

课题编号：2017YFB0701502

密 级：公开

国家重点研发计划 课题任务书

课题名称：高通量并发式计算物理基础及物理机制

所属项目：高通量并发式材料计算算法和软件

所属专项：材料基因工程关键技术与支撑平台

项目牵头承担单位：清华大学

课题承担单位：北京应用物理与计算数学研究所

课题负责人：张平

执行期限：2017年07月 至 2021年06月

中华人民共和国科学技术部制

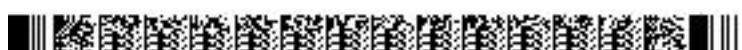
2017年07月15日

0003YF 2017YFB0701502 2017-07-15 21:55:12



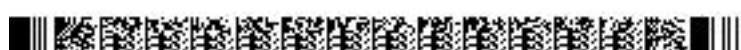
填 写 说 明

- 一、任务书甲方即项目牵头承担单位，乙方即课题承担单位。
- 二、任务书通过“国家科技计划管理信息系统公共服务平台”，按照系统提示在线填写。
- 三、任务书中的单位名称，请按规范全称填写，并与单位公章一致。
- 四、任务书要求提供乙方与所有参加单位的合作协议，需对原件进行扫描后在线提交。
- 五、任务书中文字须用宋体小四号字填写。
- 六、凡不填写内容的栏目，请用“无”表示。
- 七、乙方完成任务书的在线填写，提交甲方审核确认后，用A4纸在线打印、装订、签章。一式八份报项目牵头承担单位签章，其中课题承担单位一份，课题负责人一份，作为项目任务书附件六份。
- 八、如项目下仅设一个课题，课题任务书只需填报课题预算部分。
- 九、涉密课题请在“国家科技计划管理信息系统公共服务平台”下载任务书的电子版模板，按保密要求离线填写、报送。
- 十、《项目申报书》和《项目任务书》是本任务书填报的重要依据，任务书填报不得降低考核指标，不得自行对主要研究内容作大的调整。《项目申报书》、《项目任务书》和本任务书将共同作为课题过程管理、验收和监督评估的重要依据。

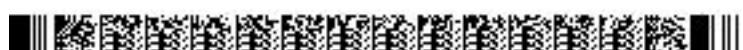


课题基本信息表

课题名称		高通量并发式计算物理基础及物理机制				
课题编号		2017YFB0701502				
所属项目		高通量并发式材料计算算法和软件				
所属专项		材料基因工程关键技术与支撑平台				
密级		<input checked="" type="checkbox"/> 公开 <input type="checkbox"/> 秘密 <input type="checkbox"/> 机密	单位总数		4	
课题类型		<input checked="" type="checkbox"/> 基础前沿 <input type="checkbox"/> 重大共性关键技术 <input type="checkbox"/> 应用示范研究 <input type="checkbox"/> 其他				
课题活动类型		<input checked="" type="checkbox"/> 基础前沿 <input type="checkbox"/> 应用研究 <input type="checkbox"/> 试验发展				
课题研究 所属学科		物理学 凝聚态物理学				
课题成果应用的主要国民经济行业		制造业				
课题的社会经济目标		国防				
经费预算		总预算 480.00 万元，其中中央财政专项经费 480.00 万元				
课题周期节点		起始时间	2017 年 07 月	结束时间	2021 年 06 月	
		实施周期	共 48 个月	预计中期时间点	2019 年 06 月	
课题承担单位	单位名称	北京应用物理与计算数学研究所			单位性质	事业型研究单位
	单位所在地	北京市 北京 海淀区			组织机构代码	12100000400002830U
	通信地址	北京市 海淀区花园路六号			邮政编码	100088
	银行账号	0200003309088131919			法定代表人姓名	王建国
	单位开户名称	北京应用物理与计算数学研究所				
	开户银行(全称)	102100000337 中国工商银行股份有限公司北京长安支行				
课题	姓名	张平	性 别	<input checked="" type="checkbox"/> 男 <input type="checkbox"/> 女	出生日期	1972-08-30



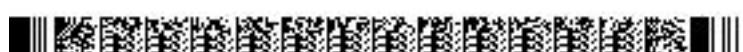
负责人	证件类型	身份证件	证件号码	370826197208305114		
	所在单位	北京应用物理与计算数学研究所				
	最高学位	<input checked="" type="checkbox"/> 博士 <input type="checkbox"/> 硕士 <input type="checkbox"/> 学士 <input type="checkbox"/> 其他				
	职称	<input checked="" type="checkbox"/> 正高级 <input type="checkbox"/> 副高级 <input type="checkbox"/> 中级 <input type="checkbox"/> 初级 <input type="checkbox"/> 其他			职务	研究室主任
	电子邮箱	zhang_ping@iapcm.ac.cn		移动电话	18911965765	
课题联系人	姓名	李孜	电子邮箱	li_zi@iapcm.ac.cn		
	固定电话	010-61935104	移动电话	13520963626		
	证件类型	身份证件	证件号码	110105198111186530		
课题财务负责人	姓名	马德成	电子邮箱	ma_decheng@iapcm.ac.cn		
	固定电话	010-59872239	移动电话	13810139620		
	证件类型	身份证件	证件号码	630103198305111616		
其他参与单位	序号	单位名称		单位性质	组织机构代码	
	1	北京应用物理与计算数学研究所		事业型研究单位	121000004000028 30U	
	2	清华大学		大专院校	121000004000006 24D	
	3	上海大学		大专院校	123100004250263 7XE	
	4	中国科学院力学研究所		事业型研究单位	121000004000122 2XA	
课题参加人数	16人。其中：		高级职称 14 人，中级职称 2 人，初级职称 0 人，其他 0 人；			
			博士学位 16 人，硕士学位 0 人，学士学位 0 人，其他 0 人。			
课题简介 (限 500 字以内)	<p>本课题以镍基单晶高温合金为主要研究对象，发展多组元材料体系从微观到宏观结构、材料物性和服役行为仿真的全链条多尺度集成计算方法及计算软件，与高通量并发式计算相集成，并发展多个计算模拟和数据分析软件，以探索材料多尺度内禀性质，揭示材料性质多尺度跨越规律及关联机制，并最终服务于合金的成分设计。</p> <p>主要的研究内容包括：</p> <p>(1) 发展多尺度计算软件，包括基于跨尺度桥接算法的 bottom-up 模式的软件，以密度矩阵理论为基础的分区并行算法及软件，跨时间尺度的加速分子动力学软件，以及从连续介质力学到原子层次的多尺度软件。</p>					



(2) 研究镍基高温合金化学组分及结构特征的基础性物理问题，涉及深层次电子效应，预期性探讨材料微观电子结构、原子过程与宏观的力学性质的关联。

(3) 针对单晶高温合金材料高通量并发式集成计算的数据中蕴含的复杂的数据关联，引入机器学习及数据挖掘方法进行分析，发展复杂数据分析与管理软件。

本课题由北京应用物理与计算数学研究所、清华大学、上海大学和中国科学院力学研究所四个单位组成，其中北京应用物理与计算数学研究所作为本课题的牵头单位。本课题的研究人员以中青年专家为主体，包括院士、“杰青”等教授和学者。

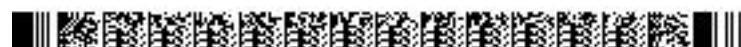


一、目标及考核指标、评测方式/方法

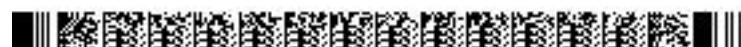
请填写下表。

课题目标、成果与考核指标表

课题目标 ¹	成果名称	成果类型	考核指标 ²				考核方式(方法)及评价手段 ⁴
			指标名称	立项时已有指标值/状态	中期指标值/状态 ³	完成时指标值/状态	
(限 500 字以内。) (1) 发展多组元复杂结构材料体系微观-宏观-物性-服役行为相链接的全链条多尺度集成计算, 与多尺度建模算法及跨层次桥接模式相集成的计算方法, 揭示合金组分-复	1: 多尺度建模及跨层次算法及件	<input checked="" type="checkbox"/> 新理论 <input type="checkbox"/> 新原理 <input type="checkbox"/> 新产品 <input type="checkbox"/> 新技术 <input checked="" type="checkbox"/> 新方法 <input type="checkbox"/> 关键部件 <input type="checkbox"/> 数据库 <input checked="" type="checkbox"/> 软件 <input type="checkbox"/> 应用解决方案 <input type="checkbox"/> 实验装置/系统 <input type="checkbox"/> 临床指南/规范 <input type="checkbox"/> 工程工艺 <input type="checkbox"/> 标准 <input checked="" type="checkbox"/> 论文 <input type="checkbox"/> 发明专利 <input type="checkbox"/> 其他	指标 1.1 多尺度算法与高通量计算相集成的理论、方法及软件	无	建立多尺度算法与高通量计算相集成的理论及方法	实现多尺度算法与高通量计算相集成软件的开发, 登记软件著作权 1 项, 发表论文 2 篇	现场评测或第三方检测, 软件登记受理通知, 论文发表或录用通知
	2: 数据关联分析软件及研究报告	<input type="checkbox"/> 新理论 <input type="checkbox"/> 新原理 <input type="checkbox"/> 新产品 <input checked="" type="checkbox"/> 新技术 <input checked="" type="checkbox"/> 新方法 <input type="checkbox"/> 关键部件 <input type="checkbox"/> 数据库 <input checked="" type="checkbox"/> 软件 <input type="checkbox"/> 应用解决方案 <input type="checkbox"/> 实验装置/系统 <input type="checkbox"/> 临床指南/规范 <input type="checkbox"/> 工程工艺 <input type="checkbox"/> 标准 <input checked="" type="checkbox"/> 论文 <input type="checkbox"/> 发明专利 <input type="checkbox"/> 其他	指标 2.1 数据关联分析通用技术及软件	无	初步建立软件框架, 并获得相关材料数据	实现数据关联分析通用软件, 提取数据规律, 建立构效关系, 登记软件著作权 1	现场评测或第三方检测, 软件登记受理通知, 论文发表或录用通知

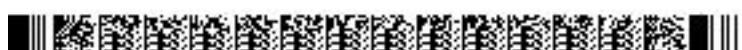


杂结构-材料物性之间的相关规律。 (2)针对单晶高温合金材料高通量并发式集成计算的数据中蕴含的复杂数据关联，集成专用格式的高通量数据信息，并对其内在相关性进行分析，发展实现数据关联表征方法与管理软件。				项，发表论文2篇	
科技报告考核指标	序号	报告类型 ⁵	数量	提交时间	公开类别及时限 ⁶
	1	最终科技报告	1	2020.12	公开
	2	年度技术进展报告	3	2018.6, 2019.6, 2020.6	公开
其他目标与考核指标（对于难以采取上述表格细化的课题目标及其考核指标，可在此细化填写，限1000字以内。）					



备注：

1. “**课题目标**”，应从以下方面明确描述：（1）研发主要针对什么问题和需求；（2）将要解决哪些科学问题、突破哪些核心/共性/关键技术；（3）预期成果；（4）成果将以何种方式应用在哪些领域/行业/重大工程等，并拟在科技、经济、社会、环境或国防安全等方面发挥何种的作用和影响。
2. “**考核指标**”，指相应成果的数量指标、技术指标、质量指标、应用指标和产业化指标等，其中，数量指标可以为论文、专利、产品等的数量；技术指标可以为关键技术、产品的性能参数等；质量指标可以为产品的耐震动、高低温、无故障运行时间等；应用指标可以为成果应用的对象、范围和效果等；产业化指标可以为成果产业化的数量、经济效益等。同时，对各项考核指标需填写立项时已有的指标值/状态以及课题完成时要到达的指标值/状态。同时，考核指标也应包括支撑和服务其他重大科研、经济、社会发展、生态环境、科学普及需求等方面的直接和间接效益。如对国家重大工程、社会民生发展等提供了关键技术支撑，成果转让并带动了环境改善、实现了销售收入等。若某项成果属于开创性的成果，立项时已有指标值/状态可填写“无”，若某项成果在立项时已有指标值/状态难以界定，则可填写“/”。
3. “**中期指标**”，各专项根据管理特点，确定是否填写，鼓励阶段目标明确的项目课题填写中期指标。
4. “**考核方式方法**”，应提出符合相关研究成果与指标的具体考核技术方法、测算方法等。
5. “**科技报告类型**”，包括项目验收前撰写的全面描述研究过程和技术内容的最终科技报告、项目年度或中期检查时撰写的描述本年度研究过程和进展的年度技术进展报告以及在项目实施过程中撰写的包含科研活动细节及基础数据的专题科技报告（如实验报告、试验报告、调研报告、技术考察报告、设计报告、测试报告等）。其中，每个项目在验收前应撰写一份最终科技报告；研究期限超过2年（含2年）的项目，应根据管理要求，每年撰写一份年度技术进展报告；每个项目可根据研究内容、期限和经费强度，撰写数量不等的专题科技报告。科技报告应按国家标准规定的格式撰写。
6. “**公开类别及时限**”，公开项目科技报告分为公开或延期公开，内容需要发表论文、申请专利、出版专著或涉及技术诀窍的，可标注为“延期公开”。需要发表论文的，延期公开时限原则上在2年（含2年）以内；需要申请专利、出版专著的，延期公开时限原则上在3年（含3年）以内；涉及技术诀窍的，延期公开时限原则上在5年（含5年）以内。涉密项目科技报告按照有关规定管理。



二、课题研究内容、研究方法及技术路线

(一) 课题的主要研究内容

拟解决的关键科学问题、关键技术问题，针对这些问题拟开展的主要研究内容，限 1000 字以内。

(1) 发展多尺度计算软件。

(a) 发展以量子力学计算为基础的底层（电子层次）到顶层（材料物性）的研究模式（bottom-up mode），建立跨尺度桥接算法及软件；

(b) 建立以密度矩阵理论为基础的分区并行算法及软件，原理性改变哈密顿矩阵结构，优化作业并行效率；

(c) 采用本项目发展的多组元镍基合金埋置原子势，结合跨时间尺度加速分子动力学技术，给出温度场和应力场服役条件下位错与固溶强化元素交互作用的吉布斯自由能势垒；基于考虑化学组元的热力学和动力学参量，建立物理参数传递有限元蠕变模型和物理半经验蠕变方程，给出合金材料在服役条件下应变随时间的演化行为。

(2) 发展电子能带和声子谱的反折叠方法，结合密度泛函方法和分子动力学方法研究单晶高温合金的电子和声子结构。对比分析单晶高温合金的电子和声子结构，探索性能优异的单晶高温合金的电子和声子结构特征。进而结合高通量计算，从大量材料中筛选具有特征的目标材料，为合金设计提供参考。

(3) 基于第一性原理计算与自主开发的动力学蒙特卡洛程序相结合的多尺度方法，系统研究镍基高温合金中的基体原子（镍或铝）、合金化元素以及空位、位错、界面等缺陷的复合效应。计算块体材料内部以及两相连接区的原子扩散过程、扩散路径选择、及扩散系数。

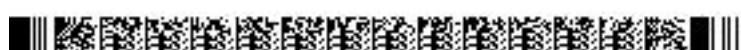
(4) 针对单晶高温合金材料高通量并发式集成计算的数据中蕴含的复杂的数据关联，引入机器学习及数据挖掘方法对其内在相关性进行分析，探索高温合金材料性能预测方法、数据关联表征方法。面向高通量计算数据，发展实现复杂数据分析与管理软件。

(5) 镍基高温合金化学组分及结构特征的基础性物理问题，涉及深层次电子效应的研究，预期性探讨材料微观电子结构、原子过程与宏观的力学性质的关联。

(a) 重元素合金体系中自旋及自旋-轨道耦合效应计算；

(b) 高温环境下电子结构以及费米面结构；

(c) 探索计算高温合金中重元素赝势及其与合金特性的关联；



- (d) 基于 CALPHAD 方法研究多元多相高温合金的热力学、扩散及扩散相变过程;
 - (e) 发展反应力场势函数方法研究原子结构的演化行为。
- (6) 基于第一性原理电子结构计算与多尺度-跨层次算法集成，探索镍基单晶高温合金化学组分间含量匹配临界性问题。为合金设计提供关键信息，平行的，与 ≥ 5000 高通量并发式作业相关联，建立多组元协同效应解析分析方法。

（二）课题采取的研究方法

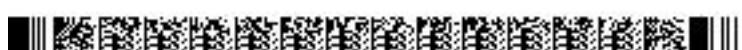
针对课题研究拟解决的问题，拟采用的方法、原理、机理、算法、模型等限 1000 字以内。

(1) 采用考虑物理化学过程的自由能面计算方法，即加速分子动力学技术，提供不同服役条件下的吉布斯自由能势垒关键物理参量，为连续介质尺度的有限元模拟提供核心物理参数。构建基于物理的本构模型，利用有限元方法在宏观时空尺度模拟高温合金的蠕变行为。

(2) 使用自主开发的 Quantum Unfolding 和 Phonon Unfolding 程序得到反折叠电子能带和声子谱，并通过计算结果寻找性能优异的单晶高温合金的电子声子结构特征。进一步修改 Quantum Unfolding 和 Phonon Unfolding 使之能够被其它程序反复直接调用，从而在高通量计算中高效地进行反折叠计算，从大量材料中找到性能优异的单晶高温合金。

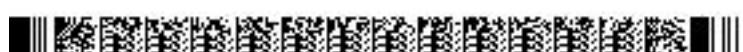
(3) 使用第一性原理的计算程序来准确获得原子的缺陷形成能以及跃迁势垒，并通过过渡态理论来获得原子跃迁的速率；通过声子谱计算来直接获得跃迁速率公式中的前置因子；自主开发动力学蒙特卡洛的程序，并配合高通量的计算框架，来模拟原子的扩散的过程。

(4) 基于机器学习算法，用历史数据建立、训练“组元-结构-性能”关联模型。首先，研究基于主动学习的多层次交互式特征选择方法，从特征预处理、相关性评估、冗余性评估和主成分分析四个方面逐层地对原始数据进行多层次、过滤式的特征筛选和特征转换，寻找单晶高温合金制作过程中各种影响因素之间及其与性能的关系。其次，研究基于集成学习的自适应混合式性能预测方法。指将有限个学习器通过不同集成策略共同处理同一个问题，使集成的模型具有更强的泛化能力，组合多个模型完成对性能的预测，提高预测精度。材料基因承载了影响“结构—物性”关联规则及化合物相稳定性的



信息，通过统计推理等方法解析主要影响因素，研究各种合金元素对高温合金的性能影响，为优化和加速镍基高温合金材料的设计提供参考依据。

(5) 材料中电子结构、自旋效应和赝势影响的研究将使用第一性原理方法；材料中原子结构演化行为的研究使用反应力场方法和经典的分子动力学方法。为构建多组元原子间相互作用势以及反应立场势，将通过第一性原理计算各种配比下多元镍基高温合金中的合金元素相分布和组织结构稳定性，包括合金元素占位形成能、基体与强化相结构稳定性、缺陷形成能和合金元素相内和相间扩散能量壁垒，并利用全局优化算法，来获得相应的势参数。为模拟多元合金热力学及扩散过程，将根据第一性原理高通量计算、分子动力学模拟及关键相平衡、高通量扩散偶实验结果，运用 CALPHAD 方法，在一维扩散模拟和扩散移动性参数概念的基础上，发展二维扩散模拟方法和程序。



三、主要创新点

围绕基础前沿、共性关键技术或应用示范等层面，简述课题的主要创新点。具体内容应包括该项创新的基本形态及其前沿性、时效性等，并说明是否具备方法、理论和知识产权特征。每项创新点的描述限 500 字以内。

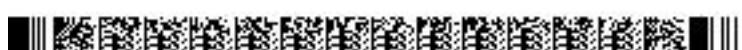
创新点 1：发展多尺度（空间及时间）建模及跨层次桥接算法，基于解析表述，与高通量并发式计算相集成实现快速、低耗跨微观-宏观尺度，材料物性及服役行为的全链条多尺度集成计算方法及软件。

- (1) 多尺度序列算法。发展以量子力学为基础的物理参量解析传递方法；
- (2) 力匹配算法。以声子格林函数桥接模式为特点。构成以底层（电子）向顶层（物性）扩展（bottom-up mode）的全程跨越理论，建模，解析表述及相关算法；
- (3) 发展基于连续力学及分子动力论的物性顶层与底层相关联的多尺度方法（Top-down mode），探索蠕变行为的跨尺度效应；
- (4) 发展基于原子结构演化与原子间相互作用势相关联的“自动势阱攀移方法（Autonomous Basin Climbing）”研究涉及时间效应的材料科学问题。

创新点 2：发展电子能带与声子谱的反折叠方法，分析多组元（重元素）-复杂结构体系电子结构及声子行为；为单晶高温合金化学组元选择及相关物性提供参考。

创新点 3：发展基于第一原理与动态蒙特卡洛方法相结合的计算方法，着重于多组元-复杂结构原子扩散过程中路径选择，以及原子间扩散关联机制问题研究，探索相关于镍基单晶高温合金相稳定性及化学元素选择与组合的相关规律。

创新点 4：建立高通量并发式计算中数据关联、数据规律提取以及复杂数据分析与管理软件，集成基于数据科学中的机器学习、数据挖掘、结构预测以及高通量计算中关联模型设计等方法。



四、预期经济社会效益

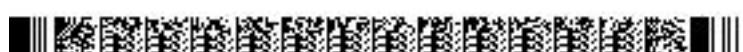
课题的科学、技术、产业预期指标及科学价值、社会、经济、生态效益。限 500 字以内。

基于“材料基因组计划”的基本理念，建立高通量并发式计算与多尺度算法及软件相集成，变革材料研发模式，探索高通量并发式计算中材料的物理机制问题，实现设计国家重大需求的新材料。

预期指标：

(1) 建立多组元材料体系微观-宏观-物性-服役行为全链条多尺度集成计算方法及软件，为材料科研提供重要方法和工具；

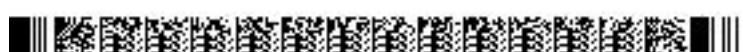
(2) 高通量并发式计算物理及机制研究以及建立多种算法和多种功能软件，体现多学科交叉变革研发模式的物理基础。



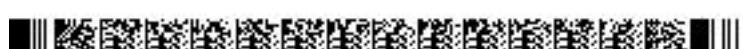
五、课题年度计划

按年度制定完成课题的计划进度，应将课题的考核指标分解落实到年度计划中。

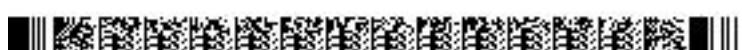
年度	任务	考核指标	成果形式
2017 年 7月 2018 年 6月	(1) 开展序列算法及声子格林函数桥接算法多尺度建模及算法工作；同时展开提高并行效率的分区并行算法； (2) 开展高温合金中原子扩散现象的理论表述及程序模拟； (3) 发展适用于高温合金的相互作用势参数； (4) 收集管理解析已有镍基单晶高温合金材料计算数据；开发主动学习的多层次交互式特征选择方法，定性定量分析各种因素对性能的影响程度； (5) 开展高温合金中自旋及自旋-轨道耦合计算工作； (6) 高温费米电子态 (7) 单晶高温合金三元及四元合金电子结构及能带精细计算，基本为单作业和几百核上的优化并行算法	发表论文 1 篇	论文发表或录用通知



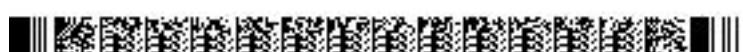
	<p>(1) 继续进行 2017 年 7 月开始的研究任务</p> <p>(2) 原子有限元与分子动力学方法相关联;</p> <p>(3) 能带反折叠程序，分析单晶高温合金中化学元素及缺陷体系的能带和声子谱，以期为合金成分设计提供理论分析;</p> <p>(4) 建立发展反应力场方法，研究温度和应力等因素耦合作用下高温合金中原子结构与力学性能关系；使用 CALPHAD 方法，研究几类多元合金体系的热力学和扩散行为；</p> <p>(5) 多尺度-跨层次算法建模及桥接模式的自统一</p> <p>(6) 多元合金设计及电子结构计算</p> <p>(7) 开展“组分—结构—性能”关联规则的表征方法研究及交互集成机器学习方法，完成程序编写与验证。使用机器学习方法挖掘高温合金数据，根据不同的学习目标自适应地构造出多种学习器混合预测模型，提高对性能的预测精度。继续开展新型镍基单晶高温合</p>	<p>发表论文 1 篇； 登记软件著作权 1 项</p>	<p>论文发表或录用通知； 软件著作权登记或受理通知</p>
2018 年 7 月 2019 年 6 月			



	金相稳定性机理研究；		
2019 年 7月 2020 年 6月	(1) 继续 2018 年 1 月至 2019 年 6 月的研究工作 (2) 反应力场模式势函数应用于分子动力学研究结构演化及高温合金裂纹扩展行为； (3) 研究系列化学及结构缺陷，在特征扩散路径下的扩散特征及机制与动态蒙特卡洛方法相结合计算扩散系数合金相稳定性； (4) 自旋与自旋-轨道耦合 (5) 高温费米电子态 (6) 基于数据关联分析计算，提取规律构建高通量并发式计算数据分析与管理软件，针对镍基高温合金材料数据，进行典型应用示范研究；	发表论文 1 篇	论文发表或录用通知
2020 年 7月 2021 年	(1) 继续前期研究工作 (2) 多尺度算法及分区并行元素研究复杂体系高温合金中的电子结构特性及多组元协同效应 (3) 有限元方法与分子动力学方法关联模拟高	发表论文 1 篇； 登记软件著作权 1 项	论文发表或录用通知； 软件著作权登记或受理通知



6月	<p>温合金的蠕变行为，结合实验验证；分析高温合金微观结构与宏观力学性能的关联，探索高温合金承温能力；</p> <p>(4) 研究基于规则抽取的可解释性方法，将机器学习学到的结果转为易于理解的 if-then-else 规则，提高预测方法的可解释性；</p> <p>(5) 发展自动势阱攀移方法，研究镍基单晶高温合金结构演化、力性及时间演化行为；</p> <p>(6) 课题总体总结</p>		
----	---	--	--



六、课题组织实施机制及保障措施

1、课题的内部组织管理方式、协调机制等，限 500 字以内。

本课题将建立有效的管理、组织和协调机制，确保课题高效运行。严格按照相关项目管理规定执行，在人员、设备、管理和配套保障措施等方面进行全面协调，综合调配开展研究所需要的各项物质条件，保证课题顺利实施；实行例会制度，定期进行课题资源调配、技术方案讨论和交流审查、研究进展检查等。

2、课题实施的相关政策，已有的组织、技术基础，支撑保障条件，限 500 字以内。

北京应用物理与计算数学研究所目前拥有峰值运算速度数百万亿次的高性能计算平台，同时拥有多个计算机集群。该所具有很好的学术氛围和图书科技文献条件，毗邻诸多中科院研究所及大学机构，学术交流非常方便。该所对本项目的申请非常支持，将在科研人员的工作环境方面给予充分的保证。

清华大学拥有先进的仪器装备和支撑条件，具备规范、高效的管理与运行机制，能够承担国家重大工程所需的尖端材料技术研究任务。前期承担了一系列相关的 973 计划课题与国家自然科学基金重大课题。清华大学是我国较早建立超算中心的高校，清华信息科学与技术国家实验室（筹）在大规模并行计算领域有较强的软硬件设施与技术力量。

上海大学高性能计算中心拥有多台高性能计算系统，安装价值近千万的多领域商用应用软件和自主研发计算程序，在众多领域开展了研究与应用。同时，上海大学高性能计算中心和计算机学院提供强有力的支持，上海大学材料学院有着一批多年从事科学与工程计算的专家和研究人员，这些都为材料计算提供支持和帮助。

中国科学院力学研究所非线性力学国家重点实验室，具有雄厚的跨尺度力学研究背景、实验设备和高性能计算平台，在材料的连续介质力学尺度模拟方面具有长期积累。

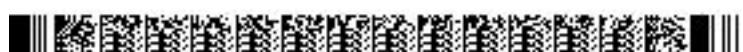
3、对实现项目总目标的支撑作用，及与项目内其他课题的协同机制，限 500 字以内。

本课题所在项目“高通量并发式材料计算算法和软件”的中心任务是发展建立微观-宏观-物性-服役行为全链条多尺度集成计算方法及相关软件。该项目设立三个课题：

课题一：高通量并发式集成计算主体算法及有自主知识产权软件系统；

课题二（本课题）：高通量并发式计算中的物理基础与物理机制；

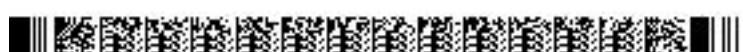
课题三：合金化学组分及组织结构优化设计（包括设计高通量并发式计算作业≥



5000) 及验证性应用。

本课题作为物理基础及物性机制与中心任务及课题一和课题三直接相关或间接传递式相关。本课题及课题三自身研究内容跨越多学科，涉及多领域，导致它们自身任务之间也相互关联和支持。

本课题的研究可以为课题一中“高通量材料计算关键算法与软件”的开发提供理论依据和数值参考，包括自动化批量作业生成、执行及结果后处理软件，面向材料计算全过程的容错纠错算法与软件，以及数据分析与可视化软件。本课题与课题三相协同，在作业数达 5×10^3 以上的高通量并发式集成作业模式运用方面，开展高温合金中3d-、4d-和5d-过渡族元素、基体元素及强化元素效应；并配合课题一的高通量计算，总结、归纳高通量计算结果所反映出的物理规律，进行验证性应用，检验高通量计算对于新材料开发的效果。



七、知识产权对策、成果管理及合作权益分配

限 500 字以内。

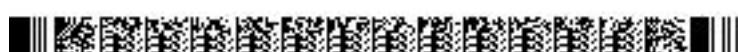
课题将严格执行国家知识产权、成果管理的相关法律法规。

(1)按照国家科技成果相关规定，严格执行《科技成果登记办法》，实行国家科技计划重大成果报告制度，课题实施过程中取得重大成果时，及时向科技部的计划管理机构报告。并根据科技成果特点，按照法律法规的规定适时选择申请专利、进行著作权登记等适当方式予以保护。

(2)在不影响项目的专利申请或其他知识产权保护的前提下，课题产生的学术报告、论文和专著在进行对外发表时，标注国家重点研发计划“材料基因工程”重点专项经费资助字样和计划项目编号。

(3)知识产权与科研成果涉及国家机密的，严格遵照《中华人民共和国保守国家秘密法》和《科学技术保密规定》及相关规定实施管理。

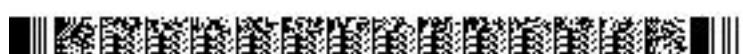
(4)在不影响知识产权保护、国家秘密和技术秘密保护的前提下，积极推动项目产生的知识产权和科研成果的转移和运用，加快知识产权的商品化、科研成果的产业化。并按照国家科技成果相关规定，对项目的成果进行权益分配。在合作过程中，为完成本合作项目，由各方独立开发获得的知识产权归开发方独自所有；本项目合作过程中，为完成本合作项目，共同研发所获得的知识产权由为此成果做出实质性贡献方共同所有。



八、需要约定的其他内容

限 500 字以内。

无。

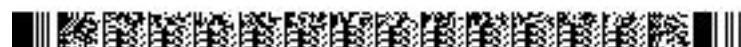


九、课题参加人员基本情况表

序号	姓名	性别	出生日期	身份证号码 (军官证、护照)	技术职称	职务	学位	专业	投入本课题的全时工作时间(人月)	人员分类	在课题中分担的任务	工作单位
1	张平	男	1972-08-30	370826197208305114	正高级	研究室主任	博士	计算凝聚态物理	24	课题负责人	课题负责人，建立赝势	北京应用物理与计算数学研究所
2	顾秉林	男	1945-10-08	110108194510088912	正高级	高等研究院院长	博士	物理	16	课题骨干	并发式计算算法及软件	清华大学高等研究院
3	鲁晓刚	男	1970-05-11	430104197005112515	正高级	无	博士	材料学	24	课题骨干	多元合金相图及扩散问题	上海大学材料基因组工程研究院
4	刘轶	男	1971-04-27	HG103666	正高级	材料基因组工程研究院副院长	博士	材料科学与工程	24	课题骨干	势函数及力学特性研究	上海大学材料基因组工程研究院
5	施思齐	男	1978-08-20	360102197808206311	正高级	无	博士	材料物理与化学	20	课题骨干	数据关联分析	上海大学材料科学与工程学院
6	王聪	男	1981-10-27	231005198110271015	副高级	无	博士	凝聚态物理	24	课题骨干	高温电子态研究	北京应用物理与计算数学研究所
7	李孜	男	1981-11-18	110105198111186530	副高级	无	博士	凝聚态物理	24	课题骨干	原子扩散问题研究	北京应用物理与计算数学研究所
8	郑法伟	男	1982-01-29	370724198201294957	副高级	无	博士	凝聚态物理	24	课题骨干	能带反折叠分析	北京应用物理与计算数学研究所



9	杨宇	男	1982-11-08	420704198211084274	副高级	无	博士	凝聚态物理	24	课题骨干	电子结构研究	北京应用物理与计算数学研究所
10	吴国清	男	1980-07-05	371324198007051117	副高级	无	博士	计算数学	30	课题骨干	数据管理与分析	北京应用物理与计算数学研究所
11	刘悦	女	1975-04-22	362101197504220021	副高级	无	博士	计算机应用	24	课题骨干	数据关联分析	上海大学计算机工程与科学学院
12	王云江	男	1981-07-01	130102198107011214	副高级	无	博士	凝聚态物理	24	课题骨干	有限元与分子动力学耦合	中国科学院力学研究所
13	朱佩成	男	1969-07-21	310222196907210030	正高级	无	博士	数学	24	其他研究人员	材料数值模拟	上海大学材料基因组工程研究院
14	王山鹰	男	1971-04-27	150204197104270912	副高级	无	博士	凝聚态物理	16	其他研究人员	材料数值模拟	清华大学物理系
15	王昊	男	1977-04-30	42050019770430131X	中级	无	博士	材料学	24	其他研究人员	材料数值模拟	上海大学材料科学与工程学院材料加工系
16	翟冬	男	1986-12-22	370305198612220759	中级	无	博士	化学工程与技术	24	其他研究人员	材料数值模拟	上海大学材料基因组工程研究院
	固定研究人员合计								370	/	/	/
	流动人员或临时聘用人员合计								576	/	/	/
	累计								946	/	/	/

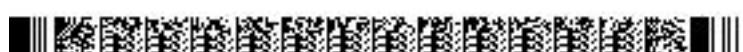


十、经费预算

课题（2017YFB0701502）承担单位基本情况表

表B1

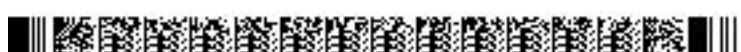
填表说明：1. 组织机构代码指企事业单位国家标准代码，单位若已三证合一请填写单位社会信用代码，无组织机构代码的单位填写“000000000”； 2. 单位公章名称必须与单位名称一致。					
课题编号	2017YFB0701502		执行周期（月）	48	
课题名称	高通量并发式计算物理基础及物理机制				
课题承担单位	单位名称	北京应用物理与计算数学研究所			
	单位性质	事业型研究单位			
	单位主管部门	中国工程物理研究院	隶属关系	中央	
	单位组织机构代码	12100000400002830U			
	单位法定代表人姓名	王建国			
	单位所属地区	北京市	北京	海淀区	
	电子邮箱	gan_guangyong@iapcm.ac.cn			
	通信地址	北京市 海淀区花园路六号			
	邮政编码	100088			
相关责任人	课题负责人	姓名	张平		
		身份证号码	370826197208305114		
		工作单位	北京应用物理与计算数学研究所		
		电话号码	010-61935173	手机号码	18911965765
		电子邮箱	zhang_ping@iapcm.ac.cn	邮政编码	100088
		通信地址	北京市海淀区花园路6号		
财务部门负责人	科研财务助理	姓名	马德成		
		电话号码	010-59872239	手机号码	13810139620
		传真号码	010-59872300		
		电子邮箱	ma_decheng@iapcm.ac.cn		
	姓名	刘胜男			
		身份证号码	230203198510101020		
		电话号码	010-61935878	手机号码	18614086927
		电子邮箱	liu_shengnan@iapcm.ac.cn	微信号	ANDY927hero



课题预算表

表B2 课题编号： 2017YFB0701502 课题名称： 高通量并发式计算物理基础及物理机制 金额单位：万元

序号	预算科目名称 (1)	合计	中央财政资金	其他来源资金
		(2)	(3)	(4)
1	一、经费支出	480.00	480.00	
2	(一) 直接费用	403.00	403.00	
3	1、设备费	18.00	18.00	
4	(1) 购置设备费	18.00	18.00	
5	(2) 试制设备费			
6	(3) 设备改造费			
7	(4) 设备租赁费			
8	2、材料费	36.00	36.00	
9	3、测试化验加工费	99.60	99.60	
10	4、燃料动力费	20.00	20.00	
11	5、差旅/会议/国际合作与交流费	79.40	79.40	
12	6、出版/文献/信息传播/知识产权事务费	44.20	44.20	
13	7、劳务费	95.60	95.60	
14	8、专家咨询费	10.20	10.20	
15	9、其他支出			
16	(二) 间接费用	77.00	77.00	
17	二、经费来源	480.00	480.00	
18	(一) 中央财政资金	480.00	480.00	/
19	(二) 其他来源资金		/	
20	1、地方财政拨款		/	
21	2、单位自有货币资金		/	
22	3、其他资金		/	



设备费——购置/试制设备预算明细表

表B3 课题编号： 2017YFB0701502

课题名称： 高通量并发式计算物理基础及物理机制

金额单位：万元

填表说明： 1.设备分类：购置、试制； 2.购置设备类型：通用、专用； 3.经费来源：中央财政资金、其他来源资金； 4.试制设备不需填列本表（10）列、（11）列、（12）列、（13）列； 5.设备单价的单位为万元/台套，设备数量的单位为台套； 6.10万元以下的设备不用填写明细。													
序号	设备名称	设备分类	功能和技术指标	单价	数量	金额	经费来源	购置或试制单位	安置单位	购置设备类型	主要生产厂家及国别	规格型号	拟开放共享范围
(1)	(2)	(3)	(4)	(5)	(6)	(7)	(8)	(9)	(10)	(11)	(12)	(13)	
单价10万元以上购置设备合计						/	/	/	/	/	/	/	/
单价10万元以上试制设备合计						/	/	/	/	/	/	/	/
单价10万元以下购置设备合计				5	18.00	/	/	/	/	/	/	/	/
单价10万元以下试制设备合计						/	/	/	/	/	/	/	/
累计				5	18.00	/	/	/	/	/	/	/	/



测试化验加工费预算明细表

表B4 课题编号： 2017YFB0701502

课题名称： 高通量并发式计算物理基础及物理机制

金额单位：万元

填表说明：量大及价高测试化验，是指课题研究过程中需测试化验加工的数量过多或单位价格较高、总费用在10万元及以上的测试化验加工，需填写明细。

序号	测试化验加工的内容	测试化验加工单位	计量单位	单价(元/单位数量)	数量	金额
	(1)	(2)	(3)	(4)	(5)	(6)
1	电子探针微区成分分析	上海大学	小时	200.00	1000	20.00
2	扫描电镜分析测试	上海大学	个	250.00	400	10.00
3	高温合金蠕变原子-连续介质多尺度模拟	国家超级计算深圳中心	万核*小时	1000.00	220	22.00
4	高温合金的第一性原理电子结构研究	吕梁云计算中心	万核*小时	1000.00	360	36.00
量大及价高测试化验加工费合计						88.00
其他测试化验加工费合计						11.60
累计						99.60



单位研究经费支出预算明细表

表B5 课题编号： 2017YFB0701502

课题名称： 高通量并发式计算物理基础及物理机制

金额单位：万元

序号	单位名称	组织机构代码-统一社会信用代码	单位类型	任务分工	研究任务负责人	合计	中央财政资金		其他来源资金	
							小计	其中：间接费用		
	(1)	(2)	(3)	(4)	(5)	(6)	(7)	(8)	(9)	(10)
1	北京应用物理与计算数学研究所	统一社会信用代码	1210000040000 2830U	课题承担单位	高通量并发式计算中物理机制及数据科学问题，包括赝势建立、能带反折叠分析、高温电子态扩散机制及计算以及数据科学问题	张平	175.00	175.00	28.00	
2	清华大学	统一社会信用代码	1210000040000 0624D	课题参与单位	发展计算材料物理与结构材料并发式计算算法及软件；单晶高温合金中自旋及自旋轨道耦合探索；多尺度算法和软件发展	王崇愚	80.00	80.00	13.00	
3	上海大学	统一社会信用代码	1231000042502 637XE	课题参与单位	发展多元单晶高温合金分子动力学势函数及力学特性研究；发展多元合金相图计算方案及其热力学、动力学分析；合金中化学组元及结构关联方式，提取合金成分设计规律、数据关联分析及处理模式集成分析	刘悦、刘铁、鲁晓刚、施思齐	135.00	135.00	22.00	
4	中国科学院力学研究所	统一社会信用代码	1210000040001 222XA	课题参与单位	原子有限元方案与分子动力学方法相耦合算法发展	王云江	90.00	90.00	14.00	



单位研究经费支出预算明细表

表B5 课题编号： 2017YFB0701502 课题名称： 高通量并发式计算物理基础及物理机制 金额单位：万元

填表说明： 1.单位类型分课题承担单位、课题参与单位； 2.组织机构代码指企事业单位国家标准代码，单位若已三证合一请填写单位统一社会信用代码，无组织机构代码的单位填写“000000000”。									
序号	单位名称	组织机构代码-统一社会信用代码	单位类型	任务分工	研究任务负责人	合计	中央财政资金		其他来源资金
							小计	其中：间接费用	
(1)	(2)	(3)	(4)	(5)	(6)	(7)	(8)	(9)	(10)
累计							480.00	480.00	77.00



预算说明

一、对课题承担单位、参与单位前期已形成的工作基础及支撑条件，以及相关部门承诺为本课题研发提供的支撑条件等情况进行详细说明。

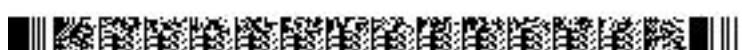
子课题二牵头单位北京应用物理与计算数学研究所目前拥有峰值运算速度数百万亿次的高性能计算平台，同时拥有多个计算机集群。这些设施将为本课题的实施提供良好的硬件条件。子课题二负责人张平的研究团队拥有丰富的第一性原理材料模拟和电子结构分析方面的经验，在温稠密物质状态诊断以及核武器材料的腐蚀老化等领域做了大量的工作，并拥有电子/声子能带反折叠通用软件、高通量二元合金第一性原理模拟与设计软件等多个自主开发的软件。

参与单位上海大学拥有以“自强 4000”超级计算机为主计算节点的计算基础设施平台，具备大数据计算的支撑平台能力，为本课题的顺利完成提供了可靠的物质保证。该团队在数据挖掘的机器学习方法、反应力场的参数构建及材料模拟、以及合金的多组元相图构建等方面都有着丰富的经验。

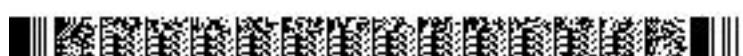
参与单位中国科学院力学研究所的非线性力学国家重点实验室主要从事纳米/微米尺度、纳/微系统、跨尺度关联和复杂流动的非线性力学理论和应用研究，具有雄厚的跨尺度力学研究背景、实验设备和研究所高性能计算平台。课题骨干王云江的研究团队主要从事纳米结构、非晶合金等新型材料物理与力学的多时空尺度计算机模拟工作，在纳米晶体蠕变、加速分子动力学、非晶变形热力学等领域取得了系列成果。

参与单位清华大学的顾秉林研究团队在凝聚态物质的电子结构、低维结构量子特性的理论研究、纳米材料及器件电子和输运性质的研究以及新型铁电材料的计算模拟等领域做出了大量的工作，积累了丰富的经验。

综上，本课题的承担单位都具备了承担本课题的资质，其充足的计算资源为本课题提供了硬件保证。课题的参与团队都有着丰富的工作基础和研究经验，



这为本课题的开展奠定了坚实的基础。



预算说明

二、对本课题各科目支出主要用途、与课题研发的相关性、必要性及测算方法、测算依据进行详细说明；按照课题进行说明，不需要按照参与单位分别说明，课题承担单位与课题参与单位应协商确定本课题各科目预算的分解情况；如同一科目同时编列中央财政资金和其他来源资金的，请分别说明。

（一）直接费用

- 1.设备费
- 2.材料费
- 3.测试化验加工费
- 4.燃料动力费
- 5.出版/文献/信息传播/知识产权事务费
- 6.其他支出
- 7.差旅费、会议费、国际合作与交流费、劳务费、专家咨询费

无需填写说明。

（项目实施中发生的差旅/会议/国际合作与交流费预算不超过直接费用 10%的，不需提供预算测算依据。超过直接费用 10%的，应说明测算依据）

（劳务费预算无比例限制。参与项目研究的研究生、博士后、访问学者以及项目聘用的研究人员、科研辅助人员等，均可开支劳务费。项目聘用人员的劳务费开支标准，参照当地科学和技术服务业从业人员平均工资水平，根据其在项目研究中承担的工作任务确定，其社会保险补助纳入劳务费科目中列支）

（专家咨询费应按照管理办法规定支出标准执行。）

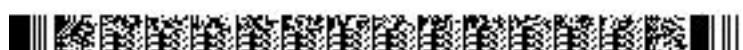
（二）间接费用

无需填写说明。

（承担单位应当建立健全间接费用的内部管理办法，合规合理使用间接费用，不得在核定的间接费用或管理费用以外再以任何名义在项目资金中重复提取、列支相关费用。项目承担单位在统筹安排间接费用时，应结合一线科研人员实际贡献公开公正安排绩效支出，体现科研人员价值，充分发挥绩效支出的激励作用；要处理好合理分摊间接成本和对科研人员激励的关系，绩效支出的安排与科研人员在项目工作中的实际贡献挂钩）

（3-1）设备费，共计 18.00 万元

1、为获得构建高温合金多组元相图所需要的实验数据，需购置专用实验设备高温扩散炉 2 台，用于制备扩散偶。高温扩散炉每台 3.00 万元，2 台共计 6.00 万元。具体参数为：额定温度 1400℃，使用温度 1350℃，电阻丝坩埚炉



(不锈钢外壳), 工作区尺寸 120 (直径) × 500 (高) mm, 瑞典康泰尔 APM 型炉丝。

2、为实现高温合金数据关联分析和挖掘任务, 需要对机器学习方法进行各种算法的实验。为此, 需购买材料基因组数据处理专用的计算显示平台 3 台, 约 4.0 万元/台, 3 台共计 12.00 万元。

(3-2) 材料费, 共计 36.00 万元

1、为获得构建高温合金多组元相图所需要的实验数据, 需要购买实验用高纯度金属及辅助实验用品, 共需要 21.60 万元。其中包括:

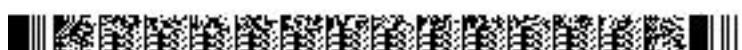
(1) 高纯金属材料, 共计 20.00 万元 (根据昆山海普电子材料有限公司近期报价, www.highpure.cn, 鉴于对实验精度的高要求, 需选用高纯度原材料, 故价格均根据最高纯度材料报价计算)。其中, 购买金属 Al、Cr、Fe、W 和 Ti 各 4kg, 共计 3.28 万元; 每种金属的报价为: Al (纯度 5N) 700 元/kg, Cr (3N5) 380 元/kg, Fe (4N) 2900 元/kg, W (3N5) 1600 元/kg, Ti (N5) 2600 元/kg。购买主要金属 Ni 和 Co 各 8kg, 共计 4.72 万元; 每种金属的报价为: Ni (4N) 2400 元/kg, Co (5N) 3500 元/kg。购买 800g 贵金属 Re (4N), 报价为 150 元/g, 共计 12.00 万元。

(2) 所需辅助实验用品, 共计 1.60 万元, 包括抛光试剂、酒精、腐蚀剂、砂纸、抛光布、镶嵌粉等。具体价格估算如下: 抛光布, 100 块, 单价为 10 元, 共计 0.10 万元; 金刚石抛光布, 300 支, 单价为 20 元, 共计 0.60 万元; 金相砂纸, 100 套, 单价为 50 元, 共计 0.50 万元; 酒精及其他化学试剂, 共 200 瓶, 平均单价为 20 元/瓶, 共计 0.4 万元。

2、为实现材料数值模拟以及数值收集与分析, 需要对高性能计算集群服务器中的专用内存和专用硬盘进行更新和升级, 共需要 14.4 万元。其中包括: 内存 16GB, 2000 元/条, 30 条, 共 6.0 万元; 硬盘 4TB 3.5 寸 SAS, 3500 元/块, 24 块, 共 8.40 万元。

(3-3) 测试化验加工费, 共计 99.60 万元

1、为获得构建高温合金多组元相图所需要的实验数据, 需要对高温合金材



料进行加工和测试，共需要 34.4 万元，测试化验加工单位为上海大学。其中包括：

(1) 测试费，共计 30.0 万元，包含扫描电镜分析测试费用 10.0 万元，收费标准为试样 90 元（含 6 张照片），点分析：9 元/个，线分析：30 元/个，面分析：60 元/个，共需要 $(90 \text{ 元} + 8 \text{ 个点} \times 9 \text{ 元} + 1 \text{ 条线} \times 30 \text{ 元} + 1 \text{ 个面} \times 60 \text{ 元}) \times \text{样品个数} = 250 \text{ 元/个} \times 400 \text{ 个} = 10.00 \text{ 万元}$ ；电子探针微区成分分析费用，共需要 $200 \text{ 元/小时} \times 1000 \text{ 小时} = 20.00 \text{ 万元}$ 。

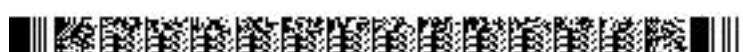
2) 加工费，共计 4.4 万元，包括纽扣锭的轧制、线切割、真空封装、成分测定等加工及测试费用。

2、为理解高温合金中的原子的基本过程，我们需要进行材料的微观电子、原子结构以及宏观的力学性能的数值模拟。由于合金材料中原子缺陷结构（空位、位错、裂纹和界面等）的复杂性以及元素掺杂的多样性（约 10 种掺杂元素），需要对大量的包含缺陷和掺杂的体系进行计算，从而需要大量的计算资源。为此，我们将购买超级计算中心的计算机时，单价为 0.1 元/(核*小时)，共需要 652 万核*小时，总费用为 65.20 万元。其中包括：

(1) 研究高温合金在温度场及力场下裂纹成核、扩展及断裂行为以及合金强韧化机制，使用反应力场方法，每年需要 18 万核*小时，四年的总费用为 7.20 万元。测试化验加工单位为上海超级计算中心。

(2) 研究高温合金蠕变性能的多尺度计算模拟，使用经典的分子动力学结合连续介质力学或时间加速技术，每年需要 55 万核*小时，四年的总费用为 22.00 万元。测试化验加工单位为国家超级计算深圳中心。

(3) 研究高温合金的电子结构、原子扩散势垒以及声子谱等，使用第一性原理计算方法。第一性原理方法计算量较大，而且为模拟更接近于真实的情况，体系通常需要包含较多的原子（约 300-400 个），这使得单一的电子自洽计算即需要约 600 核*小时；此外，在计算能量势垒、声子谱以及分子动力学时，需要多次重复电子自洽计算的过程。因此，该部分计算需要的机时较多，约为每年 90 万核*小时，四年的总费用为 36.00 万元。测试化验加工单位为吕梁云计算中心。



(3-4) 燃料动力费，共计 20.00 万元

本课题预计支出的燃料动力费为 5 万元/年，四年共计 20 万元，主要用于支付实验设备的电费以及本地小型计算服务器的电费。本课题中进行的扩散偶实验，需要高温扩散炉 4 台，每台炉子功率 5 千瓦，每年运行时间约为 1500 小时，共计 $5 \times 4 \times 1500 = 30000$ 千瓦时/年；需要非自耗真空电弧熔炼炉 1 台，功率 6 千瓦，每年运行时间约为 200 小时，共计 1200 千瓦时/年。本课题中还有 3 台用于基因组数据处理分析以及数值计算初步测试的本地小型计算服务器。每台服务器功率约为 0.8 千瓦，每台服务器每年工作约 8000 小时，每年共计用电 $0.8 \times 3 \times 8000 = 19200$ 千瓦时。电费单价约为 1.0 元/千瓦时，每年共计消耗电费为 $(30000 + 1200 + 19200) \times 1.0 = 50000$ 元，四年共计 20 万元。

(3-5) 差旅/会议/国际合作与交流费，共计 79.40 万元

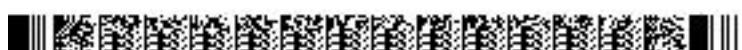
1、差旅费，共计 52.40 万元，其中包括：

(1) 调研、学术交流、方案论证等费用 40.80 万元，测算依据为：(a) 高级职称人员交通费平均 2500 元/人，住宿标准平均为 480 元/人天，差旅补助 180 元/人天。平均每年 8 人次参加会议，会期按 5 天计算，四年合计 $(2500 + (480+180) \times 5) \times 8 \times 4 = 18.6$ 万元。(b) 其它人员交通费平均 1200 元/人，住宿标准平均 320 元/人天，差旅补助 180 元/人天。平均每年 15 人次参加会议，会期按 5 天计算，四年合计 $(1200 + (320+180) \times 5) \times 15 \times 4 = 22.2$ 万元。

(2) 市内交通费，四年共计 11.60 万元。本课题中包含 4 家单位，整个项目共有 10 家单位参与，这些单位都分布在北京和上海这两个城市中。为了课题的顺利进行，在研究过程中，本课题的成员将会频繁访问各单位进行学术交流，从而产生市内交通费。预计每年花费 2.90 万元，四年共计 11.60 万元。

2、会议费，共计 12.00 万元。

由于本课题涉及高温合金材料的高通量计算和实验数据的分析，需要与材料专家进行密切合作，同时本课题的项目组分布在上海、北京等地，需要经常性的保持项目的沟通，因此课题组拟召开材料基因组问题学术研讨会 4 次，会



议标准为 400 元/人/天。其中包括 3 次主要面向项目组成员的方案论证讨论会，每次会期 3 天，参加人员 20 人，共计 7.2 万元；1 次面向国内外同行的学术交流会，每次会期 3 天，参加人员 40 人，共计 4.8 万元。4 次会议费用合计为 12.00 万元。

3、国际合作与交流费，共计 15.00 万元。

本项目的研究内容涉及国际较前沿的理论知识，需要借鉴和学习发达国家的先进方法和手段，需要参加相关领域高水平的会议以持续跟踪最新进展，吸收同行的优秀研究成果。项目执行期间，计划开展国际合作和学术交流 6 人次，包括前往美国、澳大利亚等国的知名大学及科研机构进行学术交流、参加国际著名学术会议等。费用包括往返机票（9000 元每人次）+住宿费（1000 元每人每天）+伙食公杂补贴（1300 元每人每天），出国时间每次约为 7 天，平均每人的费用共计为 $0.9 + (0.1 + 0.13) \times 7 = 2.50$ 万元。6 人次共计 15.00 万元。

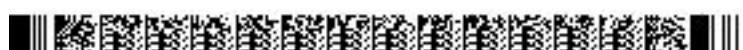
（3-6）出版/文献/信息传播/知识产权事务费，共计 44.20 万元

1、国际、国内学术论文版面及审稿费，共计 9.00 万元。四年预计共发表 15 篇文章，平均每篇费用约为 6000 元，共计 9.00 万元。

2、软件著作权申请费，共计 1.20 万元。四年预计共申请软件著作权 4 项，每项花费约为 0.3 万元，共计 1.20 万元。

3、资料费、文献检索费及购买书籍，共计 24.00 万元。用于购置学术资料、学术图书等，预计每年花费 6 万元，4 年合计 24.00 万元。

4、影像资料制作与保存的费用，共计 10.00 万元。作为材料基因组课题的研究，本课题将产生大量的实验数据和计算数据。为了更好地获得数据之间的物理关联，更直观的体现数据的变化规律，我们将把某些特定的数据制作成视频影像来保存和研究，其中一部分的影像还将作为发表文章的补充材料上传到期刊杂志的网站上。为方便观察数据特征，也为了使发表的文章引起更多的关注，相关的视频将会请专业人士来制作，制作好的视频也将会被妥善保存，这样就会产生影像制作与保存费用。预计每年花费 2.5 万元，4 年共计 10.00 万元。



(3-7) 劳务费，共计 95.60 万

在 4 年的项目周期内，需要做大量的数据模拟、模型建立、真实场景模拟分析、以及相应结果预测和测试，同时考虑到流动性问题，需要投入较多的硕士生、博士生以及博士后。考虑到项目研究人员参与其它项目引起的时间重叠，每年实际支付 6 个月酬劳，标准为博士后 2500 元/月，博士生 1500 元/月，硕士生 1200 元/月。本课题有 4 家单位，一共将有 5 位博士后、15 位博士生以及 4 位硕士生参与研究工作，每月酬劳共计 3.98 万元，4 年共 24 个月，共计约为 95.60 万元。

(3-8) 专家咨询费，共计 10.20 万元。

1、拟聘请专家对项目的实施过程、中期研究进展以及项目的成果水平等进行咨询评估，拟每年邀请来自大学或研究院所等代表共计 5 人次，每次 2 天，每人每天咨询费 800 元，四年共计 3.20 万元。

2、拟召开 3 次项目相关疑难关键问题研究会，会期 2 天，专家 5 人，每人每天咨询费 800 元，共计 2.40 万元。

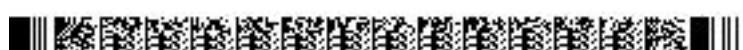
3、本项目包含 4 个研究单位，平均每个单位每年拟针对具体问题聘请专家 3 人*天，每人每天咨询费 800 元；拟通过通讯方式咨询专家 5 人次，每次咨询费 100 元。四年共计 $(800 \text{ 元}/\text{人天} * 3 \text{ 人天} + 100 \text{ 元}/\text{人次} * 5 \text{ 人次}) * 4 \text{ 个单位} * 4 \text{ 年} = 4.60 \text{ 万元}$ 。

(3-9) 其他支出

无

(3-10) 间接费用，共计 77.00 万元

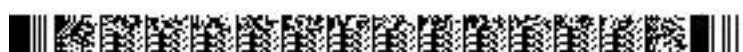
间接费用为直接费用扣除设备费后的 20%，共计 77.00 万元。其中绩效支出 19.25 万元，管理费 19.25 万元，水电费 7.70 万元，固定资产使用费 30.80 万元。

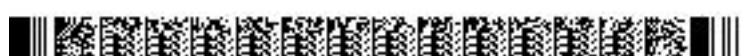


预算说明

三、其它来源资金来源说明（需说明资金的来源、用途）

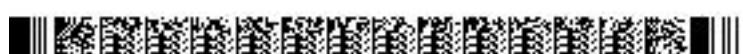
无。





十一、相关附件

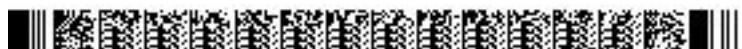
1. 乙方与参加单位有关协议（协议中须并加盖乙方与参加单位公章、法人签字签章；协议文件须扫描上传。如无参加单位，则不填）；
2. 申报指南规定的其他附件。



国家重点研发计划
“材料基因工程关键技术与支撑平台”专项
“高通量并发式材料计算算法和软件”项目
“高通量并发式计算物理基础及物理机制”课题
组织实施协议

课题牵头单位：北京应用物理与计算数学研究所
课题负责人：张平
联系方式：010-61935173

2017年6月



甲方(课题牵头单位):北京应用物理与计算数学研究所
通讯地址:北京市海淀区花园路六号
课题负责人:张平

乙方(参与单位):清华大学
通讯地址:北京市海淀区清华园1号
负责人:王崇愚

乙方(参与单位):上海大学
通讯地址:上海市宝山区上大路99号
负责人:刘悦、刘轶、鲁晓刚、施思齐

乙方(参与单位):中国科学院力学研究所
通讯地址:北京市北四环西路15号
负责人:王云江

本协议各方就共同合作参与研究国家重点研发计划“材料基因工程关键技术与支撑平台”专项“高通量并发式材料计算算法和软件”项目之课题二“高通量并发式计算物理基础及物理机制”相关事宜,经平等协商,在真实、充分表达各自意愿的基础上,根据有关法律、法规和课题管理部门的相关规定,达成如下协议,并由合作各方共同恪守。

一、关于课题牵头单位和参加单位的约定

根据课题申报书约定,各方同意继续由北京应用物理与计算数学研究所作为该课题的牵头单位,清华大学、上海大学、中国科学院力学研究所作为课题参加单位,共同就国家重点研发计划“材料基因工程关键技术与支撑平台”专项“高通量并发式材料计算算法和软件”项目之课题二“高通量并发式计算物理基础及物理机制”开展合作(以下简称“参加单位”)。关于课题牵头、承担单位约定见第二条。

二、课题研究各参与单位任务分工与中央财政经费分配

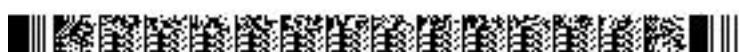
各方合作共同申请的材料基因工程关键技术与支撑平台重点专项,高通量并发式计算物理基础及物理机制课题已收到专业机构任务书和预算书填报通知。根据课题申报书,课题的牵头单位和参与单位约定如下:

牵头单位:北京应用物理与计算数学研究所

参与单位:清华大学、上海大学、中国科学院力学研究所

按照任务书要求,课题各参与单位(包括牵头单位)的负责的研究内容和主要考核指标、课题的国拨专项经费分配约定如下(经费单位:万元):

	承担任务内容	承担单位	承担者	经费	备注
任务1	高通量并发式计算中物理机制及数据科学问题	北京应用物理与计算数学研究所	张平 郑法伟、王聪、李孜、吴国清	175	包括赝势建立、能带反折叠分析、高温电子态扩散机制及计算以及数

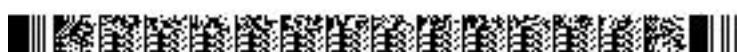


					据科学问题,清华大学王崇愚参加扩散机制问题研究
任务 2	发展计算材料物理与结构材料并发式计算算法及软件	清华大学	顾秉林	40	
任务 3	单晶高温合金中自旋及自旋轨道耦合探索	清华大学	王崇愚	40	
任务 4	发展多元单晶高温合金分子动力学势函数及力学特性研究	上海大学	刘轶	45	
任务 5	发展多元合金相图计算方案及其热力学、动力学分析	上海大学	鲁晓刚	45	包括多元合金扩散问题
任务 6	单晶高温合金中化学组元及结构关联方式,提取合金成分设计规律、数据关联分析、数据特征组合及处理模式集成分析及数据筛选与判据	上海大学	刘悦、施思齐	45	
任务 7	发展多尺度跨层次算法与高通量并发式集成算法相协同				
7a	多尺度跨层次量子力学为基础的序列算法及声子格林函数桥接算法	清华大学	王崇愚	10	
7b	原子有限元方案与分子动力学方法相耦合算法发展	中国科学院力学研究所	王云江	45	
7c	时间多尺度算法发展应用于单晶高温合金结构演化与力学问题	清华大学 北京应用物理与计算数学研究所	王崇愚 李孜	35	

三、关于科研成果、知识产权和奖励、科技报告提交的相关约定

在课题执行过程中涉及到的信息公开与分享、科研成果处理、知识产权申请与转让、奖励申报和收益分享等事宜按照以下约定执行,本协议未尽之处,应采取“一事一议”的方式签订补充协议:

1、课题执行期间,各方承诺尽最大可能互为提供资料数据,共享研究成果,但相关资料和数据仅限于各方的研究目的,任何方都不得将其他方未公开的材料和资料向其他方转移和泄露。



2、牵头单位与各参与单位在课题执行日之前各自所获得的知识产权及相应权益均归各自所有，不因共同合作本课题而改变。

3、在课题执行过程中，各方应对科技成果及时采取知识产权保护措施，并按照国家科技计划知识产权管理相关规定决定归属。独自完成的科技成果及获得的知识产权归各方独自所有，相关成果被授予的奖励归各方独自所有。各方共同完成的科技成果及其形成的知识产权归各方共有，共同享有知识产权使用权，相关成果获得的荣誉和奖励归完成各方共有。

4、共有知识产权所有权申请及转让需要各方共同同意，并另行起草签署书面约定明确归属和收益共享方式。无论是独有还是共有的知识产权转让，课题各参与方有以同等条件优先受让的权利。

5、按照国家科技报告制度的有关规定和各重点专项管理的具体要求，在课题验收前提交全面描述研究过程和技术内容的最终科技报告，在课题年度或中期检查时提交描述本年度研究过程和进展的年度技术进展报告，以及在课题实施过程中提交包含科研活动细节及基础数据的专题科技报告。科技报告应按国家标准规定的格式撰写。

四、课题资产管理和归属约定

本课题中央财政经费支持的设备购置与样机试制、资料材料以及数据等资产按国家科技计划管理办法相关要求执行；自筹经费提供方与使用方应另行签订相关协议约定自筹经费投入产生的资产归属问题。

1、中央财政经费投入研制或购置的设备、开发的样机、资料材料及数据等按国家科技计划有关法规决定所有权和归属，并至少在课题参与单位间提供共享。

2、配套自筹经费研制或购置的设备、开发的样机、资料材料及数据等，在不违反国家法律和相关规定的基础上，按自筹经费提供方与使用方之间的协议处理。

五、课题执行违约责任

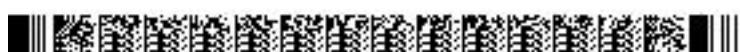
1、根据任务书约定，课题参与方负有按时完成各自负责任务并达到相关考核指标的义务。各参与单位研发进展滞后，课题牵头单位有权督促相关责任方加快进度；出现进展严重滞后并影响课题考核指标完成的情况，课题牵头单位报批专业机构后，有权缓拨、停拨、甚至追缴部分或全部课题经费。

2、各参与单位为完成任务书规定研究任务的支出，超出各自预算的部分由各方自行承担。经费承诺的自筹经费不能按时足额到位，课题牵头单位有权督促，必要时向专业机构进行报告，申请相应调整处罚措施。

3、违反本协议第四条关于科研成果和知识产权申请和权属等约定，违约方应向知识产权所属人支付违约金赔偿相关损失；在课题牵头单位或有关部门调节无法达成谅解的情况下，课题各方均有权通过法律途径追究违约方责任，但相关纠纷不作为影响课题研发进度的理由。

4、课题因难以克服的技术挑战或无法预见的客观条件变化而无法达到预期考核指标的情况，应及时通知课题牵头单位，及时报告专业机构申请调整，责任和损失由各方协商共同决定承担方式。因责任方未及时通知课题牵头单位造成的额外损失，由相关责任方自行承担。

5、因不可抗力不能履行任务书规定义务时，可以免除违约责任，但应及时



通知课题牵头单位，并按相关流程及时报告专业机构。在出现不可抗力的情况下，各方均采取适当措施减轻损失。因责任方未及时采取应对措施或通知课题牵头单位造成的额外损失，由相关责任方自行承担。

六、课题过程管理及验收

各单位应积极配合专业机构对课题执行的过程管理和验收，课题牵头、承担单位应采取召开会议、进展报告等方式协调和促进课题的执行。

各参与单位应严格按照国家科技计划管理的相关规定和办法执行课题预算，保证任务书规定的研究任务按时完成，并达到相应考核指标。

因一方或几方原因导致课题验收不通过，相关参与单位负责承担责任。

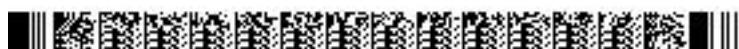
七、补充协议签署和争议解决办法

1、在课题执行过程中，任何重大调整（如任务考核指标调整、经费调整、参加单位变化等）都应及时通知课题牵头单位，报专业机构批准后签署补充协议。补充协议应对调整后的各方责任义务进行约定，与本协议具有同等效力。

2、在课题执行过程中，各参与单位发生争议应当友好协商解决。课题牵头单位出面协调无法达成一致的，可请求专业机构或相关科技主管部门进行调解。协商和调解不成的，申请由北京仲裁委员会仲裁。

本协议自各方盖章（签字）之日起生效，有效期至课题验收合格之日。协议一式5份，课题牵头单位保留2份，每个参与单位各保留1份，具有同等法律效力。

以下无正文，转签章页。



课题牵头单位（公章）：



法定代表人

或授权代理人(签章)：

课题负责人签字：

参与单位（公章）：



法定代表人

或授权代理人(签章)：

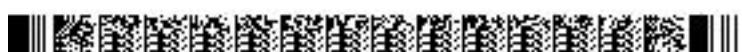
任务负责人签字：

2017年6月23日

2017年6月22日

特别说明：

- (1) 本页的单位盖章，仅限于签订国家重点研发计划“材料基因工程关键技术与支撑平台重点专项”课题组织实施协议使用。
- (2) 本页的单位盖章用于其他用途时无效。



课题牵头单位（公章）：



法定代表人

或授权代理人（签章）：

李平江

课题负责人签字：

张勇

2017年6月23日

参与单位（公章）：



法定代表人

或授权代理人（签章）：金东宇

任务负责人签字：刘晓刚 刘铁

鲁晓刚 施思齐

2017年6月20日

参与单位（公章）：

参与单位（公章）：

法定代表人

法定代表人

或授权代理人（签章）：

或授权代理人（签章）：

任务负责人签字：

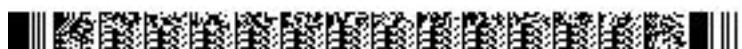
任务负责人签字：

年 月 日

年 月 日

特别说明：

- (1) 本页的单位盖章，仅限于签订国家重点研发计划“材料基因工程关键技术与支撑平台重点专项”课题组织实施协议使用。
- (2) 本页的单位盖章用于其他用途时无效。



课题牵头单位(公章) :



参与单位(公章) :



法定代表人

法定代表人

或授权代理人(签章) :

或授权代理人(签章) :

课题负责人签字:

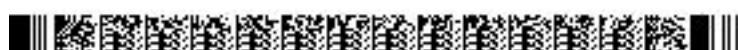
任务负责人签字:

2017年6月23日

2017年6月21日

特别说明:

- (1) 本页的单位盖章, 仅限于签订国家重点研发计划“材料基因工程关键技术与支撑平台重点专项”课题组织实施协议使用。
- (2) 本页的单位盖章用于其他用途时无效。



任务书签署

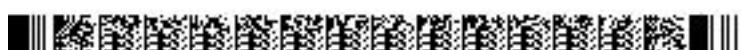
甲乙双方根据《国务院关于改进加强中央财政科研项目和资金管理的若干意见》(国发[2014]11号)、《国务院印发关于深化中央财政科技计划(专项、基金)管理改革方案的通知》(国发[2014]64号)、《中央办公厅国务院办公厅印发<关于进一步完善中央财政科研项目资金管理等政策的若干意见>的通知》(中办发[2016]50号)、《科技部财政部关于改革过渡期国家重点研发计划组织管理有关问题的通知》(国科发资[2015]423号)、《科技部财政部关于印发<中央财政科技计划(专项、基金等)监督工作暂行规定>的通知》(国科发政[2015]471号)、《财政部科技部关于印发<国家重点研发计划资金管理办法>的通知》(财科教[2016]113号)等有关文件规定,以及有关法律、政策和管理要求,依据项目立项通知,签署本任务书。

项目牵头承担单位(甲方):

法定代表人签字(签章):

(公章)

年 月 日



项目负责人签字（签章）：

年 月 日

课题承担单位（乙方）：

法定代表人签字（签章）：

（公章）

年 月 日

课题负责人签字（签章）：

年 月 日

