**二．拟解决的关键科学问题、关键技术和研究目标**

1.研究目标

基于材料基因组基本理念，以探索材料基因，变革传统离散式材料研究模式，发展建立千量级高通量并发式材料计算算法和软件，在技术层次上实现快速低耗的材料研发为目标。在向理论预测与实验验证的科学设计模式转变中预期实现按需设计材料

2. 拟解决的重大科学问题

1）物质科学中的重大基础性问题—“材料基因”问题

基于高通量集成化并发式计算的物理基础和物理机制以及合金化学组合、材料制备和微观结构实验与“数据关联”科学相协同，探索具有物质性、传递性及多样性的物质底层基本结构单元—材料基因

2）探索解决复杂缺陷结构体系多组元（三元及以上）—跨学科—多尺度全链条物理机制问题以及电子结构—能带计算中的深层次物理问题

3.关键技术问题及考核指标

1）高通量集成化并发式计算软件系统，单线程算法效率提高30%，并发式计算作业数≥5000；部署于国家无锡超算中心

2）申请软件著作权登记5项以上

3）合金技术指标：

①研制资源化低铼合金，铼元素重量百分数较之于第四代镍基单晶高温合金降低≥10%；合金单晶度沿 [001]取向≤12°；

②抑制镍基高温合金中拓扑相；

③蠕变指标达到：1100°C/137MPa下持久寿命≥300h；

**三．主要研究内容**

1.综述：

本项目科学内涵涉及跨学科—多尺度高通量计算科学中具有世纪挑战性的主题：探索物质科学中内禀性学科关联以及跨层次物理桥接模式问题；揭示电子结构及能带的深刻物理与多元复杂结构合金材料物性的关联规律以及高通量集成化并发式 “高精度”计算、容错机制及负载动态平衡和晶体对称性理论以及海量“数据关联”问题。

2.创新思路：

1)基于材料基因组基本理念,以计算-理论-实验-数据科学相融合为基础,变革研发模式,建立高通量并发式算法,实行单作业高度并行,并发式作业与跨学科-多尺度算法相集成,从量子力学出发,发展解析表述，构建桥接模式，实现全链条集成计算及数据关联分析，研发高性能合金

2）探索材料基础性内禀性质与物性关联问题，以及与高通量并发式计算直接相关的物理基础及物理机制问题

3.研究内容及任务设置方案

1）本项目设置三个相互关联、相互支撑的任务课题：

①高通量集成化并发式计算算法和软件

②高通量并发式计算物理基础及物理机制

③合金物性及组分优化设计与验证性应用

2）研究重点与课题任务

①重点：发展“高通量跨学科—多尺度集成化算法”，设计≥5000并发式作业，建立自动流程驱动引擎，实现具有高精度、容错机制及晶体对称性和动态负载平衡调控功能的软件系统。申请软件著作权登记5项以上

②高通量并发式计算的核心问题之一在于探索合金结构及化学组分与材料物性相关规律，揭示跨学科物理及跨尺度关联机制

（i）多组元—多原子体系电子结构及能带结构的计算以及多元素间协同效应研究

（ii）复杂体系能带结构反折叠计算及分析技术

（iii）发展计算精度可反映合金关键元素间化学含量临界匹配（ΔC<1wt.%）所需的高通量并发式算法

（iv）构建适用于高温合金的超软赝势，发展多组元原子间相互作用势（包括反应力场势）

（v）构建桥接模式： 实现电子结构—材料力性模式，以及有限元—微观结构算法相协同的全链条多尺度计算

（vi）高温合金中电子自旋及自旋—轨道耦合效应与化学掺杂关联问题

（vii）建立时间多尺度及扩散系数计算及分析方法

（viii）发展高温状态费米面电子态分析计算方法，建立高温状态方程

（IX）基于CALPHAD方法建立多元多相合金热力学、相图及扩散数据库

（X）拓扑相结构预测及理论分析

（XI）热力学及动力学计算调控镍基单晶高温合金组织结构，改进蠕变特性

③“数据关联”分析

（i）通过化学组分关联设计及化学元素择优分布计算，探索高通量并发式计算中内含的数据关联

（ii）机器学习及数据挖掘与数据关联分析

**四．创新点**

1.基于镍基单晶高温合金成分设计试验、微观结构实验以及k空间布点、k点路径晶格对称性理论，发展计算精度可反映合金关键元素间化学含量临界匹配（重量百分数ΔC<1wt.%）的高通量并发式算法

2.基于多尺度科学，发展融合跨学科—多尺度解析表述于高通量并发式计算之中的理论计算方法

3.发展以声子格林函数为基本解析表述的跨层次桥接模式于高通量并发式计算

4.基于密度矩阵及“分区并行”理论，发展复杂结构体系大尺度第一原理线性标度算法

5.基于群论建立初基原胞平移群与超胞平移群相关联，发展量子反折叠电子能带方法及软件，处理镍基单晶高温合金复杂能带分析问题

6.发展具有自主知识产权的超软赝势植于密度泛函“VASP”软件

7.发展多组元原子间相互作用势，用于三元以上复杂结构合金体系结构演化及动力学研究

8.发展自动势阱攀移方法以及与第一原理计算相结合的动力学蒙特卡洛方法，探索镍基单晶高温合金相稳定性及承温能力问题

9. 运用计算热/动力学方法，结合实验和第一性原理计算，建立多元镍基高温合金热力学及扩散数据库，揭示多元耦合效应

**五. 研究工作基础**

1．镍基单晶高温合金研究

1）本项目合金研制工作开始于上世纪80年代，至今已成功研制出具有自主知识产权的几代单晶高温合金成功应用于国家航空工业

2）基础性研究开始于2006年，在承担的任务中，开展了电子结构计算与材料掺杂效应以及多尺度建模与多学科协同算法（开始于上世纪90年代）以及发展多组元原子间相互作用势于结构演化动力学问题研究，发表论文50余篇

3）近三年来在资源化低铼合金系列研究，蠕变性能已达四代镍基单晶高温合金水平。

2．高通量并发式计算研究

1）计算基础

①通过了可运行“Materials Project” 基础软件包，同时读了关键程序段，可独立进行高通量并发式计算

② 初步设计了自动流程驱动引擎软件

2）发展与创新

实行了电子结构计算与高通量并发式计算的协同效应，实现了跨学科—多尺度与高通量计算的融合，编写了相关程序

3）高通量并发式计算作业设计

初步设计了：① 多元体系元素择优作业设计；② 元素协同效应作业设计；

4）建立了量子反折叠能带分析及超软赝势的算法、程序及数据库

5）运用CALPHAD研究了多元多相合金热力学、相图及扩散数据库

6）高通量计算系统软件及数据处理方面发展了多项专业技术