

如何在材料研究中引入人工智能 —— 从Materials Studio/ VASP/ Lammmps到MaXFlow的跨越 高校巡讲邀请函

人工智能 (AI) 在任何有数据的领域迅猛发展、爆发出巨大的应用价值。近年来, 利用人工智能进行材料研究的成果呈现井喷式增长, 以数据驱动的研发模式加速新材料研发正在成为行业研究者的共识。分子模拟是加速材料研发的重要方法, 同时也是数据密集型研究领域, 将传统的分子模拟与最新的人工智能技术结合将使材料研发发生革命性巨变。材料、化学、环境等领域的科研人员亟需专业、易用、可定制化的材料设计平台跟上人工智能时代材料研发步伐, 加速新材料的研发。**2018 年 5 月, 创腾科技发布了自主研发的基于人工智能技术的材料设计平台 MaXFlow 和基于云计算的科研创新协作平台 iLabPower。**MaXFlow 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, 帮助中国企业、科研机构以更低的门槛、更便捷的操作、更高的效率使用最先进的人工智能技术进行新材料研发, 更好地服务于“中国制造 2025”对新材料的发展要求。iLabPower 创新云社区致力于为科研工作者和科研团队提供方便、专业的科研信息管理, 科学数据存储与共享, 以及科研协作的数字化平台。

2019 年创腾科技有限公司将联手全国**十个城市**的重点高校, 为广大师生带来以“人工智能时代的材料研究”为主题的高校巡讲活动, **本次交流活动不收取任何费用**, 届时我们的专家将与您分享:

- 1、如何以材料基因的理念进行新材料的研究?
- 2、如何以最先进的工具进行新材料的研究?
- 3、如何为实验室建立安全、高效地科研信息化解决方案?

欢迎感兴趣的各位老师和同学亲临现场参与本次学术交流活动!

► 巡讲城市:

上 海 站

时间: 2019 年 4 月 26 日 (周五, 14:00 至 17:00)

地点: 上海大学, 宝山校区东区 7 号楼 (MGI 大楼) 510 会议室

广 州 站

时间: 2019 年 4 月 26 日 (周五, 9:00 至 11:30)

地点: 华南理工大学五山校区, 逸夫工程馆四楼会议室



- 5 月份 (待定) : 北 京 站 南 京 站 西 安 站
- 6 月份 (待定) : 大 连 站 武 汉 站
- 9 月份 (待定) : 昆 明 站
- 10 月份 (待定) : 成 都 站 天 津 站

► 报名方式 :

- 1) 本次活动不收取任何费用
- 2) 手机扫描报名二维码, 查看详情并注册报名。

► 活动联系方式 :

电话 : 021-51821768 转市场部
Email : market@neotrident.com



报名二维码

► MaXFlow 基于人工智能技术的材料设计平台 :

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。创腾科技免费发布已搭建好的针对聚合物、合金、半导体等各领域的计算工作流程, 并开放了 MaXFlow 平台接口, 与国内分子模拟软件研发领域专家共建云上材料设计平台。



该平台以工作流云计算的方式将分子模拟全流程自动化, 实现材料结构批量读入、计算作业提交、结果提取和各种类型分析报告的自动生成。支持定制化、专门化的材料设计筛选流程的搭建, 帮助材料科研机构构建专属的高通量计算平台。在提高研发效率的同时也让使用者从没有数据、有少量数据到快速累积大量的统一、规范、可用于数据挖掘的数据, 便捷强大的人工智能 (AI) 数据分析功能, 无需 AI 专业知识即可进行复杂的建模和数据分析挖掘工作, 挖掘数据背后存在的规律, 使数据发挥最大的价值。

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。

► iLabPower 创新云社区平台：

新时代下，化工产业新产品研发的传统管理模式将面临：实验数据可读性、完整性、检索查询及知识产品保护等诸多问题。iLabPower 创新云社区即是为科研团队打造的研发信息管理、协作和交流的平台。

iLabPowerEDM (Experiment Data Management , 实验数据采集与管理系统) 是以实验数据管理为核心的数字化平台 ,通过对研发项目、实验数据以及相关资源的多维度管理，帮助企业优化研发流程、促进全员协作，从而实现“数据”→“知识”的积累，全面提升企业的研发创新能力及管理效能。利用已有的研究成果和自动化的数据采集及分析技术 ,平台能够帮助企业快速整合和处理来自多种研究领域的数据 ,挖掘更多数据利用价值，更快完成研发项目，大幅提升企业的研发创新能力。



iLabPower CIMS (Chemical Inventory Management System , 试剂管理系统) 是以实验物资管理为核心的数字化平台 ,通过对实验物资、实验人员、研发项目的协同管理，可从多种维度分析和管控实验进展，实现物资的全生命周期清晰可查、人员的实验效率有据可依、项目的效益盈亏可控，以帮助企业优化研发的流程和效率，提高企业的竞争力。

除了以上的 CIMS 和 EDM 构架于 iLabPower 创新云平台之上，还有 PM 项目管理系统、CMS 化合物管理系统和 ILM 仪器管理系统，这些系统既可单独使用，又可根据需要进行系统集成，快速构建全面的数字化实验室。

更多精彩内容，欢迎参加本次讲座，届时我们将与您一起探讨！期待您的参与！

