

ガラス系の構造抽出手法の開拓

大阪大学 D3センター 川崎猛史

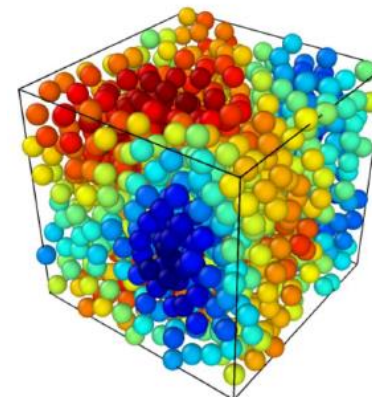
目的 ガラス系で観測される動的不均一性の起源を解明すること。

内容 分子動力学シミュレーションの静的スナップショットをスーパーコンピュータで大規模に生成し，深層学習機にかける。

結果 静的なスナップショットの学習から，ガラス系の遅いダイナミクスを牽引する特徴構造の抽出に成功した。

利用した計算機	SQUID 汎用CPUノード群
ノード時間	21923.20 時間
使用メモリ	163.9 GB
並列化	singleノード

(a) Grad-CAM Γ^L



(b) dynamic propensity dr_s

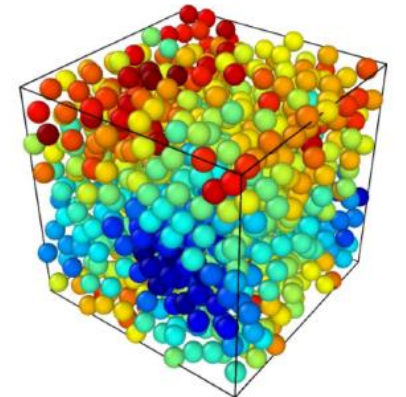


図 左：構造解析結果．右：ダイナミクス分布．これらの相関が認められる．