

# BAI

## 智源学者成果展示——人工智能的数理基础

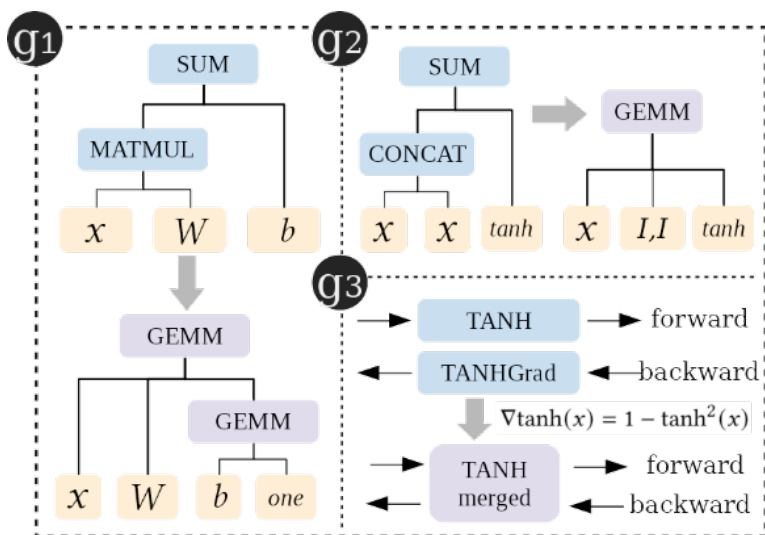
作者 王 涵（北京应用物理与计算数学研究所副研究员、智源青年科学家）

2020年6月

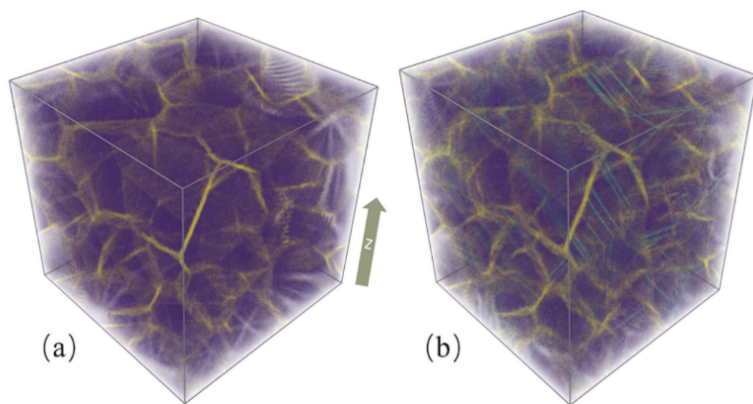
## 深度学习分子动力学的高性能优化

北京应用物理与计算数学研究所副研究员、智源青年科学家王涵等在 27360 张 GPU 加速卡上优化实现了深度学习分子动力学，首次实现了上亿原子体系的第一性原理精度模拟，模拟速度达到创纪录的 1 纳秒每天。这项工作相比当今最快的第一性原理精度模拟提升速度一千倍以上。

Weile Jia, Han Wang, Mohan Chen, Denghui Lu, Jiduan Liu, Lin Lin, Roberto Car, Weinan E, Linfeng Zhang, Pushing the limit of molecular dynamics with ab initio accuracy to 100 million atoms with machine learning, arXiv:2005.00223, 2020



本项工作对 TensorFlow 计算图的优化。



千万原子纳米铜多晶体系的拉伸模拟。

# Beijing Academy of Artificial Intelligence



微信关注  
北京智源人工智能研究院