

2023 年创腾科技材料科学分子模拟与人工智能培训课程

分子模拟与人工智能方法在功能高分子材料设计领域的应用

一、培训主旨

功能材料是指通过光、电、磁、热、化学、生化等作用后具有特定功能的材料。功能材料涉及面广，具体包括光、电功能，磁功能，分离功能，形状记忆功能等等，因此在制造业、建筑业、医疗设备、电子产品等领域中得到了广泛应用。其中功能高分子材料具备很多优势特征，使得其更加符合经济发展和社会需求，这也使得功能高分子材料的研究工作在各国的竞争中日益白热化。

然而传统的材料研发需要大量的实验，这不仅会拖慢研发时间，还会造成极大的试错成本。随着数字化智能化的潮流不断高涨，分子模拟技术和人工智能技术已经成为了材料研发的新生力量。通过本次培训，参与者将能够了解、掌握人工智能和分子模拟在功能高分子材料科学中的应用，关注到功能高分子材料设计中的一些热点问题并快速上机操作。旨在让培训学员快速了解并掌握分子模拟及人工智能的操作原理及操作方法，将新兴科研手段快速运用到实际的研发生产当中。

为提高教学质量，让学员对分子模拟和人工智能有更深刻的理解，2023 年创腾科技暑期培训班计划于 **2023 年 7 月 27-29 日 (3 天) 在苏州举办**，特别邀请到来自**苏州大学的李有勇教授**和**上海大学的陆文聪教授**分别针对分子模拟以及机器学习来进行授课。

二、特邀嘉宾介绍



李有勇 教授 苏州大学

1997 年获得北京大学化学系学士学位，2004 年 12 月获得美国加州理工学院 (California Institute of Technology) 化学博士学位。现任苏州大学功能纳米与软物质研究院特聘教授，博士生导师。长期从事材料模拟与设计研究，工作主要集中在结合不同多尺度的模拟方法（密度泛函理论、分子力场方法、介观尺度模拟方法等）对功能纳米材料和复杂分子体系进行研究。发表学术论文 400 余篇，他引 20000 余次，H-index70，入选 2020-2022 年度科睿唯安全球高被引科学家，担任中国化学会计算化学委员会委员，担任国际期刊 Scientific Reports 编委，Frontiers in Materials 编委，曾获宝钢奖、IET 奖等奖项，入选江苏省第四期 333 高层次人才培养工程和苏州紧缺人才。



陆文聪 教授 上海大学

1986 年本科毕业于清华大学化学系物理化学专业，2000 年博士毕业于中科院上海冶金所材料物理和化学专业。现任上海大学教授、博士生导师，兼任中国化学会计算机化学专业委员会委员、《Advances in Manufacturing》SCI 期刊副主编。长期从事基于数据挖掘/机器学习的材料设计和工业优化等研究工作，开发了材料



数据挖掘在线计算平台，为材料大数据的机器学习提供了在线计算方法和模型共享功能；开发了基于大数据挖掘的工业优化系统，利用化工生产大数据建立机器学习模型，用于产品质量和产量的优化控制。先后主持国家自然科学基金项目 4 项，国家重点研发计划课题 1 项，上海科委项目 5 项，企业合作项目 20 余项。已发表学术论文 230 余篇、研究专著 3 本，获得省部级科技奖 4 项，获得国家发明专利授权 12 项。

三、培训对象

面向从事功能材料设计与合成相关领域的科研工作者；希望了解分子模拟与人工智能、对分子模拟与人工智能感兴趣、想借助分子模拟与人工智能技术来开展材料研究工作并能快速上机操作的相关行业人员。

四、培训内容

本次培训会详细地介绍分子模拟和人工智能技术的原理和使用方法，及其在功能高分子材料研究中的应用。

1、计算化学专家：苏州大学李有勇教授，为大家精讲前沿功能材料研究的机遇与挑战，分子模拟在功能材料领域的应用。

2、中国材料基因组计划专家：上海大学陆文聪教授，精讲材料大数据挖掘与分析技术、机器学习与深度学习方法论、及其不同的应用场景（如材料性能预测，配方方案、工艺过程和成本优化等）。

3、创腾科技技术专家：精讲如何利用 MaXFlow 平台提高分子模拟与人工智能在科研领域中的应用性。具体内容如下：

(1) 分子力学和分子动力学方法对功能高分子材料体系的各类性质进行分析，探究功能高分子材料体系的微观结构与宏观性能之间的关系。

- ✧ 材料的基本物性计算：材料的密度、微观结构性质等；
- ✧ 材料配方共混相容性：溶解度参数；
- ✧ 材料的加工性能探究：交联结构、玻璃化转变温度等；
- ✧ 材料的机械性能评估：应力-应变曲线等；
- ✧ 材料的阻隔性能：计算材料的扩散系数；
- ✧ 材料的耐久性研究：探究材料的老化机理、防腐性能等。
- ✧ 材料的反应性探究：分析材料在不同环境条件下，发生反应过程中产物种类、数量等随时间的变化情况，探究反应机理。

(2) 人工智能辅助预测功能材料性质：通过数据库或收集实验和模拟数据集，采用机器学习或深度学习对功能材料进行性能预测（如：预测高分子功能材料的玻璃化转变温度、预测聚合物材料的形成能等）；或自主建立模型，根据模型对结构的性质进行预测。

(3) 结合机器学习和实验方案设计，优化实验方案（如配方方案）。



五、培训形式

- 1、权威专家介绍分子模拟与人工智能的原理、方法、应用及发展方向，让学员对其有更系统全面的了解和学习。
- 2、培训将以实际的和已发表的研究案例为基础，由讲师带领学员上机操作，重现其中的重要步骤，并有多位工程师现场协助指导。
- 3、线下授课形式，现场设置了讨论与答疑环节。

六、报到及培训时间

培训地点：江苏省苏州市工业园区东长路 88 号 2.5 产业园 A3 栋 2 层

培训时间：2023 年 7 月 27~29 日（三天）全天

报到时间：

2023 年 7 月 26 日 9:30-19:00 （A2 幢 303 室 创腾科技）

2023 年 7 月 27 日 8:00-9:00 （A3 幢 2 层 培训中心）

七、培训费用

注册类型	培训费用 (1 人参加)	优惠价 7 月 20 日前缴费 或同一单位≥2 人参加	团购价 5 人以上组团 (不限同单位)	团购价 10 人以上组团 (不限同单位)
教育/政府科研客户	3600/人	3000/人	2500/人	2000/人
企业客户	4600/人	4000/人	3500/人	3000/人

*注：

- 1、培训费包含听课费、资料费、上机费、午餐。**住宿和交通费自理；需要学员自带电脑；**
- 2、由学员自行组织团购，不限同一个单位，报名时务必备注团长姓名；
- 3、收到您的报名费后工作人员会将《参训指南》通过邮件发给您；
- 4、统一开据发票内容为“**培训费**”，发票将在培训期间发给学员，若您对发票内容有特殊要求请发邮件至 market@neotrident.com 说明。

八、报名方式

• 报名方式：

- 1、在线报名：[点击此处](#)
- 2、手机识别右侧二维码，提交报名

*注：提交报名后 **1 个工作日内** 会收到成功报名的邮件，请收到确认邮件后再安排汇款



• 付费方式:

a、银行汇款 (请在汇款时务必备注参加人员姓名)

户 名: 北京创腾科技有限公司上海分公司

开户行: 招商银行上海荣科路支行

账 户: 121919707510501

b、现金支付: 培训现场可收取现金或支付宝和微信支付。

九、周边住宿 (请学员自行预定, 费用自理)

- 宾馆名称: 苏州汀兰酒店 0512-65001115
宾馆地址: 苏州工业园区星龙街 515 号
- 宾馆名称: 臻庭精选酒店 (苏州工业园区奥体中心店) 0512-62628333
宾馆地址: 苏州工业园区淞北路 330 号文华公寓 9 号楼 1 楼
- 宾馆名称: 汉庭酒店 (苏州凤凰新天地店) 0512-62805388
宾馆地址: 苏州工业园区南榭雨街 9 号凤凰新天地商业二期 41 幢 103 号

*注: 以上 3 个经济型酒店供学员参考, 周边住宿较紧张, 建议学员提早预定。

十、交通地图

培训地址: 江苏省苏州市工业园区东长路 88 号 2.5 产业园 A3 栋 2 层 (靠近产业园西 1 号门, 与星巴克同一幢)

交通路线参考:

• 苏州园区火车站

- 1、【沪宁城铁园区站广场站】上车坐 116 路公交, 【港田路绿野桥站】下车, 步行 1100 米到。全程约 1 小时 10 分钟。
- 2、打车最短距离约 11 公里, 费用约 36 元。

• 苏州站

- 1、地铁 4 号线 (同里方向) 【苏州火车站】上车, 【乐桥】下车换乘地铁 1 号线 (钟南街方向), 至【南施街】下车 1 号口出, 【园区城管大厦】上快 7 路公交, 【凤凰城首末站】下车, 步行 316 米到。全程约 1 小时 12 分钟。
- 2、打车最短距离约 21 公里, 费用约 60 元。

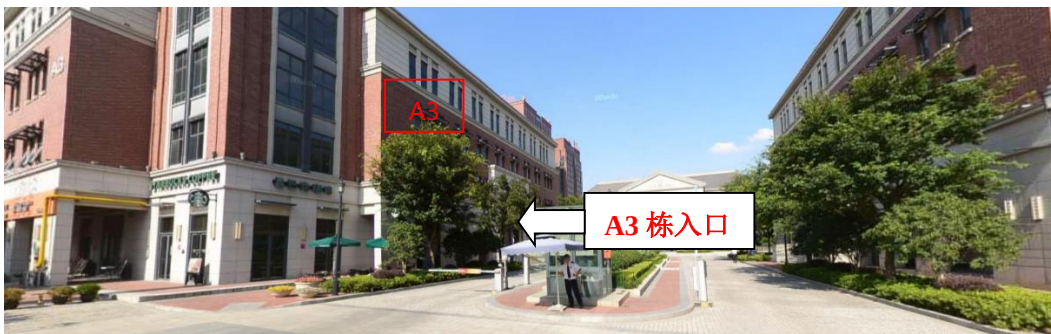
• 苏州北站

- 1、步行 1100 米到【京沪高铁苏州北站】坐快 7 路公交, 【凤凰城首末站】下车, 步行 316 米到。全程约 1 小时 48 分钟。
- 2、打车最短距离约 22 公里, 费用约 65 元。





• 地理位置



• 2.5 产业园入口处



• 左图：A3 幢入口



• 右图：A2 幢入口

十一、培训班联系人

创腾科技有限公司 市场部

电话：0512-67509707-805 或 15262446522（崔小姐）13916858963（陈小姐）

Email: market@neotrident.com

创腾科技有限公司 材料科学部

2023 年 7 月 5 日

附件：培训班日程安排



附件：培训日程安排

日期	时间	内容
第一天《功能材料的理论设计》 李有勇教授 苏州大学		
7/27	08:00-09:00	报到地点及时间 A2 幢 303 室创腾科技 (7 月 26 日 19:00 前) A3 幢 2 层 培训中心 (7 月 27 日 8:00-9:00)
	09:00-12:15	由苏州大学李有勇教授主讲, 让学员对功能材料的理论设计有更深刻的了解, 为后续研究打下基础: • 分子模拟的发展历程 • 分子模拟与人工智能的发展趋势 • 功能材料概述 • 分子模拟与人工智能在功能材料中的应用现状 • 多尺度模拟方法在功能材料中的应用
	12:15-13:30	午餐
	13:30-15:00	建立功能高分子材料体系的微观模拟参量与宏观性能之间的关系 介绍功能高分子材料的基本知识; 不同的计算性质如何与实验中功能高分子材料的研究与应用相关联, 通过精选案例讲解, 帮助学员理解在实践应用中如何选择和设计合适的功能高分子材料。
	15:00-15:15	茶歇
	15:15-15:45	MaXFlow 平台介绍 MaXFlow 背景介绍, 界面介绍, 入门操作。
	15:45-16:45	MaXFlow 结构建模 (实操) 介绍 MaxFlow 建模功能, 并准备案例上手实操。
	16:45-17:30	分子模拟技术研究功能高分子材料性质(一) 介绍 MaXFlow 平台探究功能高分子材料重点关注性质的方法和流程, 以及相关组件的原理和参数。 • 分子力学、动力学方法 • 高通量计算 workflow • APP 应用方式
	17:30-18:00	课程讨论及答疑



第二天 《机器学习与深度学习》 陆文聪教授 上海大学		
7/28	09:00-09:30	人工智能技术背景与现状 介绍目前人工智能算法的发展及现状、以及机器学习与深度学习常用算法的应用场景及特征工程的原理及使用，同时引入案例，让学员对人工智能算法的原理有更深刻的了解。
	09:30-10:45	常见机器学习算法原理 介绍目前常见的机器学习算法的原理及应用场景，包括分类模型（随机森林、逻辑回归、k近邻算法、决策树、支持向量机、梯度提升树、XGBoost、MLP、极限随机森林、AdaBoost、CatBoost、LGBM、Bagging 聚集模型、Stacking、Voting），回归模型（随机森林、线性回归、k近邻、支持向量机、决策树、梯度提升、XGBoost、MLP、极限随机森林、AdaBoost、CatBoost、高斯回归、LGBM、Bagging 聚集模型、Stacking 回归器、Voting 回归器），自动机器学习算法。分类模型与回归模型常用的评价指标。
	10:45-11:00	茶歇
	11:00-12:00	常见特征工程的原理及应用场景 介绍机器学习中所涉及到的特征工程（F 因子检验过滤、PCA 降维、互信息过滤、包装法、卡方过滤、多重共线性过滤、多项式特征、嵌套法、方差过滤、相关性过滤）的原理及意义，以及在机器学习中的应用案例介绍。
	12:00-13:30	午餐
	13:30-15:30	常见深度学习算法的原理及应用 介绍目前常见的深度学习算法（GNN、CNN、DNN、RNN 等）的发展、原理及应用场景
	15:30-15:45	茶歇
	15:45-17:15	常见深度学习算法的原理及应用 介绍目前常见的深度学习算法使用过程中涉及的网络设计、训练过程、数据处理等步骤的应用及应用过程中出现的一些问题的解决方案（如过拟合与欠拟合、数据、优化器选择、Dropout 等等）
	17:15-18:00	课程讨论及答疑



第三天 《功能高分子材料的设计与模拟精讲》

创腾科技技术专家

7/29	09:00-10:30	分子模拟技术研究功能高分子材料性质(二) (实操) 基于实际案例，介绍功能高分子材料不同性质的计算原理、计算流程、参数设置和结果分析。 • 材料的基本物性计算：材料的密度、微观结构性性质等； • 材料配方共混相容性：溶解度参数； • 材料的加工性能探究：交联结构、玻璃化转变温度等； • 材料的机械性能评估：应力-应变曲线等。
	10:30-10:45	茶歇
	10:45-11:45	分子模拟技术研究功能高分子材料性质 (三) (实操) 基于实际案例，介绍功能高分子材料不同性质的计算原理、计算流程、参数设置和结果分析。 • 材料的阻隔性能：计算材料的扩散系数； • 材料的耐久性研究：探究材料的老化机理、防腐性能等。
	11:45-12:15	分子模拟技术研究功能高分子材料性质 (四) (实操) 基于实际案例，介绍功能高分子材料不同性质的计算原理、计算流程、参数设置和结果分析。 • 材料的反应性探究：分析材料在不同环境条件下，发生反应过程中产物种类、数量等随时间的变化情况，探究反应机理。
	12:15-13:30	午餐
	13:30-14:15	人工智能案例讲解 剖析机器学习和深度学习的经典案例，展示深度学习和机器学习在功能高分子材料领域中的应用。
	14:15-15:15	搭建 AI 预测模型进行材料设计/性能预测 (实操) 演示 AI 预测模型的建立，对模型进行评估，并探讨模型用途。让学员更加详细地了解人工智能在解决功能高分子材料相关问题时的具体流程，参数设置及注意事项。 • 机器学习、深度学习组件讲解 • CNN/DNN 深度学习案例演示 • AI 预测+分子模拟方法高通量设计、预测、筛选新材料
	15:15-15:30	茶歇



	15:30-15:45	DOE 实验方案设计 (实操) 介绍 DOE 实验方案设计原理、具体操作流程、参数设置及注意事项。该方法的使用可以提高实验结果的可靠性。
	15:45-16:15	DOE-ML 实验方案设计 (实操) 介绍 DOE-ML 实验方案设计原理、具体操作流程、参数设置及注意事项，并剖析具体案例。DOE-ML 实验方案由于运用了机器学习算法，其优化效率比传统的 DOE 方法有进一步的提升。
	16:15-16:45	EDBO 优化实验方案设计 (实操) 介绍 EDBO 优化实验方案设计原理、具体操作流程、参数设置及注意事项，并通过具体案例进行深入探讨。这种方案设计可以帮助优化者更有效地利用有限的计算资源寻找到目标实验方案的最优解。
	16:45-17:30	现场答疑

