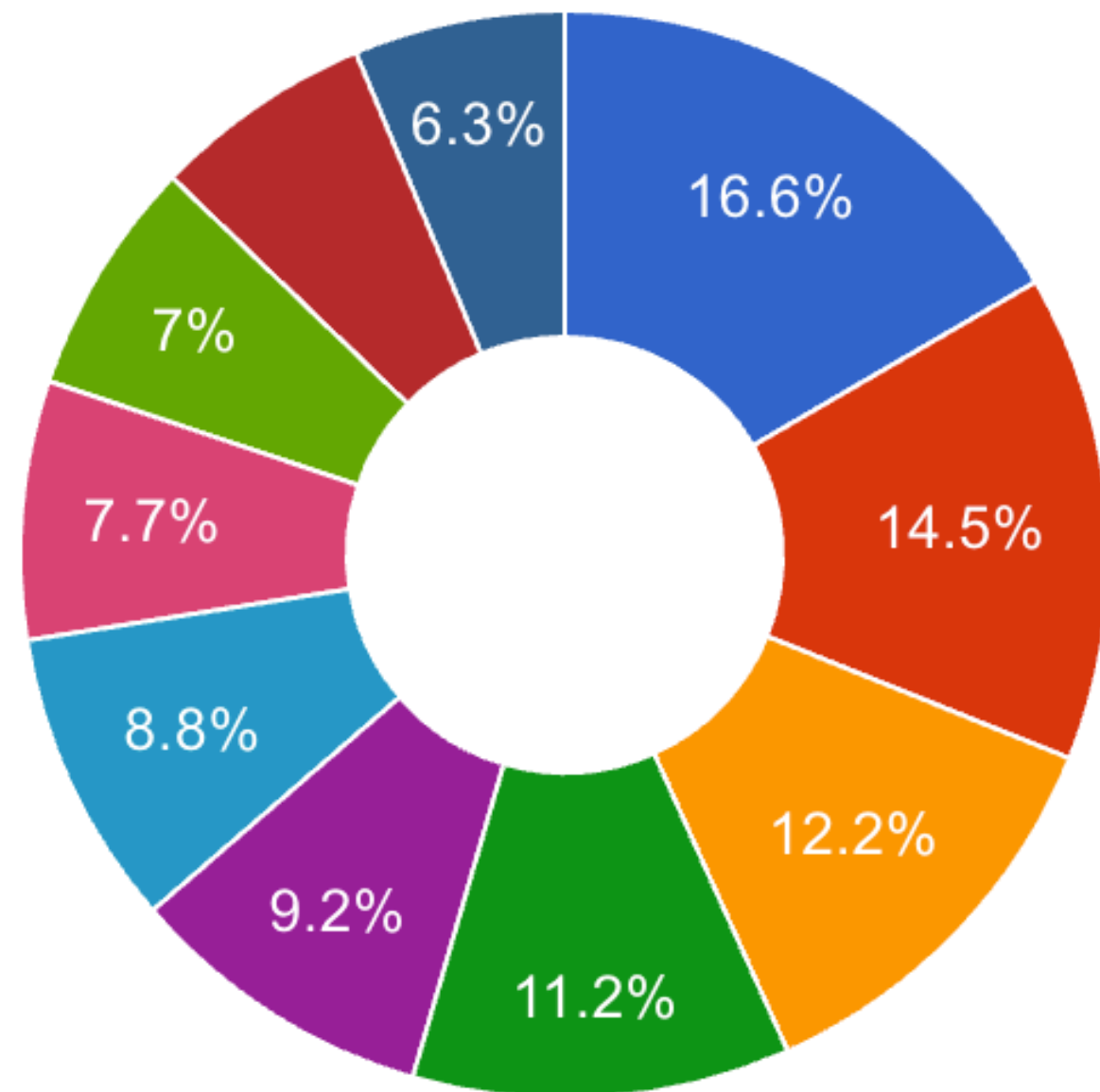
vs

AMD MI210 (PCIe)

TF32 tensor 989 TFLOPs

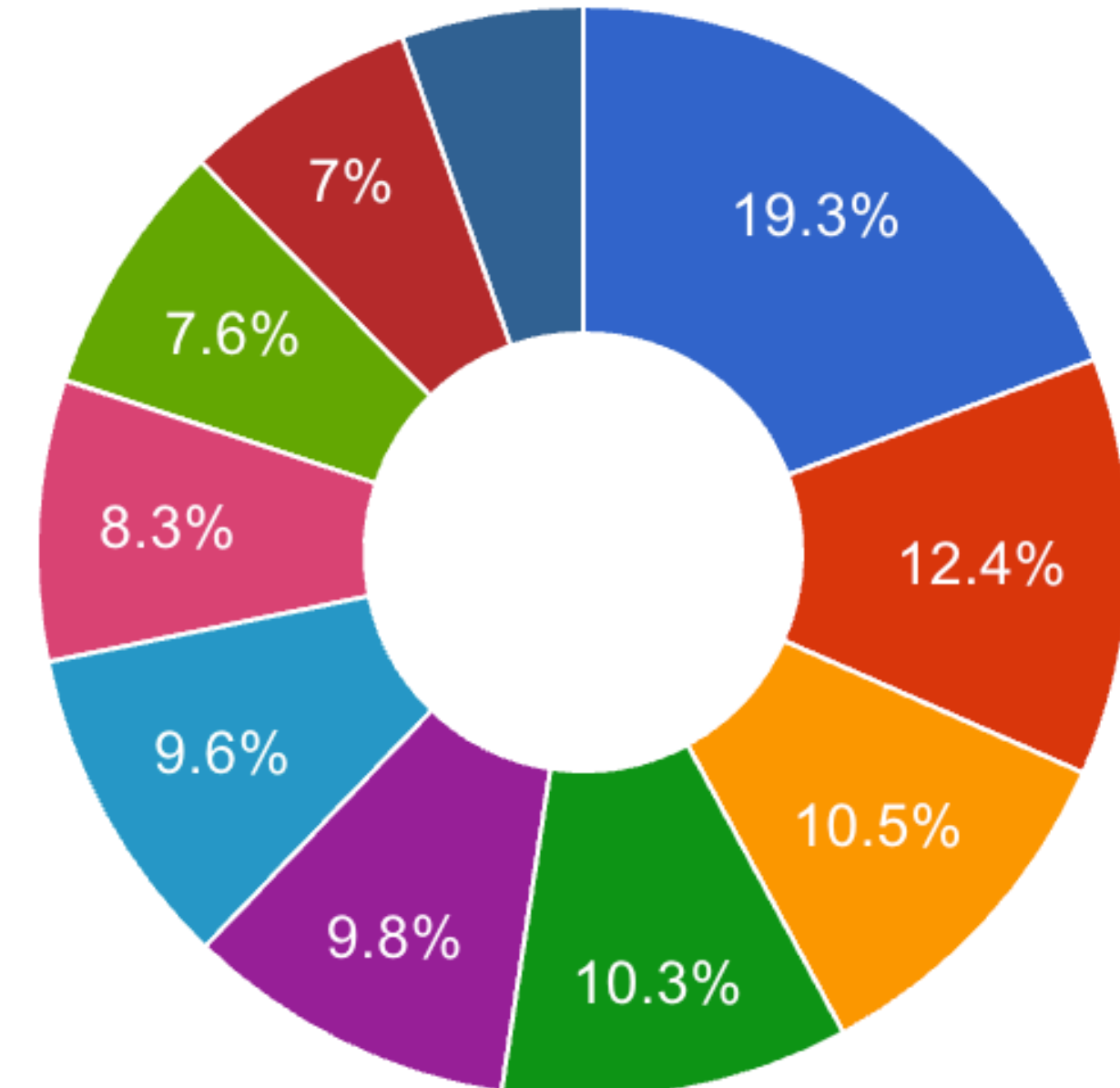
FP32/64 matrix 45.3 TFLOPs

Total Time (us)



- sm80_xmma_gemm_f32f32_f32f32_...
- sm80_xmma_gemm_f32f32_f32f32_...
- void at::native::reduce_kernel<128, 4, at::native::ReduceOp<float, at::nativ...
- void (anonymous namespace)::indexing_backward_ke...
- void at::native::(anonymous namesp...
- void cutlass::Kernel<cutlass_80_sim...
- void at::native::vectorized_elementw...
- void at::native::elementwise_kernel<...
- void at::native::index_elementwise_...
- void cutlass::Kernel<cutlass_80_sim...

Total Time (us)

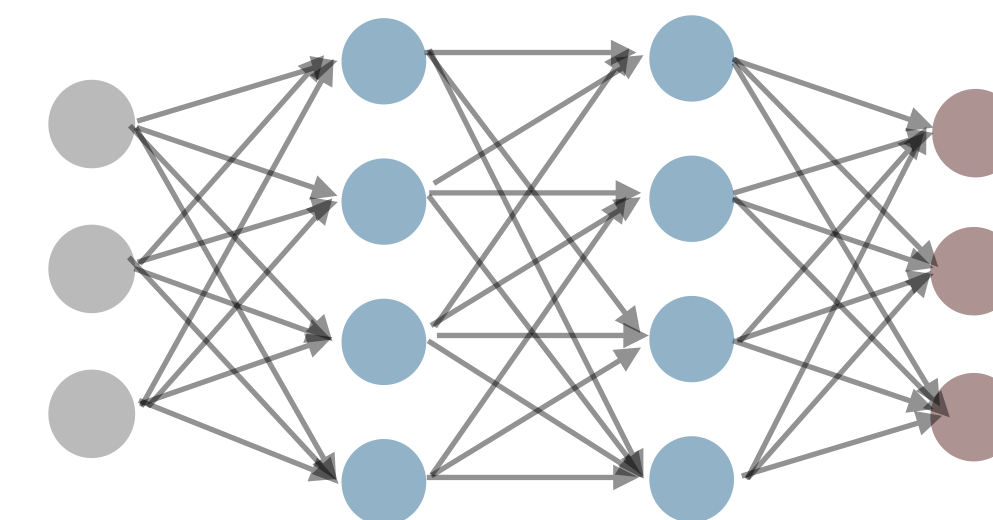
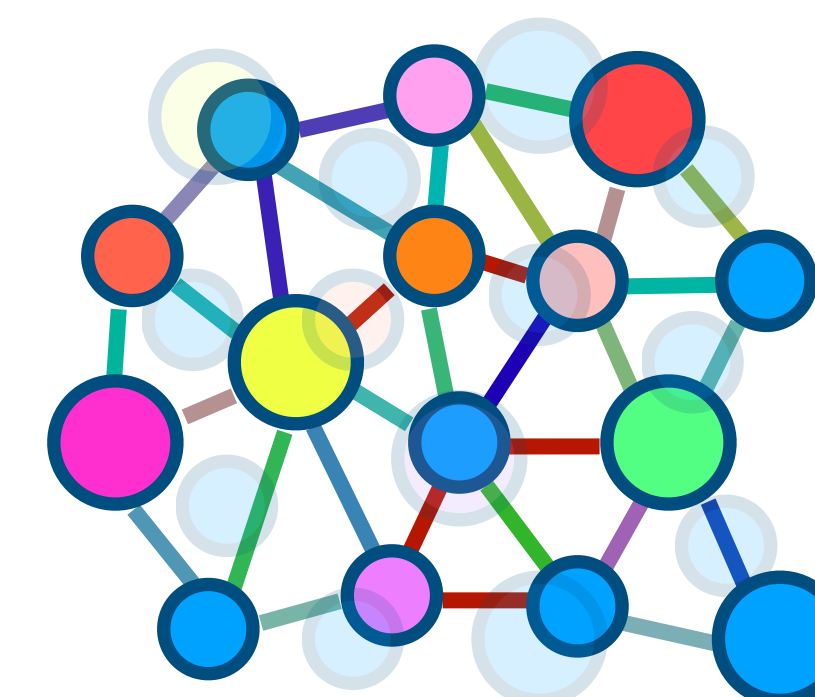


- Cijk_Alik_Blijk_SB_MT64x64x32_MI...
- Cijk_Ailk_Blijk_SB_MT128x96x16_M...

まとめ（にかえて）

ガラスの深層学習

- 超長時間のMDデータのGNN 学習 → 「最高精度」の予測
 - 何をAIが「理解」しているのか
 - どういった新たな「計算」「サンプリングに」使えるか
- 今後、重要になりうること
 - 表現力 + 少データでの学習 — 教師なし学習との組み合わせ
 - 大規模MD データへの活用
 - 生成モデルとのドッキング
- GNN の性能評価
 - multi-arch Benchmarking に簡便



[H. Shiba](#), et al., J. Chem. Phys. **158**, 184503 (2023).

Code & Dataset https://github.com/h3-Open-BDEC/pyg_botan

G. Jung, R. Alkemade, V. Bapst, D. Coslovich, L. Fillion, F. Landes, A. J. Liu, F. S. Pezzicoli, [H. Shiba](#), G. Volpe, F. Zamponi, L. Berthier, and G. Biroli, preprint arXiv:2311.14752 (2023)

Dataset on Zenodo: <https://zenodo.org/records/10118191>

Thank you !