



## “大数据中心调研座谈会”

高性能计算与  
材料智能计算  
业务介绍

Jun\_Jiang

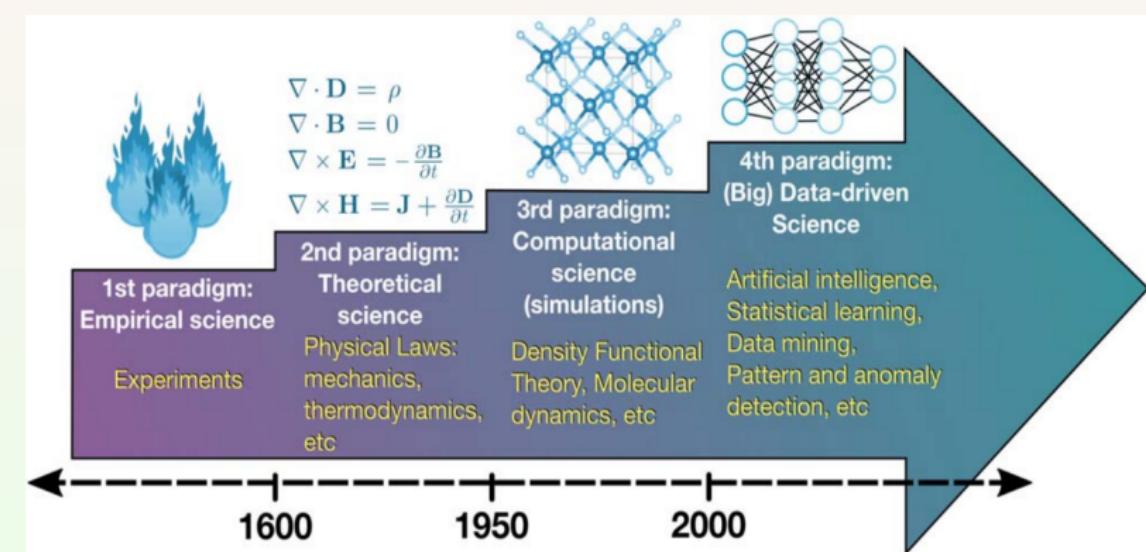
# 高性能计算与材料智能计算业务介绍

姜 骏

北京市计算中心

2023.01.06

# 科学研究的范式变更



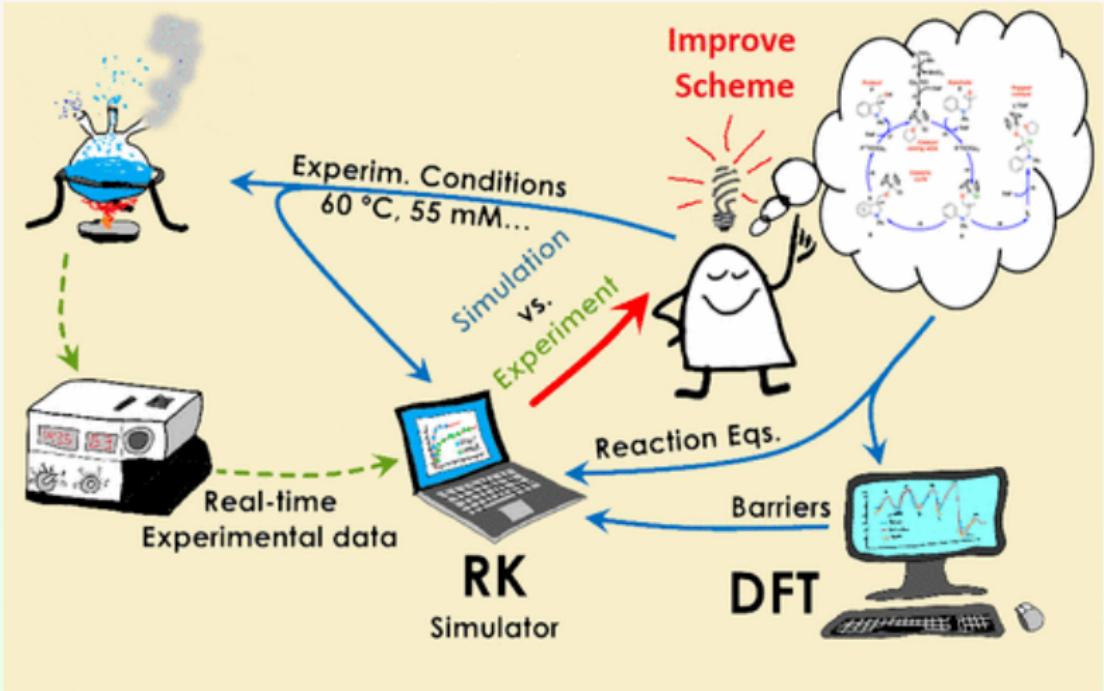
- 逐步趋于理性
- 逐步趋于复杂

- 逐步趋于抽象
- 逐步趋于深刻

# 科学研究的重要助手：计算模拟

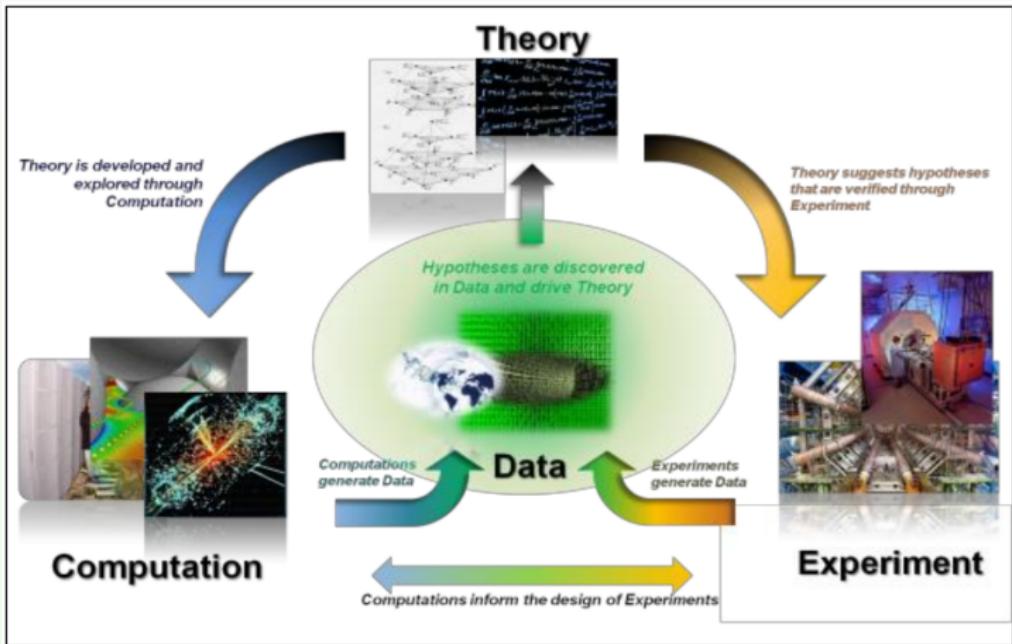
高性能计算与  
材料智能计算  
业务介绍

Jun\_Jiang



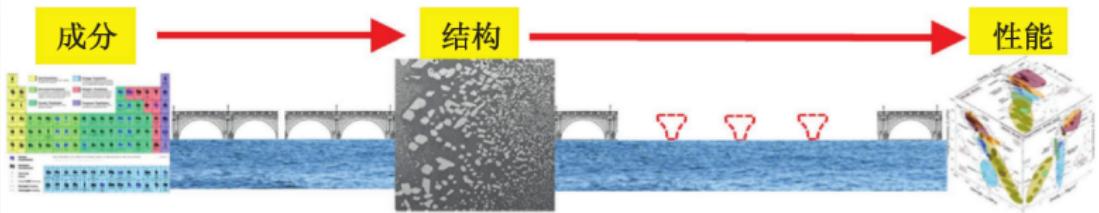
# 数据驱动的科学研究

前所未有的计算能力和大规模的数据收集能力

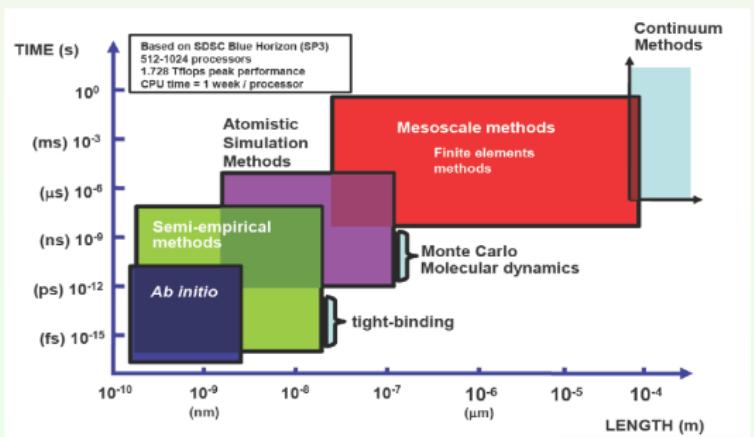


科学的新驱动力: **密集数据 + 人工智能**

# 材料模拟的基本思想和方法



- 变革研发模式，计算-实验-理论-数据科学相融合：高效、低耗按需设计
- 数据驱动的材料创新平台主要面向复杂材料的模拟



# 适应异质界面催化模拟自动流程软件

- 前处理:  
计算模型分析与预处理
- 计算流程设计与管理:
  - 1 支持计算过程的模块化
  - 2 支持高通量、跨尺度材料模拟
  - 3 提供计算结果数据管理接口
- 后处理:  
结果数据的分析、挖掘与可视化展示

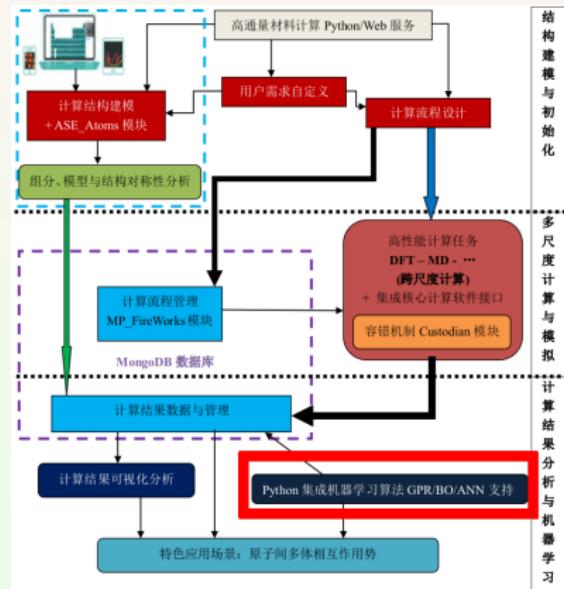


Fig.: 适用于异质界面的高通量材料计算自动流程软件架构

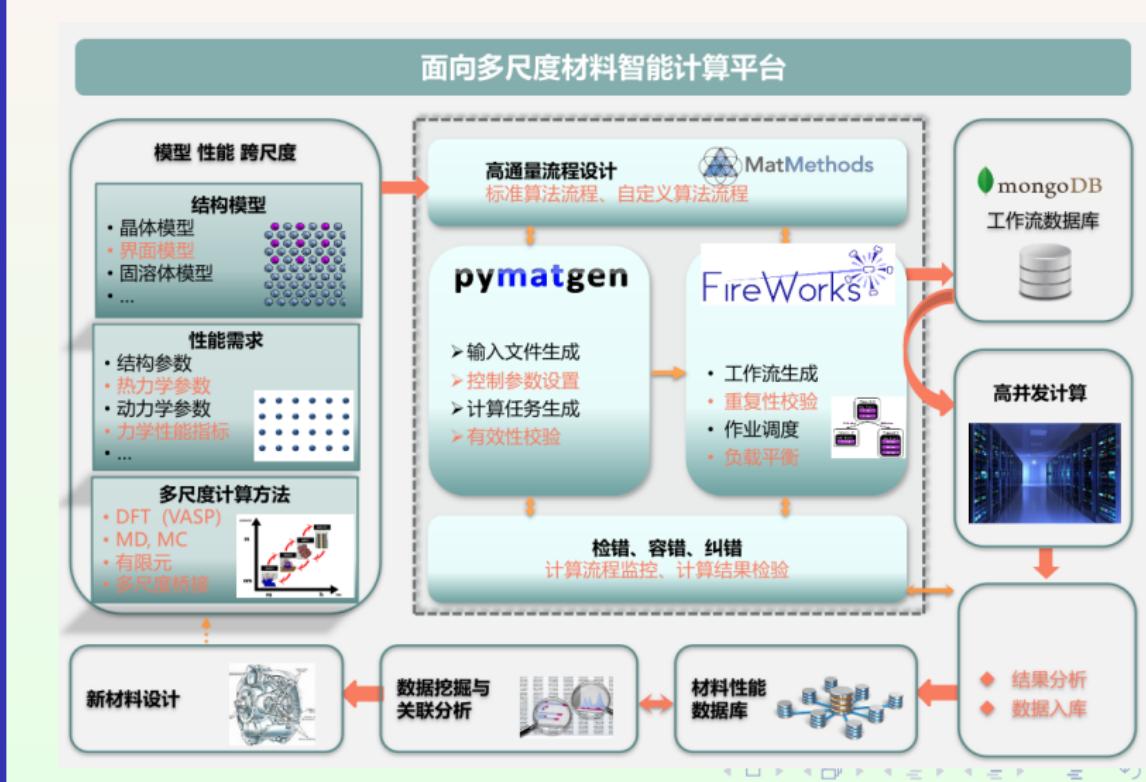
# 材料智能计算平台



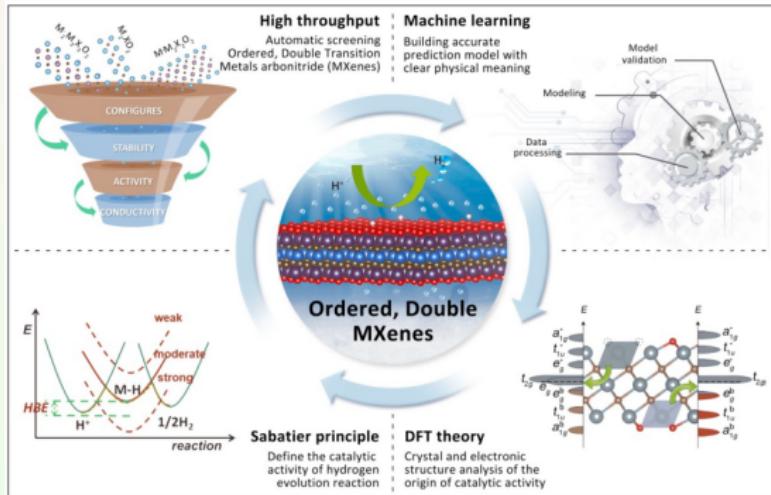
“材料多尺度模拟仿真与多目标机器学习大数据平台”

- 材料多尺度模拟流程，电子结构计算优化，化学反应动力学过程与多目标数据收集、特征工程、模型建立和验证等材料机器学习算法相融合
  - 材料计算数据库技术与大数据理念成功应用：预测晶体结构，半导体带隙，相稳定性，能源存储与转化等物理化学性质等

# 面向多尺度材料智能计算平台

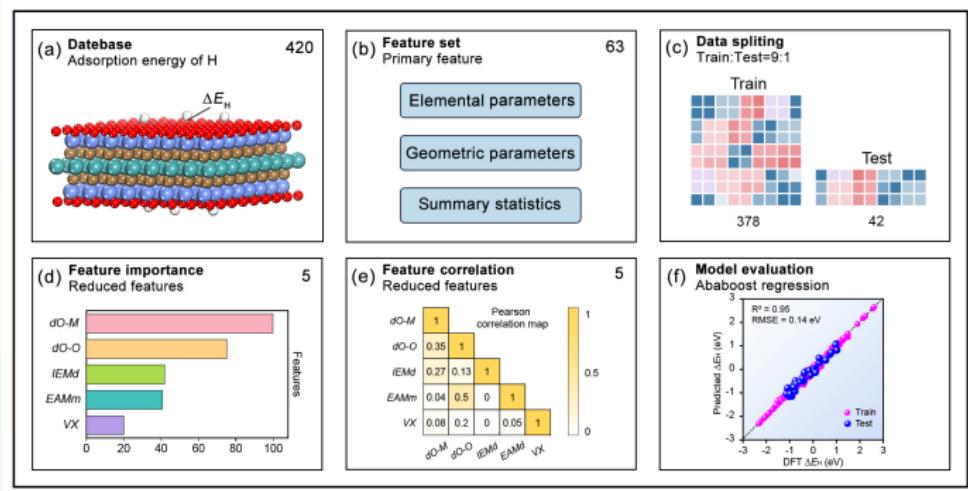


# 应用：类石墨烯材料产氢性能优化预测



应用高通量 DFT 计算，集成机器学习框架，预测 2D MXenes 有序二元合金 (OBAs) 催化活性趋势并指导 HER 催化剂设计。由数千个 2D MXenes 中筛选出的 110 种热稳定性、HER 活性优于贵金属 Pt 的潜在 2D MXenes OBAs，特别是 Ti 元素主要存在于 2D MXenes OBAs 理想催化剂中与实验合成的 MXenes 一致，提高效率 80% 获“2019 中国大数据与智能计算技术创新奖”

# 应用：机器学习构建催化描述符



面向 2D MXenes 有序二元合金 (OBAs) 催化活性:

- 根据理化知识筛选特征向量
- 基于机器学习得到好的特征向量
- 对多目标优化，检验特征向量间相关度
- 基于特征向量筛选潜在优势催化活性材料

# 软硬件全方位集成

高性能计算与  
材料智能计算  
业务介绍

Jun\_Jiang

## 从自动流程到五阶数据创新材料软硬件一体机



- 由材料模拟的物理规律转向数据处理能力的提升
- 五阶数据处理: 收集、分析、归档、清洗和标准化
- 探索数据认知能力, 助力材料研究

# 主要合作与推广应用

## ■ 中科合成油 (合作)

流程软硬件一体机可用于支持煤化工催化剂理论计算与复杂流程模拟

合作开发自主可控的第一原理计算所必须的原子数据集生成软件，为提升煤化工所需催化剂材料性能，提供更多自主数据生成工具

## ■ 中科院物理所 (推广)

提供的流程软硬件一体机有效支持凝聚态物理、特别是拓扑绝缘体的理论研究

加速对潜在拓扑绝缘体材料的发现，深化对拓扑绝缘体材料物性特征的认知



中国科学院物理研究所  
Institute of Physics  
Chinese Academy of Sciences

P.O.Box 601  
Beijing 100190  
CHINA  
http://www.iop.ac.cn  
Fax: +86-10-82640621

### 致谢函

北京市计算中心:

贵中心于2022年4月提供我课题组试用的一体机，在试用期间，该一体机承担有关计算课题任务包括第一性原理电子结构计算、拓扑材料搜索等任务的研究。为拓扑材料的研究提供了重要的数据支撑。为我们正在准备的一篇文章提供了很大帮助。特此致谢！

2023年1月10日



# 数据驱动的材料研发：应用前景

## 1 高分子宇航材料

包括橡胶、工程塑料、粘合剂及密封剂  
高分子材料性能的提升

## 2 稀土功能材料：

钕铁硼永磁材料，稀土发光功能材料  
 $3d$ - $4f$  电子相互作用机制

## 3 航空发动机材料：

镍基单晶高温合金  
合金组分的强化功能

谢谢大家！