

龙讯教学大纲



➤ 第一单元 绪论

- [1.计算材料学的发展;](#)
- [2. 计算材料学理论体系;](#)
- [3.计算材料学研究动态与展望](#)

➤ 第二单元 材料原子结构理论及建模实践

- [4.Q-Studio 简介;](#)
- [5.晶体结构、空间群、在线数据库;](#)
- [6.分子结构、液态模型、分子晶体的搭建;](#)
- [7.表面、界面及二维材料模型的搭建;](#)
- [8.无机非晶结构的搭建;](#)
- [9.高分子聚合物的搭建;](#)

提示:

点击目录标题跳转

点击右下角  播放视频



➤ 第三单元 第一性原理方法介绍

10.第一性原理方法发展历程及分类;

11.密度泛函理论;

12.求解密度泛函理论的数字方法， 赝势， 基矢

13.常见第一性原理软件介绍;

14.PWmat 简介

➤ 第四单元 常见第一性原理计算

15.电子结构、能带计算;

16.光吸收谱、介电函数计算;

17.结构弛豫计算;

18.体材料形成能和点缺陷能级计算;

提示:

点击目录标题跳转

点击右下角  播放视频



➤第四单元 常见第一性原理计算 (continue)

[19.热力学稳定性;](#)

[20.杨氏模量、状态方程计算;](#)

[21.磁性材料计算;](#)

[22.能量势垒计算;](#)

[23.声子谱计算](#)

[24.电催化计算, 水分解](#)

➤第五单元 动力学计算

[25.分子动力学基本原理、框架、系统综;](#)

[26.第一性原理分子动力学;](#)

[27.经典力场分子动力学, LAMMPS ;](#)

提示:

点击目录标题跳转

点击右下角  播放视频



➤第五单元 动力学计算 (continue)

[28.机器学习力场原理](#);

[29.MatPL 简介](#);

[30.电子动力学: rt-TDDFT, NAMD](#)

➤第六单元 AI在材料研究中的应用

[31.机器学习、神经网络、大语言模型、智能体简介](#);

[32.AI专家系统: IntelliMat](#);

[33.机器学习建模: 材料物性预测](#);

[34.VibeCoding、Claw](#)

[35. A-Lab](#)

提示:

点击目录标题跳转

点击右下角  播放视频



➤第七单元 特殊方法案例

[36.能隙修正: GW计算;](#)

[37.能隙修正: DFT+U, DFT+W;](#)

[38.量子输运: NEGF;](#)

[39.恒电势电化学计算;](#)

[40.大体系能量计算:线性标度方法LS3DF;](#)

[41.大体系电子结构计算: CPM, FSM, GMM;](#)

[42.蒙特卡洛方法及案例: PVD生长模拟](#)

提示:

点击目录标题跳转

点击右下角  播放视频





第一单元

绪论

- 1. 计算材料学的发展;
- 2. 计算材料学理论体系;
- 3. 计算材料学研究动态与展望

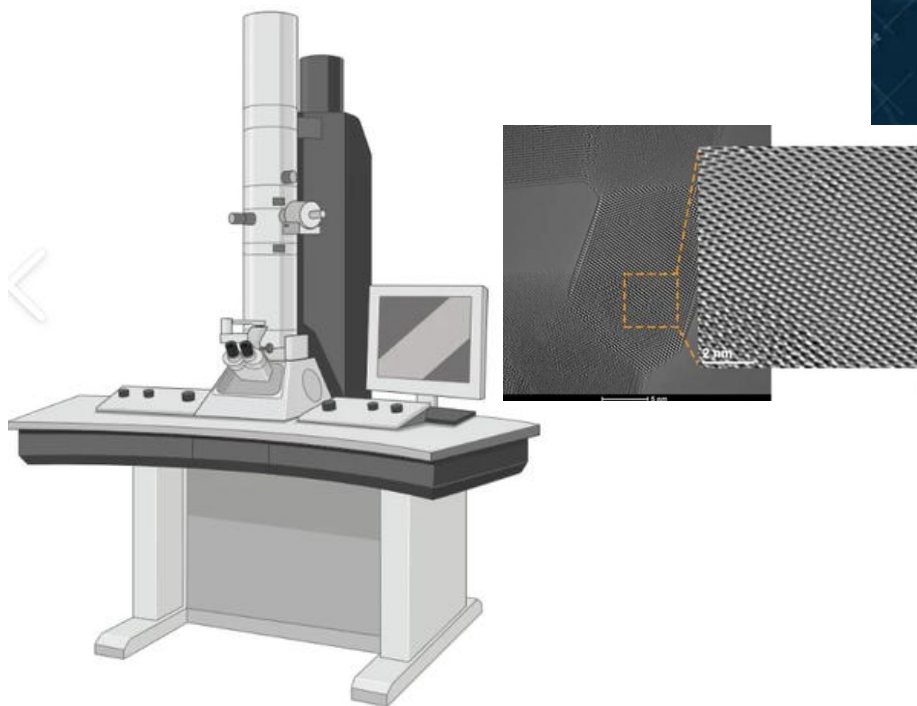
材料是文明的标志



合成



表征



计算

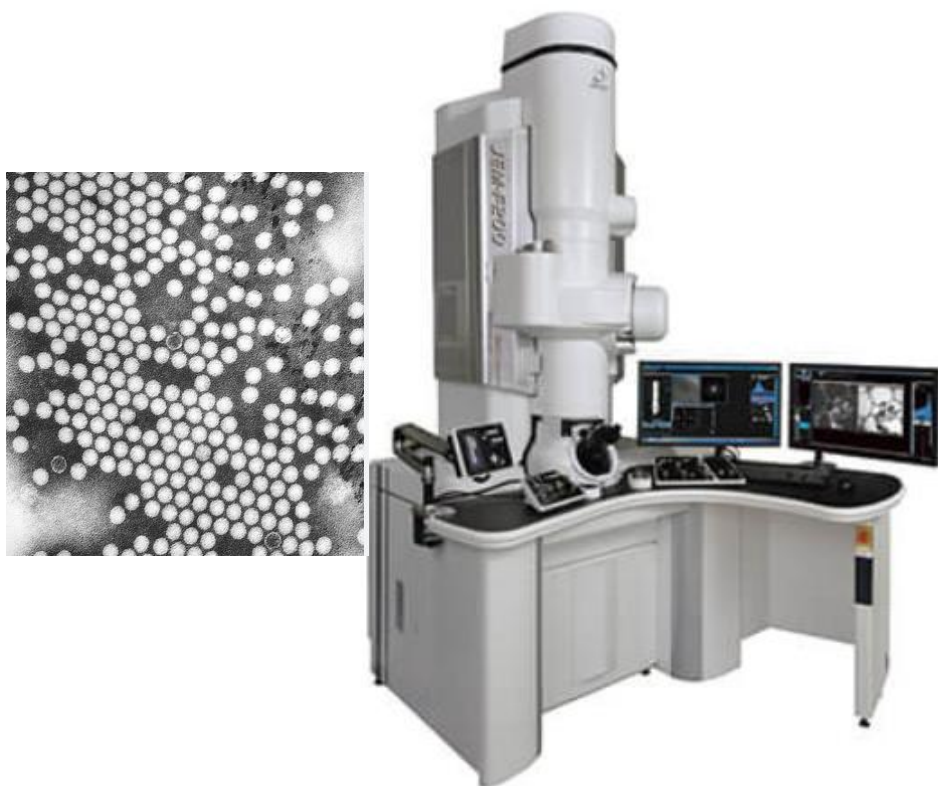


Seeing is believing

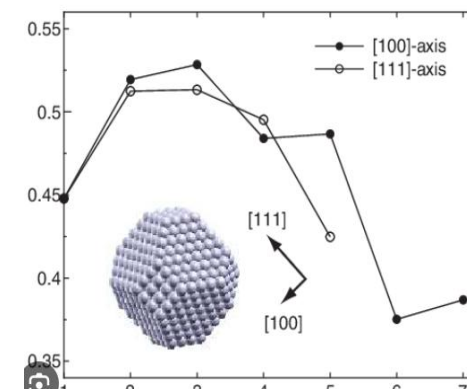
Computation is understanding

眼见为实：知其然

计算为悟：知其所以然

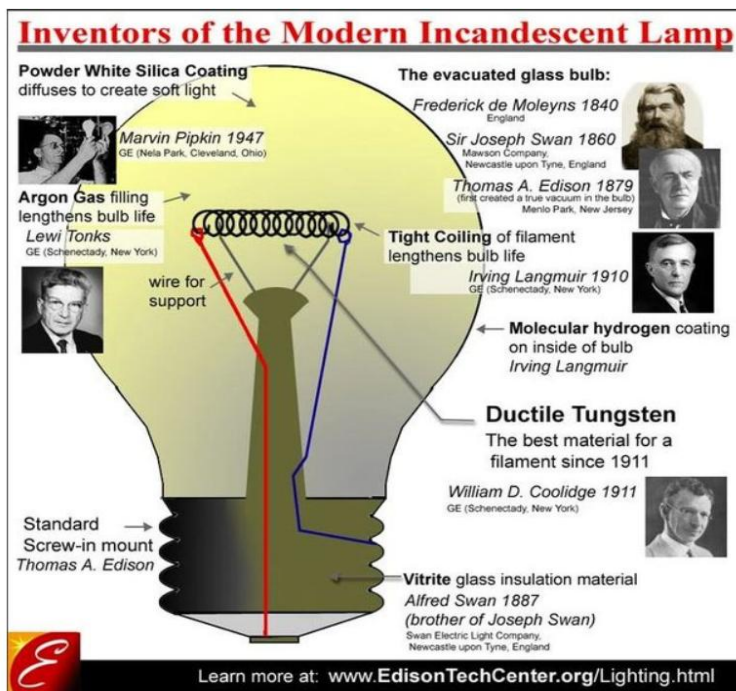


+



**Only after we fully reproduce something in our computer,
we can say we fully understand its mechanism**

改变爱迪生式的试错法 为材料的理性设计



企业界的情况

IBM
Intel
Ford
Sumsung
Dupont
Applied Material
Global Foundry
TSMC
IMEC
GE

.....

- ❖ 所有这些与材料有关的500强企业，都有几十到几百人的材料模拟团队。
- ❖ 有的企业已经把材料模拟纳入商业流程，决策制定的循环之中。

数字化的推行，AI 的发展，都加速了材料计算的应用

国内企业也正在改变
越来越多的材料企业成立研究院，
中美科技竞争，加速了这一趋势

计算材料学的意义

对实验研究
的价值



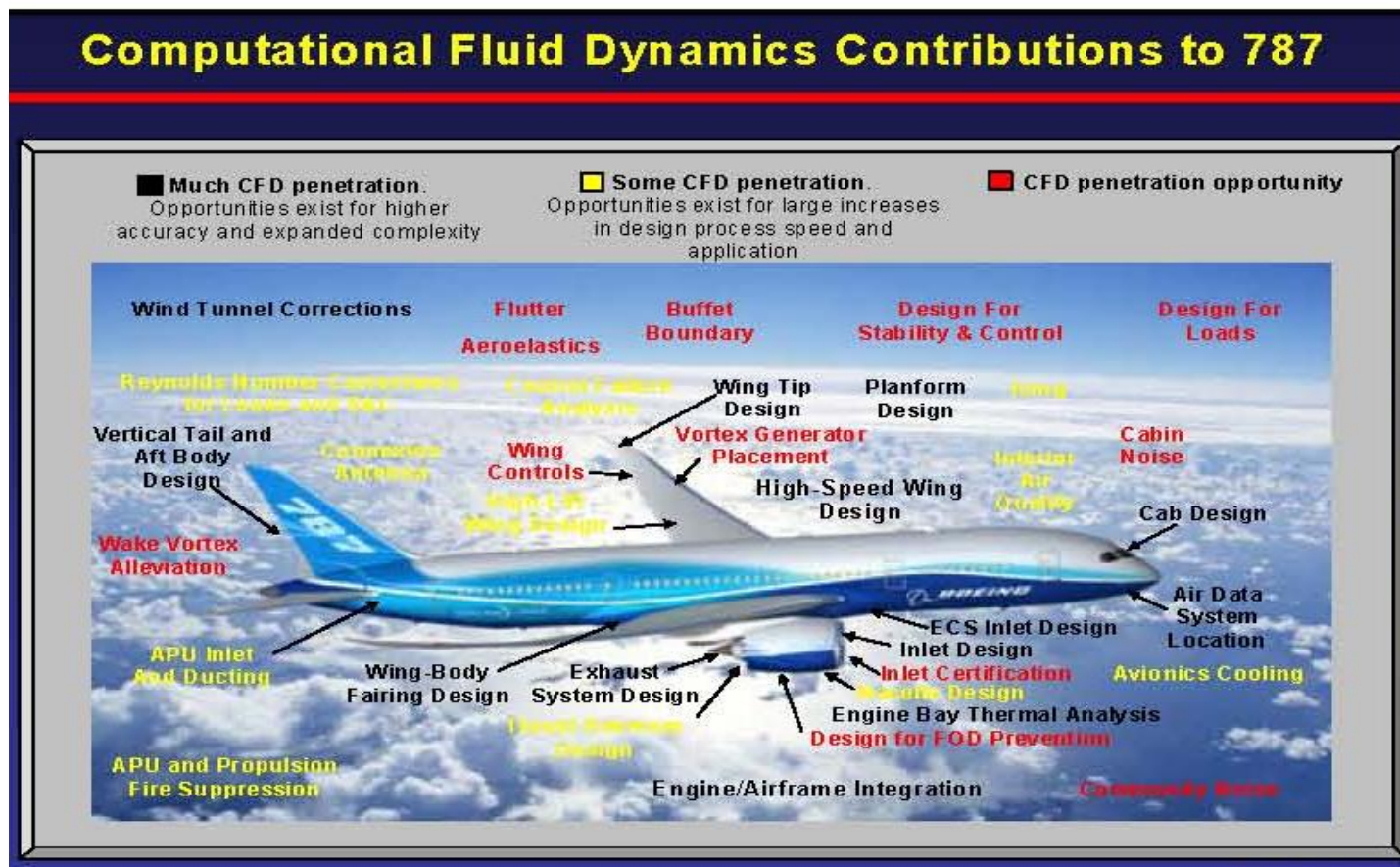
- 引导实验
- 理性设计实验
- 节省时间，降低成本

加深对材料
的认识

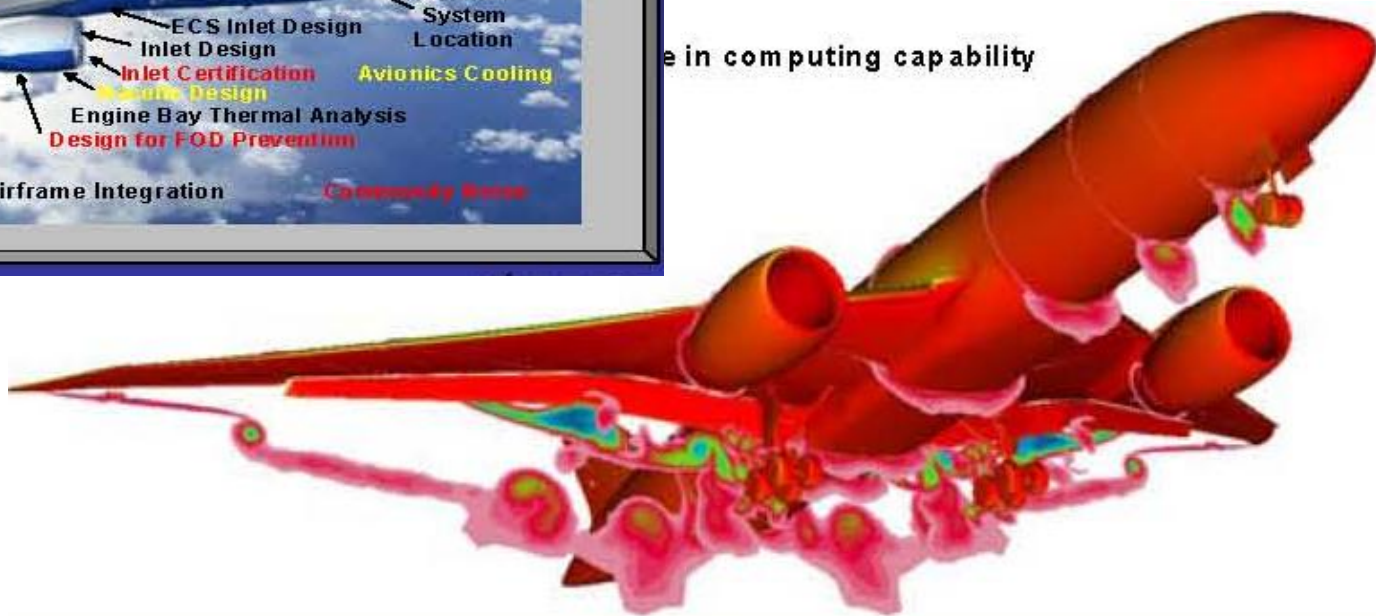


- 探究材料结构
- 探究材料性质
- 探究反应机理

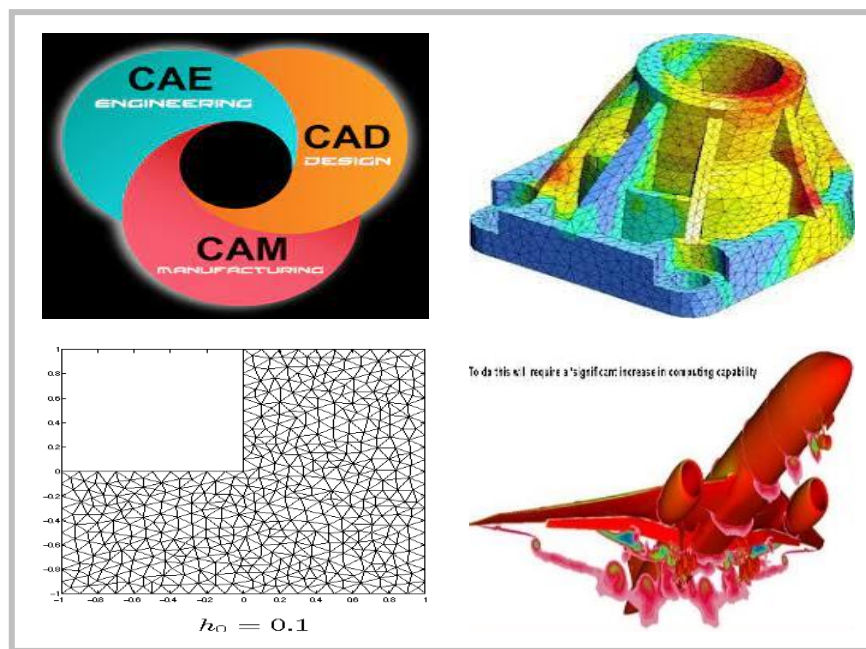




in computing capability

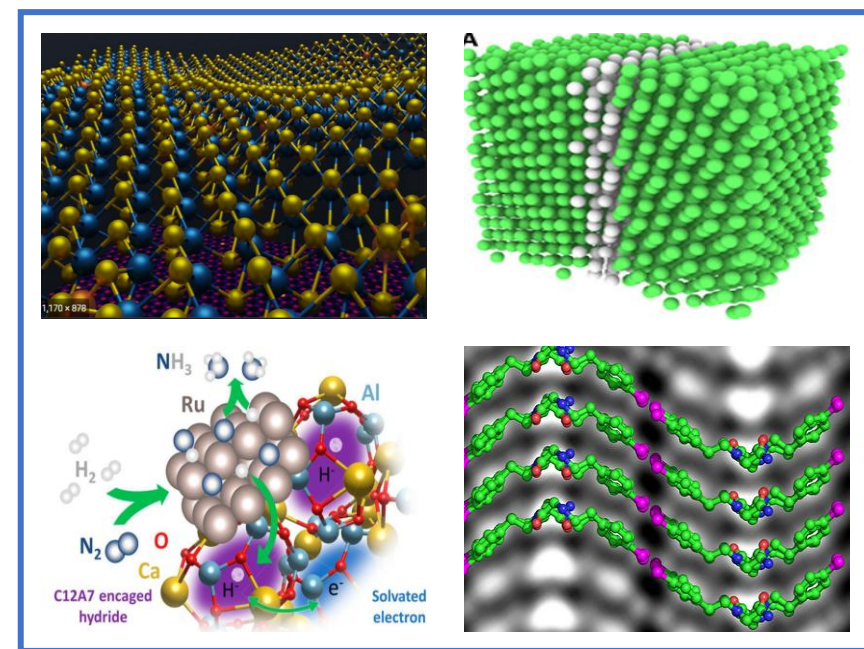


CAD



- ❖ 牛顿力学
- ❖ 连续介质
- ❖ 有限元方法

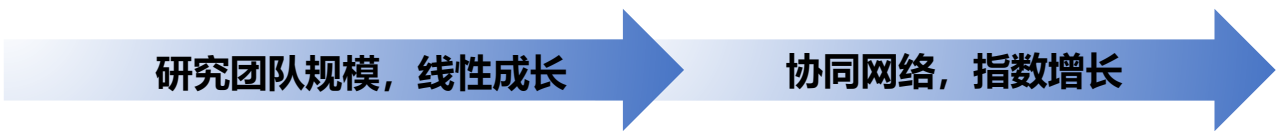
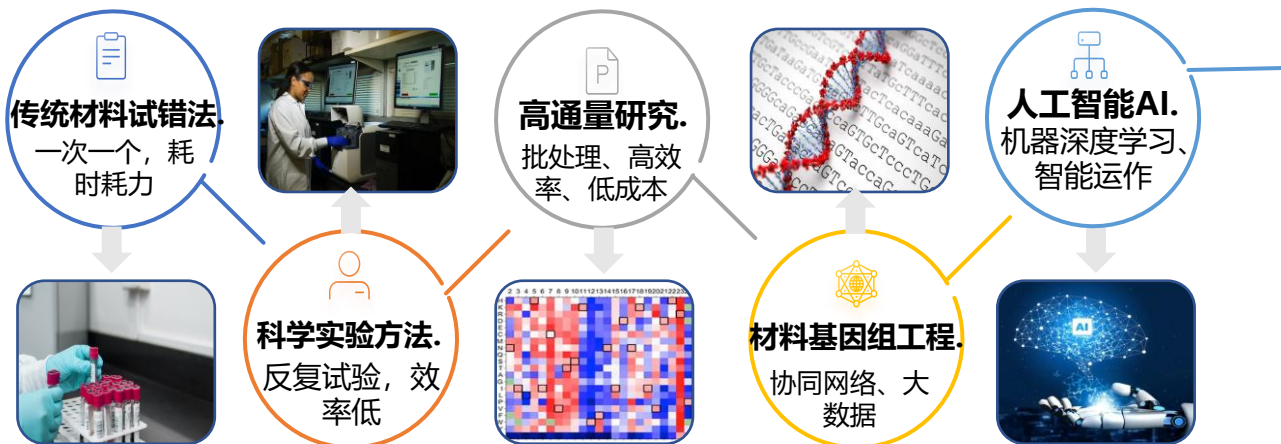
Q-CAD



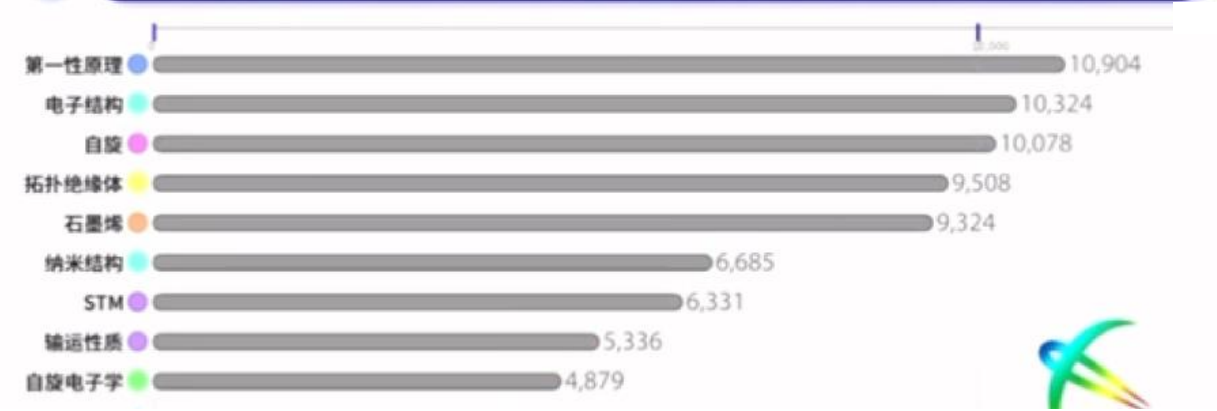
- ❖ 量子力学
- ❖ 原子分子
- ❖ 基含数展开

后工业时代依仗的不是机械设计，而是新材料的开发

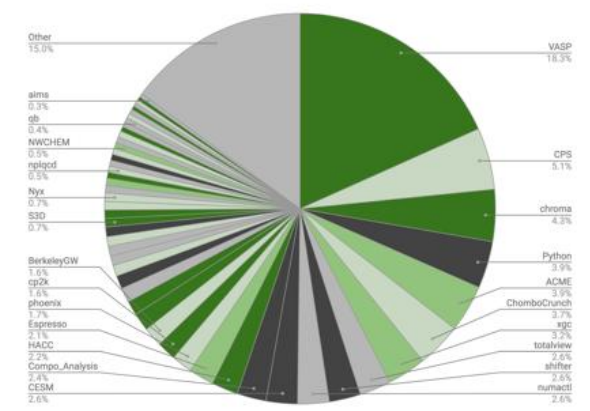
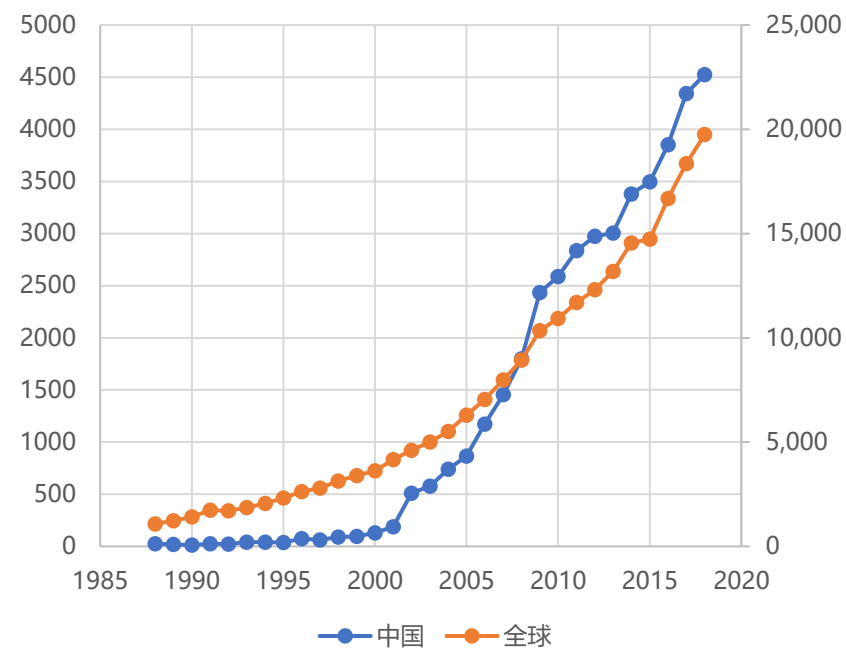
第一性原理计算已有40年历史，渗透到材料研发的每一个领域



自然科学基金项目经费动态统计(凝聚态物理方向)

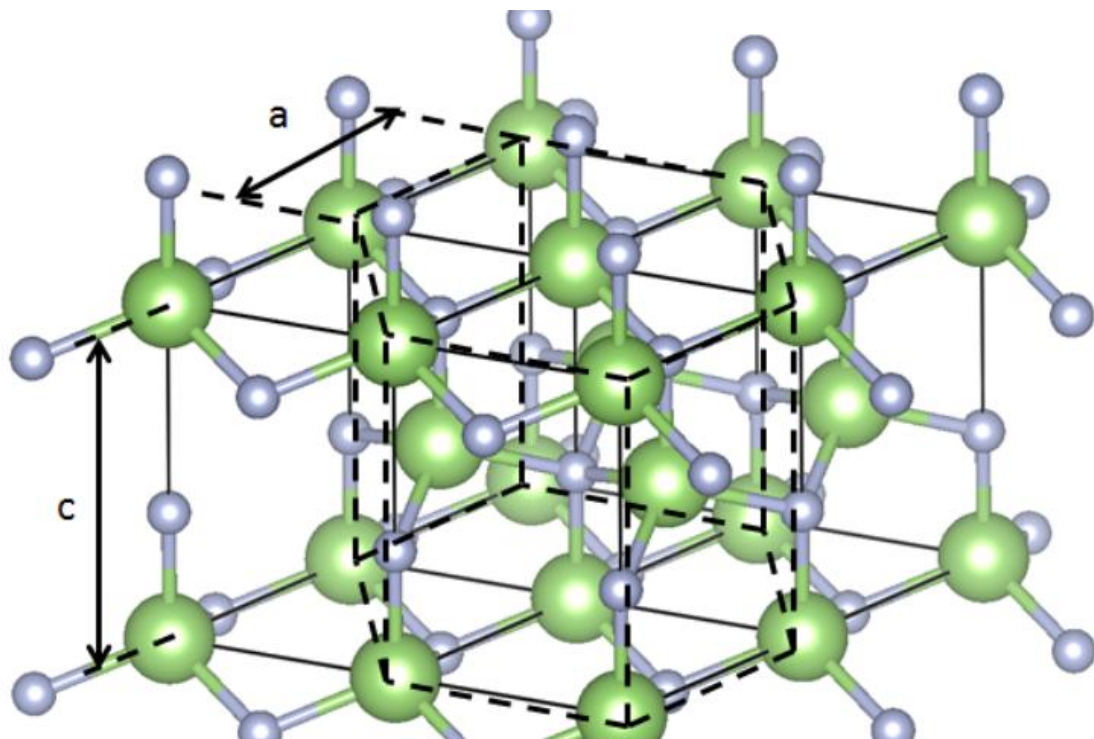


第一性原理计算领域发表文章数



NERSC 2019年计算机时统计

材料的性质是由原子之间的结构与电子的运动决定的



原子的结构，价键的强度决定了它的力学性质，强度等



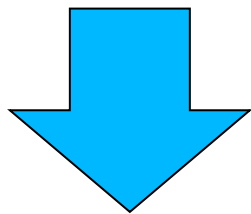
电子的运动决定了它的导电性及光学性质

描述电子运动要用量子力学

物质定律 → 薛定谔方程（大约 100 年前就知道了！）

$$\left\{ -\sum_i \frac{1}{2} \nabla_i^2 + \sum_{i,j} \frac{1}{|r_i - r_j|} + \sum_{i,R} \frac{Z}{|r_i - R|} \right\} \Psi(r_1, \dots, r_N, t) = i \frac{\partial}{\partial t} \Psi(r_1, \dots, r_N, t)$$

量子力学的多体理论
但十分难解



100年的发展

密度泛函理论 (DFT)

一个近似的单体理论

不需要任何参数，就可计算材料性质
是科技领域近40年最重要的发展
是量子力学的最辉煌成就

算力已很强大，但软件发展滞后于硬件

计算材料学基础

'... all the mathematics to solve the whole of chemistry is known, but the equations are too difficult to solve ...'

——P.A.M. Dirac (1930)



The Quantum Theory of the Electron.

By P. A. M. DIRAC, St. John's College, Cambridge.

(Communicated by R. H. Fowler, F.R.S.—Received January 2, 1928.)

The new quantum mechanics, when applied to the problem of the structure of the atom with point-charge electrons, does not give results in agreement with experiment. The discrepancies consist of "duplexity" phenomena, the observed number of stationary states for an electron in an atom being twice the number given by the theory. To meet the difficulty, Goudsmit and Uhlenbeck have introduced the idea of an electron with a spin angular momentum of half a quantum and a magnetic moment of one Bohr magneton. This model for the electron has been fitted into the new mechanics by Pauli,* and Darwin,† working with an equivalent theory, has shown that it gives results in agreement with experiment for hydrogen-like spectra to the first order of accuracy.

物理、化学的发展为计算材料科学提供了理论基础



计算材料学的愿景

用理论设计新材料、优化组分及加工处理工艺从而得到满足具体应用需求的材料，一直是材料科学家的梦想

It has always been a dream of materials researchers to design a new material completely on paper, optimizing the composition and processing steps in order to achieve the properties required for a given application.

Gerbrand Ceder, “COMPUTATIONAL MATERIALS SCIENCE: Predicting Properties from Scratch”, *Science*, Vol 280, Issue 5366, 1099-1100, 15 May 1998

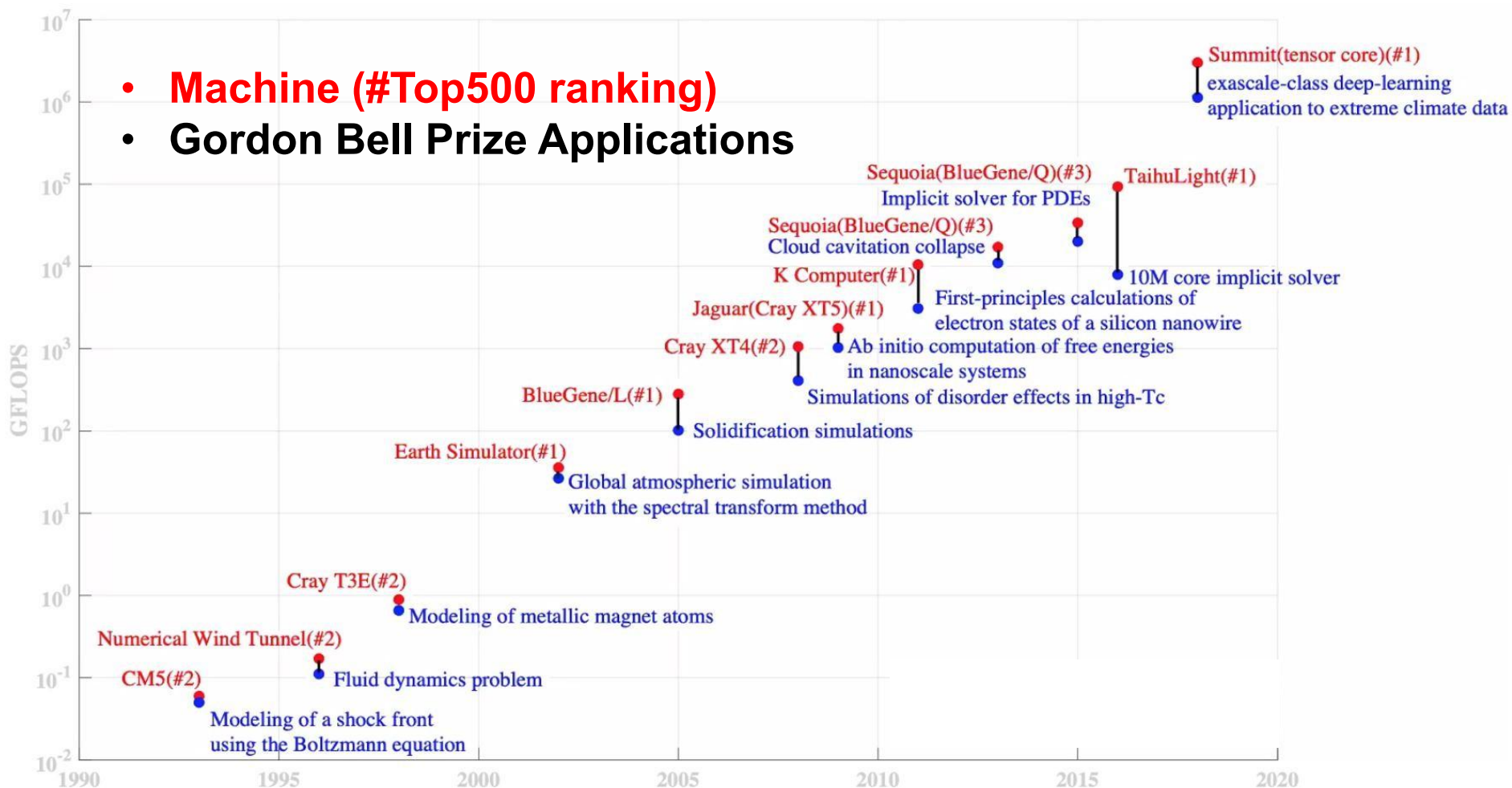


Prof. Gerbrand Ceder



过去30年，HPC算力提高1000万倍！

近几年AI的进步，把HPC变成一个计算的主要市场



The purpose of the award is to track the progress of parallel computing with particular emphasis on rewarding innovation in applying HPC to applications in science, engineering, and large-scale data analytics.

鸟瞰过去三十年戈登贝尔奖获奖工作

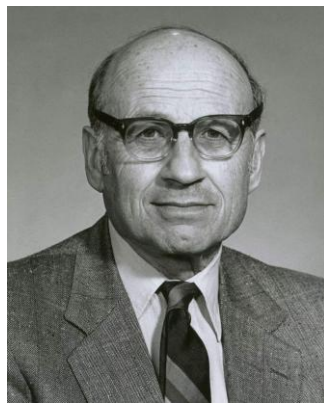
第一性原理计算历史



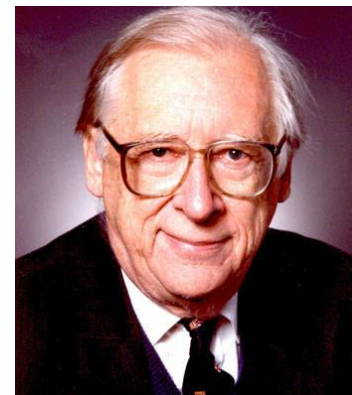
薛定谔



狄拉克



科恩



波普尔

1926年
薛定谔方程提出

1933年
薛定谔与狄拉克
获得诺贝尔物理学奖

1964年
密度泛函理论简化了
薛定谔方程的求解方法

1998年
科恩与波普尔获得了
诺贝尔化学奖

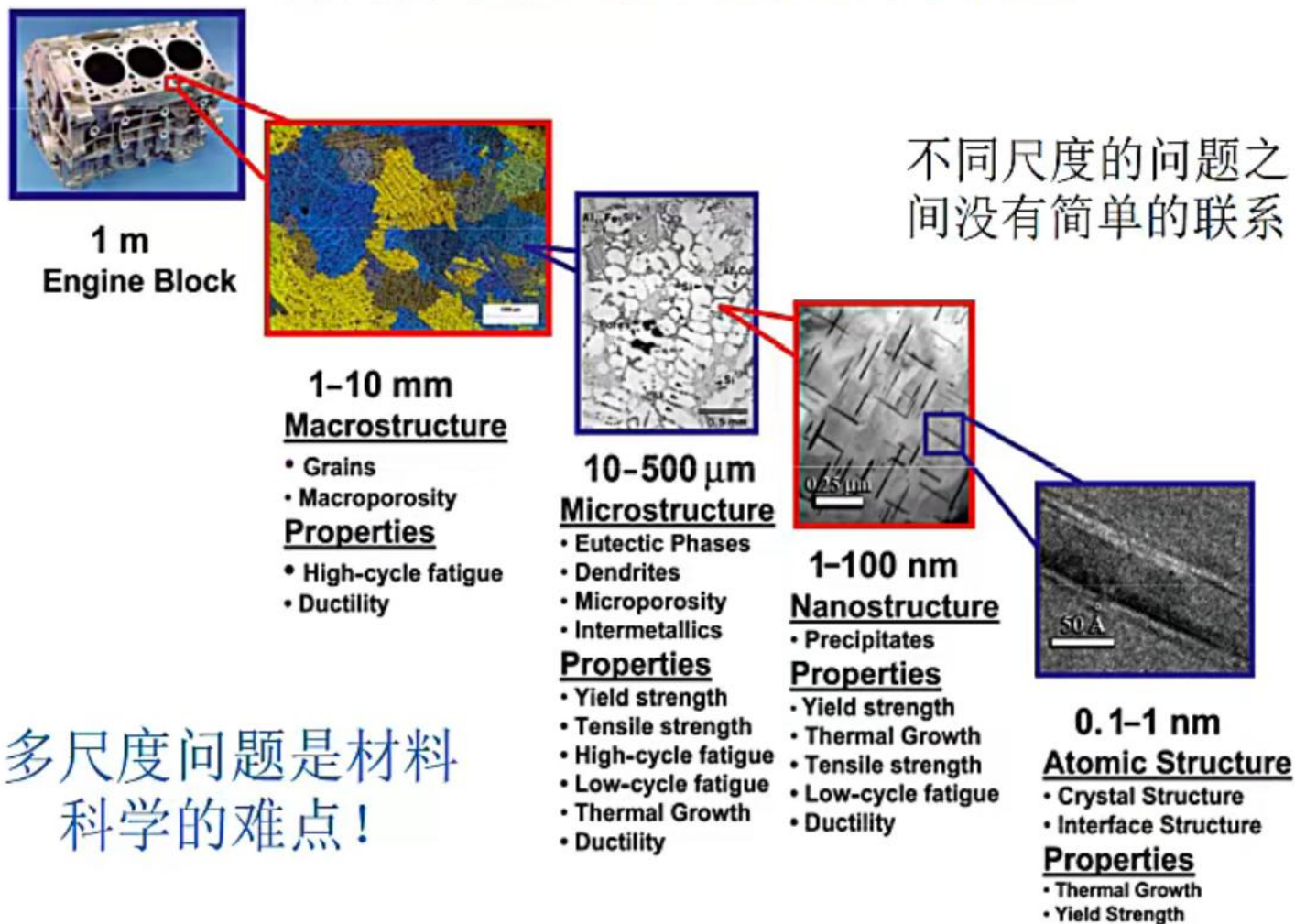
薛定谔方程
最基本的理论模型

密度泛函理论
简化计算的方法

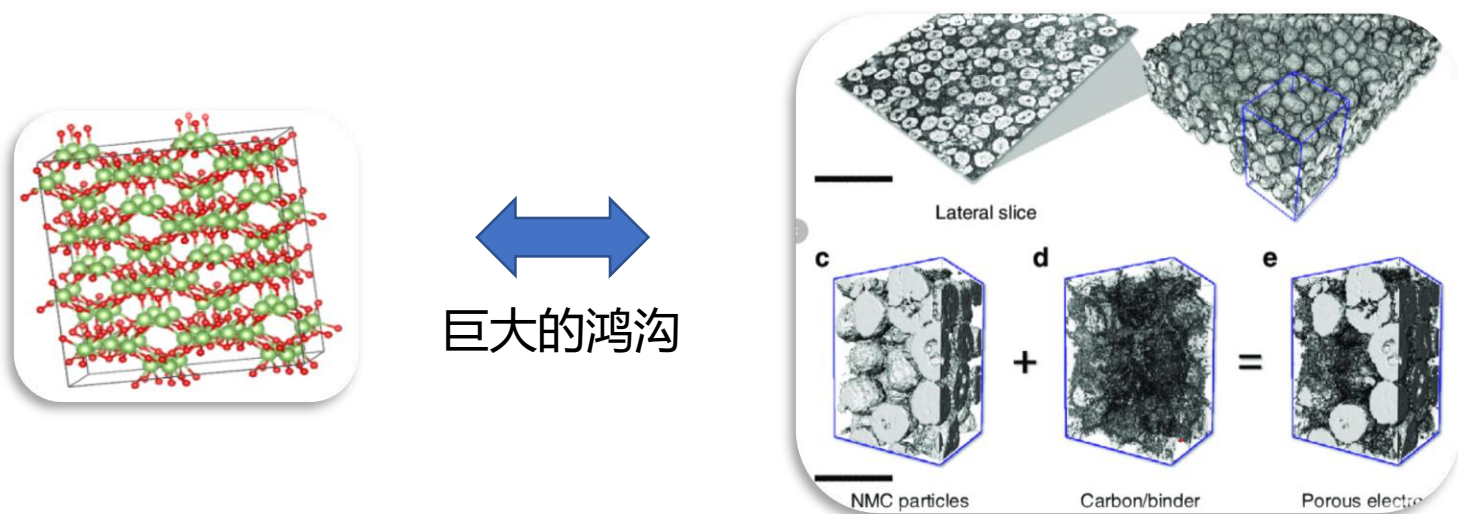
电子波函数+计算机发展
真正实现第一性原理计算

计算材料学的多尺度问题

材料科学涉及多尺度的科学问题



材料计算在实际运用中的挑战



我们还必须克服下面四个困难：

- 准确性：** 提高密度泛函精度
- 空间尺度：** 从算500原子到上百万原子
- 时间尺度：** 从算皮秒，纳秒到秒，小时
- 易用性：** 变特殊研究手段为工程优化工具

从微观到宏观

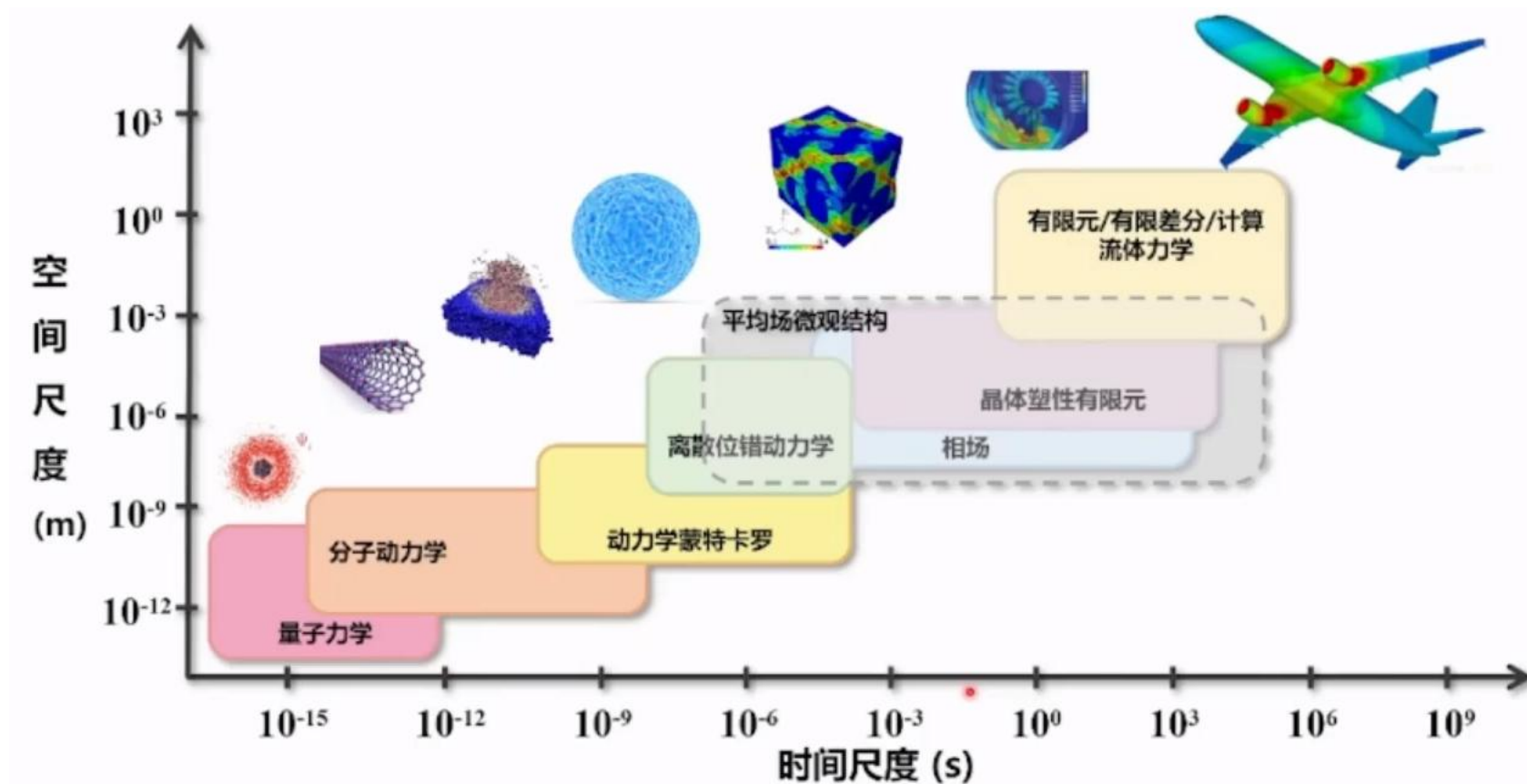
电子运动：量子力学，第一性原理计算

分子运动：分子动力学（经典力场分子动力学，第一性原理分子动力学）

蒙特卡洛方法

相场理论：宏观偏微分方程模型

第一性原理计算泛指从量子力学出发，
不需要实验输入，直接计算材料性质的方法



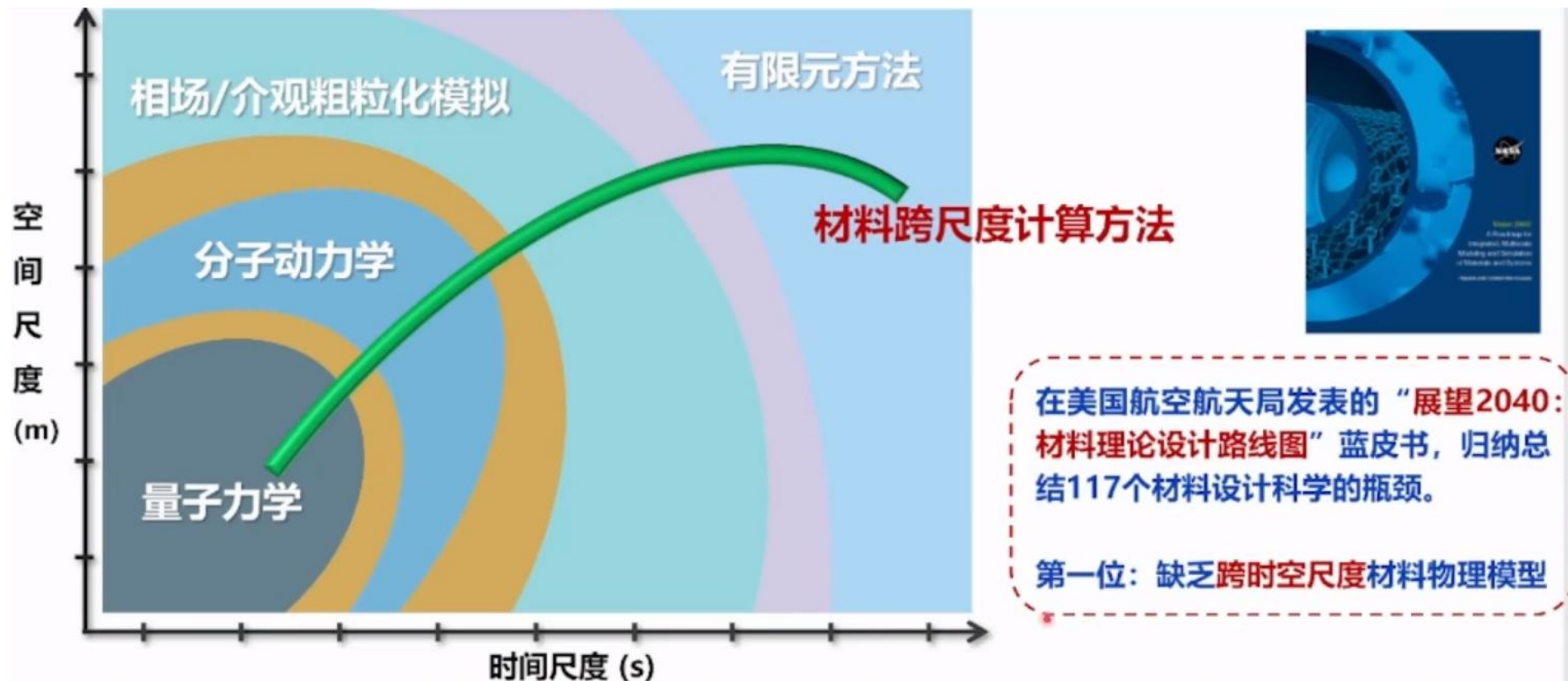
材料的按需设计是材料科学领域的一个重大挑战，因为从材料的**电子结构**到材料服役的**宏观产品**，材料设计科学要跨越**15个数量级**的空间尺度和**23个数量级**的时间尺度



这些各个尺度下的材料设计数理方法，具有跨尺度跨时域的巨大局限，不能满足新材料按需设计的要求

2. 计算材料学理论体系

跨尺度计算方法



突破时间、空间尺度上存在的壁垒，发展跨尺度耦合的数学方法，实现全尺度的材料按需设计是世界难题！



2. 计算材料学理论体系

第一性原理：解量子力学方程，电子的运动

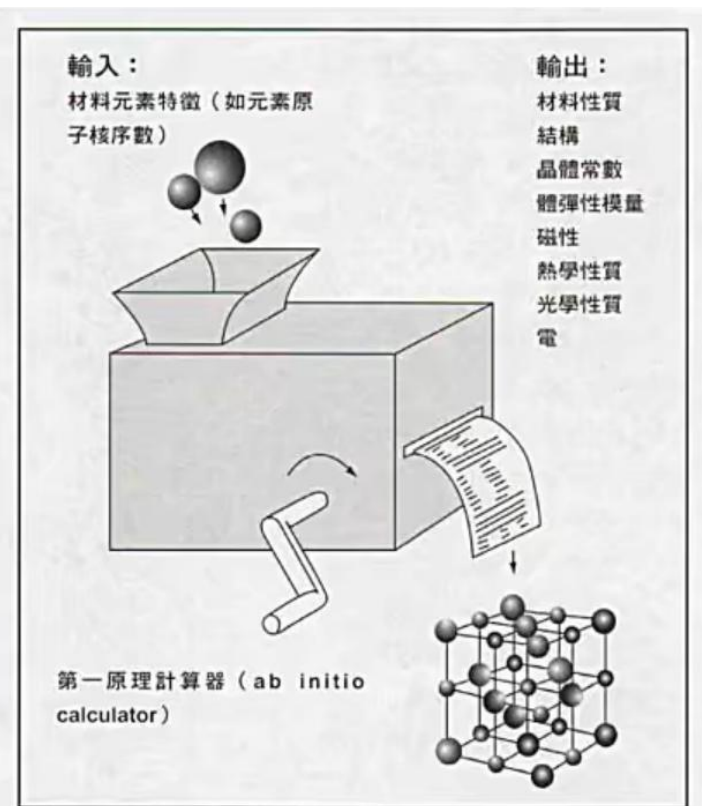
元素周期表

1	1 H	2 He
2	3 Li 4 Be	10 Ne
3	11 Na 12 Mg	18 Ar
4	19 K 20 Ca 21 Sc 22 Ti 23 V 24 Cr 25 Mn 26 Fe 27 Co 28 Ni 29 Cu 30 Zn 31 Ga 32 Ge 33 As 34 Se 35 Br 36 Kr	36 Kr
5	37 Rb 38 Sr 39 Y 40 Zr 41 Nb 42 Mo 43 Tc 44 Ru 45 Rh 46 Pd 47 Ag 48 Cd 49 In 50 Sn 51 Sb 52 Te 53 I 54 Xe	54 Xe
6	55 Cs 56 Ba 57-71 La-Lu 72 Hf 73 Ta 74 W 75 Re 76 Os 77 Ir 78 Pt 79 Au 80 Hg 81 Tl 82 Pb 83 Bi 84 Po 85 At 86 Rn	86 Rn
7	87 Fr 88 Ra 89-103 Ac-Lr 104 105 106 107	

元素周期表图例：
原子序数：92 U
元素符号：U
元素名称：铀
金属：金属
非金属：非金属
过渡元素：过渡元素

87 La	88 Ce	89 Pr	90 Nd	91 Pm	92 Sm	93 Eu	94 Gd	95 Tb	96 Dy	97 Ho	98 Er	99 Tm	100 Yb	101 Lu
102 Ac	103 Th	104 Pa	105 U	106 Np	107 Pu	108 Am	109 Cm	110 Bk	111 Cf	112 Es	113 Fm	114 Md	115 No	116 Lr

根据原子核和电子相互作用的原理及其基本运动规律，运用量子力学原理，从具体要求出发，经过一些近似处理后直接求解薛定谔方程的算法，习惯上称为第一性原理。

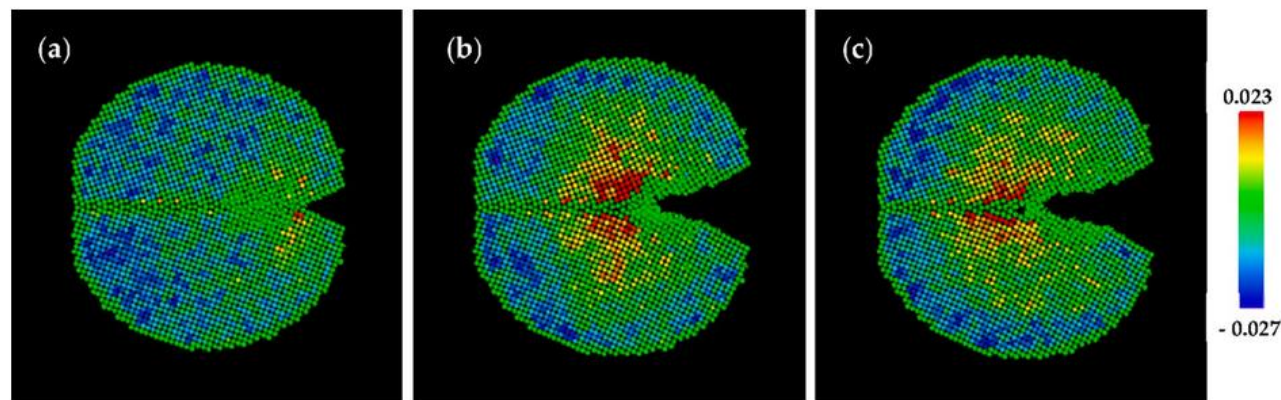


图二：第一原理计算过程：输入材料元素的特征，运转计算机便可获得想知道的材料性质。这样的计算机需要三个部件：理论或模型，数值计算方法和执行程序，电脑。对一块真实材料来说，理论或模型是没有解析解的，因此，人们只能通过高速电脑求得数值解。

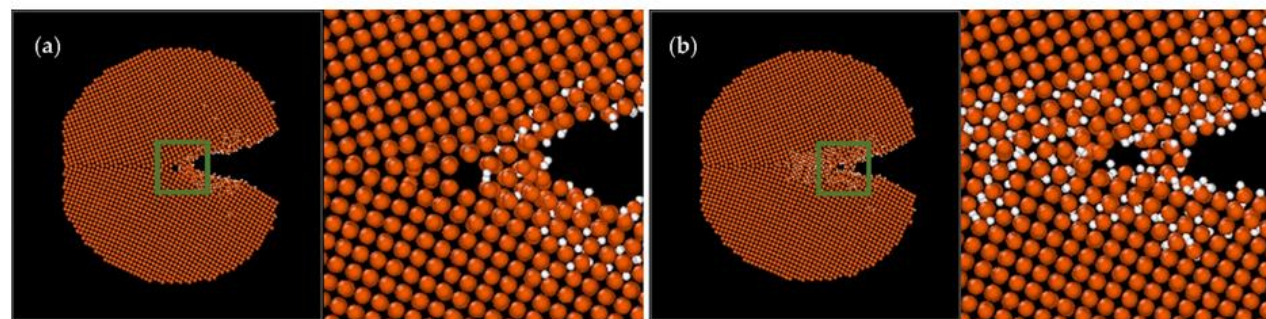


2. 计算材料学理论体系

分子动力学：利用牛顿第二定律模拟原子的运动，原子足够大，其运动不必用量子力学描述
对于给定原子位置，其力可以来自第一性原理计算，也可以来自经典或机器学习力场



含有1.097%总氢浓度的系统的体积应变分布; (a) 初始框架; (b) 大约6000 fs时的框架。

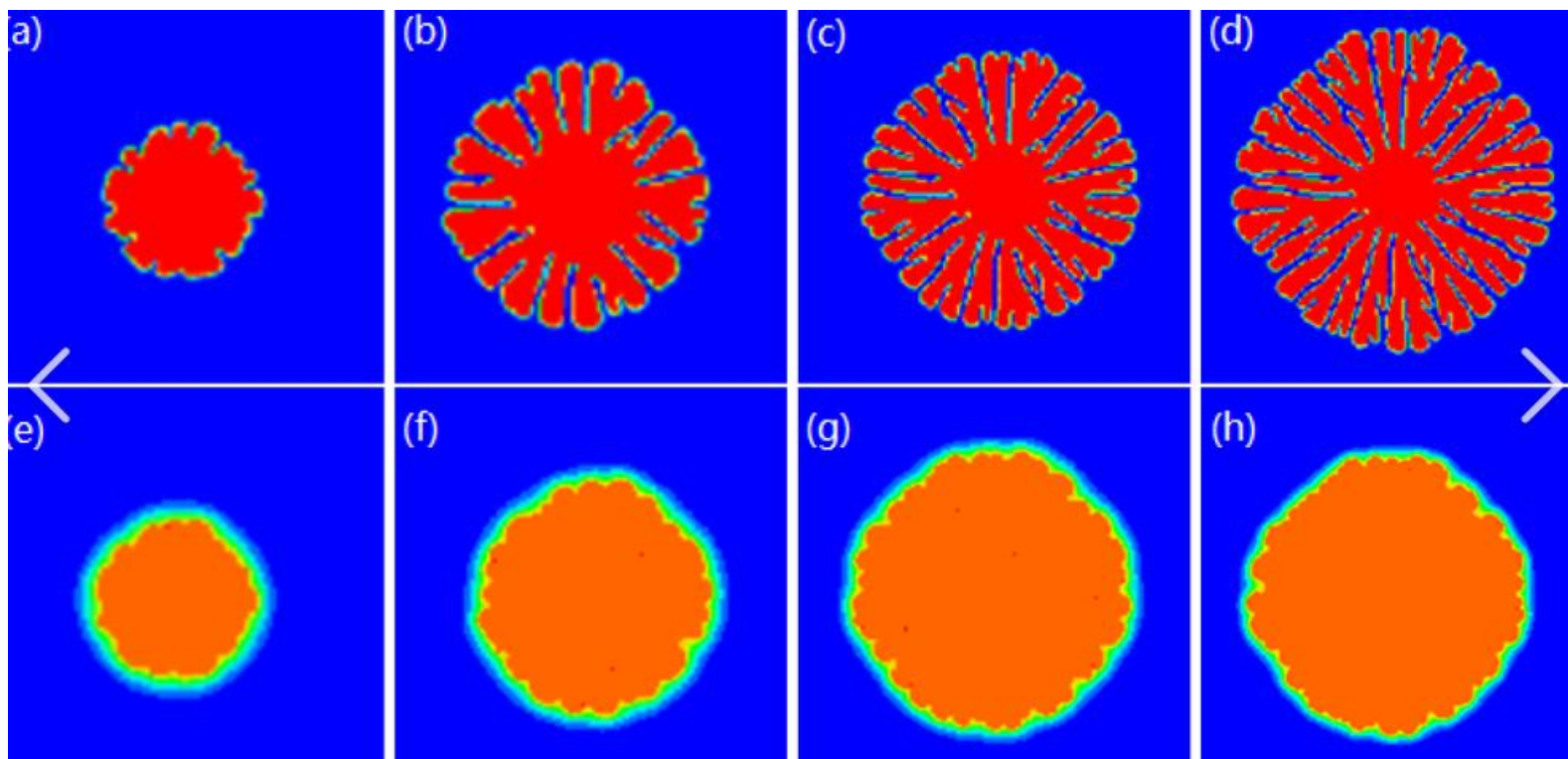


含有1.097%总氢浓度的系统的体积应变分布; (a) 初始框架; (b) 大约6000 fs时的框架。

2. 计算材料学理论体系

有限元相场理论的计算

常用于金属，生长等等的模拟，利用相参数来描述不同物相的形成，
利用偏微分方程来描述自由能，以及反应速率。属于宏观计算，没有单个原子信息



2.计算材料学理论体系

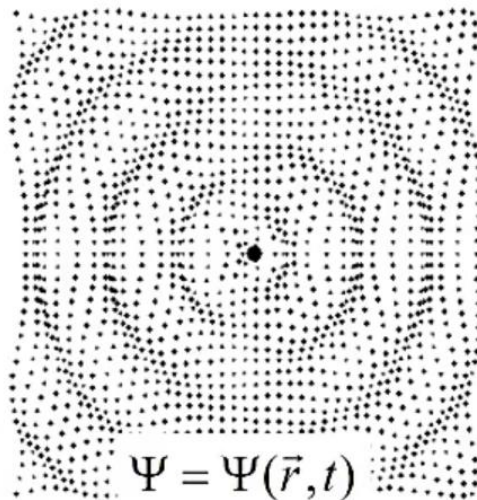
量子力学：波粒二象性

波粒二象性是量子力学中的一个概念，即每个粒子或量子实体不仅可以用粒子来描述，而且可以用波来描述

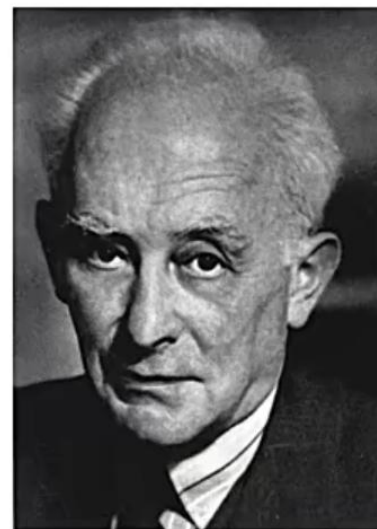


Louis de Broglie (1924)

$$\lambda \cdot p = h \quad (h = 6.6 \times 10^{-34} \text{ J s})$$



$$\|\Psi(x, t)\|^2$$



M. Born (1926)

The probability of finding a particle at x and t .



2. 计算材料学理论体系

量子力学：薛定谔方程

多个电子与多个原子核相互作用的薛定谔方程

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi(\vec{r},t)+V(\vec{r},t)\Psi(\vec{r},t)=i\hbar\frac{\partial\Psi(\vec{r},t)}{\partial t}$$

$$\hat{H}\psi(\underbrace{\{\mathbf{r}_i\}}_{\text{e}^-}, \underbrace{\{\mathbf{R}_I\}}_{+}) = E\psi(\underbrace{\{\mathbf{r}_i\}}_{\text{e}^-}, \underbrace{\{\mathbf{R}_I\}}_{+})$$

$$\hat{H} = \hat{T}_e + \hat{T}_N + \hat{V}_{e-e} + \hat{V}_{N-N} + \hat{V}_{e-N}$$

- T_e : quantum kinetic energy of the electrons
- V_{e-e} : electron-electron interactions
- V_{N-N} : electrostatic nucleus-nucleus repulsion
- V_{e-N} : electrostatic electron-nucleus attraction (electrons in the field of all the nuclei)



Schrödinger
(1926)



2. 计算材料学理论体系

复杂的多体问题

多个电子与多个原子核相互作用的薛定谔方程

N^N 维度灾难

经典计算机很难
直接计算多体量子力学方程

$$\hat{H}\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3 \dots \mathbf{r}_N) = E\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3 \dots \mathbf{r}_N)$$

The electronic hamiltonian consists of three terms :

$$\hat{H} = \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m_e} \sum_i^{N_e} \nabla_i^2}_{\text{e}^- \xrightarrow{\vec{V}}} + \underbrace{\sum_i^{N_e} V_{ext}(r_i)}_{\text{+} \xrightarrow{\vec{F}} \text{e}^-} + \underbrace{\sum_{i=1}^{N_e} \sum_{j>1} U(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j)}_{\text{e}^- \xleftarrow{\vec{F}} \xrightarrow{\vec{F}} \text{e}^-}$$



2. 计算材料学理论体系:

求解多体电子波函数的不同近似方法

❖ 量子化学的方法：近似波函数

Slater Determine, Hartree-Fock, MP, CCSD(T), full CI

(利用各种近似来描述波函数，或用多个基矢来展开波函数，
为把各种积分表述成解析公式，常用高斯基组作为最基本的数字基矢)

特点：小分子计算， N^n scaling, n 很大 (比如7) , CCSD(T) 可到化学精度 (kcal/mol), 黄金标准。

❖ 量子蒙特卡洛方法：利用蒙特卡洛方法对多体积分进行近似，变 N^N scaling 为 N^3 scaling, variational QMC, diffusion QMC.

特点：算法优美，计算量非常大，数字涨落误差, sign problem.

2. 计算材料学理论体系:

求解多体电子波函数的不同近似方法

- ❖ Renormalization group method: can be used to study strongly correlated system. But the current algorithm mostly can only be applied to pseudo 1D problem.

- ❖ Density matrix Method: 近似density matrix.

The energy only depend on the second order density matrix.

Need to use linear programming (the density matrix have linear condition).

The existence of the density matrix (it can be constructed from a many body wavefunction) is the essential issue.

Recent studies show it can be very accurate.

- ❖ 密度泛函方法: 将波函数问题转换成电子密度问题。 Everything depends on charge density $\rho(r)$

Currently most popular method in material science.

2. 计算材料学理论体系

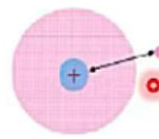
密度泛函理论：从波函数到电子密度

Define the electron density:

$$n(\mathbf{r}) = \psi^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \dots \mathbf{r}_N) \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \dots \mathbf{r}_N) \text{ 3N dimensions reduces to 3}$$

The j^{th} electron is treated as a point charge in the field of all the other electrons. This simplifies the many-electron problem to many one electron problems:

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3 \dots \mathbf{r}_N) = \psi(\mathbf{r}_1) * \psi_2(\mathbf{r}_2) * \psi_3(\mathbf{r}_3) * \dots * \psi_N(\mathbf{r}_N) \text{ (Hartree product)}$$



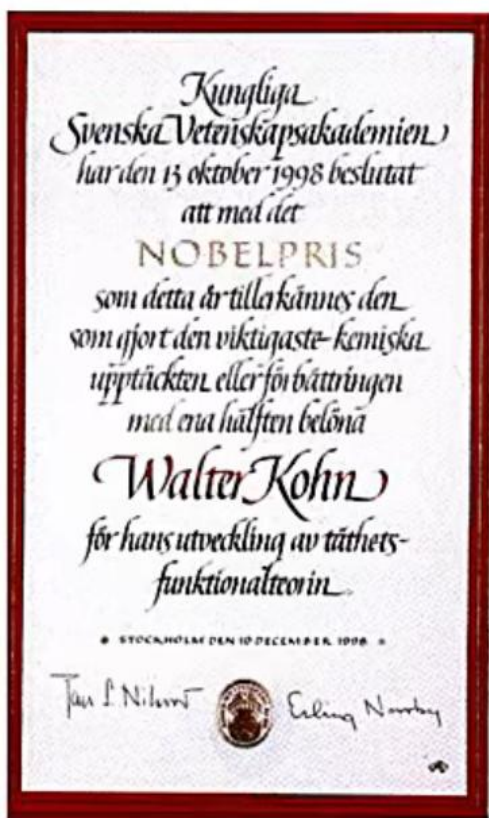
Define the electron density in terms of the individual electron wave functions:

$$n(\mathbf{r}) = 2 \sum_i \psi_i^*(\mathbf{r}) \psi_i(\mathbf{r})$$



2. 计算材料学理论体系

DFT获诺贝尔化学奖



1998 Nobel Prize in
Chemistry to Walter Kohn





2. 计算材料学理论体系

密度泛函计算方法的不同数字解分类

主要的不同来自于对波函数的不同数学描述方法

- ❖ **Empirical tight-binding method (TB)**: Not exactly DFT, but an empirical method to describe wave function Hamiltonian, only has basis coupling constants, no basis information.
- ❖ **Empirical pseudopotential method**: Not exactly DFT, an empirical method to describe the electron pseudopotential, usually use plane wave for the electron wave function basis.
- ❖ **K.P method**: a way to describe the kpoint wave function using the Gamma point wave function as a basis. Only works in crystal. Not explicit wave function, not DFT. One of the old method.
- ❖ **LCAO**: linear combination of Atomic Orbital: use a Muffin-Tin sphere around an atom, and assume a spherical symmetry potential inside the sphere, and use spherical harmonic function to describe the wave function inside the atom, and a flat potential outside the sphere, one old approximate method.
- ❖ **LAPW**: linear combination of augmented plane wave method: can be considered as a more advanced method than LCAO, it uses non-spherical approximation for the potential inside the sphere. it uses plane wave outside the sphere. It is used to solve the all-electron Hamiltonian (no pseudopotential)



2. 计算材料学理论体系

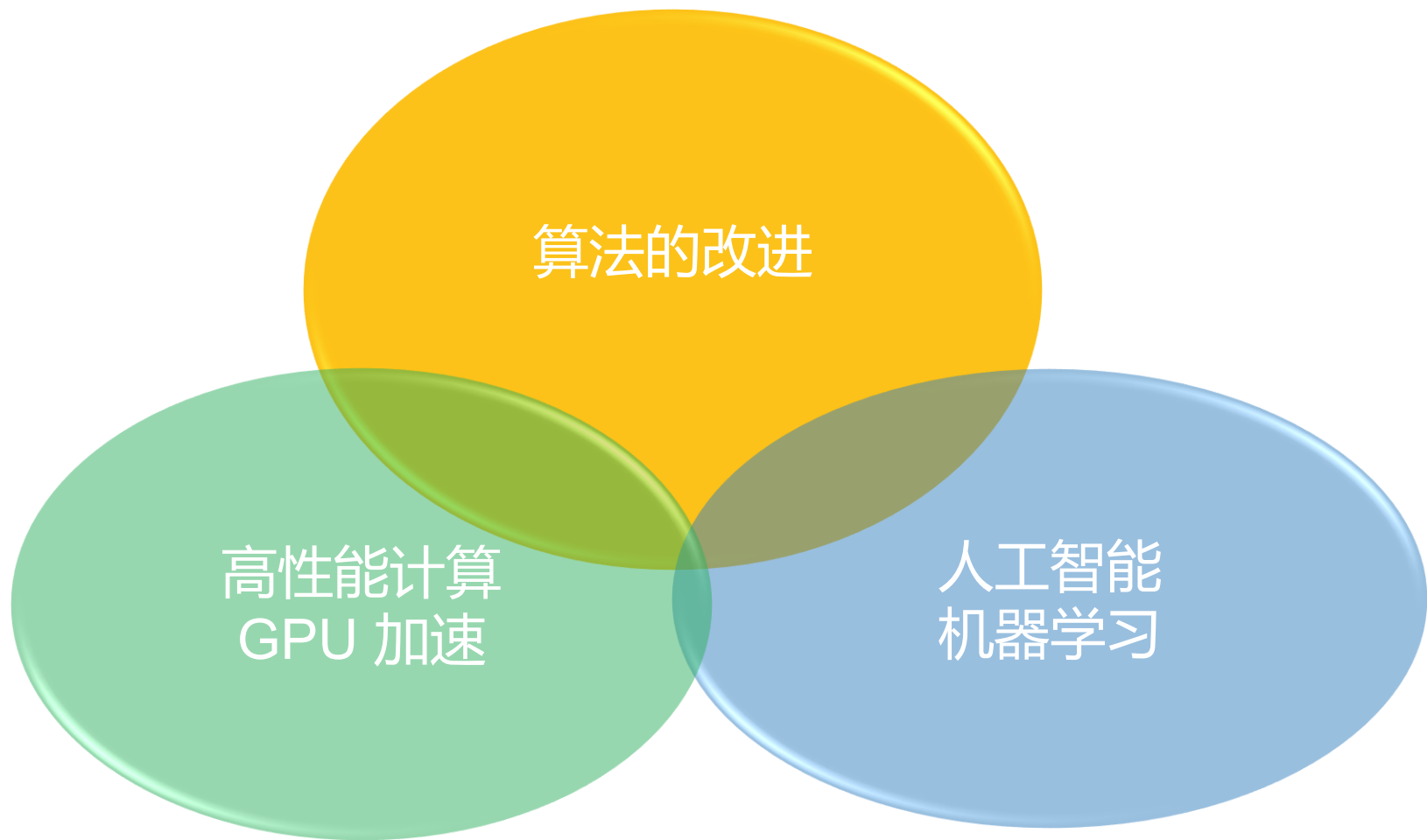
密度泛函计算方法的不同数字解分类

- ❖ **Real space grid method**: it uses a fixed real space grid to describe the wave function. It is a finite difference method. It requires a relatively dense grid, and atomic movement can be not-smooth (egg-box problem).
- ❖ **Finite-element method**: it is like the real-space grid, but use finite elements grid, special adjusted grid. In theory, it can be used to describe all electron calculations. But it has challenges when the atom moves. Never fully developed.
- ❖ **Wave let method**: it uses wave-let to describe the wave function, the idea is to have a more efficient way to describe the wave function (not uniform grid over the whole space). It also has some challenges when the atom moves.
- ❖ **Gaussian basis method**: it uses Gaussian basis to describe the wave function. It is popular in some quantum chemistry code, then used for DFT calculations.
- ❖ **Atomic basis method**: it uses numerical atomic orbital as the basis. The advantage is that it has a small number of basis. But the conduction band might not be well described.
- ❖ **Plane wave method**: using plane waves to describe the wave function, and pseudopotential to present the potential. It is relatively simple, and it is the most popular method in material simulations.



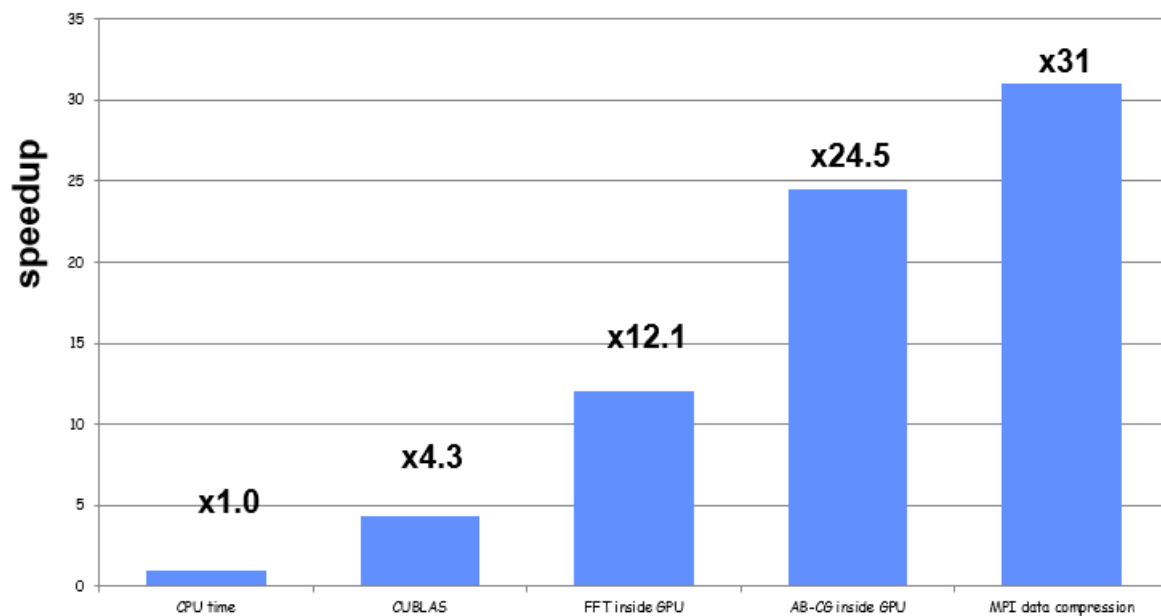
3. 计算材料学研究动态与展望

材料计算可依赖的三个技术(克服精度, 空间, 时间尺度的难题)

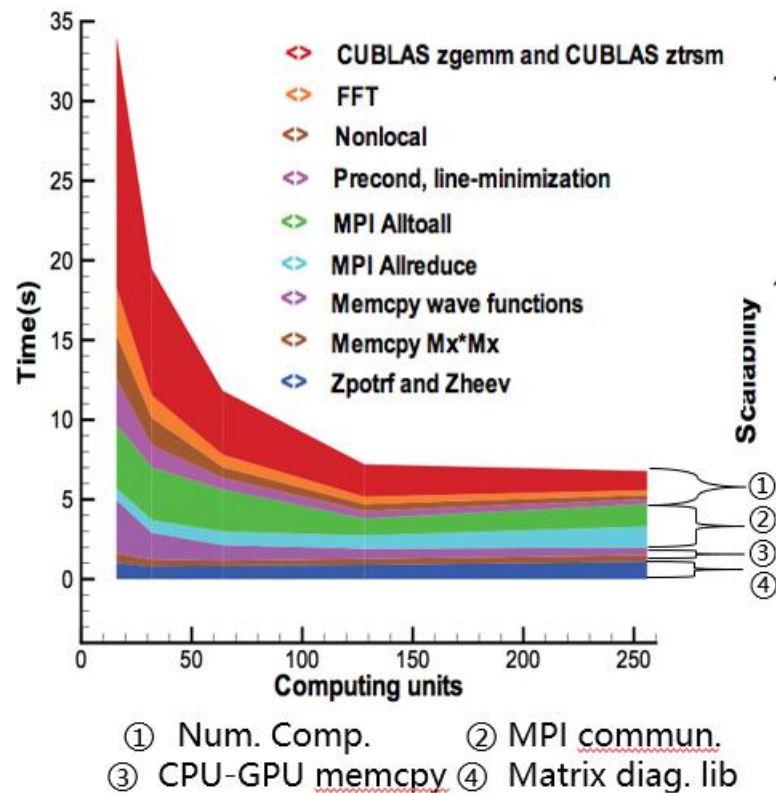


3. 计算材料学研究动态与展望

GPU 加速

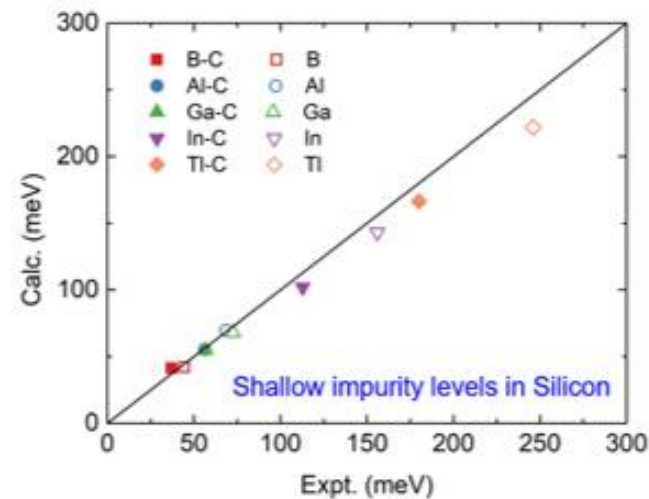
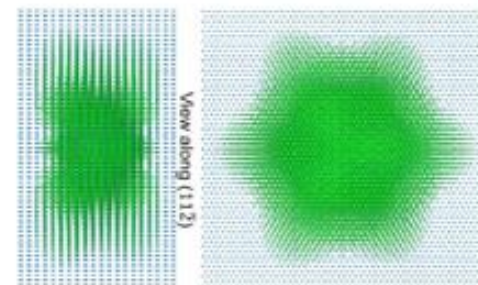
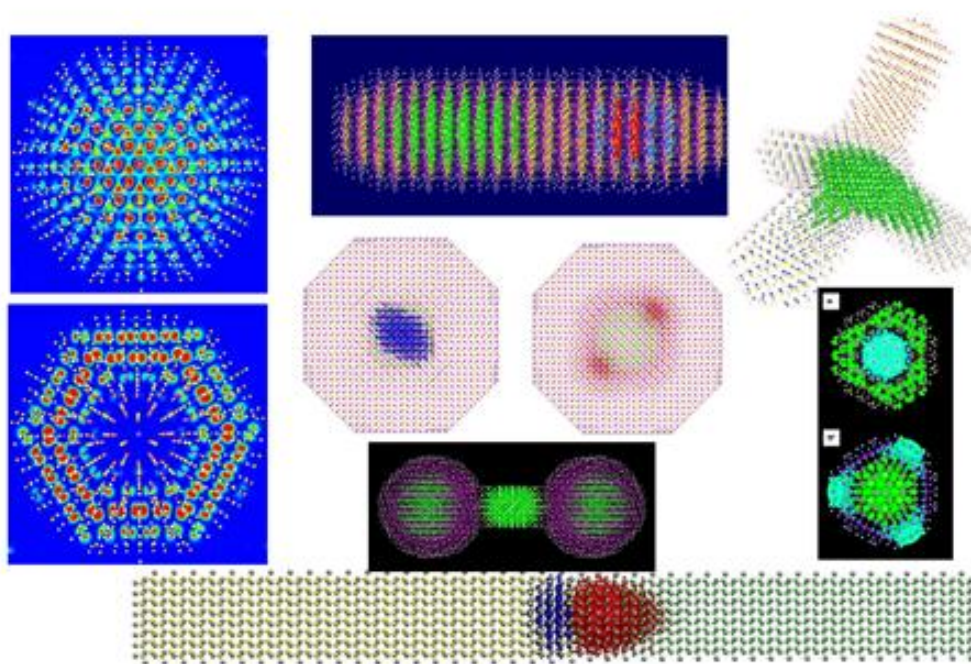
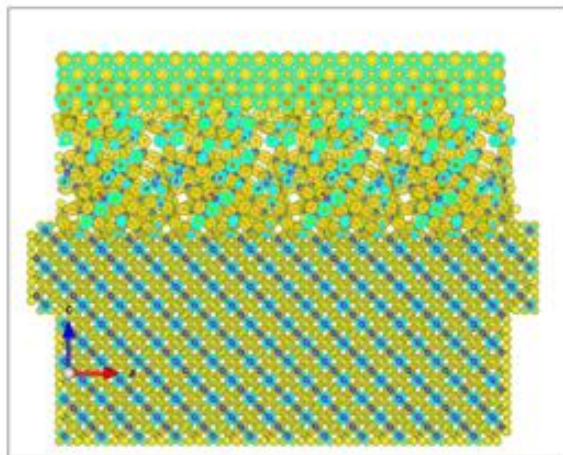
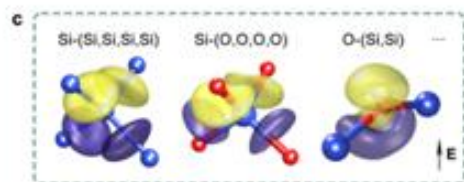
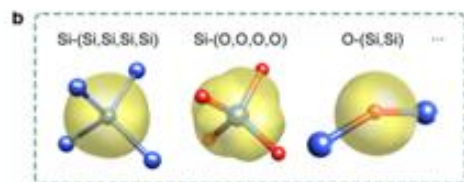


The speedup of GPU CG_AliBand over CPU PETot code on Titan.



3. 计算材料学研究动态与展望

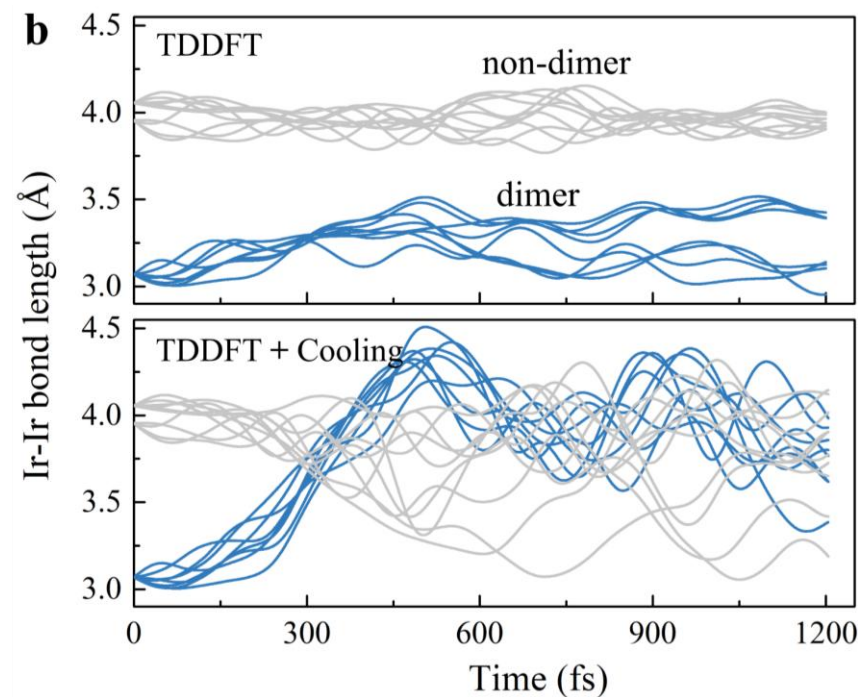
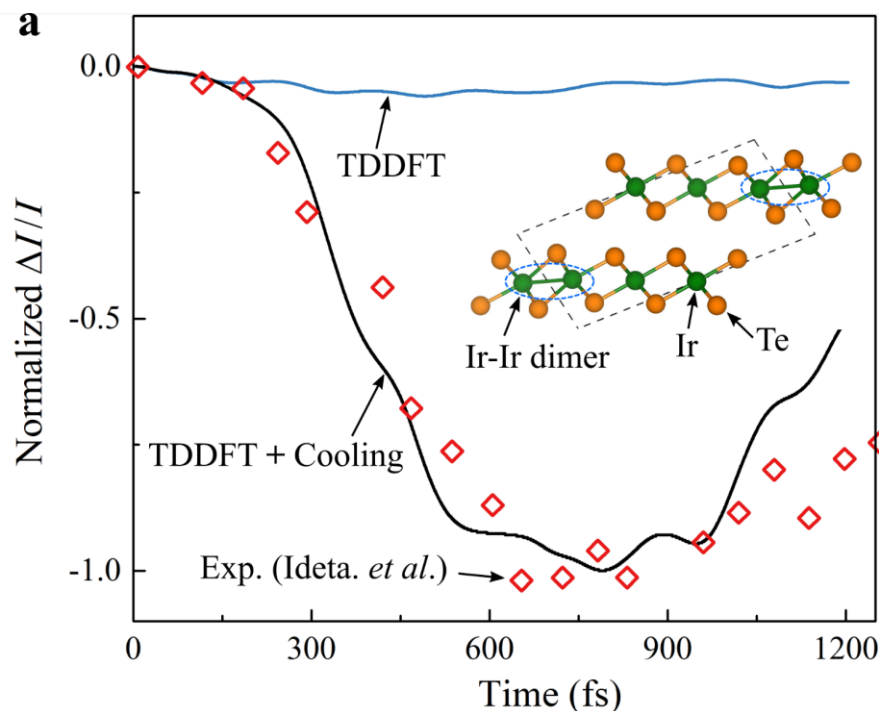
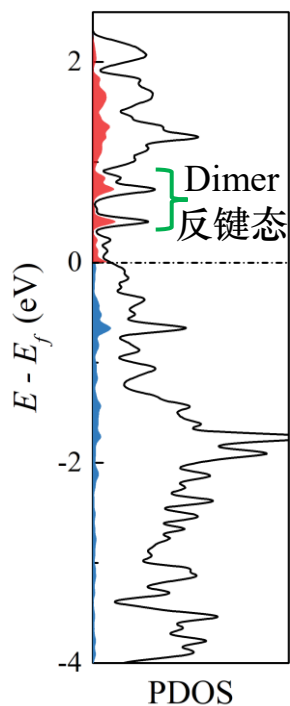
大尺度计算



II. TDDFT (无载流子冷却) 和 Boltzmann-TDDFT (载流子冷却)

光激发 3% 的电子

- ❖ Ehrenfest 动力学不太满足电子态转移的细致平衡；
- ❖ 引入 Boltzmann 因子，包括载流子冷却效应。



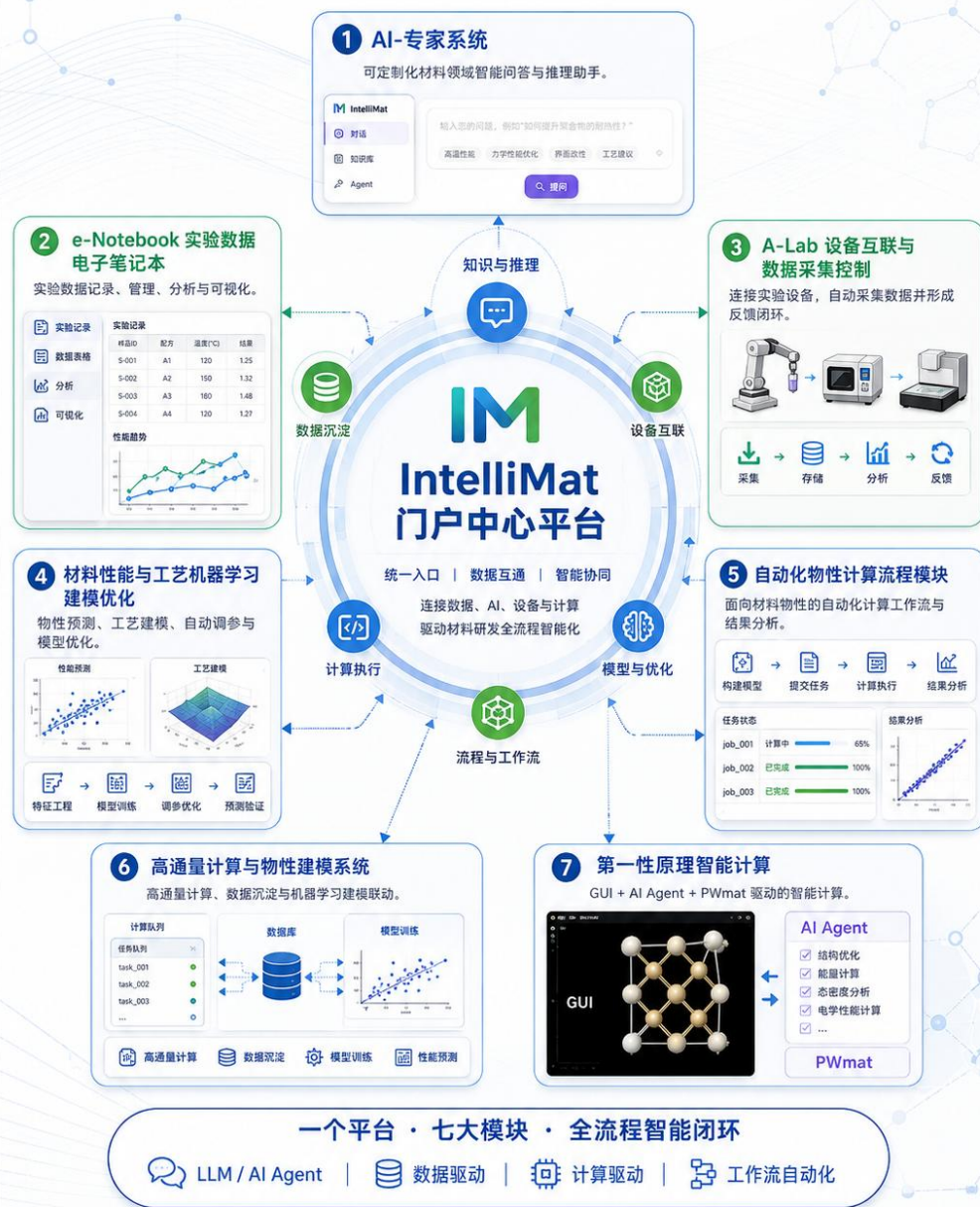
3. 计算材料学研究动态与展望

AI 在材料研究中的应用

- ❖ 利用Ai-Agent，将计算智能化，打造智算平台，降低计算门槛
- ❖ 利用大语言模型，聚集行业知识打造 AI 专家系统
- ❖ 利用机器学习增强模拟能力，打通多尺度模拟瓶颈
- ❖ 建立结构 → 物性的机器学习模型，筛选材料，优化材料
- ❖ 与实验相结合，打造 A-Lab 平台

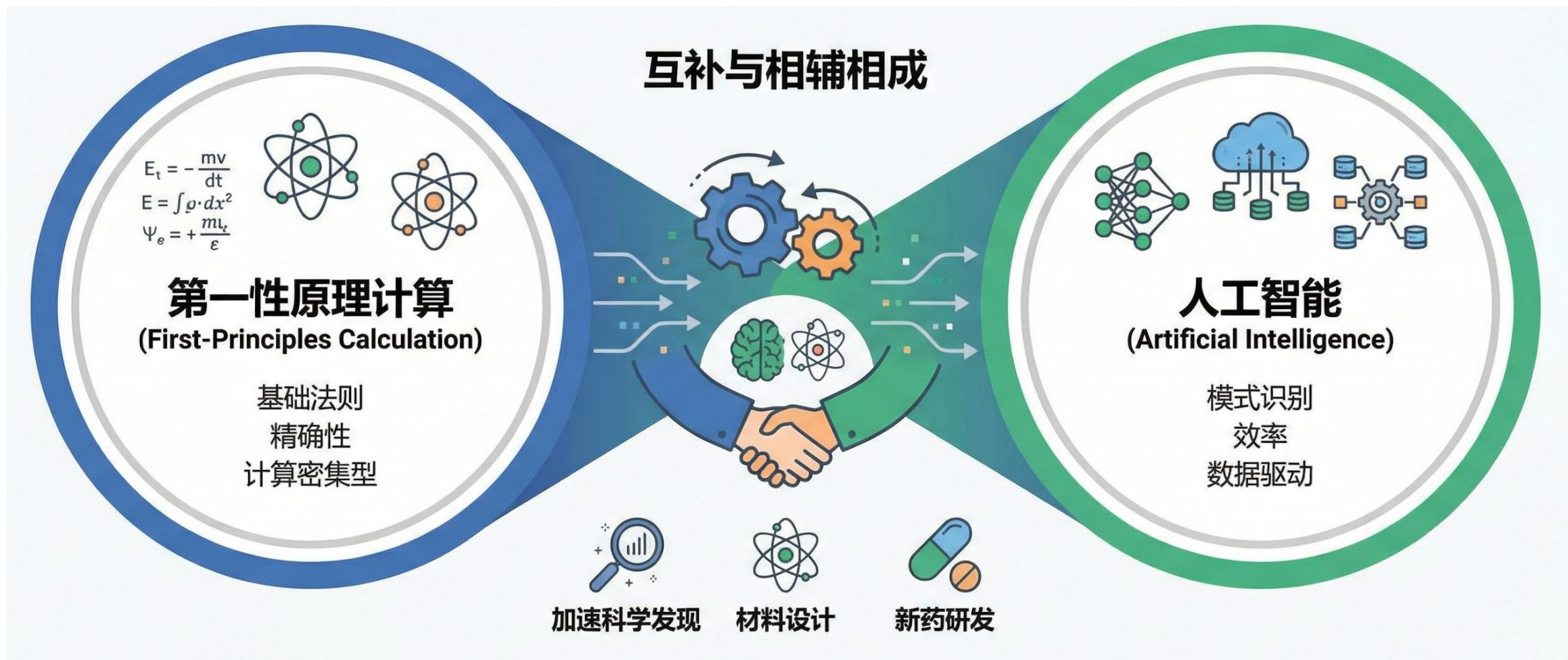
IntelliMat AI生态产品架构

面向材料研发与生产数字化的智能平台



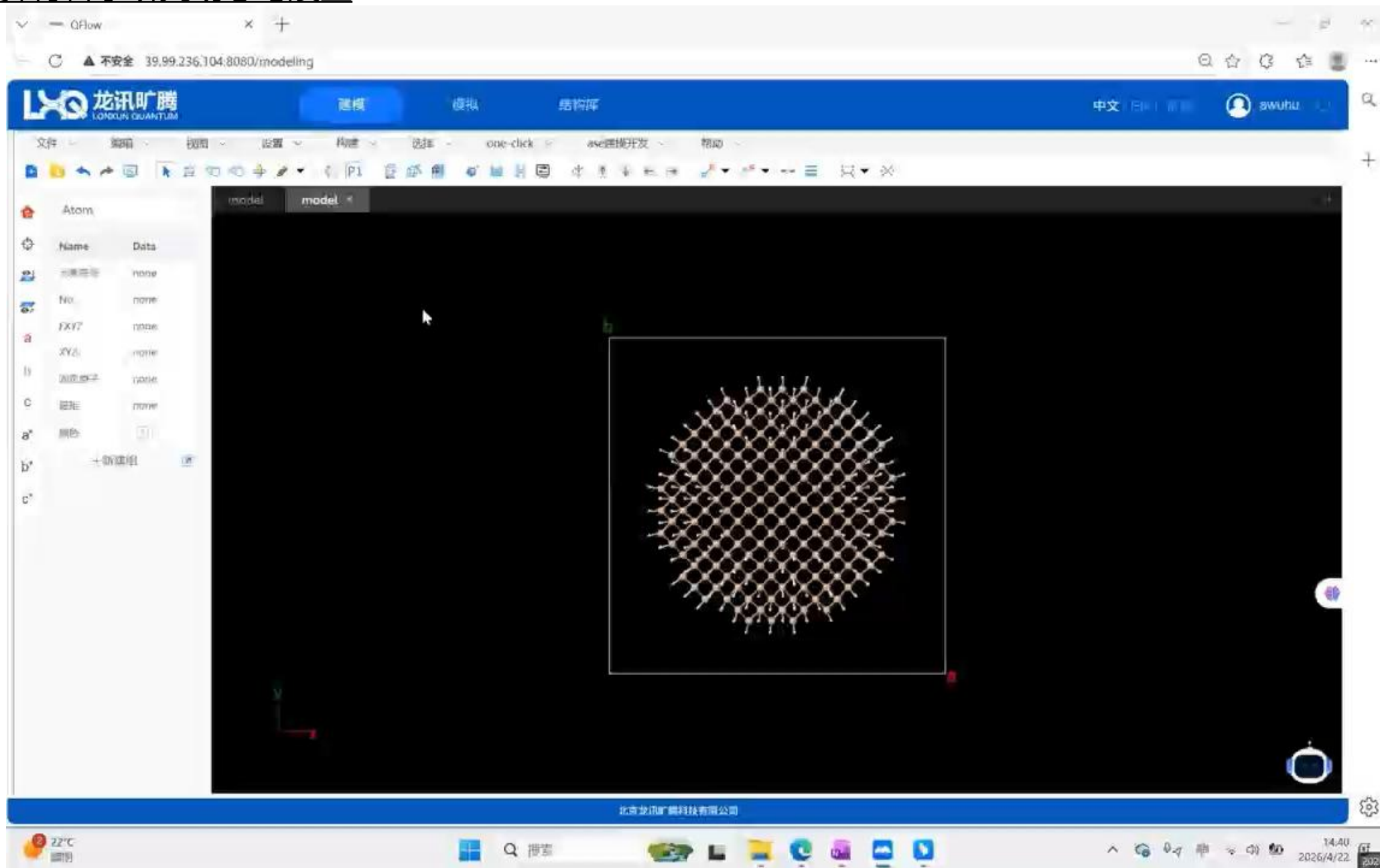
3. 计算材料学研究动态与展望

第一性原理计算与人工智能的互补协同



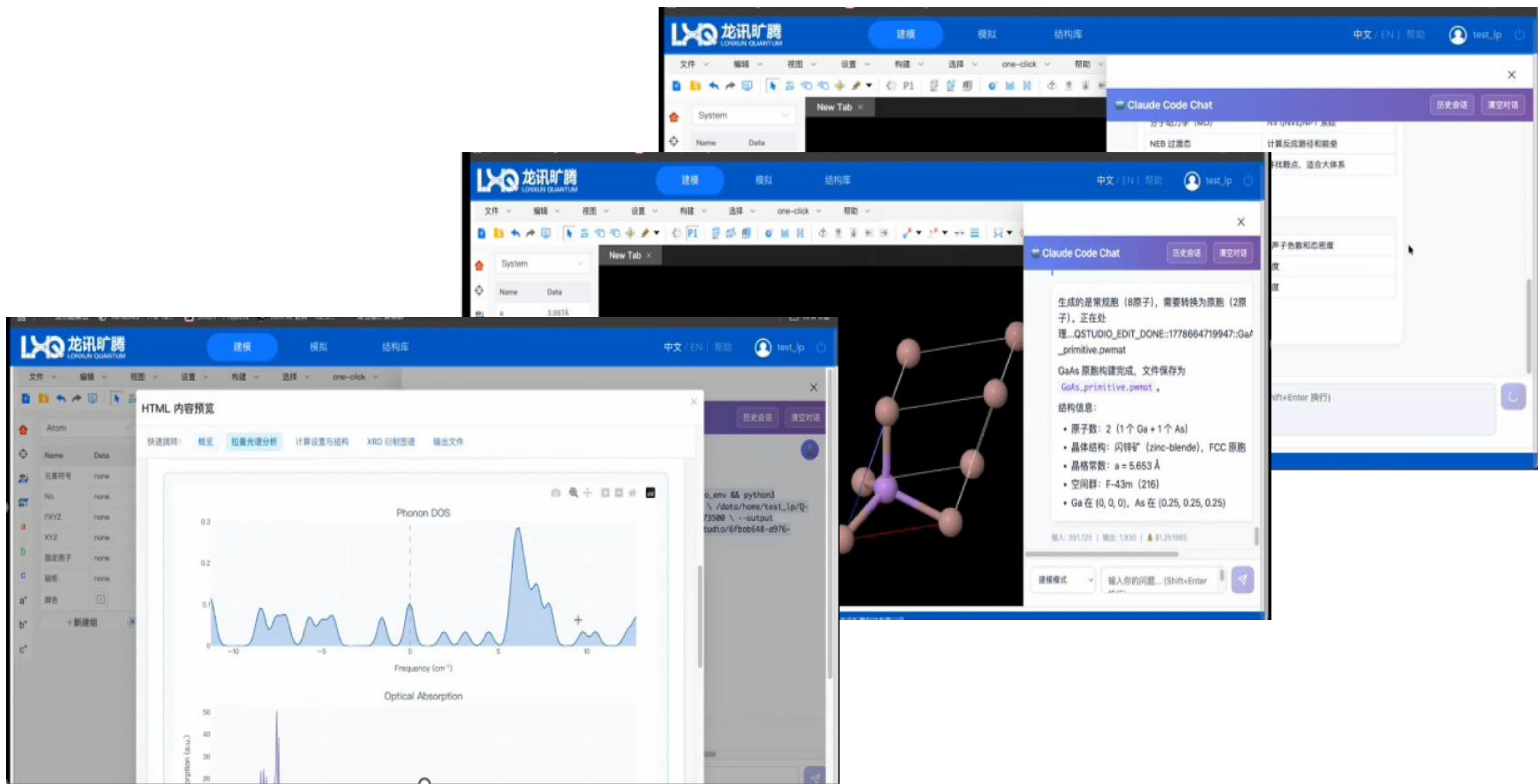
底层物理法则与数据驱动的乘数效应：用第一性原理打破‘数据黑盒’提供高精底座，用人工智能跨越‘算力瓶颈’实现指数提速，将传统数年的试错周期压缩至数月

3. 计算材料学研究动态与展望



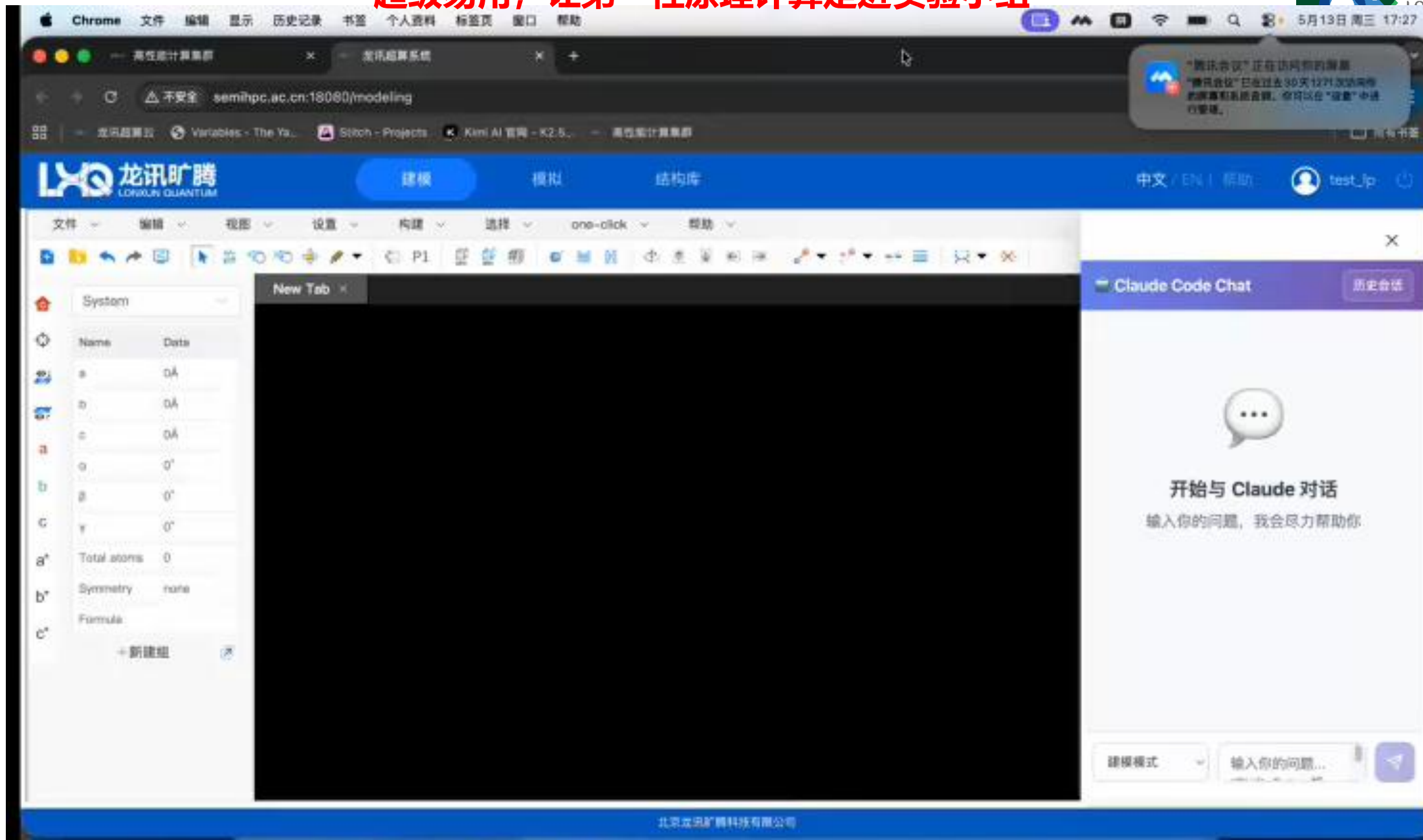
3. 计算材料学研究动态与展望

GUI + AI-Agent + PWmat



3. 计算材料学研究动态与展望

GUI + AI-Agent + PWmat 超级易用，让第一性原理计算走进实验小组

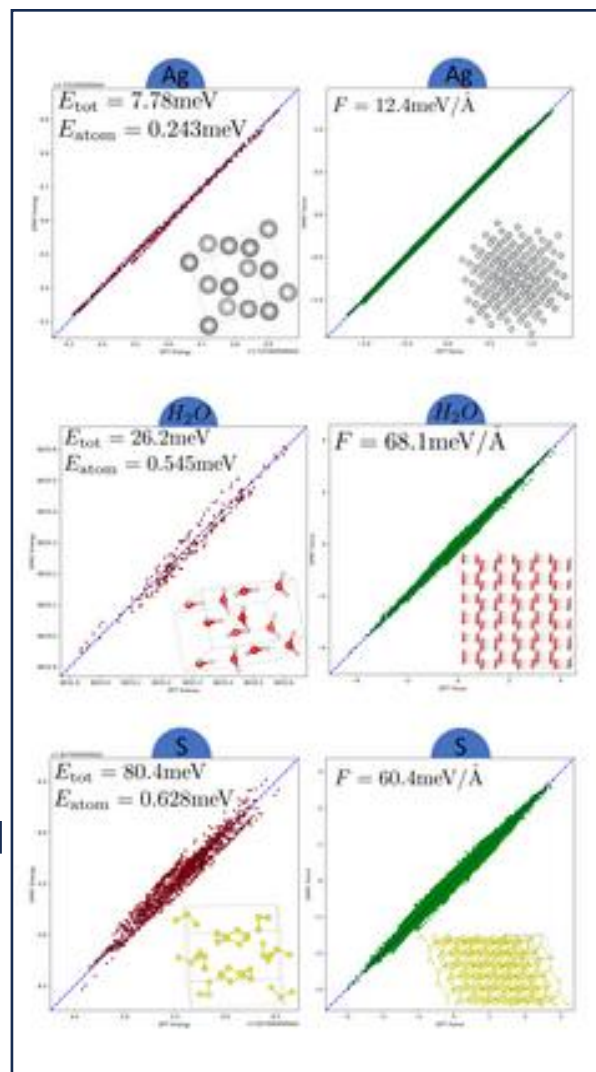
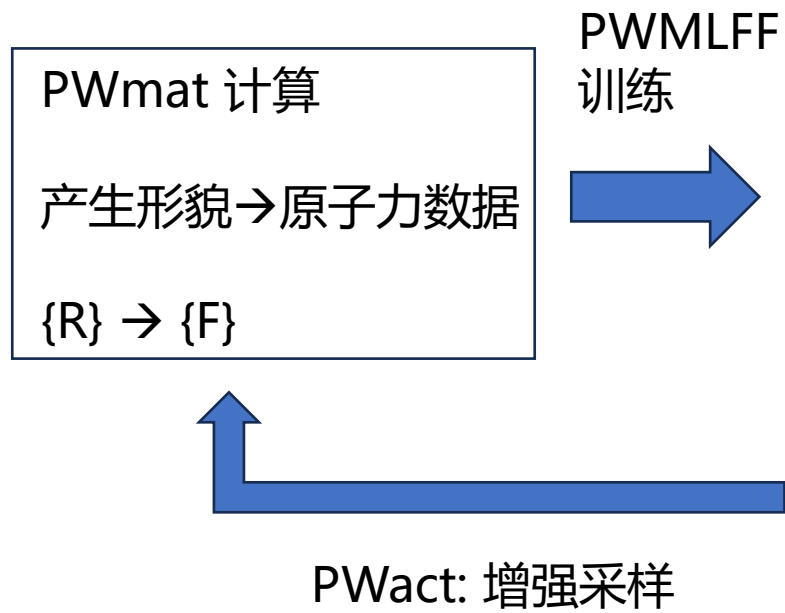


PWMLFF机器学习力场拟合、模拟过程

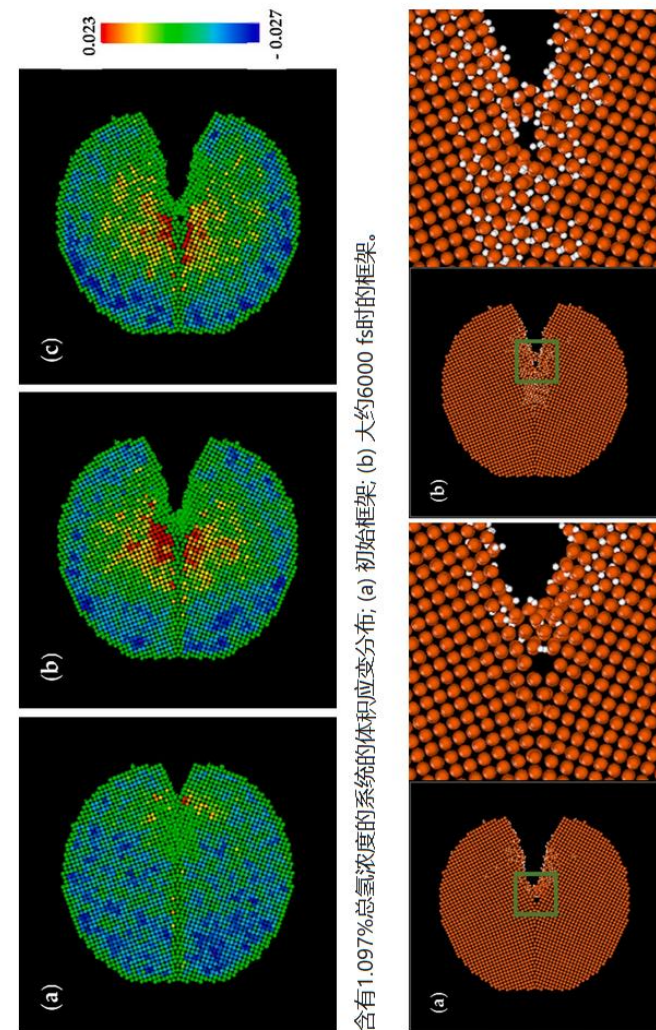
可扩大计算尺寸与时间上万倍

MLFF 精度

MLFF 模拟



应用



含有1.097%总氢浓度的系统的体积应变分布; (a) 初始框架; (b) 大约6000 fs时的框架。

含有1.097%总氢浓度的系统的体积应变分布; (a) 初始框架; (b) 大约6000 fs时的框架。

<https://matbench-discovery.materialsproject.org/>

- 有越来越多的通用大模型
- 但对应一个给定场景，还是不够准确
- 模拟速度也越来越慢

MatPL的策略

- 利用迁移学习，在大模型基础上进行微调
- 然后蒸馏出一个小模型
- 小模型可以比大模型快上百倍
- 也比开箱即用的大模型精确
- 可在两三周内得到一个小模型

Model	CPS ↑	Acc ↑	F1 ↑	DAF ↑	Prec ↑	MAE ↓	R ² ↑	K _{SRME} ↓	RMSD ↓
eSEN-30M-OAM	0.888	0.977	0.925	6.069	0.928	0.018	0.866	0.170	0.061
ORB v3	0.861	0.971	0.905	5.912	0.904	0.024	0.821	0.210	0.075
SevenNet-MF-ompa	0.845	0.969	0.901	5.825	0.890	0.021	0.867	0.317	0.064
GRACE-2L-OAM	0.837	0.963	0.880	5.774	0.883	0.023	0.862	0.294	0.067
AlphaNet-v1-OMA	0.804	0.971	0.909	5.777	0.883	0.020	0.868	0.644	0.032
DPA-3.1-3M-FT	0.802	0.963	0.884	5.667	0.866	0.023	0.869	0.469	0.069
eSEN-30M-MP	0.797	0.946	0.831	5.260	0.804	0.033	0.822	0.340	0.075
MACE-MPA-0	0.795	0.954	0.852	5.582	0.853	0.028	0.842	0.412	0.073
MatterSim v1 5M	0.767	0.959	0.862	5.852	0.895	0.024	0.863	0.574	0.073
GRACE-1L-OAM	0.761	0.944	0.824	5.255	0.803	0.031	0.842	0.516	0.072
Eqnorm MPtrj	0.756	0.929	0.786	4.844	0.741	0.040	0.799	0.408	0.084
DPA-3.1-MPtrj	0.718	0.936	0.803	5.024	0.768	0.037	0.812	0.650	0.080
SevenNet-l3i5	0.714	0.920	0.760	4.629	0.708	0.044	0.776	0.550	0.085
HIENet	0.707	0.929	0.777	4.932	0.754	0.041	0.793	0.642	0.080
MatRIS v0.5.0 MPtrj	0.681	0.938	0.809	5.049	0.772	0.037	0.803	0.861	0.077
GRACE-2L-MPtrj	0.681	0.896	0.691	4.163	0.636	0.052	0.741	0.525	0.090
MACE-MP-0	0.644	0.878	0.669	3.777	0.577	0.057	0.697	0.647	0.091
eqV2 M	0.558	0.975	0.917	6.047	0.924	0.020	0.848	1.771	0.069
ORB v2	0.529	0.965	0.880	6.041	0.924	0.028	0.824	1.732	0.097
eqV2 S DeNS	0.522	0.941	0.815	5.042	0.771	0.036	0.788	1.676	0.076
ORB v2 MPtrj	0.470	0.922	0.765	4.702	0.719	0.045	0.756	1.725	0.101
M3GNet	0.428	0.813	0.569	2.882	0.441	0.075	0.585	1.412	0.112
CHGNet	0.400	0.851	0.613	3.361	0.514	0.063	0.689	1.717	0.095
GNoME	NaN	0.955	0.829	5.523	0.844	0.035	0.785	n/a	n/a

3. 计算材料学研究动态与展望

Large scale simulation: one trillion atom MD

5.6 μm in size Mesoscale 4.5万 DCU NEP potential

1万亿原子，1秒钟一步MD

Weak scaling

Strong scaling

