

材料智能计算业务介绍

姜 骏

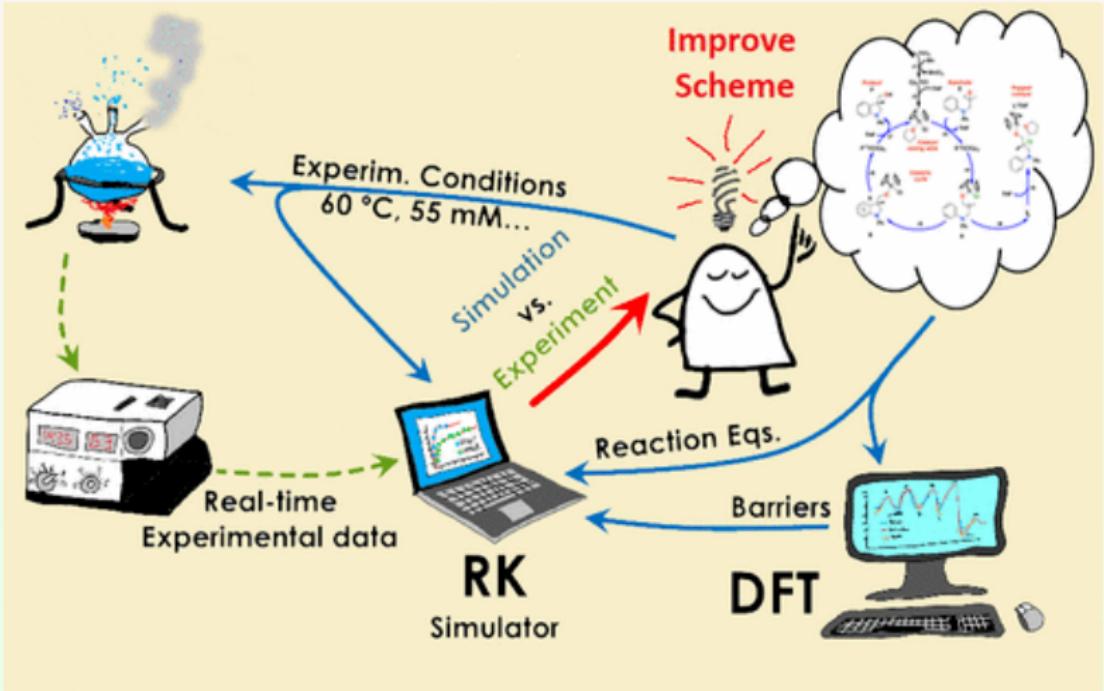
云平台事业部 材料计算团队

2024.05.17

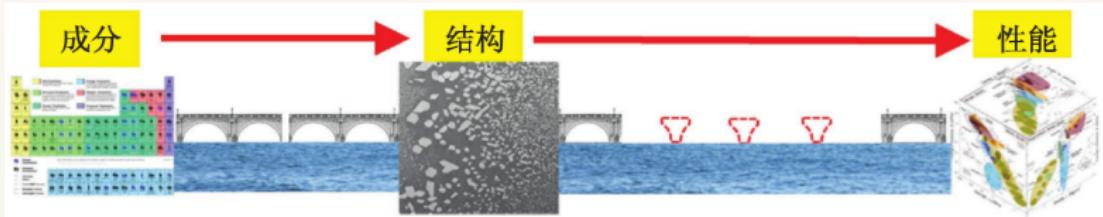
科学研究的重要助手：计算模拟

材料智能计算
业务介绍

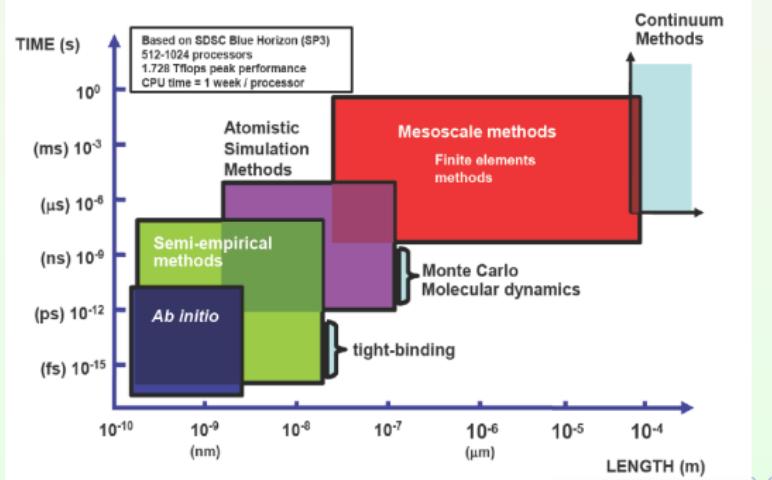
Jun_Jiang



材料模拟的基本思想和方法



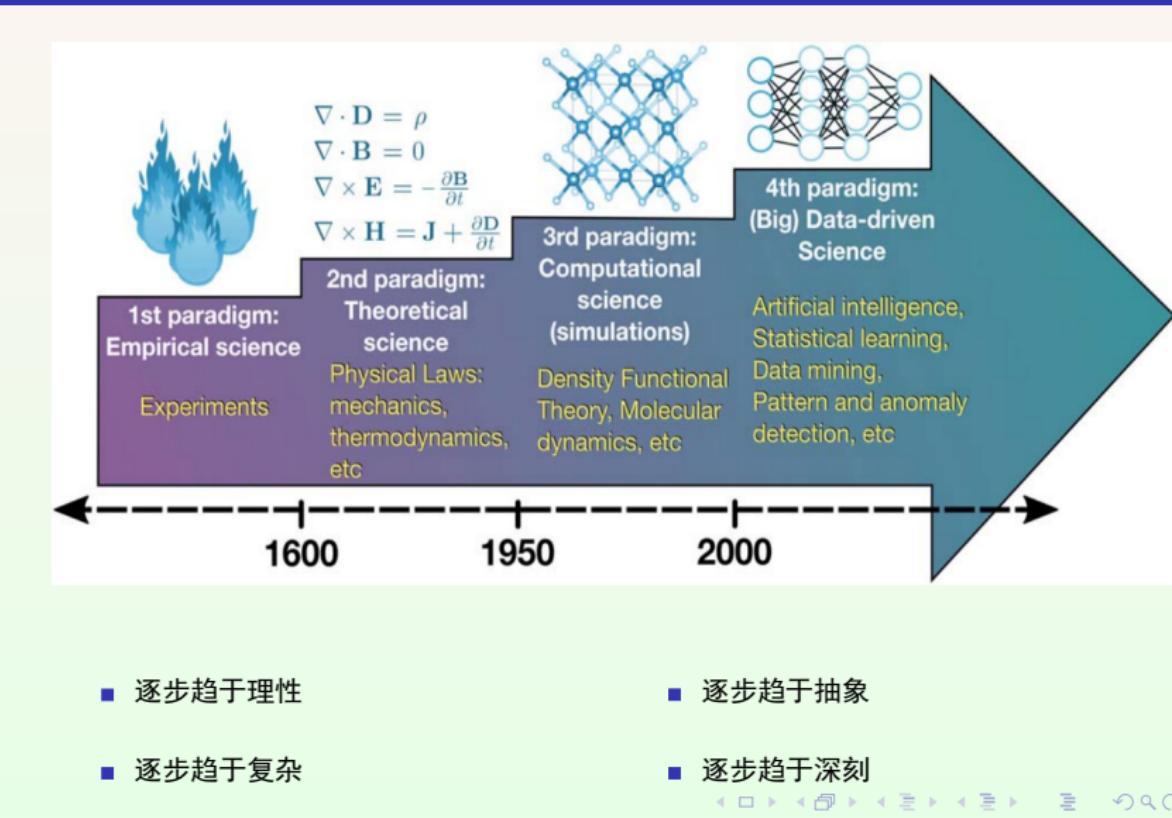
- 变革研发模式，计算-实验-理论-数据科学相融合：高效、低耗按需设计
- 数据驱动的材料创新平台主要面向复杂材料的模拟



科学研究的范式变更

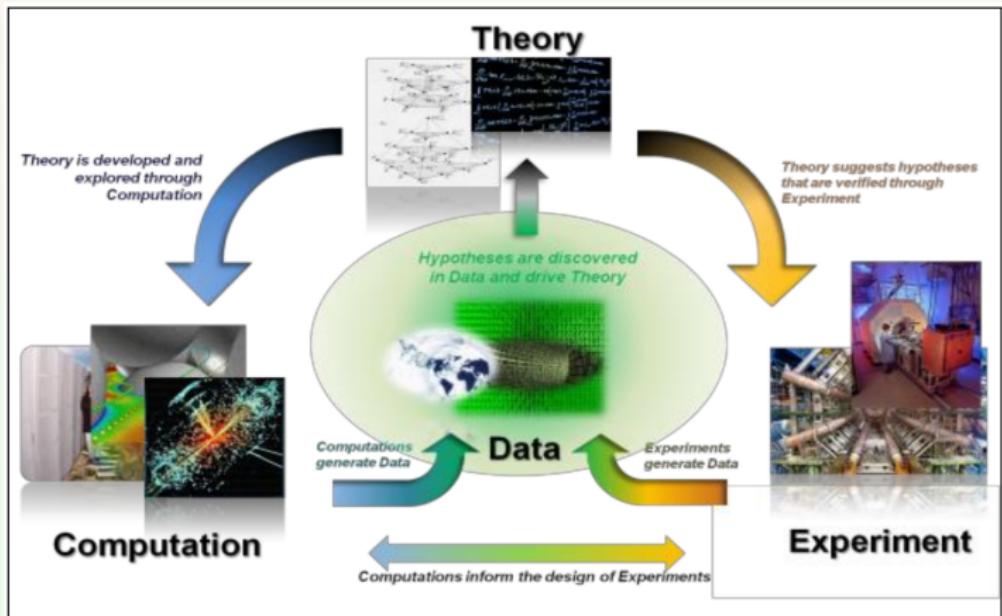
材料智能计算
业务介绍

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**

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

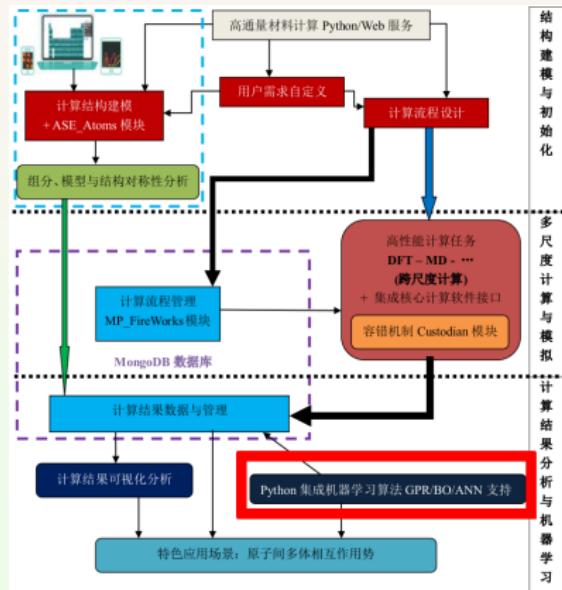


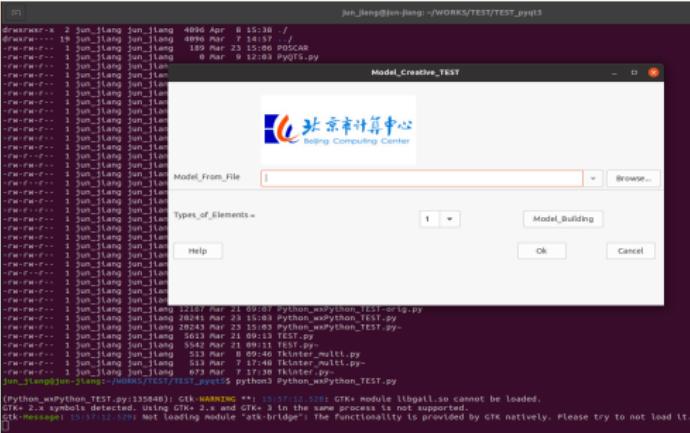
Fig.: 适用于异质界面的高通量材料计算自动流程软件架构

材料智能计算平台

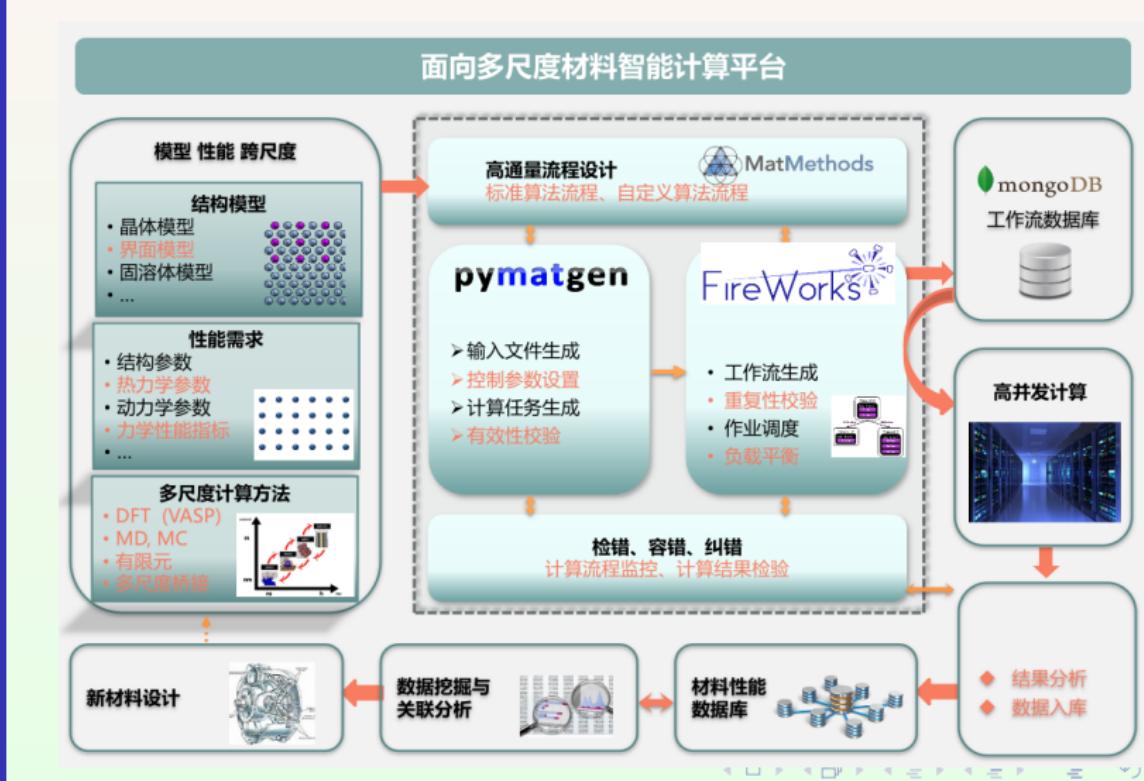


“材料多尺度模拟仿真与多目标机器学习大数据平台”

- 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应用：晶体预测结构，半导体带隙，相稳定性，存能与功能材料的物理化学性质等



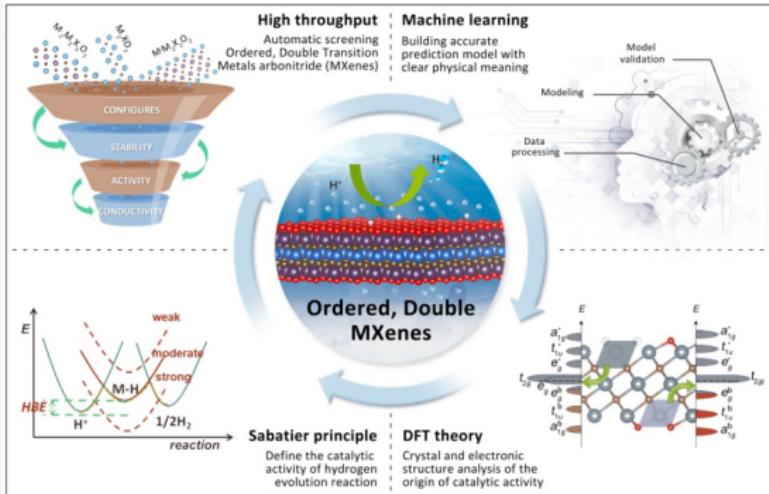
面向多尺度材料智能计算平台



应用：类石墨烯材料产氢性能优化预测

材料智能计算
业务介绍

Jun_Jiang

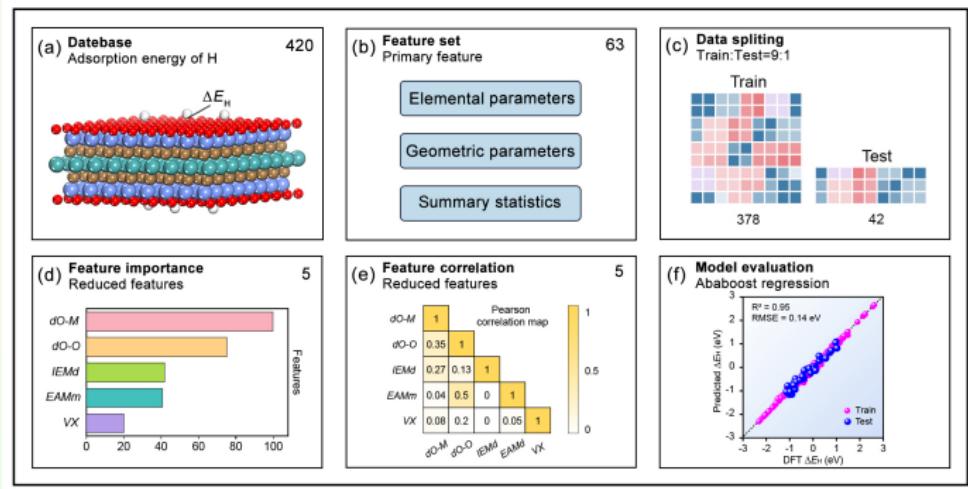


应用高通量 DFT 计算，集成机器学习框架，预测 2D MXenes 有序二元合金 (OBAs) 催化活性趋势并指导 HER 催化剂设计：

- 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

从自动流程到五阶数据创新材料软硬件一体机

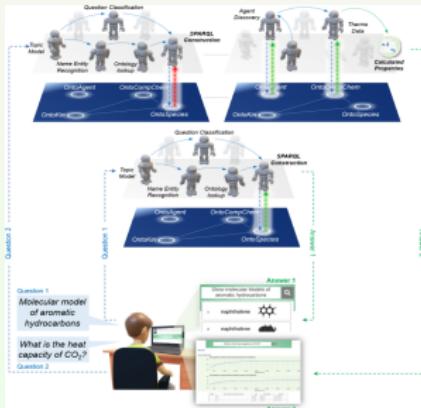
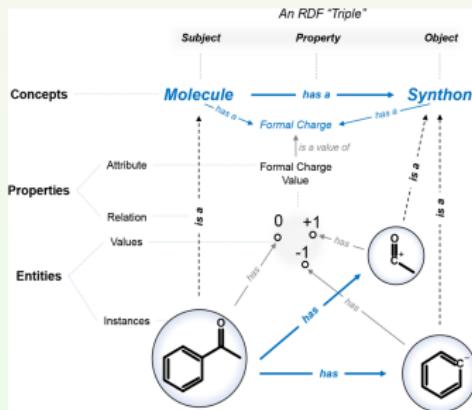


- 由材料模拟的物理规律转向数据处理能力的提升
- 五阶数据处理: 收集、分析、归档、清洗和标准化
- 探索数据认知能力, 助力材料研究

主要合作与推广应用

中科合成油 (合作)

■ 化学-化工知识图谱的建设



- 以化合物为核心，借助语义网 (Semantic Web)，组织、表示和存储化学-化工和领域特定类型的知识
- 构建拥有学习和推理能力，具备初级的创造知识的能力



主要合作与推广应用 (cont.)

材料智能计算
业务介绍

Jun_Jiang

■ 问-答式煤化工智能模型建设

| 与中科合成油讨论 | 与中科合成油讨论 | 与中科合成油讨论 | 与中科合成油讨论纪要 (IV) |
|--|--|--|--|
| 记录员: 奎 银 会议地址: 计算中心 ZTF | 记录员: 高鹏林 在线讨论 | 记录员: 高鹏林 在线讨论 | 记录员: 高鹏林 在线讨论 |
| 2014-03-13 | 2014-03-29 | 2014-04-11 | 2014-04-09 |
| 列会人员 中科院合成油技术有限公司 任鹏坤 北京市计算中心有限公司 孟凡银、高鹏林、姜维 | 列会人员 中科院合成油技术有限公司 任鹏坤 北京市计算中心有限公司 孟凡银、王晋鑫、高鹏林 | 列会人员 中科院合成油技术有限公司 任鹏坤 北京市计算中心有限公司 孟凡银、高鹏林、姜维 | 列会人员 中科院合成油技术有限公司 任鹏坤 北京市计算中心有限公司 孟凡银、高鹏林、姜维 |
| 会议内容 姜维: 前期工作的情况 • 感谢中科合成油提供机会, 通过化学-化工知识 | 会议内容 任鹏坤: 合成油方面提供专题平台, 提供了一部分中、英论文的摘要, 一些论文摘要需要到数据库中, 通过大模型训练, 回答效果, 包括英文-英文, 那样还可以——目前的硬件条件限制, 太大的模型运行不流畅, 后续可能会有突破 (Facebook 与阿里) | 会议内容 任鹏坤: 确认清明节前产能主任提供贵部门的 LaTeX 格式, 以及最好能有 LaTeX 格式文件 (头) 是有可能的 任鹏坤: 大部分文献相对较少, 有些还是扫描 姜维: 相关文档已经收集, 具体数据准备还希望 任鹏坤: 孟老师已经表示, 有方案需要的话可以 数据提供, 与中科院信息中心合作 任鹏坤: 上面的论文都是英文的, 数据是否 | 会议内容 任鹏坤: 合成油方面提供专题平台, 提供了一部分中、英论文的摘要, 一些论文摘要需要到数据库中, 通过大模型训练, 回答效果, 包括英文-英文, 那样还可以——目前的硬件条件限制, 太大的模型运行不流畅, 后续可能会有突破 (Facebook 与阿里) 孟凡银: 那早些时候发来的 Excel 文档, 希望给予明确一些的共同建议 任鹏坤: 对上次发来的 Excel 文档予以说明 (共享屏幕): Excel 表内容为 |

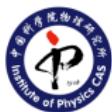
- 面向人工智能的全方位转型:
面向碳基础材料、发挥人工智能的作用
- 大模型加持专业知识

目标: 智能实验室-智能科学家

主要合作与推广应用

中科院物理所 (推广)

- 提供的流程软硬件一体机支持凝聚态物理的理论研究
- 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 603
Beijing 100190
CHINA
<http://www.iop.cas.cn>
Fax: +86-10-82649531

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，为拓扑材料的物性研究提供了重要的数据支持，为我们正在准备的一篇文章提供了很大帮助。特此致谢！

12 页
2023 年 1 月 30 日

数据驱动的材料研发：应用前景

- 1 航空发动机材料: 镍基单晶高温合金材料
合金组分优化与强化功能提升**
- 2 煤化工催化材料: 新型铁触媒材料
反应活化性能提升与化学平衡的移动**
- 3 稀土功能材料: 钕铁硼永磁材料, 稀土发光材料
3d-4f 电子相互作用机制的认知**

材料组分趋于复杂、材料机理认知趋于微观、材料与数据趋于膨胀

谢谢大家！