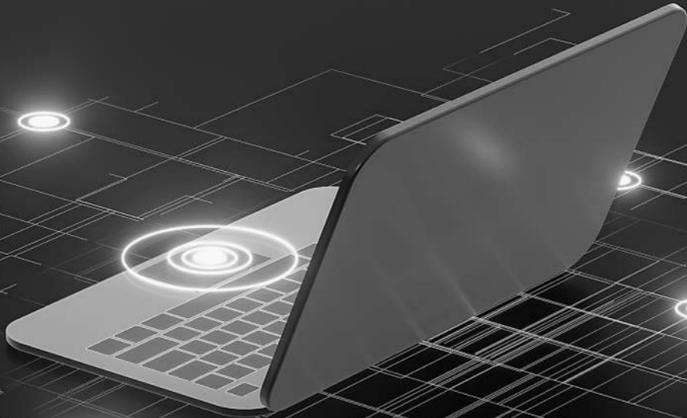


随着计算机的发展和计算能力的提高,计算材料学快速兴起,推动了材料研发由“经验+试错”的模式向计算驱动模式转变。计算驱动模式是现代材料研发的重要手段,可以有效提升材料研发的效率并降低研发成本。



大数据+超算,“算”出未来新材料

◎本报记者 陈曦

“公司和海河实验室开发的高比能锂离子电池项目,应用于电动汽车,续航里程可达1000公里。研发中所选材料需要计算来优化设计、改善性能,电池的电化学仿真结构和热仿真方面,也需要模拟计算。平时需要三四天才能算完,应用超

计算机,一天就算完了。”天津市捷威动力工业有限公司研究院副院长马华在日前举行的“计算—数据—智能融合驱动的材料创新研究高端论坛”上对科技日报记者说。在此次论坛上,专家、学者共同探讨了在新一代信息技术创新变革驱动下,如何探索发展计算—数据—智能融合驱动的材料创新研究范式,变革传统材料研究模式。

新一代信息技术带来新材料研发变革

随着新一轮信息技术的蓬勃发展,云计算、大数据、人工智能、超级计算等信息技术不断赋能各类行业,带动了行业模式的深度变革。

新材料的设计和研发越来越依赖超级计算机,材料的模拟计算已经成为超级计算主要应用领域之一。“信息技术与新材料深度融合,共同推动制造业向高端化发展。”国家超算天津中心党组书记孟祥飞说,由于材料是一个复杂的高维多尺度耦合系统,现有的基础理论还不能准确地描述材料成分—组织/结构—性能—服役行为的构效关系,一些深层次的机理还不清楚,导致材料研发长期基于经验,依靠“试错法”推进。随着计算机的发展和计算能力的提高,计算材料学快速兴起,推动了材料研发由“经验+试错”的模式向计算驱动模式转变。计算驱动模式是现代材料研发的重要手段,可以有效提升材料研发的效率并降低研发成本。

“在最近十多年,随着材料计算数据和实验数据的爆炸式增长,以及人工智能技术的发展,数据和智能驱动的材料研发分析和性质预测已成为材料研究的新手段。”孟祥飞介绍。

在美国、欧洲等国家和地区,超级计算机在材料计算与数据库建设方面起步早,已经取得了一定成效。比如由美国能源部主导建设的在线开源材料计算与数据库平台,可有效加速新材料的筛选;美国杜克大学建立的AFLOW数据库可提供基本的材料搜索、分析等服务,并集成了材料性质预测的机器学习模块。

国内也有不少科研团队和公司正在开展高通量计算与材料数据挖掘等工作,国家超级计算天津中心研发了中国材料基因工程高通量计算平台CNMGE,该平台实现了催化等多种材料的自动高通量计算以及多元多相复合材料力学行为的多尺度计算。

超级计算驱动新材料创新发展

在新一代信息技术创新变革驱动下,探索发展计算—数据—智能融合驱动的材料创新研究新范式,变革传统材料研究模式尤为重要。

特别是要依托我国新一代百亿亿次超

级计算系统,将传统的计算材料学与新兴的人工智能和大数据技术相融合,通过构建高通量、多尺度计算与高精度专题数据库基础研究设施平台,开发基于机器学习的材料快速性能预测方法及模型,从而提

高能、化工、电子、环境等领域新材料的“绿色”创造与制造研发效率。

以近年来国际材料领域兴起的前沿技术材料基因工程为例,它包括3种模式:一是高通量实验技术,通过高通量实验加速新材料研发;二是高通量计算,通过理论计算,减少实验次数,再进行实验验证;三是数据与智能驱动,通过对材料领域大量数据(即材料数据库)的挖掘和深度学习建立模型,预测候选材料,大幅降低实验试错成本。“在材料基因工程思想的引领下,国内外也涌现出一批计算、数据与智能相结合的研究成果。”孟祥飞说。

“首创性、独创性的科学研究不仅需要快速验证,更需要频繁试错、迭代,找准新

的方向,这就更需要算法和算力的支撑。”物质绿色创造与制造海河实验室常务副主任、中国科学院院士、南开大学副校长陈军表示。

由此可见,超级计算平台作为“超级算力供给+大规模数据支撑+系统性算法集成”的融合载体,在新材料创新研发方面正发挥着日益强劲的驱动作用,特别是伴随天河等新一代超级计算机的研制成功,通过将高性能计算方法、机器学习方法与第一性原理计算方法相融合,将实现更高精度、更大尺度的分子层面模拟计算以及开展上万级任务并发的高通量材料筛选等工作。因此,计算和智能技术融合将会为新材料创新研发带来新机遇、新发展。

相关链接

天河超算系统服务上千材料研发团队

目前,国家超算天津中心已经在平台上开发了多款适合先进材料研发、科研成果验证的App。天河超算计算系统支撑数百家机构上千个材料研发团队,开展了多项超级计算支撑的计算—数据—智能驱动的新材料研究工作,取得了良好的应用创新成效。

例如,支持北京大学团队发现核量子效应诱导二维冰,并首次观测到氢离子在水中的原子级分辨图像,为通过改进电极材料提升产氢效率带来全新思路。

支持深圳大学在《科学》上发表关于相变存储材料与器件设备的论文,该成果将有助于大力推进基于先进微电子技术的高性能神经元感知芯片的开发。

截至目前,国家超算天津中心已经与各大高校、科研机构合作在各类材料领域的国际期刊及主流期刊上发表论文超过1500余篇。

在支持科研成果上“书架”的同时,国家超算天津中心还助力成果转化,让几十项科研成果上了“货架”。

面向数字基础设施建设的欧拉操作系统,已构筑关键技术根基和创新机制,并实现在各行各业核心系统的规模部署,还打通了从处理器、整机、智能桌面虚拟化平台到软件系统、操作系统的软硬件完整产业链生态,充分激发产业链活力。

开源模式正从软件领域走向硬件领域

开源模式正在从软件领域走向硬件领域。2022年以来,国际开源精简指令集架构RISC-V为我国掌握世界主流中央处理器芯片产业的主动权提供了新机遇。

倪光南表示,RISC-V采用开源模式,由RISC-V国际协会维护,不属于任

何公司。

“我们欣喜地看到,欧拉操作系统在支持RISC-V基础软件方面,已经进入世界先进行列。从2020年4月开始,欧拉操作系统相关单位进行RISC-V架构适配,成立了专门的RISC-V SIG组,聚合了全球RISC-V上下游开发者和生态伙伴,构建了十分活跃的RISC-V生态,同时也有力支持了欧拉操作系统开源生态的建设。目前,欧拉操作系统已成为全球在RISC-V基础软件领域,应用推广热度最高的社区发行版。”倪光南指出。

在大会上,中国科学院软件研究所联合中国科学院计算技术研究所、芯来科技(武汉)有限公司、彭峰(北京)科技有限公司等共同发布了基于欧拉操作系统的RISC-V商业发行版“傲来2.0-RV”。傲来2.0-RV聚合RISC-V指令集,可提供桌面、模拟器、硬件板卡等多种运行环境。

“中国正在开启全面建设社会主义现代化国家新征程,面临新形势、新任务,我们迫切需要重视开源、学习开源、用好开源,充分发挥中国新型举国体制、超大规模市场优势和人才基数优势,通过开源融入全球科技创新网络、深度参与到全球科技治理当中,为世界协同创新贡献中国智慧、中国方案、中国力量。”倪光南说。

156家“新物种企业”引领中国物联网产业创新发展

◎本报记者 张晔

当前我国物联网新物种企业群体总量及发展特征如何?这些企业怎样引领新赛道发展、新能级提升?近日,在中国物联网新物种企业大会上,北京市长城企业战略研究所发布了《GEI中国物联网新物种企业发展报告2022》(以下简称《报告》)。

在“万物相连、互联互通”的物联网产业领域,已聚集了一批引领潮流的新物种企业。新物种企业逐渐成为新经济条件下物联网领域的新动能、新增长点。

《报告》显示,2021年中国物联网新物种企业数量共156家。另外,自2016年起上市“毕业”的新物种企业有4家,超龄“毕业”新物种企业有5家。

《报告》指出,新物种企业在物联网产业的感知层、应用层集中爆发。在物联网产业的感知层、网络层、平台层、应用层4个层次中,2021年分别涌现了42家、6家、23家、85家新物种企业,其中感知层和应用层新物种企业合计占比达81.4%。在赛道分布方面,156家中国物联网新物种企业分布于卫星通信、云服务、协作机器人、仓储物流机器人等34个赛道。

从国家高新区分布来看,中国物联网新物种企业中有110家位于国家级高新区,占总数的70.5%,其中,中关村国家自主创新示范区数量最多,有50家,其次为上海张江国家自主创新示范区(21家),深圳国家高新技术产业开发区有10家,无锡国家高新技术产业开发区、杭州国家高新技术产业开发区和上海紫竹国家高新技术产业开发区均为4家。

从城市分布来看,“北上深锡杭”为物联网新物种企业五大聚集地,五市物联网新物种企业共113家,占2022年中国物联网新物种企业总数的72.4%。其中北京50家、上海28家、深圳20家、无锡8家、杭州7家,其次为广州和苏州各6家、天津5家、武汉和南京各4家、合肥3家、青岛和长春各2家。从城市群分布来看,长三角、京津冀、粤港澳大湾区城市群分别出现59家、56家、27家物联网新物种企业。

打造数字生活“新入口” 数字社区加速推动数实融合

◎新华社记者 张辛欣

你的数字生活有哪些“打开方式”?邮箱、浏览器还是app?随着信息技术快速迭代,“人网上云”的方式也更加多元,沉浸式的数字社区成为越来越多网民的选择。

工信部下属中国信息通信研究院近日发布《数字社区研究报告(2022年)》指出,伴随着数字经济的发展,数字社区这一新型网民生态圈正成为数字生活的“新入口”与数字经济的载体。

报告指出,数字社区是以新一代信息技术为基础,以海量数据为流通要素,以先进的数字化交互手段为主要表现形式,通过打造高互动的数字生活场景,建立人与人、人与物、人与社会之间的信任连接,从而实现线上线下高效融合的新型互联网社区。

中国信息通信研究院总工程师敖立说,当前,数字社区的主要表现形式从图文和语音转向以短视频、直播等为主,交互更实时、场景更丰富等特点,催生了消费、生产新业态、新模式。

让消费更“可感知”。什么样的羊绒最亲肤,羊绒毛衣如何洗护?通过在直播间进行内容输出,服装品牌“三只小山羊”2022年“双11”成交额创新高。“三只小山羊”创始人杨玉勇告诉记者,通过短视频内容分享,可以将消费者带穿、洗、护等多种与服装相关的生活场景。消费者的感知更多元,对品牌的信任就更多,连接就更紧密。这就是数字社区推动消费的实践。

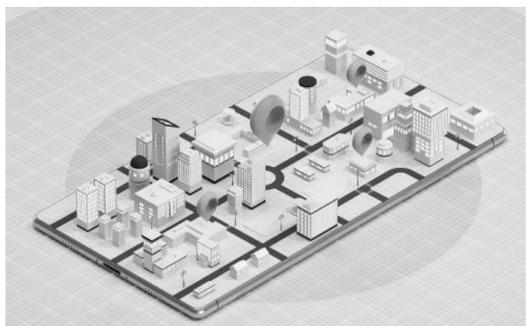
新年伊始,快手发布“村播计划”,通过幸福乡村带头人评选等多种方式,扶持农村优质主播成长,推动农产品销售。过去三年,快手幸福乡村带头人项目在全国发掘和扶持超过100名乡村创业者,通过数字社区模式累计带动1万多户百姓增收。快手科技副总裁宋婷婷表示,下一步将借助数字社区做好主播培育,助力乡村振兴。

让产业运行更高效。面对生产周期较长的家具供应链,如何精准锁定产能、筛选合适供应商、洞察用户需求是林氏木业要解决的重要问题。企业负责人告诉记者,借助钉钉平台打造产业链数字社区,企业将供应链质检、装车运输等20多款应用与生产连接。“运营人员可通过实时报表调整采购计划,生产供应商可及时备货,实现上下游的协同。”

《数字社区研究报告(2022年)》指出,数字社区具有普惠、连接、效率和信任四大特征,将生产要素在数字世界连接成多个内容模块,形成内容生态,催生更多数字化服务。

“数字社区的每个内容板块背后都连接着多条产业链,各条产业链覆盖产品或服务供给的全链路。”敖立说,数字社区不断扩展、丰富人们的交互空间与生活生产消费方式,其间孵化、催生的大量技术场景赋能到实体经济,成为服务现代化产业体系建设的新型移动互联网产品形态。

“大力发展数字社区,打造具有高互动特点的数字生活场景、产业场景,将推动数字技术更好赋能千行百业,助力实体企业在产业互联网的竞争中赢得先机。”中国信息通信研究院有关负责人说。



本版图片由视觉中国提供