



3DEXPERIENCE®

分子模拟和数据科学 在石油化工科研板块的应用

胡锐骥 博士

达索系统技术咨询部

BIOVIA 解决方案顾问

2022-02-23

达索系统概览

目标导向的企业

艺术、科学与技术完美融合，
促进世界可持续发展

20,000 名激情洋溢的员工

140 个国籍
195 家办事处
一个全球研发中心 / 69 个实验室

12,600 家合作伙伴

软件、技术与架构
内容与在线服务
销售
咨询与系统集成商 (C&SI)
教育
研究

长期进取

大股东控股
收入：40.56亿欧元*
营业利润率：32%*

*截至2019财年 / 非IFRS

270,000 家客户

140个国家的11个行业
2500万用户
颠覆性的 3DEXPERIENCE 平台

达索系统覆盖

总部

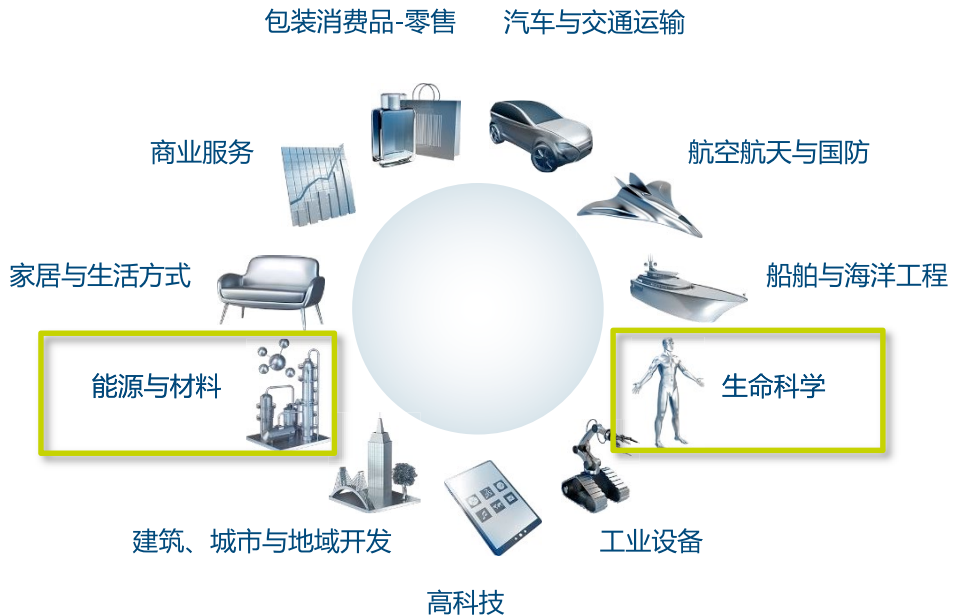
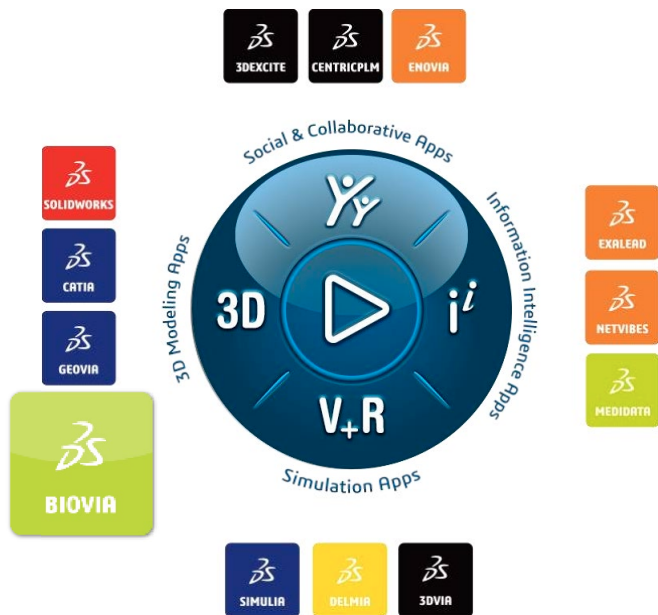
- ① 全球及欧洲大区总部 / 巴黎
- ② 美洲总部 / 波士顿
- ③ 亚太区总部/上海

- 研发实验室 (69个)
- 达索系统办事处 (195个)



3DEXPERIENCE® 驱动我们的品牌应用...

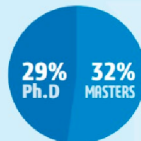
...服务11大行业



BIOVIA品牌概览



高学历员工分布



超过
30%

员工作为专家受邀在学术和行业会议发表报告



超过

38%
员工拥有超过
10 YEARS

相关行业背景



超过

20%

员工在科研机构
兼任教职



22%
年度营收
投资于研发



超过
2,000
全球商业客户



BIOVIA
服务于超过
\$1 TRILLION
全球研发项目



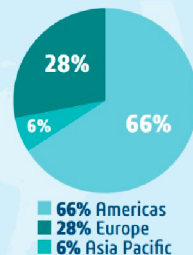
超过
25 YEARS
专注科学行业
数字化转型



基于BIOVIA产品超过
20,000
经过同行评议的
科研论文发表



1.4 MILLION
全球用户



BIOVIA

源自科学,服务科学



DASSAULT
SYSTÈMES



BIOVIA全球超过2,000客户



全球制药25强中的25家



全球生物科技25强中的25家



全球化工25强中的20家



全球快消品5强中的4家



全球石油天然气10强中的5家



全球航空科技5强中的3家

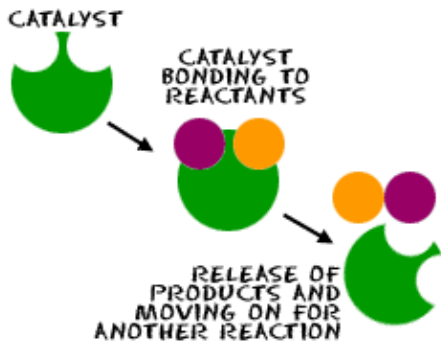


国际政府及学术单位

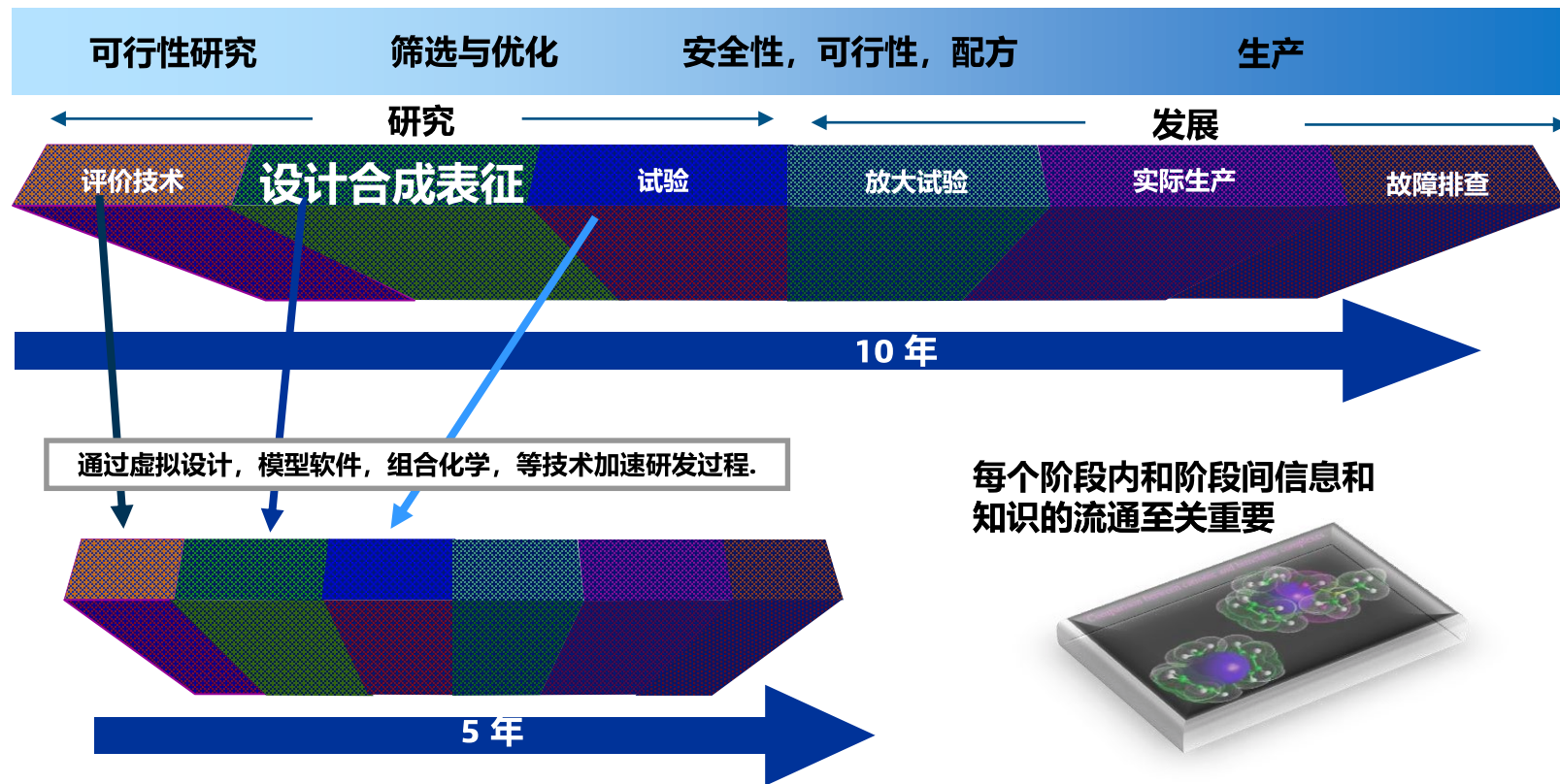


达索系统石油化工解决方案

- 在石油炼制与化工领域中，**催化剂**的使用是非常普遍的，它的性能优劣将直接影响整个行业的效益。



达索系统石油化工解决方案



达索系统石油化工科研板块解决方案

重复研究，运营孤岛，
昂贵的供应链等

现在...

- 企业决策
- 转型规划
- 质量合规

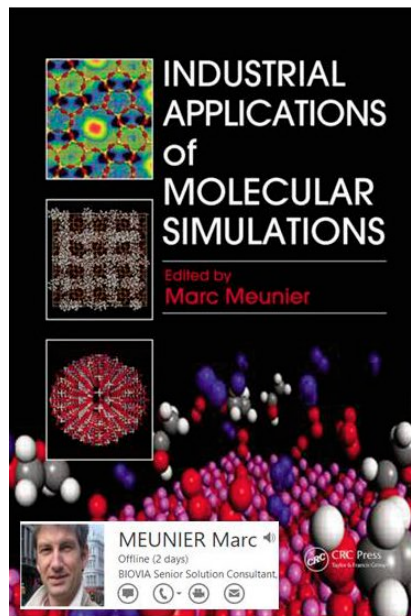


以前...





达索系统石油化工科研板块解决方案



达索系统石油化工科研板块解决方案



2. 材料虚拟仿真

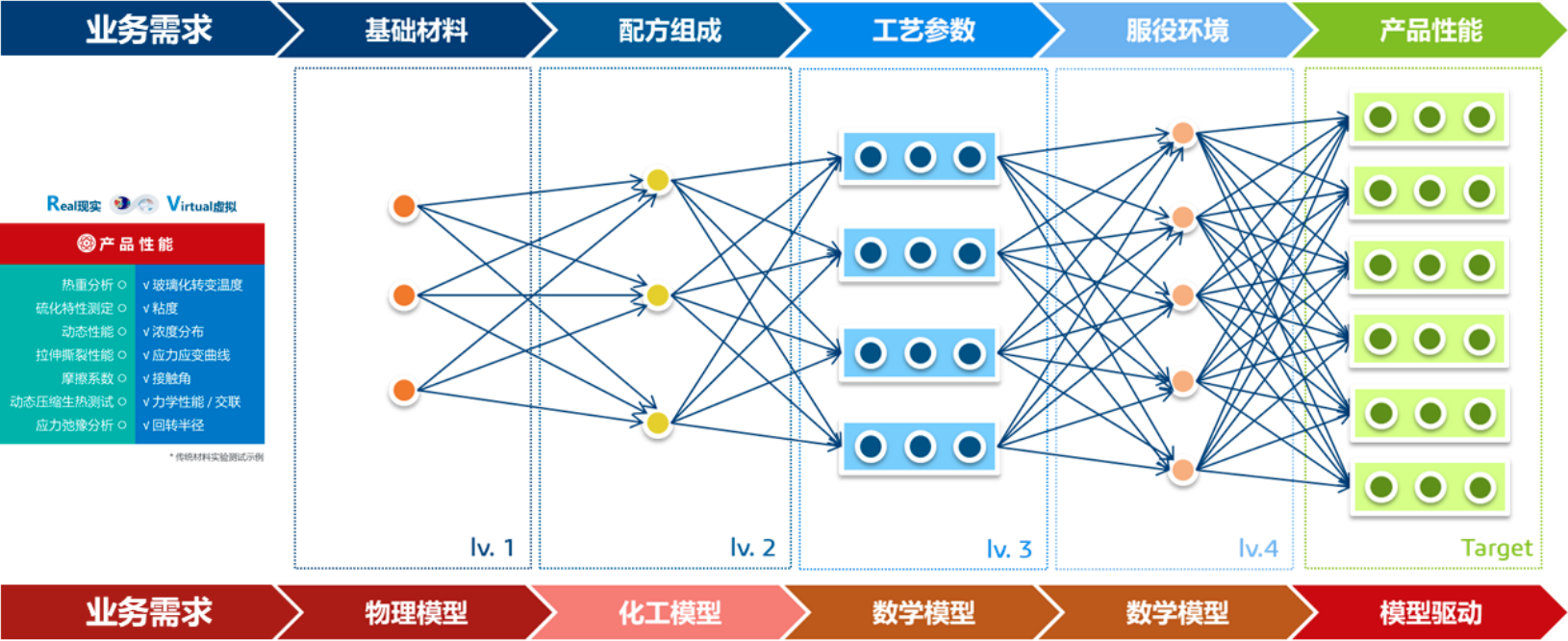
3. 研发数据智能

1. 一体化实验室



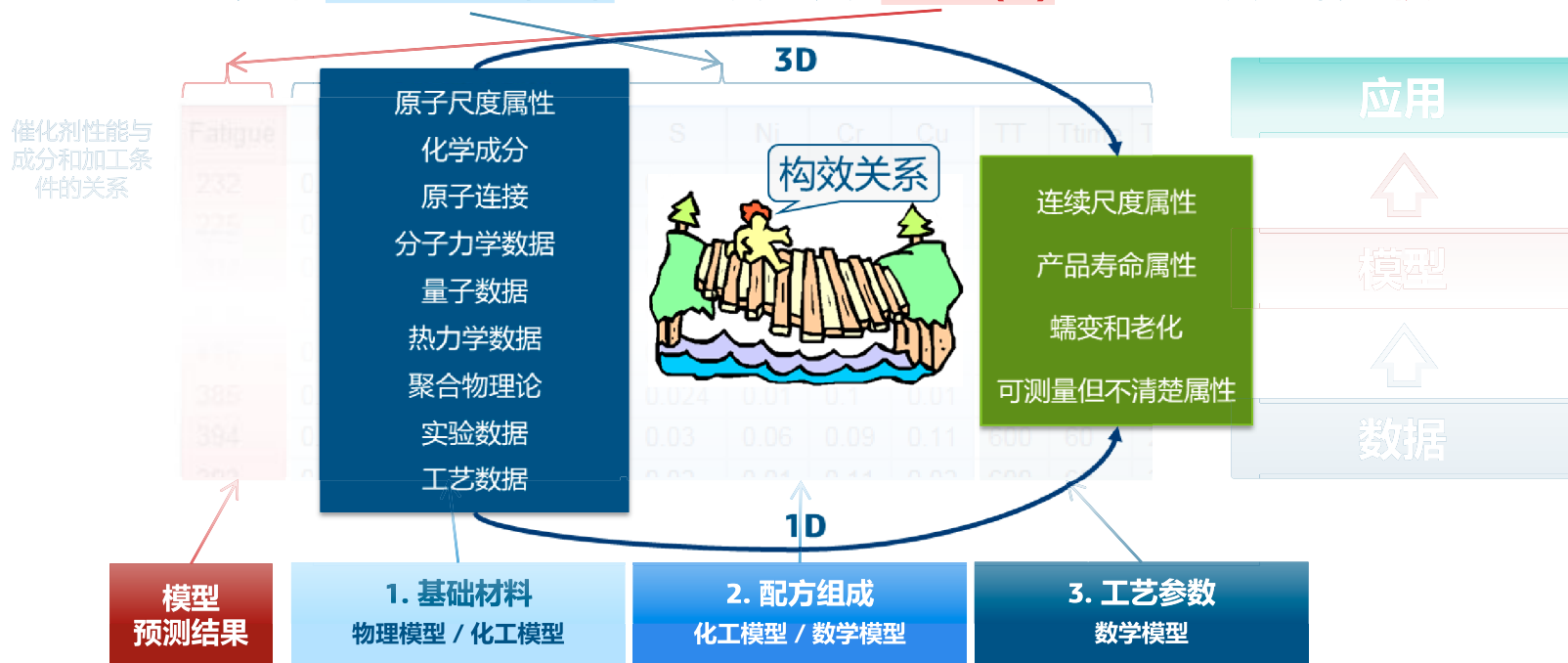
- 减少实体实验，降低新产品研发成本；
- 缩短产品创新设计周期；
- 增强产品竞争力，企业最可持续。

达索系统石油化工科研板块解决方案

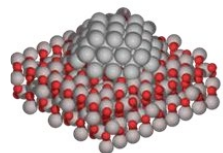


达索系统石油化工科研板块解决方案

基于研发数据的机器学习，是从数据集中提炼知识得到规律，使用多个**输入参数 (X's)** 建立规则预测**性能 (Y)**。这组规则即为**模型**。



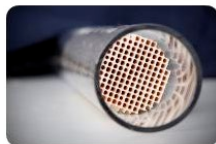
达索系统石油化工科研板块解决方案



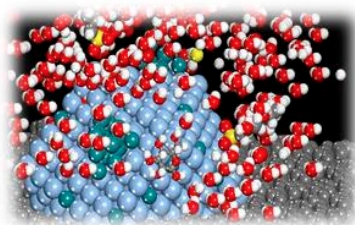
Lv 1.性能预测



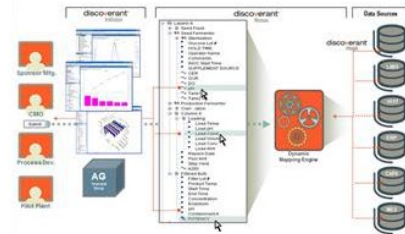
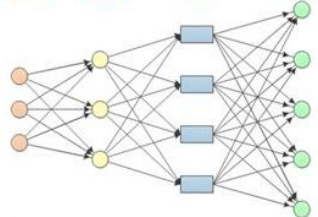
Lv 2.配方筛选



Lv 3.工艺优化



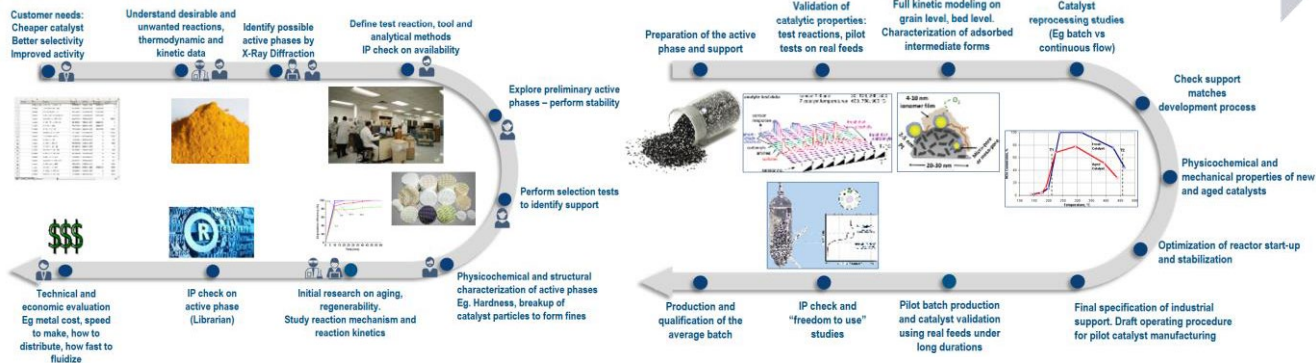
原材料 添加剂 加工 测试



Level 1. 性能预测

Level 2. 配方筛选

Level 3. 工艺优化



智能增强材料设计—Level 1.性能预测

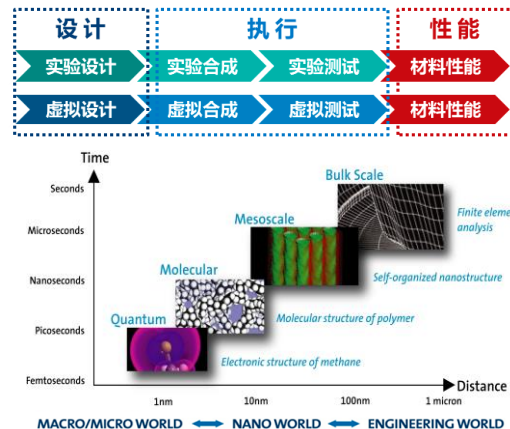
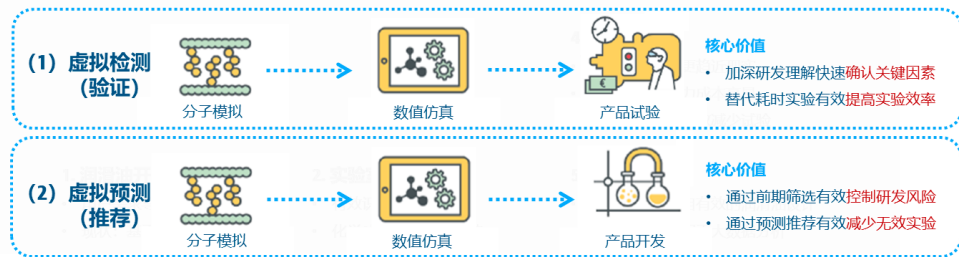
- 在材料开发和设计中可以通过引入基于量子力学的分子模拟进行虚拟设计：

- 材料选型和性质预测
- 工艺优化和虚拟实验
- 高通量虚拟筛选

- 能够基于薛定谔方程通过表征电子结构变化来评价**化学反应**。

- 在化工材料开发中使用的主要包括：量子力学，分子力学和介观力学。

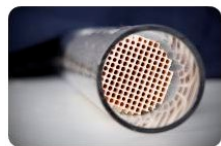
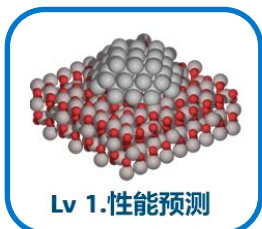
注意：现阶段分子模拟计算能力受限于方法和算力，需要进行有效的分子建模，并不适于直接处理超长时间尺度和超大体系的直接仿真计算。



Real现实	Virtual虚拟
产品性能	
热重分析	√ 玻璃化转变温度
硫化特性测定	√ 粘度
动态性能	√ 浓度分布
拉伸撕裂性能	√ 应力应变曲线
摩擦系数	√ 接触角
动态压缩生热测试	√ 力学性能 / 交联
应力弛豫分析	√ 回转半径

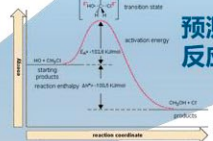
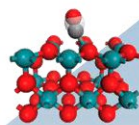
* 传统材料实验测试示例

通过信息化改善研究和协作，数据汇总和分析，物料注册，全球化学
品采购，库存管理，质量和合规以及人员健康和安全。



系统模型

材料/反应评价

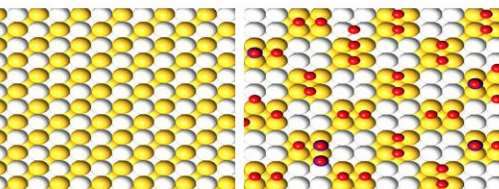


$$k = Ae^{\frac{E_a}{RT}}$$

预测催化剂表面的
吸附质分布



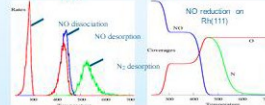
建立和验证化学机理
的V+R模型



排放预测

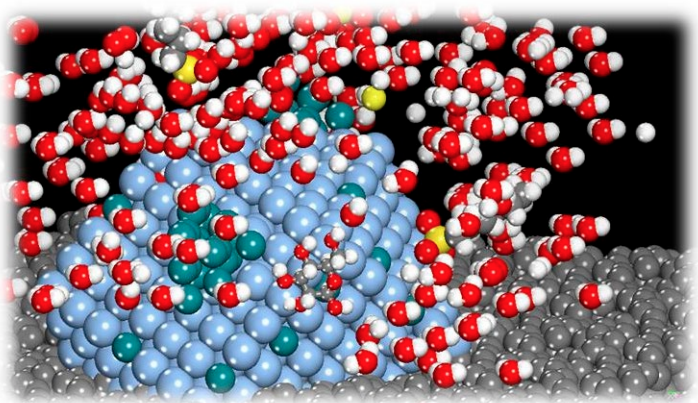


$$\frac{d[A]}{dt} = -k[A][B]$$



预测反应物和生
成物浓度

智能增强材料设计—Level 1.性能预测



壳牌催化剂技术创新中心

核心目标 Main Objective

- 通过单一界面和数据库连接与催化剂开发相关的所有系统
- 灵活地添加新方法和计算

数据量 Numbers

- 3个位置，每个用户1-15个设备/方法，数据量在每个实验的每30秒每天1个数据点到1个数据点之间变化
- 实验涉及一种催化剂材料的制备/老化/测试/分析

收益 Benefit

- 缩短开发新催化剂的时间
- 更好地利用实验和历史数据。
- 更轻松地在全球网络中共享大量数据

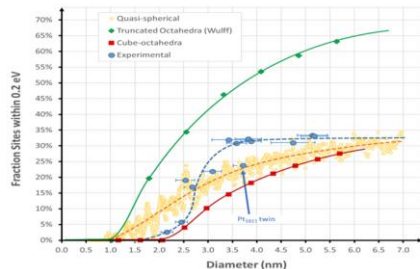
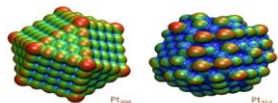
建设经验 Achieved

- 达索BIOVIA能够快速提供满足所有四项挑战的系统
- 框架+插件的方法非常成功
- Shell现在有一个他们可以使用的系统并自己扩展系统

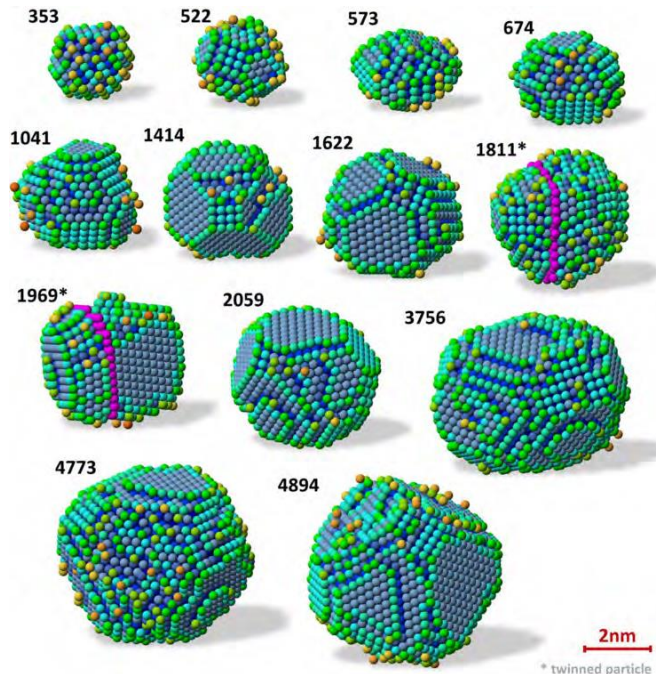
智能增强材料设计—Level 1.性能预测

预测Pt纳米颗粒的催化活性

- 基于ONETEP对Pt纳米颗粒的表面结合能进行评价，预测催化活性
- 使用电子和结构相关信息能够有效表征纳米材料特征
- 研究人员对Pt纳米催化剂在ORR氧还原反应中不同位点的催化活性进行了评价

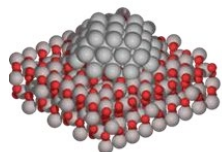


J. Aarons, L. Jones, A. Varambhia, K. E. MacArthur, D. Ozkaya, M. Sarwar, C.-K. Skylaris, and P. D. Nellist. *Nano Lett.* 17 (2017) 4003-4012



基于ADF-STEM获得的实验纳米颗粒

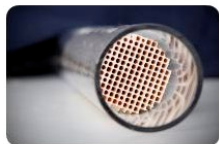
智能增强材料设计—Level 2. 配方筛选



Lv 1.性能预测



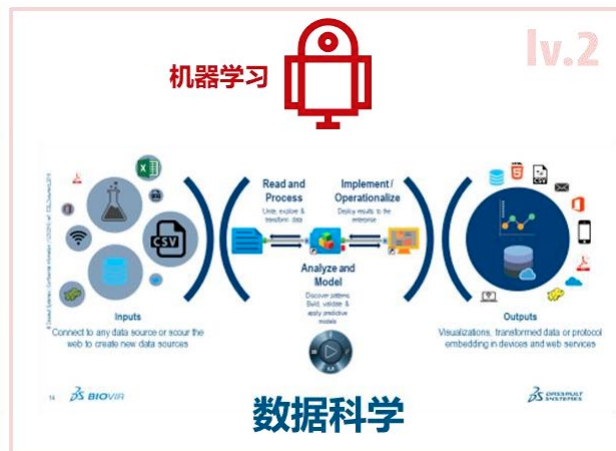
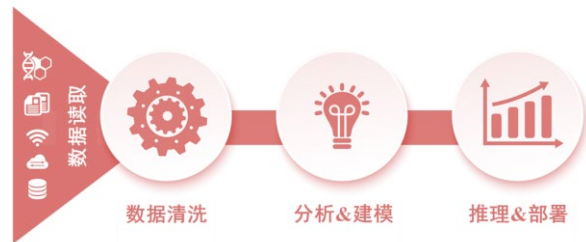
Lv 2.配方筛选



Lv 3.工艺优化

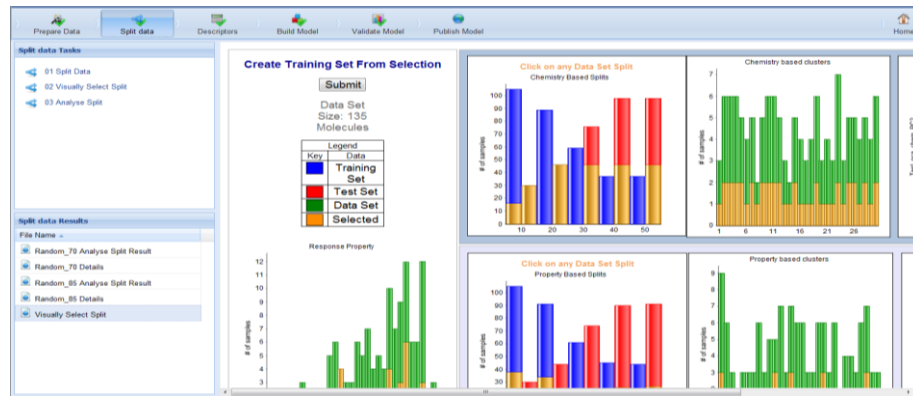
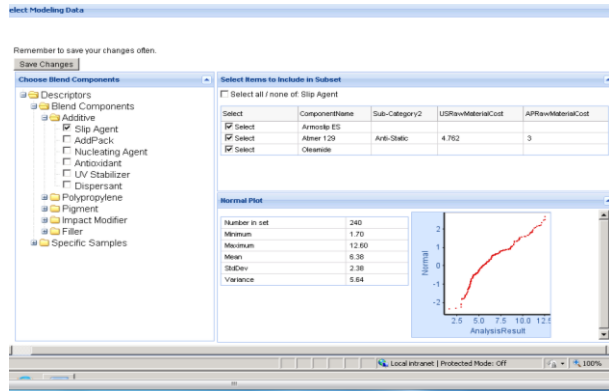
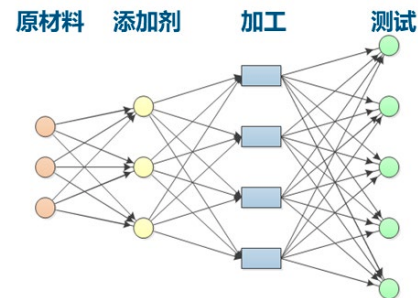
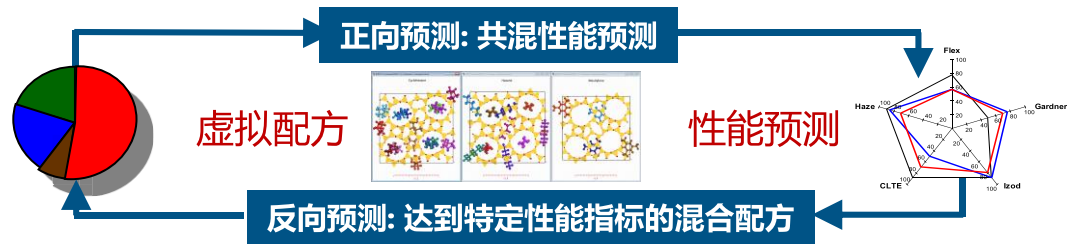
IF WE

预测 / 优化

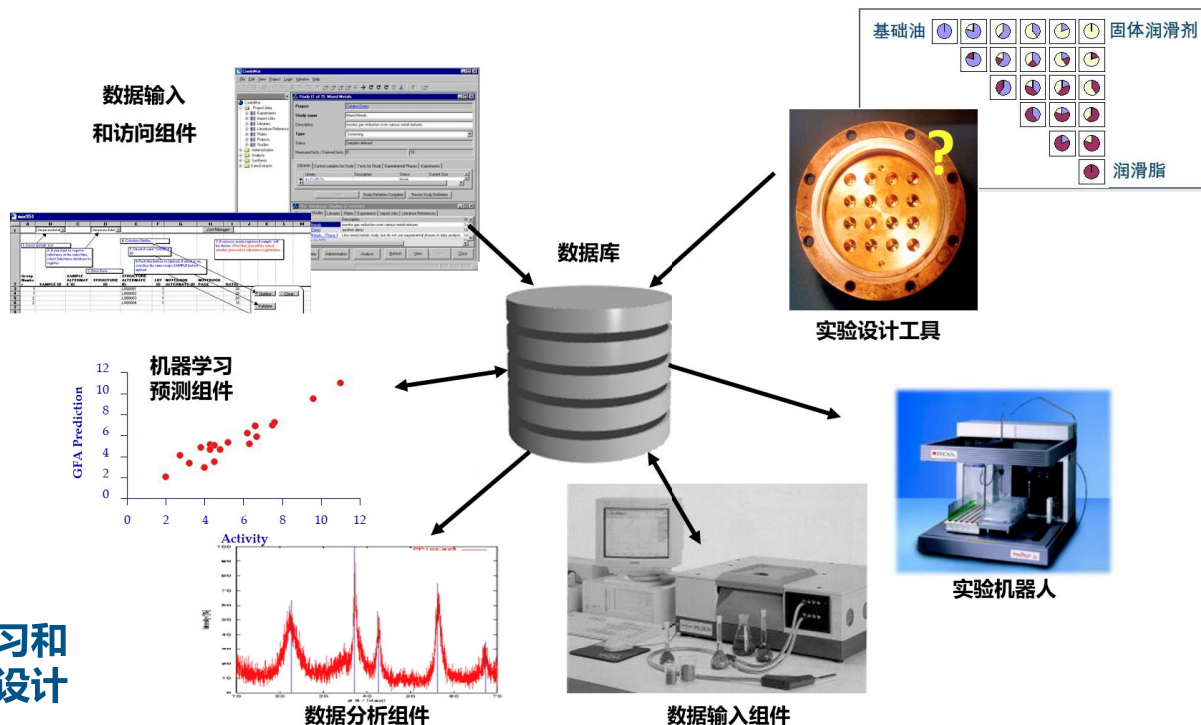


智能增强材料设计—Level 2. 配方筛选

ExxonMobil

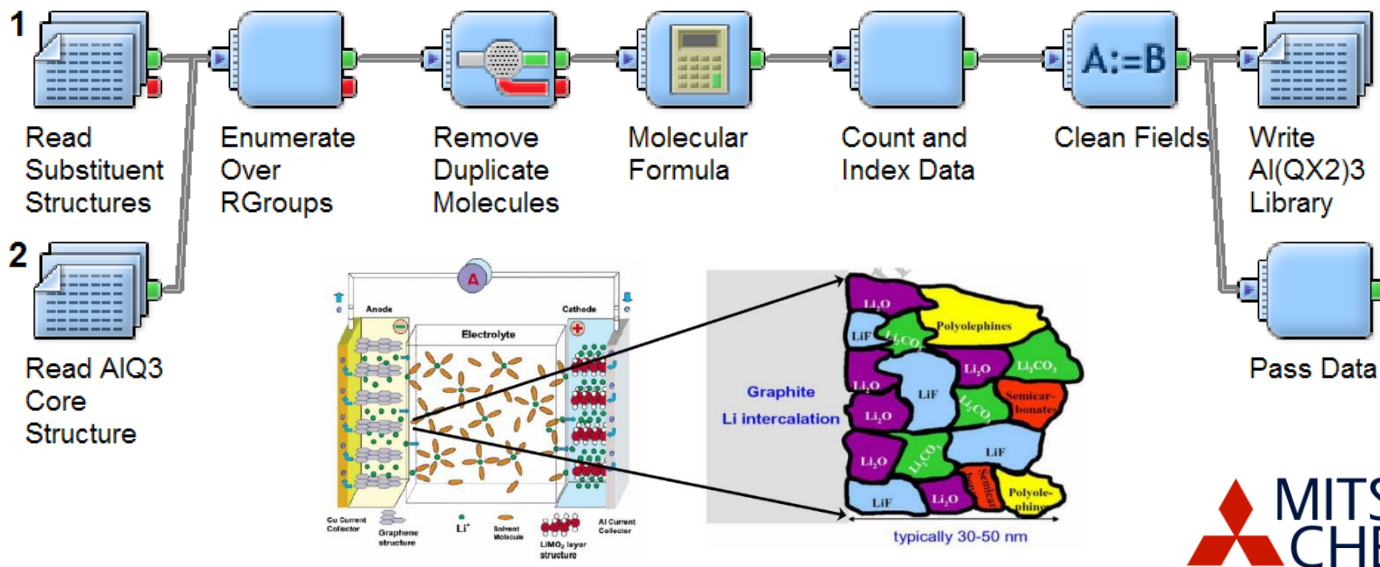


智能增强材料设计—Level 2. 配方筛选



英国石油使用机器学习和高通量技术进行配方设计

智能增强材料设计—Level 2. 配方筛选



配方添加剂高通量筛选

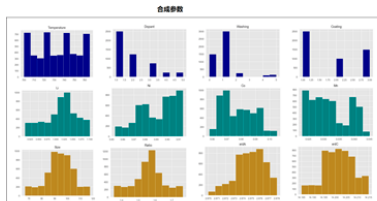
智能增强材料设计—Level 3. 工艺优化



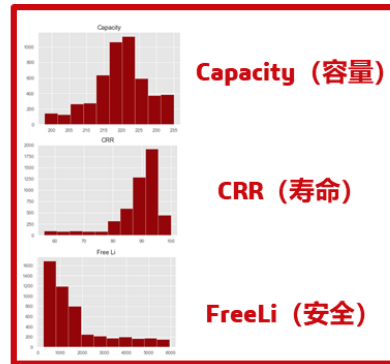
智能增强材料设计—Level 3. 工艺优化



Composition	Temperature	Dopant	Washing	Coting	Li(mol)	Ni(mol)	Co(mol)	Mn(mol)	Size(nm)	Ration	xrdA	xrdC
0, 1	(700,765)	Al,Bi,Un,Ti,Zr	0,1,2,3,4,5	M,W,N	(0.910, 1.100)	(0.853, 0.914)	(0.058, 0.105)	(0.023, 0.045)	(66.90, 117.50)	(1.354, 1.766)	(2.870, 2.878)	(14.185, 14.215)



- 采用共沉淀法合成NMC材料的关键步骤包含：掺杂，煅烧，表面修饰和材料清洗等步骤。针对这些关键工艺参数和材料特征，选取**500**组实验数据的**13**个特征量作为输入进行**机器学习**，预测电池**容量**，**寿命**和**安全**指标。



Capacity (容量)

CRR (寿命)

FreeLi (安全)

智能增强材料设计—Level 3. 工艺优化



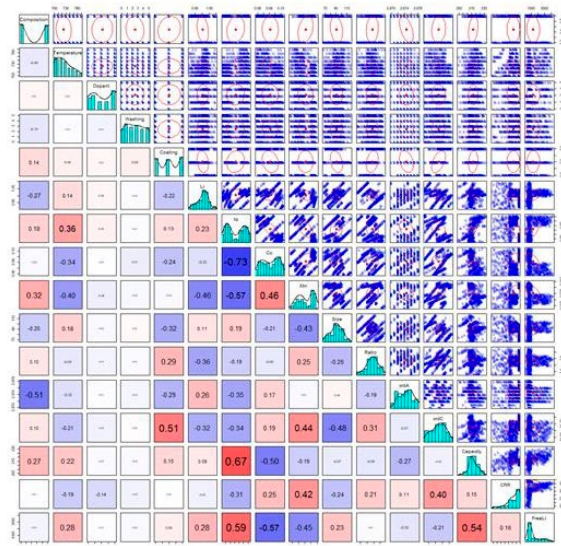
数据
Data



模型
Model

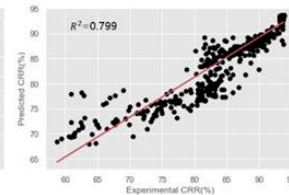
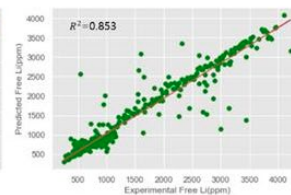
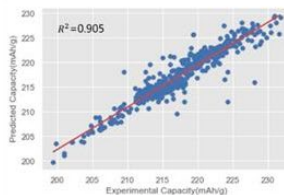


预测
Prediction



变量特征工程

预测模型	Capacity		CRR		Free Li	
	R-Squared	RMSE	R-Squared	RMSE	R-Squared	RMSE
Ridge Regression	0.652	5.973	0.581	7.001	0.576	1177.174
Support Vector Regression	0.655	4.563	0.624	5.379	0.736	738.980
Random Forest	0.850	2.980	0.799	3.745	0.900	452.915
Neural Networks	0.239	6.867	0.187	7.797	0.586	924.209
XGBoost	0.853	2.955	0.796	3.805	0.905	442.983



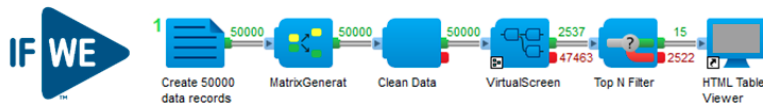
预测模型评估

智能增强材料设计—Level 3. 工艺优化



逆向工程和目标工艺筛选

- 采用“工艺机器人”对样本空间内50,000组虚拟工艺参数组合按照电池寿命CRR > 93%，NMC样品残锂含量 < 1300 ppm 作为目标进行虚拟筛选，所得15组最优工艺参数组合如下。



Composition	Temperature	Dopant	Washing	Coating	Li	Ni	Co	Mn	Size	Ratio	xrdA	xrdC	Capacity	CRR	FreeLi
TRUE	700	Un	3	W	1.013	1.277	0.092	0.060	71.444	1.605	2.872	14.208	220.46	94.384	867.91
TRUE	710	Un	0	W	1.032	1.303	0.095	0.064	75.099	1.631	2.872	14.209	220.13	94.13	857.09
TRUE	720	Un	3	W	1.037	1.311	0.096	0.065	76.219	1.639	2.872	14.209	220.27	94.099	862.38
TRUE	730	Un	0	W	1.029	1.299	0.095	0.063	74.587	1.627	2.872	14.209	220.49	93.977	878.44
TRUE	720	Un	0	W	1.005	1.266	0.091	0.059	69.788	1.594	2.872	14.207	220.63	93.864	874.42
TRUE	710	Zr	3	W	1.022	1.289	0.094	0.062	73.100	1.617	2.872	14.208	219.75	93.432	755.43
TRUE	710	Al	2	W	1.048	1.326	0.098	0.067	78.383	1.654	2.872	14.210	219.36	93.374	805.06
TRUE	700	Al	1	W	1.015	1.279	0.093	0.061	71.724	1.607	2.872	14.208	219.94	93.348	796.99
TRUE	700	Al	0	W	1.019	1.286	0.093	0.061	72.680	1.614	2.872	14.208	219.85	93.325	787.29
TRUE	710	Al	5	W	1.014	1.279	0.092	0.061	71.672	1.607	2.872	14.208	219.83	93.306	781.56
TRUE	720	Al	3	W	1.013	1.277	0.092	0.060	71.430	1.605	2.872	14.208	220.21	93.297	807.97
TRUE	710	Zr	4	W	1.003	1.263	0.091	0.059	69.471	1.592	2.872	14.207	219.78	93.276	756.44
TRUE	730	Al	3	W	1.043	1.319	0.097	0.066	77.455	1.648	2.872	14.210	219.75	93.243	823.67
TRUE	730	Bi	4	W	1.012	1.275	0.092	0.060	71.141	1.603	2.872	14.208	220.3	93.109	785
TRUE	720	Bi	3	W	1.048	1.326	0.098	0.067	78.332	1.654	2.872	14.210	219.62	93.081	747.89

工艺参数价值评估

关键性	Capacity (容量)	CRR (寿命)	Free Li (安全)
1	Ni	Temperature	Washing
2	xrdA	Dopant	Temperature
3	Temperature	Washing	Dopant

- 评价工艺参数对电池性能影响敏感度：
 - 电池容量与Ni含量，NMC材料晶格参数，煅烧温度相关性显著；
 - 电池寿命受煅烧温度，掺杂元素和洗涤条件影响较大；
 - 高容量电池安全与洗涤条件，煅烧温度和掺杂元素密切相关。

控制Ni含量和煅烧温度有利于提高电池性能

智能增强材料设计—Level 3. 工艺优化

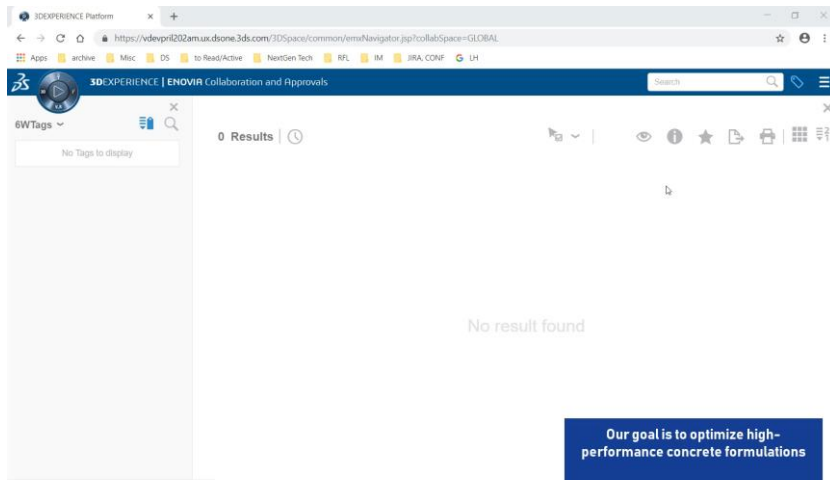
核心价值

- 仿真&配方一体化
- 数据挖掘与机器学习
- 协同实验室与产品开发
- 集成材料管理 / 实时合规管理

核心角色

-  C – 配方 / 工艺工程师
-  C – 研发项目经理
-  C – 数据工程师

BIOVIA 智能增强材料设计



智能增强材料设计 Demo

价值一览



14%
12%
10%
8%
6%
4%
2%
0%
-2%
-4%

2%

-2%

10%

15%

8%

提高工
厂整体效率

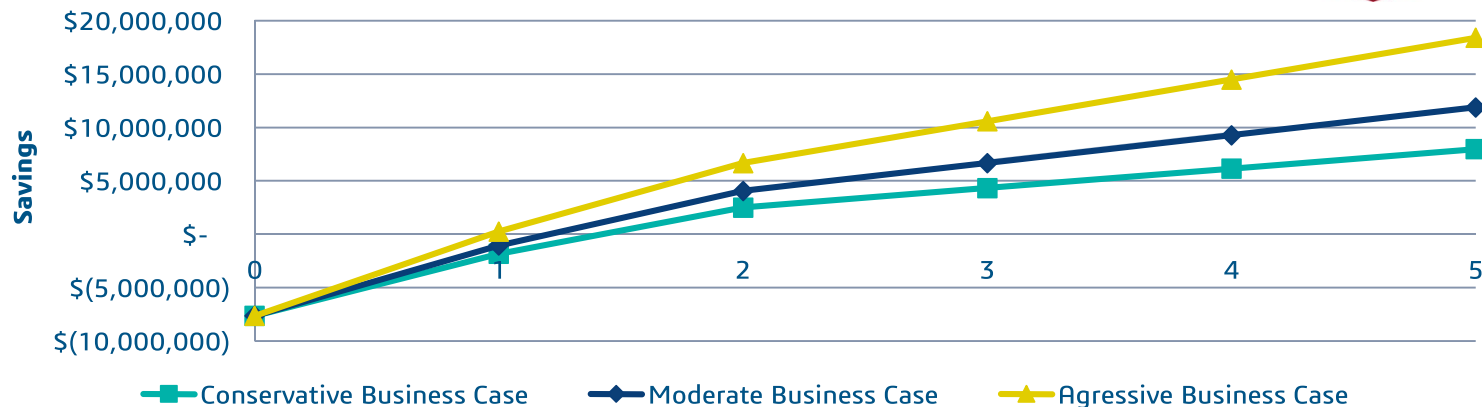
减少材料使
用

提高整体
研发效率

增加新配
方产出

缩短新配方研
发时间

雪佛龙预计年度节省



保守估计

- NPV = \$1.0 M
- Payback = 3.5 Years
- IRR = 24%

正常估计

- NPV = \$6.2M
- Payback = 2.8 Years
- IRR = 43%

不保守估计

- NPV = \$14.8M
- Payback = 2.1 Years
- IRR = 70%

达索系统石油化工科研板块解决方案

$$V \rightarrow V+ \rightarrow V+R$$

• 材料虚拟仿真

• 研发数据智能

• 一体化实验室



- 减少实体实验降低研发成本;
- 缩短产品创新设计周期;
- 增强产品竞争力。

