

基于甲烷燃烧催化机理的 材料计算自动流程设计

北京市计算中心 云平台 姜骏

2017.07.26

1 项目背景

2 项目规划

个人信息



基于甲烷燃烧
催化机理的
材料计算自动
流程设计

项目背景

项目规划

姓 名 姜 骏

出生年月 1978.12

学 位 理学博士

专业方向 物理化学



当前从事专业 材料计算软件开发与金属材料计算

工作单位及部门 北京市计算中心 云平台事业部

承担课题 “材料基因工程关键技术与支撑平台” 重点专项

1 项目背景

2 项目规划

- 天然气储量丰富、热效率高、价格低廉、污染较小。但天然气主要成分甲烷直接燃烧，温度高达 1600°C 左右，在没有催化剂的情况下，在空气中燃烧生成氮氧化物等物质，对环境造成一定的污染。通过催化剂作用，降低燃料的起燃温度和燃烧的峰值温度，提高甲烷燃烧利用率，减少大气污染物生成
- 在催化剂存在时，甲烷的多相催化氧化反应和自由基反应同时发生，在 $377\sim 877^{\circ}\text{C}$ 的温度区间内两者均起作用，这对研究催化反应的反应机理带来了很大的困难
- 利用第一原理计算工具，有可能从理论角度探索甲烷燃烧催化机理，为有关实验研究提供辅助和支持；在研的“材料基因工程关键技术与支撑平台”任务已开发了支持金属材料计算平台，为催化材料计算提供了经验和积累

1 项目背景

2 项目规划

项目目标



基于甲烷燃烧
催化机理的
材料计算自动
流程设计

项目背景

项目规划

- 针对第一原理计算特点，开发适应甲烷催化燃烧机理研究的自动流程计算平台并程序化
- 自动流程计算平台将包括结构建模的可视化，计算流程的自动化，结果数据分析的可视化
- 将开发的自动流程应用于六铝酸盐系列 ($\text{MAl}_{12}\text{O}_{19}$) 甲烷燃烧催化剂计算

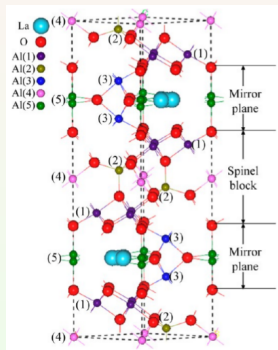


Figure: The Structure of $\text{MAl}_{12}\text{O}_{19}$.

- 自动流程计算平台主体框架的实现，将基于“材料基因工程”项目开发的Ni-基单晶高温合金模拟的软件平台开发，适应催化机理研究，该平台是基于 Python 开发的，核心的第一原理计算将采用 Gaussian/VASP/ADF 中的一种或几种
- 材料计算的可视化主要包括输入模型和计算结果可视化，在本平台的开发中，可视化主要通过集成开源的结构可视化工具如 GSview、Xcrysten 和 VESTA 和数据可视化绘图工具如 Gnuplot、Pymatlib 模块 (Python 自带) 实现
- 该计算平台针对甲烷燃烧催化研究的典型应用，通过对六铝酸盐系列 ($\text{MAl}_{12}\text{O}_{19}$) 催化甲烷燃烧过程的模拟，探索甲烷燃烧的催化机理

- 第一原理催化反应模拟计算平台自动流程的技术分析报告
- 甲烷催化燃烧模拟的理论计算与结果分析技术报告
- 催化反应模拟自动流程计算平台软件著作权 1 份

- 该项目主要面向典型催化过程化学反应模拟，建立自动流程计算平台，**为中心开发催化反应模拟自动流程软件**；开发中将考虑到平台功能的可扩展性，有助于提高云平台部门的材料模拟能力和范围
- 从热稳定性、机械强度和抗热冲击热几方面性能考虑，六铝酸盐系列催化剂是最有希望的高温燃烧催化体系，此次开发主要针对该类反应的催化机理，有望从理论计算角度给出催化机理的合理解释，为实验可控制备提供辅助
- 通过现有平台的开发，推动中心在“材料基因工程”领域针对典型材料的计算流程、数据分析与可视化的科学计算平台建设

■ 经费总计: 5.8 万元

Table: 经费预算表 (单位: 万元).

开支项目	预算总金额	2018 年度	2019 年度
设备费	4	2	2
差旅费	0.5	0.25	0.25
会议费	0.3	0.15	0.15
出版/文献/信息传播/知识产权事物费	0.2		0.2
专家咨询费	0.8	0.4	0.4

希望经过该项目的研究历程，个人得到以下能力的提升

- 深化对甲烷燃烧催化剂催化机理的认识，提高凝练课题目标、独立组织和完成课题任务的能力
- 提升在团队科研活动中人员管理、学术交流和财务分配的相关组织和业务管理能力
- 促进个人在材料科学计算软件开发与应用领域发现新需求的能力

谢谢大家！