

# GDyNets 在玻璃化体系中的应用

Author: 王子龙

---

Topic: 机器学习与玻璃化

Last Edit: *February 2nd, 2024*

## Abstract

## 1. 实验思路

## 2. 实验进度记录

日期：2024.3.14.

整理了各种文献，在粗略地搜索下，大致浏览了一些文献<sup>1</sup>，选择了文献<sup>2</sup>作为入手点。有以下原因：

- 原理清晰——该文章所用方法<sup>3</sup>在蛋白质折叠动力学分析领域已比较完善。
- 领域比较贴近——即使数据分析时需要修改代码也不需要大幅改动。
- 工具开源——得益于作者的开源精神，所需数据与代码全部可以直接获取。<sup>4</sup>

---

<sup>1</sup>见??，为略读。

<sup>2</sup>Xie, T., France-Lanord, A., Wang, Y., Shao-Horn, Y. & Grossman, J. C. Graph dynamical networks for unsupervised learning of atomic scale dynamics in materials. Nat Commun 10, 2667 (2019).

<sup>3</sup>为基于 Koopman 方法与 MSM 方法发展的动力学分析方法，结合了变分法与图机器学习方法加以发展。Koopman 方法与 MSM 方法这两类算法分别在流体力学、工程力学与蛋白质分析领域得到广泛应用。

<sup>4</sup>截止 3.14 下午 16:19，在数据重复说明文件的提示下，重复过程正常进行。