

# 第一原理计算软件简介与应用

北京市计算中心 云平台事业部 姜骏

E-mail: [jiangjun@bcc.ac.cn](mailto:jiangjun@bcc.ac.cn)

北京科技大学 理化楼-308

2023.07.12

# Outline



第一原理计算  
软件简介与应  
用

# 现有高通量计算平台概览

第一原理计算  
软件简介与应用

	编程语言	建模 功能	任务提交与管理		后处理	数据组织管理
			软件接口	运行容错		
AFLOW	C++	✓	△	☆	☆	Django
MP	Python	✓	✓	☆	☆	MongoDB
QMIP	JavaScript/SVG +html/Python	✓	✓	—	✓	—
CEP	Python	✓	✓	—	✓	Django/MySQL
ASE	Python	☆	☆	—	△	—
MatCloud	JavaScript +.NETCore	✓	△	✓	✓	MongoDB

- ☆ 该功能较突出
- ✓ 该功能基本满足需求
- △ 该功能存在不足

Lin L. *Materials databases infrastructure constructed by first principles calculations: a review. Mater. Perform. Character.*, 2015, 4(1):148.

谢谢大家！