



MaXFlow

基于人工智能技术的

材料设计平台

Solutions for Innovation.
信息化建设领导者

MaXFlow 软件是新一代智能材料研发设计平台，利用基于大数据和机器学习的人工智能技术，整合计算机模拟技术与人工智能的优势加速新材料的研发。



MaXFlow 能自动实现高通量模拟计算作业的生成、海量数据的存储及各种定制样式报告的生成，建立基于 MaXFlow 的材料数据库



便捷强大的人工智能（AI）数据分析功能，无需 AI 专业知识即可基于数据库数据进行复杂的建模和数据分析挖掘工作



MaXFlow 中以工作流的方式执行多步骤模拟进程，工作流及其中被验证的最优参数被记录和存储，形成知识沉淀



MaXFlow 整合了 Materials Studio 多模块并提供多种广泛应用的计算模拟软件程序接口，为整合的软件提供图形化界面化操作环境



灵活的部署方式使得 MaXFlow 既可以最大限度调用本地计算资源，也可以最新的云端部署方式实现更大规模的计算节点调度



先进的 Web 页面登录方式使用户无需安装软件，即可随时随地通过浏览器登录并使用软件进行在线作业提交、监控、数据存储管理和分析挖掘

MaXFlow 为新材料设计提供一个准确、快速、全面、高效的 AI 解决方案。科研人员能快速掌握 MaXFlow 软件的使用，通常只需引入研究对象结构，即可提交计算任务，因此无需在软件的学习中消耗大量时间。利用 MaXFlow 软件，企业和科研单位的研究人员可便捷高效地利用最先进的模拟技术进行方案辅助设计、配方筛选，优化工艺流程，显著提高研发的效率与成功率。

MaXFlow 软件功能特色

■ 高通量、高并发计算

新材料的理论设计包括结构筛选、元素替代、性能与成分的优化等，这将在模拟计算初始阶段生成大量的结构模型，对于结构模型的性质预测需要大规模的材料计算。

MaXFlow 采用先进的集群和网络技术的分布式并行计算机制，实现高并发高通量计算。基于新的并行机制，MaXFlow 将根据用户的设定分批自动读取多个结构，并发执行多结构的计算任务，根据资源优化配置的原则，支持用户自定义并发计算任务中每一个结构计算任务调用的核数，满足大规模高通量材料计算任务的同时大大提升计算资源利用效率。

■ Web 端登录，图形界面

MaXFlow 采用灵活便捷的 Web 端方式登录，用户无需安装任何程序即可随时随地通过浏览器登录并使用软件进行在线作业提交、监控、数据存储管理和分析挖掘。

MaXFlow 为使用者构建一个界面简洁、操作方便、功能强大的材料模拟设计的 Web 平台。

The screenshot displays the MaXFlow web interface for the 'Shear Viscosity Calculation' (剪切粘度计算) module. The interface includes a top navigation bar with industry categories like 'New Energy', 'Automotive', 'Aerospace', 'Electronics', 'Chemical', and 'Defense'. A search bar is located on the left. The main content area features a sidebar with a list of simulation tasks, with 'Shear Viscosity Calculation' selected. The central panel provides a detailed workflow: 1. Read single molecules and optimize structure; 2. Build amorphous crystals; 3. Perform molecular dynamics equilibrium on the generated structure; 4. Run shear simulation to calculate viscosity. Below the workflow, there are parameter settings for 'Import Structure' (with a 'Select Data' button), 'Amorphous Crystal Density' (set to 0.9), 'Number of Molecules' (set to 12), and 'Shear Rate' (set to 0.1). A 'Submit' button is in the top right, and a 'Result Display' icon is on the right side of the workflow diagram.

MaXFlow

智能材料设计平台

■ workflow 库

MaXFlow 软件具有功能丰富的模拟计算 workflow 库，满足汽车行业，新能源，化工，航空航天，国防等各领域的模拟设计需求，同时可根据特定的研究需求个性化定制开发 workflow。

■ 数据库

MaXFlow 软件将高通量模拟计算与模拟数据进行集成化管理，在自动完成流程化模拟计算作业后，软件自动进行数据提取，并按指定的存储格式存储到数据库中，建立基于 MaXFlow 的材料数据库。数据库支持各种数据的存储，包括键长、角度、晶胞参数、原子位置等各种结构数据；能量，焓，焓，自由能、热导等热力学数据；带隙、电荷、激发能、功函、磁矩等电子性质计算数据；弹性常数、体模量、剪切模量、泊松比、硬度等力学性质计算数据；原子受力、扩散系数、粘度、玻璃化转变温度等动力学计算相关数据。

■ 数据挖掘

MaXFlow 提供多种数据分析和数据挖掘算法，包括决策树、支持向量机 SVM、贝叶斯、深度神经网络 (deep NN) 等，对产生的海量物性数据进行数据检索、管理、分析、挖掘，发现数据中的潜在规律，将数据转换成有用的信息和知识。适用于各领域大规模计算必须的数据分析需求，特别是材料基因工程等相关课题的研究。

■ 知识共享

研究组的每一个重要研究课题涉及的多步骤模拟进程在 MaXFlow 中以 workflow 的方式被开发，workflow 及其中被验证的最优参数被记录和存储，形成知识沉淀。使专家级个人经验扩散到组织层面，组织针对不同用户的研究需求，一键分发所需 workflow，帮助研究部门简化成员间的沟通和分享方式，使知识达到指数级增长，提升效率。

workflow	关键字	发起人	开始时间	持续时间	计算平台	状态	收藏	共享
示例1--结构优化及性质能量输出排序批处理 workflow		超级管理员	2018-06-14 17:33:38	07:00.8	MS集群	运行中	收藏	
固体材料应力应变曲线模拟		超级管理员	2018-06-12 14:52:54	13:59.1	64服务器	已完成	收藏	共享
固体材料应力应变曲线模拟		超级管理员	2018-06-12 11:38:22	05:57.9	64服务器	已完成	收藏	共享
1-多结构批处理及丰富的可视化结果数据展示		超级管理员	2018-06-12 11:31:38	16.8	MS集群	已完成	收藏	共享
1-创建高分子聚合物的交联结构		超级管理员	2018-06-10 21:04:03	57:17.6	MS集群	已完成	收藏	共享

■ 开放整合多种计算机模拟软件

MaXFlow 整合了 Materials Studio 多模块并提供多种广泛应用的计算模拟软件程序接口，为整合的软件提供图形化、界面化操作环境，可满足最广泛用户的模拟需求。同时可根据用户的实际使用需求，定制个性化的程序接口，形成用户专属的材料设计平台。

MaXFlow 提供面向模拟面临问题的全套解决方案

Q：作为实验人员觉得模拟技术虽然有用但门槛比较高，需要掌握太多理论知识，没有精力学习模拟软件。

A：MaXFlow 具有面向不同领域定制开发的工作流，将多步骤模拟进程固化，并提供每步计算任务所需的最优参数。科研人员能快速掌握 MaXFlow 软件的使用，通常只需引入研究对象结构，即可提交计算任务。因此无需在软件的学习中消耗大量时间，为实验过程提供可行性方案。



Q：有些分子模拟软件需要掌握一定的程序语言，才能修改软件计算参数与提交任务，感觉有点复杂。

A：MaXFlow 全部参数以及计算任务的提交均是在可视化操作界面上完成的，只需要进行点选操作，无需学习任何程序语言。

The screenshot displays the MaXFlow software interface for configuring a '剪切粘度计算' (Shear Viscosity Calculation) workflow. On the left, a sidebar lists various simulation workflows, with '剪切粘度计算' selected. The main panel shows the '参数设置' (Parameter Settings) for this workflow. The settings include:

- 导入结构** (Import Structure): A button labeled '结构集' (Structure Set).
- 分子个数** (Number of Molecules): A text input field containing '12'.
- 计算平台** (Computing Platform): A dropdown menu currently set to 'MS集群' (MS Cluster).
- 无定型晶胞密度** (Amorphous Cell Density): A text input field containing '0.9'.
- 剪切速率** (Shear Rate): A text input field containing '0.1'.
- 进程数** (Number of Processes): A text input field containing '1'.
- 作业名称** (Job Name): A text input field containing '自动' (Automatic).

MaXFlow

智能材料设计平台

Q：模拟人员经常面对模拟计算数据庞杂，无法对数据进行统筹管理的问题，更无法有效地进行数据挖掘，得到规律性结论。

A：MaXFlow 将高通量模拟计算与模拟数据进行集成化管理，可建立基于 MaXFlow 的材料数据库，支持对产生的海量物性数据进行数据检索、管理、分析、挖掘、生成报告，彻底解决材料大规模计算面临的计算分散、数据分散等问题。

Q：研究组多年积累的模拟经验无法进行知识方法固化，无法在不同体系和不同的使用者中进行复用。

A：研究组的每一个重要多步骤模拟进程在 MaXFlow 中以工作流的方式被开发、所用计算参数被记录、并将工作流上传至公有库实现共享，专家级的知识经验得以被固化。一键式分发所需工作流到特定研究人员，大大提升了知识的复用性和传承性。

Q：模拟工作已开展多年，软件很多，希望能将软件以界面化的方式集成在一个平台上使用。

A：MaXFlow 的开放性使其支持多种软件的程序接入，为接入的软件提供图形界面操作环境，同时可根据用户的实际使用需求，定制个性化的程序接口，形成用户专属的材料设计平台。



MaXFlow 计算示例

■ 示例一、多结构并发计算，根据目标性质筛选最优结构

新材料的设计包括结构筛选、元素替代、性能与成分的优化等，这将在模拟计算初始阶段生成大量的结构模型，对于结构模型的性质预测需要大规模的材料计算。

本案例示例了通过 MaXFlow 软件一键提交 100 个结构的计算任务，自定义并发计算的结构数目为 4，每个结构的计算调用 8 核，计算完成后自动返回每个结构的能量和带隙，并通过列表的方式呈现计算结果。

Materials	Total Energy(eV)	Band Gap(eV)
BaO	-1470.6202	2.1164
BaO ₂	-1908.6073	2.3659
CaO	-1447.6501	3.6640
CdO	-1907.3226	#UNDEFINED
CeO ₂	-2131.0316	1.9858
Cu ₂ O	-7601.1075	0.4935
Ga ₂ O _{3_monoclinic}	-11236.9194	1.8970
GeO ₂	-6835.9735	1.0861
GeO _{2_alpha}	-10253.9222	3.0888
La ₂ O ₃	-3274.0035	3.6685
MgO	-2133.1252	4.3918
Na ₂ O	-3057.9762	1.4657

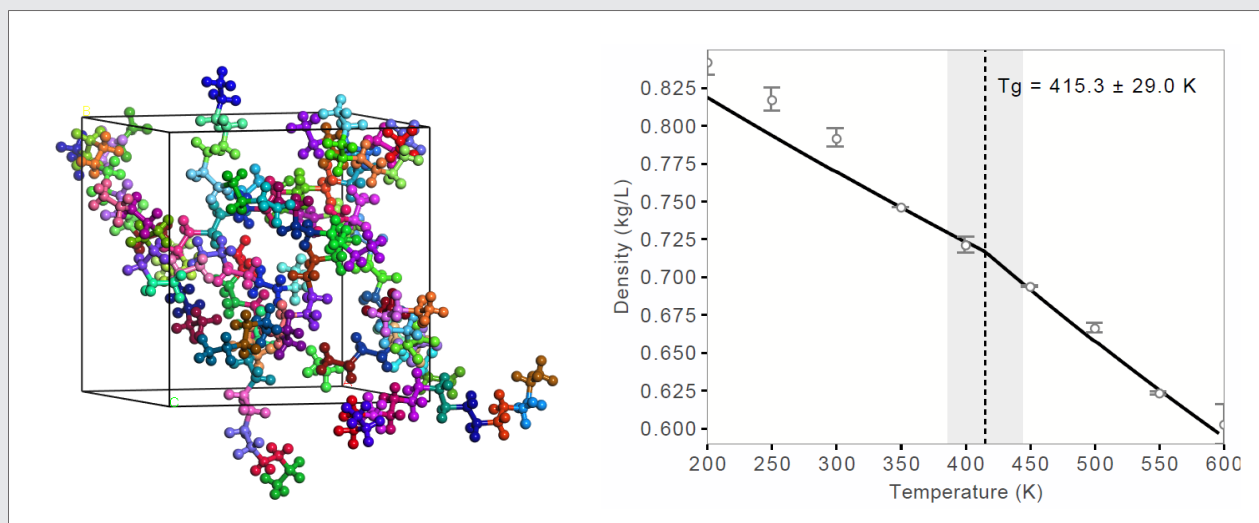
Materials	Total Energy(eV)	Band Gap(eV)
PbO_tetrag	-11738.2261	1.7904
PoO ₂	-3320.7544	1.6188
PuO	-2696.8266	#UNDEFINED
PuO ₂	-3138.6110	#UNDEFINED
Rb2O	-1821.2118	1.2798
SiO ₂ _cristobalite_high	-2107.2160	5.2110
SiO ₂ _cristobalite_low	-4214.6684	5.4305
SiO ₂ _quartz	-3160.9511	5.5967
SiO ₂ _quartz_beta	-3160.9153	5.4692
SiO ₂ _stishovite	-2106.2234	4.9082
SmO	-2849.9423	#UNDEFINED
SnO	-5000.7358	0.5760
SnO ₂	-5880.3166	0.5840
SrO	-1319.6724	3.3344
TiO ₂ _anatase	-4955.6738	2.0875
TiO ₂ _brookite	-19822.4364	2.3858
TiO ₂ _rutile	-4955.4925	1.8361
ZnO	-4455.1490	0.6952
ZrO	-1735.2261	#UNDEFINED
ZrO ₂ _cubic	-2178.1575	3.2945
ZrO ₂ _monoclinic	-8713.4858	3

备注：图中仅示例部分计算结果，计算结果精度不在本例讨论范围内

■ 示例二、高分子聚合物的玻璃化转变温度模拟

非晶态聚合物的玻璃态与高弹态之间的转变，称为玻璃化转变，所对应的转变温度即是玻璃化转变温度 (T_g)。玻璃化转变温度，直接影响材料的使用性能和工艺性能，是高分子材料的一个重要的物理性质。

MaXFlow 中包含的工作流利用分子力学、动力学模块 Forcite Plus 计算聚合物的玻璃化转变温度。输入结构可为聚合物的单体或者是聚合物块体结构，通过自动多次调用 Forcite Plus 模块，计算聚合物在指定温度区间内多个特定间隔温度点的密度、体积等，最终自动绘制温度与密度的关系图，得到玻璃化转变温度。

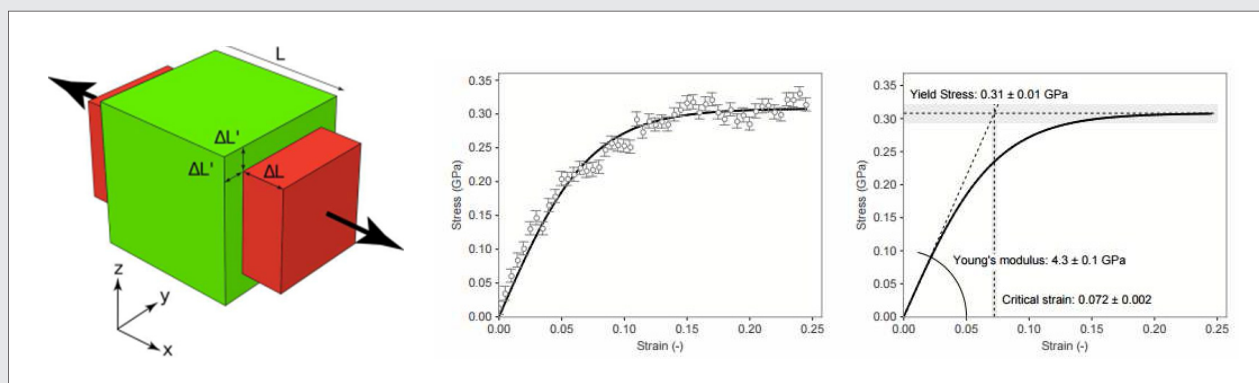


■ 示例三、高分子聚合物（交联和非交联结构）的力学性质—屈服强度和临界畸变

研究高分子材料力学性能的一般规律以及力学性能与高分子结构、分子运动之间的内在关系对改进和提高高分子材料的力学性质、优化高分子的制品设计、选择合适的成型加工条件、合理使用高分子材料都具有重要意义。

计算高分子的屈服强度需要对高分子材料一步步施加应变并计算对应应变下的应力，此过程是一个包含多步计算的繁琐过程。而利用 MaXFlow 中对应的工作流，则可以通过一次计算任务的提交，直接不断调用 Forcite Plus 模块，计算得到高分子的屈服强度和临界畸变。工作流主要包括以下三个步骤：

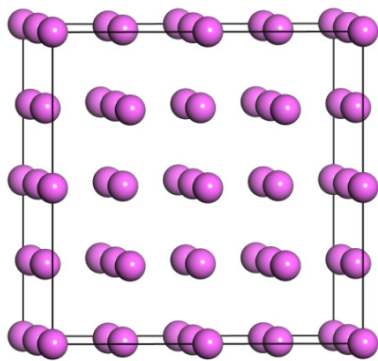
- 在指定的温度和压力下对高分子结构进行平衡
- 增加指定方向的拉伸应变并且计算拉伸应力
- 应力 - 应变曲线的弹性阶段及塑性阶段曲线外推的交点作为屈服强度，对应的应变点为临界畸变



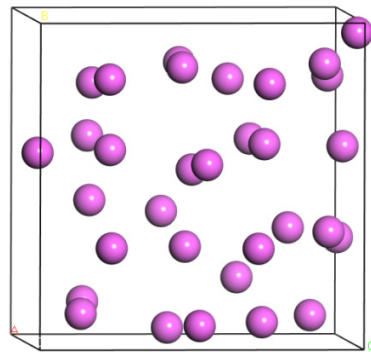
■ 示例四、金属电子热导、电导计算

固体可通过电子运动导热，也可通过格波的传播导热。半导体和绝缘体一般是晶格导热，金属中的热量传输主要由电子传输。MaXFlow 中用于计算高温下的金属热导、电导、热电势 /seeback 系数的工作流利用 CASTEP 模块中的第一性原理分子动力学方法，结合 Kubo-Greenwood 公式计算电子热导率，并直接将计算结果输出。

对热导的计算主要分为两步：第一步对引入的金属材料结构创建超晶胞，并进行分子动力学计算，在动力学过程中，指定模拟温度。第二步：对动力学轨迹文件的多帧调用 Kubo-Greenwood 公式计算，并对计算结果进行平均得到最终的金属传输性能。



Al 金属超晶胞初始结构



动力学轨迹文件中的一帧结构，温度为 1000 K

CellFormula	=	Al64
Density	=	2.350 g/cm ³
Cellvolume	=	1220.212 Å ³
Conductivity	=	0.708 +/- 0.1
MSiemens/m		
ThermalConductivity	=	0.012 +/- 0.0
kW/(m K)		
ThermoPower	=	-0.123 +/- 0.02 mV/K

部署 MaXFlow 的系统需求

服务器端需求				
硬件最低要求	<ul style="list-style-type: none"> • Intel® Core™ i7 或兼容的 CPU • 8 GB 以上内存 • 安装需要 4GB 硬盘空间 			
Linux 平台操作系统	x86-64 (64-bit) <ul style="list-style-type: none"> • Red Hat Enterprise Linux Server 6 • Red Hat Enterprise Linux Server 7 • SuSE™ Linux Enterprise Server 11 SP4 			
Windows 平台操作系统	只支持 64 位服务器操作系统。 <ul style="list-style-type: none"> • Windows 7 (Professional & Enterprise) - SP1 • Windows 8.1 (Professional & Enterprise) • Windows 10 (Professional & Enterprise) • Windows Server 2008 - SP1 • Windows Server 2012, all editions – R2 			
客户端需求				
硬件最低要求	Intel® Core™ i5 或兼容的 CPU 3-Button 鼠标 显示器分辨率在 1024 × 768 以上 4 GB 以上内存 安装需要 4GB 硬盘空间 16-bit / 65536 colors			
操作系统	<ul style="list-style-type: none"> • Windows 7 (Professional & Enterprise) - SP1 • Windows 8.1 (Professional & Enterprise) • Windows 10 (Professional & Enterprise) 			
浏览器				
	Microsoft Edge	Internet Explorer 11	Firefox ESR	Chrome
操作系统为 Windows 7 时		√	√	√
操作系统为 Windows 8.1 时		√	√	√
操作系统为 Windows 10 时	√	√	√	√



创腾科技有限公司成立于2000年初，是业界领先的面向生命科学和材料科学领域提供综合研发、过程、检测、生产信息化平台及咨询服务的高新技术企业。创腾科技的业务总部设在北京，在上海设有研发中心。

作为一家业界领先的信息技术公司，创腾科技可以为生命科学和材料科学的用户，提供包括计算模拟与数据建模、科技创新信息化两大平台的综合解决方案和服务，提升这些用户在研发、过程、检测、生产等领域的管理、决策和创新能力。创腾科技与国际上在业界领先的著名信息技术公司拥有长期而紧密的合作关系，并拥有业界最先进的开发平台和较强的研发能力，能够为中国的企业和科研机构提供当前世界上最先进的信息技术解决方案和服务。

作为一家高科技企业，创腾科技拥有一支具有专业背景和IT背景的高素质复合型人才队伍，以及经验丰富的管理团队，能够保证向用户提供一流的技术支持和服务。现在，在中国已有超过500家的单位得到了创腾科技所提供的产品和服务，其中包括国内最大的制药企业，最大的新药研发外包企业、最大的石化企业以及主要的高校和科研单位等。

为客户提供持续一流的产品和服务，不断为客户创造价值，是创腾科技努力的目标。创腾科技愿意为提高中国科研机构和企业的创新能力与核心竞争能力，做出自己的贡献。

创腾科技有限公司

NeoTrident Technology LTD.

北京办公室

北京市中关村科学院南路2号
融科资讯中心C座南楼1512室
邮政编码：100190
电话：+86 10 82676188
传真：+86 10 82677178

上海办公室

上海市浦东新区张江达尔文路88号
半岛科技园11栋4楼
邮政编码：201203
电话：+86 21 51821768
传真：+86 21 51821758

苏州办公室

江苏省苏州市工业园区东长路88号
2.5产业园A2栋301室
邮政编码：215028
电话：+86 512 67509707
传真：+86 512 67509705

广州办公室

广州市天河区黄埔大道西33号
三新大厦16-E房
邮政编码：510620
电话：+86 020-88527961