

西部(重庆)科学城“微著”2.0 重磅上线

在科幻小说《三体》中,三体人所在星系有3个“太阳”,“太阳”内部发生着极其复杂的运动,且规律难以预测。如果将每个“太阳”理解为一个尺度,那么人们已经找到了在这尺度中从微观到宏观观察并对不同尺度问题进行模拟,进而能快速求解超大规模多体问题的方法。试想,如果要计算“太阳”与“太阳”间有何联系,又该怎么办呢?

西部(重庆)科学城的一款自研的国产通用科学计算平台,就能很好解决这个问题。

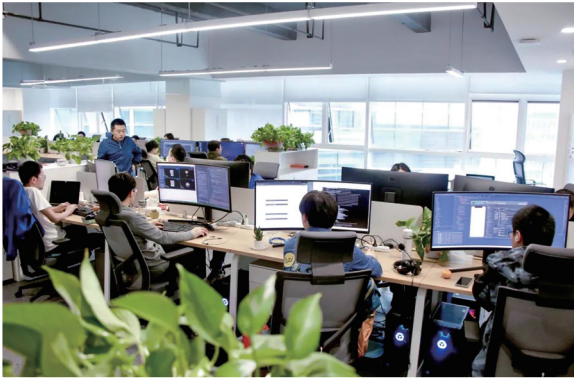
位于西部(重庆)科学城的沪渝人工智能研究院多体智能软件项目组自主研发了多体智能软件“微著”旗舰产品——随机分批分子动力学(RBMD)模拟软件云计算平台2.0版,该产品运用随机分批Ewald算法(RBE)和随机分批链表算法(RBL),有效解决了长程与短程作用力计算中的效率瓶颈,在技术上实现了GPU单卡模拟千万原子。



RBMD 计算平台界面截图

跨尺度模拟计算在国家科技布局中占据关键地位,“微著”2.0版作为一款先进的通用科学计算平台,不仅能够从微观到宏观对不同尺度问题进行精准模拟,快速求解超大规模多体问题,更重要的是,其具备跨尺度模拟计算能力,在我国多体问题微观仿真领域具有较强的能力。

在实际应用中,上海交大全固态电池项目研究成为“微著”2.0实力的有力见证。固态电池作为储能技术的重要发展方向,其性能受固态电解质影响较大。此前科研人员面临电池充放电导致固态电解质性能损失的难题,而“微著”2.0团队通过创新的建模、计算与分析,将微观世界清晰可视化,精准锁定锂离子电导率衰减这一核心问题,并给出精确的调控方案,如添加特定材料及合理用量,成功让锂离子电导率维持在高水平。这一成果使得科研人员后续实验和工作效率大幅提升,研究时间相比传统算法减少一半,为材料科技的突破和国家相关产业的发展提供了坚实支撑。



上海交通大学重庆人工智能研究院工作室内景
雷键/摄

同时,“微著”2.0版在科学计算领域实现了多方面的创新突破,集“算得快”“算得大”“轻量化”三大优势于一身。其核心算法创新基于随机分批算法在GPU上加速,运用RBE和RBL算法高效解决长程和短程作用力计算效率问题。经在3种GPU上验证,“微著”2.0版运算速度显著,极大地节省了算力消耗。

从去年9月项目团队基于自研算法开始开发RBMD平台,不到一年时间实现从算法到软件的落地应用,再到上线5个月登上平台热榜,其发展速度堪称飞速。这背后,离不开西部(重庆)科学城提供的优质科研环境和浓厚的科研氛围。科学城积极把握时代脉搏,坚持面向国家需求,为科研团队搭建起坚实的创新桥梁,有力地推动了科研团队在科技创新的道路上不断前行,深入探索,为我国科技事业的发展贡献力量。

据悉,此次“微著”RBMD云计算平台的突破,将在新材料研发与新能源技术、智能制造等多个关键领域发挥重要作用。通过更精准、更高效的模拟,将加速新材料的发现与验证过程,降低研发成本,缩短上市周期。

目前,“微著”RBMD云计算平台正处于公开免费试用阶段,并持续优化UI界面与底层软件性能,以期为用户带来更加流畅、高效的使用体验。

文:王柯岚
图片来源:西部(重庆)科学城



位于科学谷数智科创园上海交通大学重庆人工智能研究院

公益广告

加强科技创新和产业创新深度融合

