

A dark blue background featuring a complex, glowing digital wave pattern composed of numerous small, white and light blue dots. The waves curve and flow across the frame, creating a sense of motion and depth.

浪潮信息

AI 加速新材料研发 解决方案

AI accelerates new material research
and development solutions



场景分析

Scene
Analysis

新材料作为新兴支柱产业，在新能源材料、生物医药、绿色建筑等领域有着举足轻重的作用，新材料应用有利于产业链结构调整和能力提升。新材料从研发到产业化周期十分漫长，研发周期缩短一半、研发成本降低一半是我国科学家们努力的目标。

- “材料基因工程”是当前材料领域公认的开发新材料的颠覆性前沿技术，通过计算技术、大数据技术和高通量自动化实验等关键技术，大幅提升新材料的研发效率，缩短研发周期，降低研发成本，促进工程化应用。
- AI4S正在成为科学的研究的一种新范式，在材料领域也得到了广泛应用。通过深度学习算法构建模型，借助智算力训练模型来预测材料性能、发现结构异化晶体等，进而达到发现新材料的目的，以深度学习为代表的人工智能技术改变了传统材料研究新范式。

在材料科学领域，高通量计算和深度学习已成为推动新材料发现与设计的关键技术。这些技术的核心在于能够获得、处理并分析海量的数据等。尽管这些技术极大地加速了材料研发过程，但同时也对算力资源提出了巨大的需求。

■ 材料数据生成、高通量计算算力需求大

材料数据生成是深度学习的首要步骤，涉及读取大量的输入文件等，随后执行计算以得到材料的物性数据。比如，仅仅是在电子云密度分布数据的生成上，构建具有简单立方对称性的10000种材料数据集，就需要超过10的七次方核时，动辄需要数年时间来完成。这一过程中，算力资源的短缺成为限制高通量材料计算任务的一个主要瓶颈。

随着高通量计算算力需求的增大，传统的物理实验和计算方法逐渐显得力不从心。以耐蚀材料的研发为例，传统方法需要进行成百上千次实验才能获得材料最佳的比例和浓度，而高通量计算方法虽然能够加速这一过程，但其本身的算力需求极大，尤其是在实现跨尺度的研究上，需求更是高得惊人。

■ 模型训练需要巨大的算力资源

模型训练作为深度学习在材料科学中的应用之一，尤其是卷积神经网络（CNN）的使用，能够构建覆盖原子特征、化学键特征和分子特征等多尺度的模型，但其逻辑复杂、参数量大，完成一次模型训练依然需要数百至数千张GPU卡协同工作。在单个GPU上，一个大型CN模型的训练可能需要耗费数周时间，而在一套计算集群系统上则可能仅需数天或数小时。

材料的研发，十分关注在现实场景中服役的表现。用于设计的材料完成筛选后，通过纳入成分-工艺-性能-环境等综合因素，对其进行仿真，获得材料在服役环境中的表现，完成仿真模拟与物理实验双重验证。材料仿真过程需要借助智算模型，缩短研发周期，以提升研发效率。

■ 计算平台建设周期长

“一代材料、一代技术、一代产业”，重大工程与装备“等米下锅”现象较突出，加快基础设施的建设，也是重中之重。计算平台建设面临周期长、缺乏定制化、以及运维手段过于单一等问题。据相关数据表明，传统数据中心建设平均周期为200天，业务上线90天，与客户要求数周业务上线时间相差甚远。



解决方案

Usage Scenario

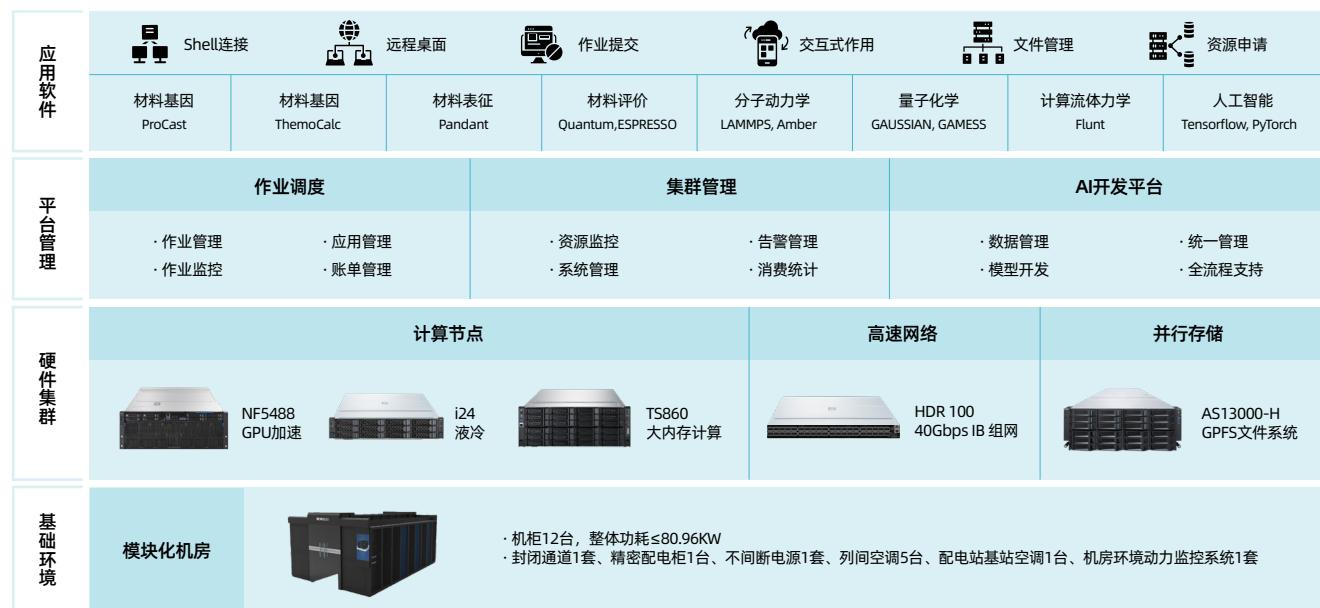


图1：材料基因计算集群解决方案

在硬件集群层，为满足材料预测模型开发需求，通过部署人工智能开发平台，调度GPU服务器集群完成模型一站式开发、训练和部署。针对高通量计算大算力要求，分别部署多节点服务器和大内存计算服务器，实现新材料成分、结构、性能分析和高效筛选。

在基础环境层，提供模块化机房，采用一体化集成设计理念，将机柜、供配电、制冷、综合布线、消防、防雷、监控等功能于一体，通过列间空调近热源直接送风，避免热岛效应，相比传统机房，微模块机房制冷效率提升12%以上。



方案价值

Program Value

■ 基于深度学习建模，实现数据驱动多尺度材料计算与预测，使“算”出新材料成为可能

- 利用深度学习技术对材料失效建模，对3000多万条腐蚀数据筛选计算，实现低合金钢大气腐蚀实时速率与动力学演化规律的高效精准预测，预测精度从50%提高至94%。
- 通过不同腐蚀预测模型分析及仿真测试，可以快速得到耐高温高湿、耐腐蚀，具有更长寿命的新材料，有利于解决我国每年因材料腐蚀造成的数万亿元损失。

■ 高通量计算“创造”大量数据，以强大算力基础设施，提升新材料研发效率

- 采用至强8358 CPU服务器构建数十乃至数百P算力的高性能计算集群，使得材料电子云密度数据集生成时间，由数年压缩至数月甚至更短的时间即可获得。
- 利用材料高通量计算和大数据分析、筛选技术，在近 4×10^4 种材料中发现了8000余种拓扑材料，超出历史上发现拓扑材料数量的10倍。

■ 提供一站式“交钥匙”式服务，加快数据中心建设周期，实现集群快速上线

- 各系统采用模块化工厂预制，现场积木式快速搭建，建设周期相比传统方案加快50%以上。采用行间精密空调实现近端制冷、水平送风，较常规空调节能率超过30%。
- 通过部署智能型动力与环境集中监控系统，达到数据中心动力、环境、能耗的动态管理，具备现场触控屏运维、WEB远程运维和手机APP运维的能力，实现无人值守。



相关产品

Related
Products



■ AI服务器 NF5488A5

- 全新架构，采用PCIe 4.0和NVlink3.0互联，实现AI性能、通信带宽、显存容量全翻倍；
- 8颗高性能加速卡和2颗64核CPU，NVlink3.0全互联，PCIe链路极致优化。



■ 液冷计算节点 i24LM6

- 2U空间支持4个双路计算节点，实现业界最高密度最多支持8颗Intel Ice Lake处理器，支持液冷升频，计算性能提升5%以上；
- 采用温水冷却方式，水冷散热效率高达80%，水冷覆盖CPU、内存和VR，PUE≤1.1，减少数据中心制冷设备部署，显著降低制冷成本。



■ 八路大内存计算节点 TS860M5

- 搭载8颗全新一代处理器，支持高达36T内存。计算性能提升超过20%，内存带宽最大提升20%，适合大内存计算、异构计算等计算密集型场景；
- 整机RAS特性80余项，实现全模块化容错设计，超高的性价比，超强的计算性能，满足高性能计算等关键应用。



■ 人工智能平台AIStation

- 提供从开发到部署的AI全流程数据、算法和开发环境流转共享，简化开发和部署工作，支持根据模型训练要求自动匹配最佳算力分配策略；
- 在训练和推理的不同维度，允许一张卡执行多个任务，提升集群资源的整体利用率，减少重复工作，让模型自动持续迭代。

