

# INTERNATIONAL FORUM ON ADVANCED MATERIALS GENOME INITIATIVE

## 中外专家交流切磋 材料基因组科学技术的战略思想及关键问题

### —材料基因组科学技术论坛侧记

文/上海大学 张明

2011年6月美国总统奥巴马签署了由美国科学技术顾问委员会倡导的“Materials Genome Initiative (MGI)”科技白皮书。MGI中文被称作“材料基因组工程”。作为重新振兴美国先进制造业计划的一部分，MGI旨在通过集成理论、计算、实验和数据库手段，将新材料的发现设计、合成制备到服役应用的整个开发周期从目前的平均约20年降低一半，而且成本更低廉。毫无疑问，该项计划如果成功实现，那么将全面加快现代工业发展进程。我国学术界和材料界对MGI非常敏感并迅速做出反应，仅隔半年，2011年12月北京香山会议上师昌绪院士、徐匡迪院士等20余位两院院士和业界专家汇聚一堂，讨论具有中国特色的材料基因组工程计划——“材料科学系统工程”建设。本次香山会议对“中国版材料基因组计划”具有开创性特殊意义。此后，两院院士发起、组织材料领域学者进行了多次讨论会，中国工程院2014年11月完成了《材料科学系统工程发展战略研究-中国版材料基因组计划》咨询项目。材料基因组科学技术受到我国材料界和产业界人士的密切关注，应用成果备受期待，目前在众多地方及高校、科研院所得到布局和重点支持。

本次论坛由上海大学材料基因组工程研究院、上海材料基因组工程研究院和上海市科学技术委员会共同承办。论坛邀请了国内外材料基因组技术领域知名学者33位，围绕材料基因组战略思想、关键问题，计算技术、数据库技术的最新进展和指导先进材料研发的成功案例等方面，分18日和20日两天进行报告、交流。



MGI的缘起与发展历程、与中国材料科学系统研究的衔接以及中国MGI的现有基础和初步框架。目前，发展MGI在国内不仅得到学术界的认可，同时受到科技部、工信部的重视。陈立泉院士带来了这方面的好消息：2014年11月，中国工程院材料基因组计划咨询组与科技部高新司863新材料专家组对接召开了双方专家组联席会议，项目进入国家重大科技项目备选名单；2015年3月，中国工程院在提交科技部“十三五”国家重点研发计划专项建议书中将“材料基因组工程”作为重点专项申报。



美国政府材料基因组计划的执笔人C.Wadia博士介绍了美国MGI计划的由来、推进、规划及其在具体研究工作面临的困难和处理办法。指出MGI计划的缘由是：（1）缺乏研制新材料的工具；（2）材料研发模式的限制；（3）各学术领域的分散或缺乏交流合作。他认为，MGI的核心目标是建立包含计算技术、高通量实验技术和数据库技术的基础设施和研发文化的转变；MGI的挑战是我们目前还没有可预测的材料模型，另外除了材料发现，更重要的是要用于真正的材料设计开发全过程，尤其是制造和合成过程。谈到数据积累，C.Wadia博士说计算是自下而上，而数据是自上而下，当数据积累到一定程度，可以用于材料设计。高通量实验技术还有很长的路要走。

### ▶▶中外专家关于MGI研究的高层直接对话

本次论坛邀请国内陈立泉院士、陈难先院士和国外C.Wadia博士、Peter Voorhees教授和George Crabtree教授进行了一场关于MGI研究的高层直接对话，分享他们对MGI的深度理解，并与现场参会代表就热点问题进行了深入交流。

中国工程院材料基因组咨询项目总负责人陈立泉院士指出，“中国版材料基因组研究”的框架已初现端倪，近几年科技部将牵头并会同工信部、发改委、工程院等部委出台、实施一系列支持中国材料基因组技术发展及应用的政策和项目。

陈难先院士在原子相互作用势库研究中提出了由晶体结合能到对势的严格简捷公式，为复杂材料性能预测和材料设计建立了良好基础。

C.Wadia博士强调MGI的核心是基础设施建设和材料研发文化的转变。

George Crabtree教授认为，面对复杂材料行为研究和多功能材料研发带来的计算技术的难题，基因、介观尺度计算和在计算、合成、表征和应用间的循环沟通是3个关键因素。

美国西北大学Peter Voorhees教授作为负责人之一的Hierarchical Materials Design研究中心应用MGI技术已在Co基超合金、二维电子材料研发方面取得成功，展示了MGI技术的巨大力量。



陈难先院士



陈立泉院士



### 热烈讨论

#### 您预计MGI计划在美国几年内可以取得成功应用，产生效益？

**C.Wadia博士：**这个时间不好回答，但我们2014年12月颁布的《材料基因组计划战略规划》，公布了9大关键材料研究领域下的63个重点方向，将协调和指导联邦政府的投资和研发活动，为MGI的发展指明了具体方向，将MGI战略落到实处，其将指导并快速推动MGI的实施进程。GE公司已通过MGI方法成功实现了一种新材料设计。

**MGI方法融合材料学-物理学-力学-信息学-计算科学等学科技术，MGI研究团队应该学习其他学科的知识，引入信息学科、计算方面的人才，这方面是不是比较重要？**

**C.Wadia博士：**是的，一开始我们把MGI项目书拿给白宫IT部门的人员看时，他们惊到，这不是材料的事情，这是我们的工作。所以，必须和软件、计算机、数据管理相关领域合作，这方面都刚起步，中国在数据方面加大布局和研发，也有可能取得领先地位。

#### 超级计算能对MGI有何影响？

**C.Wadia博士：**我们现在有很大量高速的并行计算，但也许我们需要做更少的计算，而不是更多，比如利用数据库。

#### 介观尺度科学研究是否能成为今后的美国国家科学计划项目？

**George Crabtree教授：**介观尺度研究很重要，而且其实已经被包含在MGI计划中。

2015 IFAM