

超算赋能中国材料基因工程创新发展

2025 年 11 月 19 日至 23 日，第九届材料基因工程国际论坛在西安成功举办。本次论坛由全国新材料大数据创新联盟和中国材料研究学会共同主办，西北工业大学、西北有色金属研究院、西安交通大学、北京科技大学、北京云智材料大数据研究院等单位联合承办，旨在进一步促进材料基因工程基础理论、前沿技术与关键装备的发展，加快材料领域“人工智能+”方向的科技创新与产业应用。

论坛期间，海内外材料领域 40 位院士、300 余家单位、1200 余位代表参加本次论坛，线上参会 3.6 万人次。来自 17 个国家和地区的近 260 位专家学者作学术报告，组织 210 篇研究生墙报。



在本届论坛开幕式上，举行国家新材料大数据中心及材料基因工程领域专项成果发布仪式，由大会主席谢建新院士主持。国家超级计算天津中心党组书记、首席科学家孟祥飞代表中心联合国家新材料大数据中心，携手国内多家高校、科研院所等单位，共同启动“材料计

算设计软件天河培育计划”。未来五年，中心计划将投入机时资源专项支持国产软件研发与应用，依托天河新一代国产超算系统，加速推动我国材料计算软件的自主可控，支撑新材料智能研发与设计。



本届论坛期间，论坛组委会邀请 50 余位材料基因工程领域青年学者组成评审团，通过线上预审和线下展示，评选优秀墙报。国家超级计算天津中心在优秀墙报奖颁奖环节设立了“津·天河科学计算奖”，以支持材料基因工程领域的优秀青年科研人员，并鼓励其在材料计算与模拟仿真方面的创新研究。



在“材料大数据与数据资源分论坛”上，与会专家围绕材料大数据与数据资源建设展开深入探讨。国家超级计算天津中心高性能计算部部长菅晓东受邀作题为“多源高效新材料计算设计专用数据资源节点建设”的报告。该报告详细介绍了中心牵头承担的重点新材料研发及应用国家科技重大专项“支撑新材料计算设计专用数据资源节点建设”项目进展情况。该项目依托我国新一代国产 E 级超级计算平台及“十三五”材料基因工程专项成果，致力于推动材料计算设计多领域、多尺度计算的流程化、规模化与高质量数据整合，围绕多尺度共性数据采集与基础支撑数据生产，构建数据总规模**超千万条**的资源节点 **CNMGE-MSDB**。材料计算设计专用数据资源节点建设作为国家新材料大数据中心“1+N”架构的重要节点，为新材料研发设计中各个尺度所需的计算软件以及材料智能研发提供了关键数据支撑。



在本届国际论坛中，国家超级计算天津中心还设立了宣传展台，积极展示中心在材料基因工程领域的创新成果。中心材料计算研发团队长期致力于材料高通量与智能计算平台、多尺度材料模拟计算、材料专题数据库以及“AI for materials”等方向的研究与应用，先后牵头承担了“十三五”国家重点研发计划“产学研用协同的高通量材料计算融合服务平台”及“十四五”国家科技重大专项“多源高效新材料计算设计专用数据资源节点建设”等多项国家级科研项目。

未来，国家超级计算天津中心将继续依托天河新一代超级计算机系统，面向新材料研发设计领域深度融合高性能计算、大数据与人工智能等技术，持续赋能材料基因工程创新突破，助力推动中国材料强国与制造强国建设。