



北京理工大学

数学与统计学院学术报告

模拟微观世界：从薛定谔方程到大原子模型

报告人：王涵 北京应用物理与计算数学研究所

时间：2024.9.25（周三） 15:30-17:00

地点：良乡 文萃楼E218

摘要：本报告综述了原子模型的发展历史，从约翰·道尔顿的原子理论到量子力学的建立，以及现代微观模拟方法面临的挑战。报告重点介绍了机器学习模型在原子尺度模拟中的应用，特别是深度势能模型（DeePMD）在处理大规模原子体系的精度和效率，同时讨论了现有机器学习模型的局限性。为了克服这些限制，报告介绍了几种旨在实现具有通用性的机器学习模型的尝试，并指出创建一个多领域、多任务的通用模型所面临的困难。报告提出了DPA-2大原子模型（Large Atomic Model, LAM）的模型架构、训练方法、微调策略以及模型知识蒸馏方法，并指出DPA-2采用的多任务训练方式，对增强其少数帧泛化能力具有关键作用。报告展示了DPA-2在现实世界应用中的准确性。最后，报告介绍了OpenLAM倡议，这是一个旨在推动大原子模型发展的开源计划。

简介：王涵，北京应用物理与计算数学研究所研究员，博士生导师。2011年毕业于北京大学数学科学学院，获得理学博士学位；2011至2014年于柏林自由大学数学与计算机学院从事博士后研究。2014年加入北京应用物理与计算数学研究所。主要研究兴趣为分子动力学模拟中的多尺度建模与计算方法。与合作者发展了深度势能模型，解决了传统方法精度和效率无法两全的困境，将第一原理精度分子动力学模拟规模推进至亿原子量级。