

中国材料大会 2025

暨新材料科研仪器与设备展

7 月 5-8 日, 2025

福建 厦门

E06-材料基因与人工智能
E06-Materials Genome and Artificial
Intelligence

主办单位

中国材料研究学会

会议网址: <https://cmc2025.scimeeting.cn>



E06 材料基因与人工智能分会

分会主席：张统一、谢建新、段文晖、赵旭山、刘轶

拟交流类型：邀请报告

10412

多智能体具身智能研究进展及趋势

王钢*

北京理工大学

具身人工智能（Embodied AI）是人工智能前沿热点研究方向，其核心在于将 AI 系统与物理实体深度融合，使其具备感知、推理和与环境交互的能力。随着深度学习、强化学习以及大语言模型技术的持续突破，具身 AI 在机器人、医疗、交通、制造等领域展现出广阔前景。真实世界中的具身 AI 不仅需要与环境交互，更需实现多智能体之间的协作与实时学习。本报告梳理了该多智能体 AI 领域的发展现状、关键成果及未来挑战，旨在为多智能体具身智能的深入研究与技术创新提供有价值的理论参考和发展指引。

拟交流类型：邀请报告

10416

AI+科学仪器：高通量智能实验设备研发与系统集成

公维博*

苏州国家实验室，前沿材料研究部

传统的材料研发范式逐渐无法解决当下面临的极端复杂的材料学问题，AI 技术正在推动材料研发范式变革，该变革需要自动化、数据科学、人工智能等尖端技术与材料科学的无缝集成和高效协同，对科学仪器和实验设备的研发创新与系统性集成提出了前所未有的新要求。材料领域的科学仪器正经历智能化、高通量化的转型。本次报告我们将聚焦“AI+科学仪器”的交叉领域，结合苏州国家实验室在材料智能研发方向的布局，介绍团队在高通量智能实验设备中的研发创新，系统集成策略，关键软硬件技术与挑战，以及相关系统的部署案例；同时，以仪器开发和集成工程化的视角，分享如何有效落地部署智能实验设备、决策算法以及闭环自主迭代系统，解决复杂材料实验效率低，周期长，数据解析困难的问题。

拟交流类型：邀请报告

6354

MatPilot——人机融合框架下大模型赋能的 AI 材料学家

倪子淇，叶益聪*

国防科技大学

团队自主研发了 AI 材料学家 MatPilot，综合运用大模型、智能体、自动化与具身智能实验技术，实现固相材料从自主设计到制备表征的智能研发。MatPilot 基于群体智能思想，融合了人类独特的认知能力、丰富的经验积累、持续的好奇心和探索欲，以及 AI 智能体具备的知识储备、高维信息处理能力、多任务并行能力、高精度自动化实验能力。以储能陶瓷材料的研发为例，

MatPilot 能够有效赋能研究团队生成科学假设和实验方案，调用预测模型与优化算法，驱动自动化实验平台开展实验验证，高效验证、持续学习和迭代优化，显著提升材料研发的效率。

拟交流类型：邀请报告

2235

先进陶瓷材料自主实验技术与智能化研发平台

白洋*

北京科技大学

新材料智能化研发，以材料大数据、人工智能技术、智能化研发平台等为基础支撑，将人工智能的思想和理念、算法和技术应用于材料设计研发，包括材料自主实验等新兴技术。依托人工智能技术的兴起和快速发展，各类自主实验系统的研发已成为材料先进实验技术的发展趋势。通过将智能控制和决策融入材料自动化制备和表征的各实验环节，加速新材料，特别是在极端条件下服役的新材料研发，探索材料的极限性能。本团队研发陶瓷材料自主实验系统，开发出一系列适用于自主实验的自动化技术与设备，由人工智能机器人串联各环节设备完成全流程闭环迭代实验；同时发展引入融合领域知识的自主反馈机器学习策略，有效挖掘材料结构-性能之间的深层关联，并与高通量制备及表征设备互联互通，从而形成融合大数据技术和高通量实验技术的自主实验智能化研发平台，促进复杂材料的高效设计。

拟交流类型：邀请报告

6862

材料科学规律发现的多智能体框架

胡博^{1,3}、刘思宇^{1,2}、叶贝琳¹、郝运⁴、陆洋^{1,2}、柳延辉⁵、David J. Srolovitz^{1,2}、文通其^{1,2}

1. 香港大学机械工程系结构材料中心

2. 深圳生命科学与能源材料创新研究院 (MILES)

3. 清华大学未央书院

4. 华南理工大学软件学院

5. 中国科学院物理所

揭示材料结构、成分与性能之间的定量关系是推动材料科学理论发展和高效设计新材料的关键。近年来，随着人工智能 (Artificial Intelligence, AI)，特别是大语言模型 (Large Language Models, LLMs) 的快速发展，符号回归 (Symbolic Regression, SR) 方法以及 AI 赋能的符号回归方法已经被广泛应用于材料定律的公式推导，成为实现“可解释性 AI 赋能材料科学”的重要手段。

传统的符号回归方法，如遗传编程等，仅依赖数据本身的定量关系，依靠大规模的表达式搜索获得定量公式，但未能有效地将材料科学知识嵌入在内。大语言模型依靠其大量的训练数据，可以为科学公式发现任务提供背景知识支持。基于此，本研究提出了一个面向材料科学定律发现的多智能体符号回归框架。该框架基于大语言模型构建，融合了深度优先搜索 (Depth First Search, DFS) 算法、记忆机制 (Memory) 与智能体自我反思机制 (Self-reflection)，能够系统地探索并优化公式。通过提示词工程、搜索轨迹反馈以及同时考虑准确度与复杂度的评价指标，这一多智能体框架能自动探索生成准确度高且复杂度低的材料定律公式。

基于 Deepseek 模型，我们以金属玻璃的玻璃形成能力（GFA）为案例验证该框架的有效性，使用三个特征温度（玻璃转变温度 T_g 、晶化起始温度 T_x 、液相线温度 T_l ）作为自变量，金属玻璃的临界冷却速率 R_c 作为因变量。在 23 组训练数据的基础上，多智能体框架能够发现高准确度和低复杂度的公式，公式预测的 GFA 指数与临界冷却速率在测试集上的相关系数达到 $R^2 = 0.948$ ，显著优于传统的 GPlearn 符号回归工具及已报道的 GFA 指标，同时具有更低的公式复杂度（仅包含 4 个运算符）。公式在超出训练集分布之外的测试样本上也保持了优异的外推性能，体现出其稳定性和泛化能力。

通过对比消融实验，我们进一步验证了记忆机制与反思机制的有效性：引入记忆机制后模型性能相较于随机搜索提升了约 30%；而反思机制通过引导搜索方向实现了公式复杂度的降低。

此外，文章还深入分析了智能体自我反思机制的具体作用原理和生成公式的物理意义，该公式综合考虑了玻璃形成和抗结晶两大影响因素，具有良好的可解释性和实际指导意义。

该多智能体材料科学定律发现框架具备可扩展性和通用性，适用于不同的材料科学符号回归任务，可用于发现新材料定律、提高实验数据的解释能力。

拟交流类型：邀请报告

10415

多智能体 AI 系统赋能材料科学自主探索

Multi-Agent AI Systems Enabling Autonomous Materials Innovations

刘雨阳*

幻量科技 (DeepVerse)

This talk introduces a paradigm shift in materials R&D through the deployment of multi-agent AI systems that autonomously drive innovation. Dr. Liu will present how DeepVerse integrates adaptive AI with active learning and uncertainty quantification to transform sparse, fragmented datasets into accelerated discovery pipelines. By orchestrating AI agents across tasks such as hypothesis generation, experimental design, and outcome interpretation, the system mimics and amplifies expert intuition at scale. The presentation will highlight key technological challenges in materials development and demonstrate how DeepVerse's proprietary tools deliver dramatic reductions in cost and development time. Attendees will gain a forward-looking perspective on how autonomous, multi-agent platforms are reshaping the future of materials science and how they can partner with DeepVerse to lead this transformation.

拟交流类型：邀请报告

8592

材料智能体：大脑、内脏、四肢、神经

王轩泽*、方正、孔辉、牟光俊、彭勃、万学忠

创材深造（苏州）科技有限公司

近期 20 余家行业巨头联合发布首个 **AI 智能体** 标准，定义了智能体需要具备感知、记忆、规划、执行四方面能力。对于新材料研发，我们期待着 AI 可以更自主、更快速、更具启发性的帮助完成整个研发过程。因此，材料智能体也应具备类似于人类的**大脑、内脏、四肢、神经**四套系统：大脑通过大模型实现，主要负责任务的理解、拆解、记忆、规划；内脏通过专业模型实现，高效、

精准的完成各类专用任务，具有确定的输入输出；四肢主要负责执行，通过高通量实验设备实现，完成与现实世界的交互，获取所需的额外真实信息；神经主要负责感知，由高通量设备中的多种传感器、实验室信息系统、数据库组成，建立虚拟算法与现实数据的链接。大模型、专业模型、高通量设备、实验室系统是材料智能体的必要组成部分。

为加速新材料研发进程，本研究以开发新型材料智能体为目标，主要通过构建材料研发大模型以及各种材料专有模型，同时针对不同材料和工艺搭建高通量实验数据采集和验证系统。该新型材料智能体已成功应用于多款高端金属材料的开发，相关性能指标已达到行业领先水平。本研究将为以 AI 驱动的新材料研发范式以及针对新材料研发的材料智能体开发提供更多的技术支撑。

拟交流类型：邀请报告

3394

Detecting Deformation Mechanisms of Metals from Acoustic Emission Signals through Knowledge-Driven Unsupervised Learning

丁向东 (Xiangdong Ding)

西安交通大学 (Xi'an Jiaotong University)

Timely detection of deformation mechanisms in metallic structural materials is essential for early-warning alerts on potential damages and fractures. Acoustic emission (AE) technologies are commonly used for this purpose due to their non-destructive nature. However, traditional methods often struggle with distinguishing AE signals associated with multiple co-existing deformation mechanisms. To address this challenge, we propose a knowledge-driven unsupervised learning approach. The novel method leverages a family of gradient-driven supervised base learners and integrates them with a knowledge-infused aggregate loss function, effectively transforming the approach into an unsupervised learning framework. Compared to existing methods, our approach excels in identifying co-existing deformation mechanisms associated with AE signals. Experiments on porous 316L stainless steel during tensile process show that the avalanche statistics of the identified dislocation and crack AE signals align closely with classical statistical methods and fracture theory. By integrating with the avalanche theory, our proposed approach can continuously monitor material deformation mechanisms in real-time and provide dynamic early failure warnings. Additionally, the framework demonstrates strong transferability in recognizing multiple co-existing deformation mechanisms in new materials, leveraging its unsupervised learning capability.

拟交流类型：邀请报告

924

AI 辅助热障涂层服役损伤过程可视化

王亮*

中国科学院上海硅酸盐研究所

热障涂层在实际服役过程中不可避免地面临失效问题，如何对热障涂层的失效模态及服役寿命提前预知并做出评判是科学界面临的共性难题。基于此，我们开发了一套基于 AI 的“耳朵听”及“眼睛看”相结合的热障涂层服役损伤过程可视化的全流程。对热障涂层在原位力学加载及实际服役过程的原位声发射信号进行动态分析，包括滤波分析、快速傅里叶变换、小波（包）分析、K-Means 无监督机器学习聚类分析、小波能量系数计算、神经网络（BP 神经网络，RBF 神经网络）分析，设计开发了一套软件，能够快速建立起热障涂层内部裂纹扩展模态与声发射信号特征参数之间的动态联系，实现了“耳朵听”快速判断涂层的失效模态。进一步基于热障涂层制备态及服役态早期的截面微结构照片，对微结构的不同特征实现了批量化自动化打标签，进一步结合深度学习及长短时记忆神经网络（LSTM）实现了涂层微结构演变的动态预测，尤其是对涂层内部裂纹随着服役时间延长其动态扩展规律，热障涂层内部热生长氧化物（thermally grown oxide ,TGO）的增厚，因高温烧结效应引起的陶瓷层内部气孔率的变化进行了全方位的预测。从而全面实现了热障涂层失效行为的“耳朵听”和“眼睛看”相结合的双模态驱动的 AI 可视化。

拟交流类型：邀请报告

539

AI 赋能防腐涂层新材料设计与评价

张达威*、马菱薇、富忠恒、龚海燕、杨景智、李晓刚

北京科技大学

随着材料基因工程研究领域的不断壮大，材料智能技术的发展为腐蚀学科的研究范式带来变革性突破。其中，高通量和自动化实验技术可显著加速耐蚀材料的筛选及其在复杂/耦合影响因素下的腐蚀评价。利用机器学习方法，实现材料腐蚀程度/速率的高效预测和成分配比智能化设计，与传统“试错式”研究方法相比大幅度缩短了腐蚀评价周期，降低了材料研发成本。在此背景下，本研究介绍了人工智能技术在防腐涂层新材料优化设计与服役评价中的若干应用案例。

拟交流类型：邀请报告

2537

语言数据驱动材料设计方法与软件

张磊*

南京信息工程大学

人工智能技术，特别是自然语言处理（NLP）与大规模预训练语言模型（LLM），正在重塑材料科学研究的方法体系。本次报告将系统阐述基于文献文本的材料创新研究路径与软件工具开发：首先概述材料语言数据的处理策略及其在物性预测/逆向设计中的实践，分析“语言模型+晶体结构生成+量子力学计算”的融合方法体系，通过整合语义理解、晶体构型搜索和量子力学模拟，提升了新材料的研发效率。同时介绍团队最新构建的 AI+材料软件，该系统包含了检索增强生成技术和多智能体协同框架，展示团队研发的材料信息学平台 NJmat 及其子模块，该平台整合了材料描述符自动构建、机器学习建模（涵盖传统算法与深度学习方法）、计算势函数开发、图神经网络应用、优化算法、结果可解释分析以及自动化预测与可视化等功能模块，为智能化材料研发提供了高效工具集。

拟交流类型：邀请报告

10477

钢铁材料设计基座大模型构建与应用

姜雪*, 田少晗, 王伟仁, 王浩, 杨小文, 宿彦京*

北京材料基因工程高精尖创新中心, 高精尖学院, 北京科技大学, 北京, 100083, 中国

近年来, 人工智能和机器学习方法在材料科学领域已经被广泛应用, 成功加速了新材料发现和材料关键性能提升。然而, 它们的成功在很大程度上依赖于高质量结构化数据和特征工程, 对研究人员的专业知识提出了极高的要求。近年来, 基于 Transformer 架构的大语言模型, 通过大规模数据、庞大的神经网络、自监督学习和强大的硬件, 展现出通用智能能力, 并为直接利用历史文本知识, 转变传统机器学习驱动的材料研究方式提供了崭新的途径。本研究提出了一种基于大语言模型的从海量历史文本知识中定量预测材料性能的端到端策略。该策略由材料自然语言编码器 SteelBERT 和多模态深度学习框架组成, 以成分和工艺文本为输入, 定量预测力学性能。其中, SteelBERT 基于 DeBERTa 架构, 在包含 420 万篇材料科学相关摘要和 55,000 篇钢铁材料文献全文上预训练, 将化学元素、制备加工工艺等钢铁知识的准确表示为上下文感知向量, 通过深度学习框架成功预测了文献中新报道的 18 种不同钢种、不同工艺路线下的材料力学性能, 屈服强度、极限抗拉强度和延伸率的决定系数 (R^2) 分别为 78.17% ($\pm 3.40\%$)、82.56% ($\pm 1.96\%$) 和 81.44% ($\pm 2.98\%$)。进一步地, 通过在特定钢种的极小样本数据 (64 个 15Cr 奥氏体不锈钢数据集) 上微调, 屈服强度、极限抗拉强度和延伸率的 R^2 分别达 89.85% ($\pm 6.17\%$)、88.34% ($\pm 5.95\%$) 和 87.24% ($\pm 5.15\%$)。最终, 通过优化钢铁工艺流程, 添加二次冷轧和回火处理, 成功制备出屈服强度为 960 MPa、抗拉强度为 1138 MPa 及延伸率为 32.5% 的新型 15Cr 奥氏体不锈钢, 超越了该体系下已报道不锈钢的综合力学性能。

关键词: 性能预测; 钢铁设计; 材料语言模型

参考文献:

- [1] Tian S, Jiang X, Wang W, et al. Steel design based on a large language model[J]. Acta Materialia, 2025, 285: 120663.
- [2] Jiang X, Wang W, Tian S, et al. Applications of natural language processing and large language models in materials discovery[J]. npj Computational Materials, 2025, 11(1): 79.

* 通讯作者: jiangxue@ustb.edu.cn, 13581997167.

* 通讯作者: yjsu@ustb.edu.cn.

拟交流类型：邀请报告

11223

AlloyGAN: LLM 赋能的逆向材料设计框架

范澈*

香港城市大学

生成模型为逆向材料设计提供了新路径, 但其性能常受限于训练数据不足与模型架构约束。本研究提出 AlloyGAN——一种融合大语言模型 (LLM) 知识提取与条件生成对抗网络 (CGAN) 的闭环框架, 通过增强数据多样性与优化逆向设计提升性能。以合金设计为案例, 该框架整合科学文献数据挖掘、迭代生成设计与实验验证, 高效探索成分设计空间。在金属玻璃应用中, AlloyGAN

对新型合金热力学性质的预测与实验值误差小于 4%，突破了传统生成式 AI 的泛化瓶颈。该框架通过领域知识驱动，提出兼具创新性与实验可行性的候选材料，为加速定制化材料发现提供了可扩展路径。

拟交流类型：邀请报告

9014

领域大模型赋能新材料发现与性能预测

孙志梅*

北京航空航天大学

随着大语言模型（LLM）在自然语言处理等领域取得突破性进展，其强大的知识理解与生成能力引发了科研界广泛关注，成为推动“AI for Science”的重要引擎。然而，LLM 在材料科学中的应用仍面临等诸多挑战，如：缺乏高质量领域数据，缺乏统一评估标准，幻觉问题严重，多尺度、多模态的材料知识复杂，使得大模型难以直接迁移到材料研究中。针对这些问题，我们基于检索增强生成（RAG）技术开发了材料计算模拟大模型（MatterLLM, <https://matterllm.cloud>），集成了材料自主计算模拟和材料性能预测等能力。MatterLLM 内嵌大语言模型驱动的 VASP 自动化计算模块，可根据用户输入的自然语言自动生成 VASP 计算 workflow、提交任务并完成模拟过程，为用户提供从任务生成到结果输出的一体化自动计算服务。针对神经拟态半导体材料，我们构建了包含文本数据提取、材料计算模拟、实验表征等含 10 万余个光学性能和电学性能的材料多模态数据，并针对材料特性构建了 10 余个性能预测专家系统，具备对消光系数、介电函数、光学性能、极化强度等关键物性指标准确率 $\geq 90\%$ 的高精度预测能力。MatterLLM 有效提升了材料性能预测与模拟的效率与智能化水平，显著降低了高通量计算的专业门槛，也为结构化知识抽取、材料设计与自动化实验提供了智能化支撑，展示了领域大模型在材料科学领域的广阔应用前景与技术引领作用。

拟交流类型：邀请报告

10513

基于第一性原理的材料大模型

徐勇*

清华大学 物理系

从发现量子力学到材料计算预测经历了上百年的发展，由此诞生了以密度泛函理论为代表的的第一性原理计算方法，从此原子、电子层次的材料计算设计变为可能。然而，受限于高昂的计算代价，第一性原理方法只适用于小尺寸材料计算；数据驱动的材料发现被认为是富有潜力的未来发展方向，但现有第一性原理材料数据库规模太小，离真正意义的材料大数据还很遥远，这也极大地限制了该领域发展。在该报告中，我将介绍一个新兴的研究方向——第一性原理人工智能，即利用先进的人工神经网络方法克服第一性原理计算面临的效率瓶颈，为未来物理、材料发现带来新的研究范式。作为最新的进展之一，我将重点介绍一种普适的、泛化能力极强的深度学习哈密顿量模型 DeepH [1-10]，它用神经网络替代复杂的密度泛函理论自洽计算，在保持第一性原理精度的同时可将计算效率提升多个量级；更为重要的是，随着训练数据的增加，神经网络方法将变得越来越智能，可实现电子层次的通用材料模型[9]，为实现“材料大模型”、推动基于人工智能的新物理和新材料发现奠定基础。上述工作展示了第一性原理人工智能的巨大优势，将深刻改变科学计算与材料发现的未来发展[11-13]。

参考文献:

- [1] DeepH: H. Li, et al. Nature Computational Science 2, 367 (2022)
- [2] DeepH-E3: X. Gong, et al. Nature Communications 14, 2848 (2023)
- [3] xDeepH: H. Li, et al. Nature Computational Science 3, 321 (2023) Cover story
- [4] DeepH-DFPT: H. Li, et al. Physical Review Letters 132, 096401 (2024) Editors' suggestion
- [5] MagNet: Z Yuan, et al. Quantum Frontiers 3, 8 (2024)
- [6] DeepH-hybrid: Z. Tang, et al. Nature Communications 15, 8815 (2024)
- [7] DeepH-2: Y. Wang, et al. arXiv:2401.17015
- [8] DeepH-PW: X. Gong, et al. Nature Computational Science 4, 752 (2024)
- [9] DeepH-UMM: Y Wang, et al. Science Bulletin 69, 2514 (2024) Cover story
- [10] DeepH-Zero: Y. Li, et al. Physical Review Letters 133, 076401 (2024) Editors' suggestion
- [11] H. Li, et al. Materials Genome Engineering Advances e16 (2023)
- [12] 深度学习与第一性原理计算 H. Li, et al. Physics, 53, 442 (2024)
- [13] 物理学与深度学习: 2024 年诺贝尔物理学奖介绍 Z. Tang, et al. Physics, 54, 1 (2025)

拟交流类型: 邀请报告

3903

深度量子蒙特卡洛与电子密度

程立雪^{1,2*}¹Microsoft Research AI for Science Lab²香港科技大学

变分从头算量子化学方法在直接获取波函数方面, 相较于其他方法具有显著优势。这原则上允许直接提取除能量之外的其他感兴趣的观测量, 然而在实践中, 这种提取往往在技术上非常困难且计算上不可行。在本文中, 我们将电子密度视为量子化学中的一个核心观测量, 并引入了一种新颖的方法, 利用神经网络表示电子密度, 捕捉已知的渐近性质, 并通过得分匹配和噪声对比估计从实空间多电子波函数中进行训练, 从而获得精确的电子密度。我们采用变分量子蒙特卡洛方法, 并结合深度学习的 ansätze (深度 QMC), 从而获得没有基组误差的高精度波函数, 并使用我们提出的新方法, 从这些波函数中得到同样精确的电子密度。我们通过计算偶极矩、核力、接触密度以及其他基于密度的性质来验证我们方法的准确性。

拟交流类型: 邀请报告

8882

结合晶体生成与基础原子模型的条件逆向设计主动学习方法

文通其*、李卓远、刘思宇、叶贝琳、David J. Srolovitz

香港大学

人工智能（AI）正在重塑材料科学的研究范式，推动理论突破并加速材料发现。近年来，晶体生成模型能够面向目标性能设计晶体结构，而基础原子模型（Foundation Atomic Models, FAMs）能够在元素周期表范围内准确刻画原子间相互作用，这两方面的进展显著提升了材料逆向设计的能力。然而，高效整合晶体生成模型与基础原子模型仍是一项挑战。

本研究提出了一种主动学习框架，将晶体生成模型与基础原子模型相结合，以提高逆向设计的准确性与效率。作为案例，我们采用 Con-CDVAE 生成候选晶体结构，并使用 MACE-MP-0 这一基础原子模型作为高通量筛选器之一，用于预测体模量。通过迭代式主动学习，我们展示了 Con-CDVAE 在生成目标性能晶体方面的精度不断提升，验证了基于性能驱动的微调策略的有效性。

该框架具有通用性，可兼容不同的晶体生成与基础原子模型，构建了一个可扩展的 AI 材料设计路径。通过桥接生成建模与原子尺度模拟，本工作为实现更加精准高效的材料逆向设计奠定了基础。

Presenting Type: Invited

5128

Symmetry Aware Generative Models for Crystals: From Latent Space to the Lab Synthesis

Zekun Ren*

Berkeley Education Alliance for Research in Singapore

Generative models are rapidly reshaping inorganic crystal discovery by shifting the focus from “screening what exists” to “imagining what could.” I will survey the recent progression of crystal generators—FTCP, WyCryst, WyFormer, and Dis-CSP—and show how each step addresses a key bottleneck on the road from latent space to laboratory reality.

FTCP introduces an invertible, real- + reciprocal-space representation that couples a variational auto-encoder to a property-regression branch, giving a probabilistic latent space from which crystals with user-specified formation energy, band gap, or thermoelectric power factor can be directly decoded and DFT-validated. WyCryst pioneers’ symmetry-aware tokenisation of Wyckoff sites; WyFormer refines this idea with a Transformer that generates diverse, symmetry-consistent structures without explicit atomic coordinates, achieving higher novelty and comparable accuracy to coordinate-based methods. Extending beyond ordered phases, Dis-CSP is the first model to encode partial occupancies equivariantly, enabling generative exploration of the >50 % of ICSD for which disorder is intrinsic.

Closing the loop, I will present an autonomous workflow that screens latent candidates for synthesizability, plans reactions, and performs rapid synthesis. This pipeline produced the previously unreported metal-deficient spinel ZnVO_3 and two Y-Mo-O phases close to the model’s YMoO_3 target, validating the practical value of generative predictions.

Despite these advances, major hurdles remain: sparse thermodynamic data for disordered systems, the kinetic blindness of current retrosynthesis planners, and limited resolution in diffraction/elemental analyses for partially disordered or multiphase products. Addressing these issues—through richer disorder databases,

high-throughput ab-initio thermodynamics, and next-generation in-situ characterization—will be crucial for turning generative inspiration into reliably synthesized, application-ready materials.

拟交流类型：邀请报告

8674

领域知识嵌入的生成式模型及其在材料科学领域的应用

刘悦*

上海大学

生成式模型凭借其强大的数据拟合与生成能力，正日益成为材料科学领域的重要工具。然而，其在实际应用中仍面临高质量数据缺失和模型可解释性有限问题。针对此，基于课题组提出的材料领域知识嵌入型机器学习框架，本报告将系统探讨领域知识引导下的生成式模型关键方法与应用路径。在高质量数据获取方面，构建了融合领域知识的数据质量治理框架，并基于生成模型提出了“数据品质与数量协同提升”策略，实现了高质量数据的高效获取。在模型可解释性方面，课题组发展了可解释生成模型、可控生成模型以及领域知识嵌入的大语言生成模型，推动了材料数据增强、科学知识发现与新材料设计等关键任务的可控性与可信性提升。研究结果表明，领域知识与生成式模型的深度融合正为材料智能设计提供更加坚实与可靠的技术支撑。

拟交流类型：邀请报告

4831

面向小样本的挑战：提升深度学习预测性能的策略探索

蒲雪梅*、孙明、杨松燃、毛俊、刘静

四川大学

针对化学、材料领域小样本数据的挑战，结合课题组的研究工作，从机器学习的三要素（数据、特征和模型）系统介绍了提升机器学习性能的策略，包括数据质量的评估过滤/代表性划分、嵌入领域的先验知识/特征融合、强化化学本质的特征学习和迁移学习等。这些研究策略可为机器学习在化学、材料等领域中的应用提供方法参考。

拟交流类型：邀请报告

10517

材料基因工程赋能新能源材料产业化研发

赵旭山^{1,2}*

¹中国福建能源器件科学与技术创新实验室

²宁德时代新能源科技股份有限公司

在“碳达峰、碳中和”大背景下，国家全面推进新能源高质量发展，推动能源体系绿色低碳转型，锂电池是新能源汽车产业乃至储能发展的关键部件，而锂电材料性能优劣又是锂电池电化学性能的决定性因素。

宁德时代作为新能源领域的科技创新型企业，积极拥抱材料基因和人工智能技术，“算力·算法·数据·模型·知识·场景”六位一体，提速锂电材料研发，加快在产业链各环节应用，开发出能量密度更高、安全性更强、综合性能优良的锂电材料，取得了卓越成效。包括：

(1) 高通量计算+AI，把人工智能数据模型嵌入传统物理模型的求解过程，实现高通量材料虚拟筛选、溶剂化分子和界面微观结构建模、实验工艺参数多目标优化等；

(2) 高通量实验+AI，通过“模块化→自动化→数智化→自主化”的智能感知、精细化自适应软硬件控制技术，探索建设“自动化配料→自主化合成→原位表征→实时反馈→在线寻优→逆向设计”的智能实验室；

(3) 材料基因数据库建设，针对电池主材逐步积累电池材料数据库，包括计算数据库（含正极、负极、电解液等专题数据库）、物料数据库、电芯性能数据库、制备工艺数据库等，目前已积累前沿材料设计数据超 2 亿条。

同时，宁德时代正联合地方政府建设绿色超算中心，以支持大模型训练及复杂的研发任务、数据处理和分析任务。

(1) 专用。发展基于“专用芯片+专用架构”的材料科学专用超算，借助对专用指令集、处理器架构、计算系统架构等多维度创新，软硬件一体化设计，存算智一体化设计，将材料仿真计算、性能仿真模拟的效率较传统超算提升 2~4 个数量级。

(2) 绿色。借助宁德时代的“锂/钠电储能”、“钙钛矿光伏组件”、“智能微网”等产品，建设智慧能源电力系统，为超算、数据中心提供一部分动力或辅助电。一方面为电化学储能产品开拓新的应用场景；另一方面也在超算和数据中心领域打造践行“双碳战略”的示范工程项目。

综上所述，推动材料基因和人工智能技术向实体经济纵深拓展，立足解决企业真正的“卡脖子”问题，推动技术创新，是实体经济实现可持续发展的源泉和保障。宁德时代也真诚期待能携手优势科研团队，打通实验室到市场的“最后 1 公里”，用您的智慧和成果为人类新能源事业做出卓越贡献。

拟交流类型：邀请报告

2694

计算与数据驱动的电池材料多目标性能协同优化

刘建军*

中国科学院上海硅酸盐研究所

在锂离子电池正极材料研究中，传统实验方法长期依赖“试错法”，面临周期长、成本高、效率低等问题。随着新能源产业对电池性能要求不断提高，单一依赖实验已难以满足高性能正极材料的精准设计需求。特别是在多性能指标协同优化中，各目标常相互制约，进一步加大优化难度，研究盲目性强，严重制约新型正极材料的高效研发。本报告介绍实验研究、计算模拟与人工智能技术的深度融合，构建高效协同的智能研发体系，聚焦富锂正极材料与锂空气电池正极材料的筛选。针对富锂层状材料在容量与电压稳定性协同优化中的挑战，其性能退化主要源于晶格应变、不可逆氧释放与过渡金属迁移等相互制约因素，难以建立有效构效关系。利用密度泛函理论计算、机器学习与实验验证，围绕复杂多元素掺杂体系，构建涵盖电化学活性、晶格应变、氧稳定性与金属迁移势垒的多层级筛选策略，并借助 AI 挖掘关联机制，首次发现替代元素耦合的多面体畸变参数 $D+\sigma^2$ 是影响循环中结构稳定性的关键特征。基于预测开发的富锂层状材料表现出优异

性能：300 次循环后容量保持率达 95.8%，电压衰减率仅 0.02%/次。本研究不仅获得高性能正极材料，也提出了普适性的理性设计方法，为多目标协同优化提供新思路，显著提升研发效率。

Presenting Type: Invited

7620

AI-aided Energy Material Design

Lei Shen*

National University of Singapore

Materials are the cornerstone of technological development, and new materials are the foundation and driving force of technological revolutions. Energy materials, including catalytic materials, battery materials, and superconductors, are important for the energy conversion, energy storage, and energy transport. However, identifying high-performance energy materials from among hundreds of thousands of existing candidates presents a formidable challenge. At such a vast scale, traditional experimental approaches and quantum-mechanics-based computational methods become impractical. With the advancement of artificial intelligence, machine learning has demonstrated remarkable capabilities in materials discovery, particularly in the design and discovery of new materials. In this talk, I will present some of our recent work on AI-assisted design of energy materials.

拟交流类型：邀请报告

5125

基于化学机器人平台的锂电池电解液创新

陈翔*

清华大学

电解液是锂电池的重要组成成分，主要发挥导通离子、绝缘垫子的功能，同时稳定电极界面，显著影响锂电池的实际性能，被誉为“电池血液”。因此，设计开发新型电解液体系被认为是下一代锂电池匹配高比能电极以提升能量密度和提升循环寿命、功率密度、宽温域性能的重要途径。然而，实际电解液研发面临着溶液化学规律复杂而难以建立有效的设计原理、备选材料分子空间庞大而难以精准设计、电解液组分强关联而难以快速优化的巨大挑战。传统实验“试错”方法在设计新电解液体系过程中往往周期长、效率低、成本高，越来越难以满足新能源行业未来高质量、高速发展的迫切需求。本报告将介绍基于化学机器人平台的锂电池电解液创新，包括开发动力电池电解液垂直领域人工智能模型，支持电解液理化性质、合成路径、形成固态电解质界面膜反应机理等精准预测，实现亿量级分子空间电解液分子的定向设计；开发动力电池电解液高通量评测的化学机器人平台，集成电解液配置、电池组装、电池预检测、电化学性能测试和数据自动化采集与分析等功能，实现全流程的无人化运行和高鲁棒性；围绕长循环、高比能电池电解液研发需求，结合主动学习算法和领域专家知识，高效设计新型电解液配方。

拟交流类型：邀请报告

9335

机器学习驱动能源材料设计：从预测模型到实验验证

王永祯*

太原理工大学

随着全球能源转型加速，传统的材料开发模式因周期长、成本高、试错依赖性强等问题，难以满足新型能源材料的迫切需求。本报告聚焦机器学习（ML）与计算材料学融合创新，阐述基于第一性原理计算与机器学习构建的协同研发体系，重点解析数据驱动范式如何革新能源材料研发流程。通过固态电解质、电催化剂、超级电容器及煤矸石基低碳胶凝材料四大关键领域的实践案例，展示理论计算与机器学习交叉技术在材料性能预测、结构优化和机理解析中的突破性进展。

拟交流类型：邀请报告

1916

人工智能驱动的复杂体系物质科学研究

戴佳钰*

国防科技大学

人工智能正逐步深入科学研究的各个环节，从理论建模、数据分析到实验设计与知识发现，其角色已由辅助工具演变为科研体系中的核心驱动力。本报告聚焦 AI 赋能复杂体系的物质科学研究，重点介绍面向宽温压域、强激光与辐照等极端条件的通用多尺度物理方法，以及其在国防材料、半导体器件服役性能与毁伤效应评估等关键领域的应用实践。同时，报告还将探讨 AI 在跨尺度建模、材料性质预测与逆向设计等方向的发展前景，以及物理规律与非平衡统计物理思想如何深度融合于机器学习框架，以推动 AI 向更强可解释性与泛化能力演进的核心挑战。

拟交流类型：邀请报告

9412

大-小模型协同驱动金属材料智能设计

薛德祯*

西安交通大学

在材料科学研究领域，除了依赖于数字数据库资源外，还存在海量的文本化知识。目前的机器学习模型在利用材料领域专业文献、书籍报告中的文本知识时存在局限性。虽然大语言模型能够对文本知识进行融合理解，为材料智能化研发整合海量知识提供了可能，但其在领域专业度和定量判断预测能力方面仍有不足。鉴于此，本工作整合了大模型的文本知识提炼能力与小模型的精准数值预测优势，高效实现了金属材料的智能设计与开发。具体而言，首先通过挖掘 120 万篇金属材料文献摘要及 5 万篇 Ti 合金文献摘要挖掘信息，分别建立了两个自然语言处理模型，借助余弦相似度计算与筛选，成功识别出在 Ti 合金中应用较少或未被应用、却在其他合金中广泛应用的合金元素，进而设计新型 Ti 合金成分，实现了强韧性协同提升；其次，利用大语言模型生成不同化学元素的语义描述符，并将其应用于下游任务流程，模型预测精度得以显著提高；最后，针对材料智能研发中的共性需求，定制化预训练了特定材料的垂直大模型，与通用大模型相比其预测更定量、生成更靶向，与传统小模型相比其知识更广泛、交互更简单。

Presenting Type: Invited

668

Bgolearn: An End-to-End Active Learning Framework for Materials Optimization

Bin Cao*, Tong-Yi Zhang

The Hong Kong University of Science and Technology (Guangzhou)

Materials discovery and optimization require efficient exploration of vast compositional and processing spaces, yet traditional high-throughput experiments and trial-and-error methods remain time- and resource-intensive. We present Bgolearn, an open-source, end-to-end active learning framework designed to accelerate materials optimization. Bgolearn seamlessly integrates data management, surrogate modeling, acquisition-function-driven candidate selection, and experimental feedback into a closed-loop workflow. At its core, it employs a flexible Bayesian optimization engine based on Gaussian process regression, enabling rigorous uncertainty quantification. The framework allows users to plug in custom surrogate models, acquisition strategies, and constraint-handling mechanisms to meet specific research needs. Through its interface, BgoFace, Bgolearn unifies computational predictions and experimental measurements within a single workflow. We demonstrate its effectiveness in three materials science applications: improving the strength and ductility of lead-free solder alloys, achieving high nitric oxide concentrations in nanozyme systems, and designing highly active, acid-stable oxygen evolution reaction catalysts. Bgolearn is freely available at <https://github.com/Bin-Cao/Bgolearn>, along with comprehensive documentation, tutorials, and example workflows.

拟交流类型: 邀请报告

1382

知识图谱指导的性能预测与合金设计

王晨充*, 徐伟

东北大学

以硫化氢腐蚀及多种合金案例为例, 阐明知识图谱指导金属材料复杂性能预测与合金设计中的作用。在合金成分复杂、腐蚀产物多样及多种外部环境因素共同作用的工业腐蚀环境中, 传统经验模型与机器学习方法常因高维度特征空间以及数据样本限制, 难以在短时间内做出最佳决策, 这一问题限制了材料在工业环境体系下耐蚀性能的预测能力。本研究以油气井服役环境中不锈钢的硫化氢应力腐蚀开裂 (SSCC) 行为为研究对象, 构建了图卷积神经网络 (GCN) 预测模型。该模型通过整合引入成分和工艺参数的密度泛函理论 (DFT) 计算数据作为专家知识, 并结合知识图谱进一步增强模型对“成分-工艺-微观物理参数”关系的表达能力。结果表明, 引入经过验证的知识图谱可使模型预测精度显著提升, 且图谱揭示的规律可迁移至图生成网络 (GGN) 及图同构网络 (GIN) 框架。并在此模型的基础上进一步引入可反映不同腐蚀机制的 DFT 特征集, 揭示了晶界物理性能参数对 SSCC 预测模型性能的正向有效性。这一加速了物理机制因素对于腐蚀模型预测过程中有效性的判断, 更为材料基因工程领域当前侧重于材料数据辅助 AI, 而缺乏 AI 反哺材料机理挖掘的问题提供了参考。

拟交流类型：口头报告

5179

MDLM:利用语言模型自动化提取和挖掘文献数据加速材料设计

负培文、付华栋、谢建新*

北京科技大学

随着材料科学文献数量的迅速增长，如何从分散的材料知识中快速构建结构化数据集并进行高效检索和利用，成为材料设计中的重大挑战。为解决这一难题，本文基于语言模型开发了 MDLM，这是一种从科学文献中自动分析数据的系统化流程，包括文献数据自动提取、数据检索以及数据应用。在金属材料领域中，由于工艺流程较长且参数众多，目前尚无能够有效提取‘成分-工艺-性能’完整序列的自然语言处理方法。MDLM 针对复杂语义设计了一种‘成分-工艺-性能’的提取方法，成功构建了完整序列，为后续的数据检索和应用奠定了基础。该方法在命名体识别、关系提取和序列生成任务中 F1 分别达到了 88.0%、86.4%和 80.4%。此外，MDLM 采用关键词、稠密向量和稀疏向量三种检索方式结合的混合检索模型，在 MRR、Precision@1、Recall@1 和 Recall@10 方面的表现均超越了基于单一关键词检索的基线模型，分别达到了 89.18%、82.65%、70.31%和 92.45%。同时，配备了可视交互方案，支持多种合金参数对比分析及材料全生命周期的机器学习建模。结果表明，MDLM 为金属材料设计提供了强有力的支持，将传统上人工采集实验数据并建立机器学习模型所需的 3-4 周缩短至仅 1-2 天。同时，MDLM 还为语言模型在材料设计中的应用奠定了基础。

拟交流类型：口头报告

3639

多效能函数贝叶斯优化实现零样本合金的制备参数快速设计

孙竟泰、付华栋、张洪涛、赵孟合、负培文、谢建新*

北京科技大学

机器学习是突破复杂构效关系建模难题，快速设计新材料的重要方法，但仍然面临如何在零样本或小样本数据条件下高效构建模型并进行优化设计的困境。本文提出一种结合正交试验和多效能函数贝叶斯优化的新策略，用于零样本新合金制备参数的快速设计。首先，采用正交试验方法获取必要最少数量的实验样本用于机器学习建模。然后，采用多效能函数贝叶斯优化方法实现在巨大的潜在数据空间进行快速寻优。作者等为降低 Co 含量、减少组成元素而设计的新型 C70350 合金（Cu-2.92Ni-0.92Co-0.74Si）用于新策略的实验验证。仅用少量实验（25 组正交试验+5 次迭代优化），实现了新合金制备参数的快速优化设计。与前期参考工业制备参数进行实验的结果相比，优化制备参数条件下新合金试样的极限抗拉强度与导电率乘积（UTS*EC）进一步提升了 10% 以上。试样中存在高密度位错和大量细小弥散的析出相，显著提升了综合性能。本研究为零样本新合金复杂制备参数的快速设计提供了新思路。

Presenting Type: Invited

2014

AI-guided domain knowledge-based design of alloys with a record-high combination of tensile ductility and yield strength

Yasir Sohail*

Xi'an Jiaotong University, Xi'an, China

The pursuit for strong-yet-ductile alloys has been ongoing for centuries. However, for all the alloys developed thus far, including recent high-entropy alloys, those possessing good tensile ductility rarely approach 2 GPa yield strength at room temperature. The few that do are mostly ultrastrong steels; however, their stress-strain curves exhibit plateaus and serrations, as their tensile flow actually suffers from plastic instability (such as Lüders strains), and the elongation is pseudo-uniform at best. Here we report that a group of carefully engineered multi-principal-element alloys, with a composition of $\text{Fe}_{35}\text{Ni}_{29}\text{Co}_{21}\text{Al}_{12}\text{Ta}_3$ designed via domain-knowledge informed machine learning, can be processed to reach an unprecedented range of simultaneously high strength and ductility. An example of this synergy delivers 1.8 GPa yield strength combined with 25% truly uniform elongation. We achieved the strengthening by pushing microstructural heterogeneities to the extreme, via unusually large volume fractions of not only coherent L12 nanoprecipitates but also incoherent B2 microparticles. The latter, being multi-component with a reduced chemical ordering energy, is a deformable phase that accumulates dislocations inside to help sustain a high strain hardening rate that prolongs uniform elongation.

拟交流类型：邀请报告

1526

基于机器学习的探索空间约束实现合金高效设计

袁睿豪*、Turab Lookman、李金山

西北工业大学

机器学习近年来在合金设计中获得了越来越多的关注。但是，进一步提升合金设计效率所面临的瓶颈问题是：如何有效地操纵巨大的待探索空间，更有针对性地推荐新材料进行实验验证？本报告通过利用符号回归、无监督学习和采样技术，实现了待探索空间的大幅度、理性化收缩，进而结合优化算法在过滤后的空间进行搜索，实现了高性能目标合金的快速开发。具体内容如下：

（1）针对难熔高熵合金，建立了目标性能与基本物理参量的显性构效关系，这一关系可用于辅助合金化元素筛选，使得能够从巨大未知空间筛选出更有希望提升性能的候选材料，通过少量实验验证，开发的新合金将目标性能提升了 30%。（2）针对高温合金，结合无监督技术和相似性评估，兼顾预测值和多样性，从未知空间筛选出候选成分，仅一次实验制备出具有高温稳定性的新成分。

参考文献：

Closed-loop inverse design of high entropy alloys using symbolic regression-oriented optimization, *Materials Today*, Minor Revision. (通讯作者)

Unsupervised learning-aided extrapolation for accelerated design of superalloys, *npj Computational Materials*, 2024. (通讯作者)

拟交流类型：邀请报告

4215

知识-数据混合驱动合金设计策略

熊杰*

上海大学

人工智能的快速发展为材料科学与新材料设计开辟了全新的研究范式。然而，机器学习方法对大规模高质量数据的需求日益增长，这一问题在金属结构材料领域尤为突出，小数据困境极大限制了人工智能在该领域的应用潜力。本工作围绕结构合金的微观结构和服役性能预测问题，探索应用了多种技术策略，将材料领域的专业知识与物理原理嵌入到机器学习的正向建模与逆向设计过程中，实现了数据驱动与知识驱动的有机结合。这一融合策略有效克服了合金材料设计中普遍存在的小数据难题，帮助我们更深入地理解结构合金中的构效关系，为合金设计提供了一条更为精准高效的新路径。

拟交流类型：口头报告

3976

机器学习策略实现航空用 Al-Cu-Mg 合金性能的双重同步提升

胡昊、赵帆、姜磊、谢建新*

北京科技大学

提升高强 Al-Cu-Mg 合金的室温与高温力学性能是满足航空航天高端装备轻量化发展需求的重要途径，然而由于铝合金成分复杂、室温和高温的主要强化相不同，同步提升室温和高温两种条件下的强度和塑性两种性能非常困难。为此，本文提出了一种可实现双重同步提升的机器学习策略。采用特征筛选确定了影响合金抗拉强度和断后伸长率的关键合金因子。建立以关键合金因子和温度为输入，抗拉强度和断后伸长率为输出的机器学习预测模型。通过构建包括室温和 200° C 下合金的抗拉强度和断后伸长率共 4 个目标性能的贝叶斯优化效能函数，基于遗传算法进行寻优，使合金在室温和 200° C 下的强度和塑性均得到同步提升。设计了新合金 Al-4.32Cu-1.74Mg-0.51Mn-0.54Zn-0.19Zr-0.21Cr-0.1Ti (wt.%)，实测在室温和 200° C 下的抗拉强度分别为 577±4 MPa 和 458±7 MPa，断后伸长率分别为 18%±0.5%和 19.3%±0.8%。与目前性能领先的 2524 铝合金相比，室温和 200° C 下的抗拉强度分别提升了 19%和 24%，断后伸长率分别提升了 1/4 和 1/5 以上，实现了合金的室温和高温综合力学性能的同步提升；与耐热 2618 铝合金 200° C 下的拉伸性能相比，新合金的断后伸长率基本相同，而抗拉强度提高了约 50%。体积分数达 4.3%的纳米级 S 相提高了新合金的室温力学性能，而多重孪晶 T 相（体积分数达 3.1%）在高温下不易粗化，是合金高温力学性能显著提升的主要原因。

拟交流类型：口头报告

3479

结合高通量实验、热力学计算和机器学习阐明 Cu-Ni-Sn 合金体系的铸造性能、热处理行为和力学性能演变规律

陈明营、刘新华、赵帆、谢建新*

北京科技大学

Cu-Ni-Sn 合金是一种环保型高强高弹铜合金，广泛应用于继电器、弹簧片、接插件及载重轴承等关键零部件的制造。Ni 与 Sn 含量对合金的力学性能具有显著影响，然而，目前缺乏成分对加工性能及力学性能影响的系统性研究，制约了新型 Cu-Ni-Sn 合金的优化设计。本研究采用高通量快速制备方法，系统制备并评估了 84 种不同 Ni、Sn 含量组合的 Cu-Ni-Sn 合金样品，全面揭示了 Ni、Sn 含量变化对合金铸造性、固溶及时效行为等加工性能的影响规律。并结合机器学习建模、热力学计算与实验验证，确定当 Ni 含量为 13 wt%~19 wt%、Sn 含量为 7 wt%~9 wt%时，合金可获得优异的综合性能，其抗拉强度普遍超过 1100 MPa，部分成分体系的强度优于目前被广泛认为

具有最高强度的 Cu-15Ni-8Sn 合金。研究结果为 Cu-Ni-Sn 合金体系的成分设计提供了重要的数据支持与理论依据，拓展了该合金体系在高性能铜合金领域的应用潜力。

拟交流类型：邀请报告

5134

面向未来的可扩展模块化材料数据模型与数据标准

汪洪*

上海交通大学材料科学与工程学院/材料基因组联合研究中心/张江高等研究院

随着人工智能与高通量技术的深度融合，材料科学已进入以数据+AI 为核心驱动力的“第四范式”。材料数据具有数量大、来源多、形式杂的特点。没有标准，不仅收集和储存复杂，而且使用不便。建立统一的数据标准规范，是多源异构数据可以顺畅地流通共享的重要保证。在 AI 语境下，材料数据是反映多种因素对材料性能影响的信息载体，其标准制定中涉及两个维度：一是数据产生的本源维度，对应于材料信息产生的技术、方法（如制备、表征、计算等）的数据标准，决定相应数据的内容、格式及操作规则；二是材料类型的维度，对应于在实际应用时所需的特定信息集合中所包含的信息元素的构成，即特定材料类型研发全流程需要用到的数据标准系列。完整呈现材料的全息数据需包含相关的制备、表征（包括实际与虚拟）全部过程及结果。数据参量的多样性与多变性造成对全链条数据进行标准化非常困难。CSTM《材料基因工程数据通则》在符合 FAIR 原则前提下提出了一种可扩展模块化数据模型，以独立成章的制备、表征、衍生过程作为数据采集、存储的模块单位，开发独立的标准化数据模板。完整的材料研发全链条数据由相关数据模块组合而成，大大降低了复杂数据的标准化难度。总体而言，可扩展模块化材料数据模型以模块化架构整合多维度数据，实现灵活拓展，各模块从材料类型维度出发将相关信息元素通过标准化数据格式连接，通过全面的局部（模块层面）标准化实现材料数据整体的标准化。

拟交流类型：邀请报告

10524

如何构建 AI 友好的材料数据集？

苏航*¹、王畅畅²、王炫东¹

¹ 中国钢研科技集团

² 北京新材道数智科技有限公司*

材料+AI 的基石在于高质量数据集。高质量材料数据集的特征是同源性、分散性、可信性、完备性。收集文献数据缺乏同源性，生产数据缺乏分散性，匿名网络数据缺乏可信性，除计算、产品数据集外，文献、实验、生产数据集一般不易达成完备性。为此需要改变以往以验证为目的的数据产出模式，通过高通量计算、高通量实验、区块链数据发现等手段，分别构建可信计算数据集、可信实验数据集、可信应用数据集，才可能形成大量细分领域的完备数据集。材料研发中需要摒弃“通用 AI 大模型”的幻想。深耕细分领域的闭环、完备数据集建设，才可能建立高价值专业模型，形成颠覆性的 AI 应用，支撑材料科学发展的未来。

拟交流类型：邀请报告

5873

材料拉曼光谱标准数据库及其比对

任玲玲*

中国计量科学研究院

在材料拉曼光谱领域，计量比对对确保测量结果的可比性与溯源性至关重要，然而海量数据的复杂性、计算方法的多样性及数据来源的差异性制约了材料数据的标准化进程。因此，项目团队提出基于 XML 的结构化数据格式 MaiML (Material Raman Spectroscopy Markup Language)，通过整合测量条件、原始光谱数据、拉曼频移信息及图像数据实现多源数据统一管理，并依托哈希值唯一标识符与工作流生成技术构建了可溯源机制，确保数据全链条可验证。该格式支持测量条件与结果数据的标准化描述，为提升数据一致性提供技术支撑，为长期实验管理、统计分析与数据挖掘提供统一框架。基于此项研究，项目组将持续建设拉曼光谱标准数据库，深化计量技术研究，将设备校准、计量比对等信息纳入标准数据库体系，从而进一步推动跨平台数据互认共享。

拟交流类型：邀请报告

11756

AI4S 赋能煤基新材料高质量数据集建设与应用

孙小杰、邵帅、董阳*

北京低碳清洁能源研究院

本报告介绍国家能源集团在 AI4S 领域的战略布局和实践成果，重点展示低碳院在煤基新材料领域构建的“干湿结合”研究范式。通过费托催化剂、交联聚乙烯、生物可降解材料、复合材料和电池材料等多个领域的应用案例，展示如何利用人工智能技术处理实验和文献数据，结合高性能计算及高通量实验，建立材料结构与性能的预测模型，以高质量数据集建设赋能新材料研发全流程。

拟交流类型：邀请报告

6109

含噪声数据建模的鲁棒机器学习方法及应用

钱权*

上海大学

在实际场景中，噪声数据普遍存在，如何对其进行高效建模是提升模型准确率的关键。本报告将介绍三种方法：首先，针对数据复杂性问题，我们提出混合指数族后验网络，通过扩展先验分布为指数族混合形式，实现了对复杂数据的精准建模。该网络不仅能独立更新各分布的后验贝叶斯估计，还能动态调整权重，并通过熵加权融合随机与认知不确定性，最终在材料数据集中实现仅剔除 5%异常数据就提升 2%-5%准确率的显著效果。其次，针对异方差噪声问题，提出基于异方差高斯噪声的李生近端支持向量回归模型，在若干实际应用场景中相比现有模型提升 7%-11%的预测精度。最后，针对混合噪声分布问题，提出基于高斯-拉普拉斯混合噪声的李生近端支持向量回归，在风电功率预测等任务中取得 32%和 24%的显著精度提升，为不同噪声场景下的数据建模提供了多种解决方案。

拟交流类型：邀请报告

1293

面向材料科学文献的命名实体识别及关系抽取的研究与应用

韩越兴*

上海大学

从海量且非结构化的材料科学文献中精准高效地进行命名实体识别，是实现信息提取、支持知识发现和加速科研决策的关键环节。信息抽取技术是从科学文献中自动获取结构化知识的关键技术之一，对于加速材料领域的知识发现与智能化应用具有重要意义。然而，材料科学文献数量的快速增长和学科交叉所带来的术语密集与知识体系复杂化问题，在材料科学等高度专业化的领域尤为突出，这使得传统人工检索难以保证效率与准确性。与此同时，现有联合抽取模型在面对材料文献中特有的信息表达复杂、知识关联隐蔽以及实体边界模糊等挑战时，性能仍然受限。

信息抽取是从海量非结构化文本中自动获取结构化知识的关键技术之一，其核心任务包括命名实体识别与关系抽取。前者旨在定位并分类文本中的特定实体，后者则致力于识别这些实体间存在的语义关系。在信息抽取流水线中，两个子任务串行执行。然而，任务间有限的交互导致关系抽取任务未能充分利用命名实体识别过程中的丰富特征信息，从而制约了性能进一步提升。同时，作为自监督表示学习领域的一项重要进展，对比学习的出现尽管为知识迁移提供了有力的技术支持，但在应用于命名实体识别任务时，现有方法在实体跨度特征表示上存在不足。为此，针对现有命名实体识别方法在长跨度表示上语义信息不足的问题，提出了一种基于偶数卷积的跨度表示增强模块。针对现有基于对比学习的命名实体识别框架对比维度单一的问题，引入了基于跨度和类别的双重对比学习目标，与仅进行跨度优化的方法相比，本文方法学习到了对实体类别更具区分性的表示。针对信息抽取方法中子任务间交互不足的局限性，提出了一种知识迁移方法，旨在将基于对比学习的命名实体识别模型特征迁移至关系抽取模型。

针对传统的“先实体识别、后关系抽取”式流水线方法存在错误累积和忽略任务交互等困难。提出两种联合抽取模型，以提升对材料文献的实体识别与关系抽取精度，为构建材料领域知识图谱和实现材料性能预测提供了坚实的技术支撑。针对材料文献中信息表示复杂与交互隐蔽的问题，提出了基于多粒度表示与特征增强的联合抽取模型。针对联合抽取中实体边界模糊和关系解码复杂的问题，提出了基于边界感知与分割式解码的联合抽取模型。在复合材料领域的应用探索方面，基于本文所提模型，成功构建了复合材料领域知识图谱。同时，进一步针对高度专业化的材料文献挖掘，提出了基于大语言模型的上下文一致的实体显式标注方法与结合直接偏好优化的双阶段训练方法，探索出一种上下文一致的实体显式标注方法与双阶段训练方法，来解决大语言模型在生成式输出与命名实体识别任务序列标注特性之间的差异，克服材料文献中大量低频专业术语导致命名实体识别精度不足的问题，提出了一种基于领域语言模型的语义融合方法，通过将不同领域语言模型和领域词级向量进行语义融合，来增强对科学文献的深层语义理解，提高识别精度。利用实验验证了方法对材料科学领域中复杂专业文本的适应性，展现出在科研文本挖掘及辅助研发决策方面的实用价值。

拟交流类型：邀请报告

9085

智能高通量自动固液配料及钙钛矿刮涂系统

崔华晨*、颜畅、赵航、肖殿勋

香港科技大学（广州）

材料研发过程中，需要大量制备混合各类固体和液体用于新材料测试与表征，传统人工固液配料的方式存在可靠性差、重复性弱、偶然误差大、耗时长、不可追溯和难以在极端工况（超净、无水环境等）下进行等缺点，极大制约了新材料研发的进程。本团队致力于解决这一问题，以钙钛矿材料系统为例，开发了高通量自动固液配料及刮涂系统，实现了全流程智能自检，自动修正系统状态，能够适配各类固体和液体的高精度大量程制备混合，具有可靠性高、重复性强、误差小、通量高、全过程可追溯以及适用极端工况等特点，能够大大加速新材料研发的进程。通过结合多种特异化固体称重设计和多量程分段液体称量设计，该系统的固体闭环称重精度达到 0.1 毫克，量程范围达到 50 克，液体称量精度达到 0.1 微升，称量范围达到 100 毫升。同时，团队还以刮涂工艺为例，研发了钙钛矿固液配料的后道工艺，通过结合多自由度机械臂、非标自动化模组设计等，实现了原料自动获取、刮涂过程各参数的自动化调控等。固液配料和刮涂结束后，各种参数指标均在控制系统中进行留存记录，方便后续研发过程中通过人工智能等先进手段进行数据分析和溯源。该研究实现了高精度大量程固体液体的高通量自动称量，将助力未来新材料研发和相应后续自动化系统的开发，为新材料研发提供新的范式。

拟交流类型：邀请报告

11535

基于超重力技术的材料高通量制备与评估

韦华*

浙江大学

传统材料研发模式周期长，投入大，且由于材料成分-结构-性能之间非线性关系，很难实现面向实际性能需求的材料设计。美国为了持续保持自身的科技优势，2011 年率先启动“材料基因组计划”，建立基于高通量材料计算、高通量材料制备与表征和专用数据库技术的材料研发新模式，实现材料研发由“经验指导实验”向“理论预测、实验验证”的转变。高通量材料制备与评估是“材料基因组计划”顺利实施的基础。本项目利用超重力场在相同半径处存在一个等超重力场、沿径向存在离心力梯度的特点，在材料制备时，借助超重力强化密度差产生的浮力对流效应，通过温度、冷速、超重力参数等因素调控形核长大行为和凝固组织形成顺序，获得具有成分或组织梯度的材料，实现材料高通量制备；在材料性能评估时，样品性能测试时可实现相同温度、不同应力水平下测试，明显缩短材料性能测试时间，旨在为高性能材料研发提供技术支撑。

拟交流类型：邀请报告

4699

人工智能材料制备中的机遇与挑战

安唐林*

合肥科晶材料技术有限公司

AI 在材料制备领域的研究和应用正在颠覆传统的研发模式，同时带来前所未有的机遇和挑战，高通量虚拟筛选，生成式设计突破和多物理场的耦合建模，都大大加速了新材料的研发和工艺的优化。但是正式因为如此，需要实验样品数据较多和对数据的准确性要求升高，理论计算与实验要紧密结合避免弯路。合肥科晶此次报告中，专注与采用高通量实验与传统实验相比提升实验数据的数量，用于验收材料设计和材料初步筛选，同时也采用智能化实验平台进一步提升实验数据的准确性：最大程度避免人为误差和合成出单相均质材料。

拟交流类型：邀请报告

2264

FeSe 超导薄膜的高通量制备与性能优化研究

何亚勋, 刘行健, 张嘉颖, 曹世勋, 葛军怡*

上海大学

超导 FeSe 涂层导体具有最简单的元素组成和结构, 同时其超导转变温度(T_c)大范围可调, 成为超导机制研究的理想平台及应用的潜在候选材料。本研究采用高通量实验、材料数据库构建与数据驱动分析相结合的方法, 系统研究了 FeSe 超导薄膜的制备与性能优化。我们利用脉冲激光沉积技术中激光与 FeSe 靶材产生的等离子体羽辉所自然形成的空间分布不均匀性, 实现了高通量实验策略, 快速在多种衬底上获得了具有多参数梯度分布的 FeSe 薄膜, 包括晶格常数、化学组成、结晶度、厚度、应变状态、缺陷密度以及 T_c 等关键参数。我们系统研究了这些梯度变化与生长条件、材料特性之间的内在关联, 为精准调控 FeSe 超导薄膜性能提供了实验依据。通过这种高通量制备方法, 我们获得了 $T_c \sim 18$ K 的高性能 FeSe 薄膜(150 nm)。进一步通过多轮高通量实验, 我们建立起一个 FeSe 薄膜样本库。我们进一步将实验中获得的大量多维数据用于训练随机森林(Random Forest)模型, 并评估了各物理参数对超导转变温度的贡献程度, 以期找出影响 FeSe 超导薄膜 T_c 的主导因素。本研究通过材料基因组工程的“三位一体”策略(高通量实验、材料数据库与数据驱动分析), 为“11 相”铁基超导薄膜的性能优化提供了新思路, 也为深化 FeSe 体系超导物理机制的理解提供了关键实验依据。

Presenting Type: Oral

2140

High-throughput Methods for Fabricating Low-dimensional Carbon Nanomaterials on Metal Surfaces

Jiayi Lu¹, Chanyu Li², Hao Jiang¹, Zhiwen Zhu¹, Qiang Sun^{1,2}

1. Materials Genome Institute, Shanghai University

2. Qianweichang College, Shanghai University

The rapid discovery and optimization of low-dimensional carbon-based nanomaterials demand high-throughput experimental strategies that can efficiently explore vast compositional and structural spaces. In this talk, I will present our recent advances in the high-throughput fabrication of surface-supported molecular networks, including supramolecular hydrogen bonding assemblies, metal-organic frameworks (MOFs), and high-entropy molecular systems on metal substrates. By integrating physical masking techniques into ultra-high vacuum (UHV) deposition setups, we demonstrate spatially addressable preparation of sample libraries with continuous gradients of molecular or metallic components. Notably, a rotational mask inspired by Venn diagrams enables combinatorial deposition of multiple ligands, offering a unique route for high-throughput exploration of high-entropy molecular networks. These libraries enable systematic exploration of molecular stoichiometries and coordination environments on a single substrate. High-resolution scanning probe microscopy reveals diverse structural motifs, from ordered assemblies to disordered high-entropy networks. Graph-theoretical analyses and computational simulations further provide insights into structure-property relationships and entropy-driven behaviors. The demonstration of high-throughput methods offers a robust platform for

accelerating the discovery of functional low-dimensional carbon nanomaterials with tailored properties for future applications in electronics, catalysis, and molecular devices.

Presenting Type: Poster

671

SimXRD-4M: Big Simulated X-ray Diffraction Data and Crystal Symmetry Classification Benchmark

Bin Cao*, Yang Liu, Zinan Zheng, Ruifeng Tan, Jia Li, Tong-Yi Zhang

The Hong Kong University of Science and Technology (Guangzhou)

Powder X-ray diffraction (XRD) patterns are highly effective for crystal identification and play a pivotal role in materials discovery. While machine learning (ML) has advanced the analysis of powder XRD patterns, progress has been constrained by the limited availability of training data and established benchmarks. To address this, we introduce SimXRD, the largest open-source simulated XRD pattern dataset to date, aimed at accelerating the development of crystallographic informatics. We developed a novel XRD simulation method that incorporates comprehensive physical interactions, resulting in a high-fidelity database. SimXRD comprises 4,065,346 simulated powder XRD patterns, representing 119,569 unique crystal structures under 33 simulated conditions that reflect real-world variations. We benchmark 21 sequence models in both in-library and out-of-library scenarios and analyze the impact of class imbalance in long-tailed crystal label distributions. Remarkably, we find that: (1) current neural networks struggle with classifying low-frequency crystals, particularly in out-of-library situations; (2) models trained on SimXRD can generalize to real experimental data.

Presenting Type: Poster

1769

Automated production of batched unclonable micro-patterns anti-counterfeiting labels with strong robustness and rapid recognition speed

Yuzheng He¹, Zunshuai Zhang¹, Yifei Xing¹, Zhiyuan Lang¹, Jinbo Wu², Jiong Yang*¹

1. Materials Genome Institute, Shanghai Engineering Research Center for Integrated Circuits and Advanced Display Materials, Shanghai University

2. Faculty of Materials Science, Shenzhen MSU-BIT University

Anti-counterfeiting technologies are indeed crucial for information security and protecting product authenticity. Traditional anti-counterfeiting methods have their limitations due to their clonable nature. Exploring new technologies, particularly those based on pixel-level textures is a promising avenue to address the clonable issue due to high encoding capacity. However, research in this field is still in its early stage. This work introduces a new fluorescent anti-counterfeiting label technology with four key characteristics: efficient laser etching, high-throughput fabrication and segmentation, robustness aided by data augmentation, and an

exceptionally high recognition speed. To be specific, the etching achieves a speed of 1,200 labels/3s, the high throughput yields a rate of 2,400 labels/4 min, and a total count of about 5.2×10^4 labels. The number of labels is further augmented to about 5.2×10^6 by implementing arbitrary rotation and brightness variation to enhance the robustness in the recognition procedure. We divide these labels into 44 categories based on differences in patterns. Utilizing machine learning methods, we have achieved a total recognition (including extraction and search process) time per label averaging 421.96 ms without classification, and 40.13 ms with classification. Specifically, the search process with classification is nearly fiftieth times shorter than the non-classification method, reaching 8.52 milliseconds in average. The overall recognition time is much faster than previous works, and achieve an accuracy over 98.7%. This work significantly increases the practical significance of pixel-level anti-counterfeiting labels.

Presenting Type: Poster

4259

Physics-guided deep learning strategy for 2D structure reconstruction from diffraction patterns

Rong Fu^{1,2}, Tianhao Su¹, Yue Wu¹, Musen Li^{1,2}, Runhai Ouyang¹, Shunbo Hu¹, Michael Cortie², Danica Solina², Zhongming Ren^{*1}, Tongyi Zhang¹

1. Shanghai University

2. University of Technology Sydney

Two-dimensional (2D) materials have garnered significant attention due to their tunable electronic and optical properties and exceptional mechanical performance. Reconstructing 2D structures from diffraction patterns without prior assumptions or comprehensive knowledge is challenging, especially for heterogeneous stacking and quantum 2D materials. Here, we introduce DD2D (diffraction pattern deep-reconstruction 2D structures), a physics-guided deep learning method that predicts 2D structures directly from diffraction patterns. DD2D employs a twin-tower framework, integrating a crystallographic geometric encoder and a site texture encoder, and uses a self-attention mechanism to identify intrinsic correlations in physical information and corresponding areas in the diffraction pattern. The results demonstrate high anti-interference, robust recognition capabilities, reliable interpretability, and prediction accuracy of up to 99.0%, highlighting its potential for future 2D materials discoveries.

Presenting Type: Poster

4769

Decoding synergistic residue interactions in mussel-inspired adhesives through machine learning-enhanced molecular dynamics

Binchen Du*

China University of Petroleum (East China)

Adhesion mechanisms in marine mussels have inspired the development of bioinspired adhesives, particularly due to the unique properties of proteins enriched with 3,4-dihydroxyphenylalanine. Despite advancements in synthetic catechol-based polymers, their performance in wet environments remains limited, indicating that a deeper understanding of the synergistic interactions among amino acids is needed. Here we show that by integrating molecular dynamics simulations and machine learning, significant insights into the adhesion properties of mussel-derived peptides can be gained, leading to the formulation of the "seesaw effect." This concept elucidates the roles of end-group dynamics, side-chain interactions, and steric constraints in peptide adhesion. Our findings reveal that non-DOPA-rich peptides can achieve adhesion strengths comparable to those of their DOPA-rich counterparts, challenging traditional notions that emphasize catechol groups as essential for adhesion. This work not only enhances our understanding of natural adhesion mechanisms but also establishes a foundation for the rational design of functional peptides with tailored adhesive properties, advancing the field of biomimetic materials.

Presenting Type: Poster

4770

Development of a Coarse-Grained Model for Heavy Oil Systems Based on Machine Learning

Haiyang Li*

China University of Petroleum (East China)

As a crucial unconventional petroleum resource, heavy oil is characterized by its high density, elevated viscosity, and poor flowability, which significantly impede extraction efficiency. Understanding the viscosity mechanisms and developing effective viscosity reducers are pivotal for heavy oil utilization. Conventional experimental approaches exhibit inherent limitations in microstructure characterization and mechanistic interpretation, whereas molecular dynamics (MD) simulations offer a novel paradigm for heavy oil research due to their unique capability in microscopic analysis. However, current all-atom simulations are constrained by computational scale limitations, while existing coarse-grained (CG) methods demonstrate inadequate accuracy in characterizing aromatic condensed-ring structures, necessitating the development of high-precision CG models to overcome this technical barrier. Herein, we develop a systematic coarse-graining methodology framework for heavy oil, using five representative structural units as the fundamental building blocks for model construction. Using radial distribution functions obtained from all-atom MD simulations as key optimization targets, we innovatively integrate particle swarm optimization (PSO) with Bayesian optimization (BO) methods to precisely fit Lennard-Jones potential parameters for CG beads. Through comprehensive comparative analysis with the mainstream MARTINI force field, our model demonstrates superior performance in both structural characterization accuracy and dynamic behavior prediction for heavy oil systems. The developed CG model provides critical technical support for elucidating viscosity mechanisms and designing efficient viscosity-reducing molecules, thereby facilitating breakthroughs in enhanced heavy oil recovery technologies.

Presenting Type: Poster

5945

Ga₂Se₃-based Ovonic Threshold Switching selector for high-density memory applications

Haotian Wang, Wei Ren*

Shanghai University

The increasing demand for high-density and high-speed memory systems, driven by big data and artificial intelligence, presents significant challenges for current information storage architectures, particularly in 3D stacking technologies. Selector devices with low leakage current and high thermal stability remain a critical limitation. This study investigates Ga₂Se₃ as a simple binary Ovonic Threshold Switching (OTS) material through advanced fabrication, characterization, and first-principles simulations. Our key findings demonstrate that Ga₂Se₃ exhibits exceptional low leakage current (~8 nA), thermal stability (up to 400° C), excellent performance at dimensions as small as 60 nm, and fast switching speed (~10 ns). These results, combined with insights into its electronic state localization and bonding characteristics, position Ga₂Se₃ as a promising candidate for next-generation high-density storage and computing technologies.

Presenting Type: Poster

6377

The Impact of Silicon Doping on the Structure and Dielectric Properties of HfO₂

Yingtao Yang, Wei Ren*

Shanghai University

Tetravalent dopant elements (zirconium and silicon) of hafnium dioxide (HfO₂) has significant effect on the relative stability and dielectric properties of different crystal phases (monoclinic, cubic, tetragonal, and orthorhombic). First-principles calculations indicate that an increase in the doping concentration of the Zr atoms leads to a linear trend in the energy and dielectric constant of the different phases of HfO₂. On the contrary, first-principles calculations reveal that Si dopant in HfO₂ induces local SiO₂ quartz-like tetrahedral ordering when Si-Si distances reach 4.991 Å, stabilizing the tetragonal phase Hf_xSi_{1-x}O₂ with a dielectric constant of 32.12. This phenomenon can be explained by structural changes and charge transfer mechanisms, demonstrating dopant spatial distribution as a critical design parameter for high-κ dielectrics. This study provides a theoretical basis and guidance for the development of a new generation high-performance dielectric materials.

Presenting Type: Poster

6400

Inverse design and classification of topological materials using deep learning

Tao Hong¹, Jingchang Sun^{1,2}, Tongyi Zhang^{1,3}, Wei Ren^{1,2,3}, Guixin Cao^{*1,3}

1. Materials Genome Institute, Shanghai University, Shanghai 200444, China

2. QianWeiChang College, Shanghai University, Shanghai 200444, China

3. Shanghai Engineering Research Center for Integrated Circuits and Advanced Display Materials, Shanghai University, Shanghai 200444, China

Topological materials possess unique electronic properties that are of great interest for both fundamental research and advanced technological applications. However, conventional computational approaches face limitations in efficiently discovering novel topological phases. In this study, we present a comprehensive deep learning-based framework for the inverse design and classification of novel functional topological materials. Our proposed pipeline, CTMT, integrates CDVAE for crystal structure generation, Topogivity for topological feature embedding, interatomic potentials (IAPs) via M3GNet for stability assessment, and Topological Quantum Chemistry (TQC) for topological validation. Complementing this is TopoGNN, a graph neural network classifier that determines the topological types with state-of-the-art accuracy. Together, this integrated approach enables an end-to-end workflow—from generating candidate structures to verifying their stability and topological nature. Using this method, we successfully identify four topological insulators and sixteen topological semimetals, including chiral Kramers-Weyl fermion semimetals and low-symmetry chiral systems, which were previously challenging to characterize. These findings demonstrate the power of data-driven methods in accelerating the discovery of advanced topological materials and underscore the potential of machine learning in modern materials design.

Presenting Type: Poster

6817

Microstructure Generation of Ni-based Single-crystal Superalloys via Composition-Conditioned Diffusion Models

Yingying Ma¹, Wenyue Zhao^{*1,2}, Mingzhe Li³, Yi Ru^{1,2}, Huibin Xu^{1,2}

1. Tianmushan Laboratory, Beihang University, Hangzhou 311115, China

2. School of Materials Science and Engineering, Beihang University, Beijing 100191, China

3. Research Institute of Aero-Engine, Beihang University, Beijing 102206, China

The microstructure of Ni-based single-crystal (SX) superalloys serves as a critical link connecting their alloy composition to intrinsic/service mechanical properties (e.g., creep resistance). However, high experimental costs and data confidentiality concerns in the Ni-based SX superalloy field severely restrict access to publicly available experimental microstructure images, hindering progress in image-based machine learning research. Recently, diffusion models have emerged as a powerful approach for microstructure generation in diverse material systems, offering an effective means for large-scale microstructure acquisition. This study focuses on a multi-dimensional composition-guided microstructure generation framework. Leveraging a phase-field-simulated dataset capturing microstructural evolution in ternary Ni-Al-Mo alloys aged at 1473 K, we develop a composition-conditioned denoising diffusion implicit model (DDIM) with accelerated sampling capabilities. In

the architectural design of diffusion models for Ni-based SX superalloy microstructures, composition conditions are fused via cross-attention mechanisms, with Diffusion Transformers (DiTs) replacing the conventional U-Net backbone. Experiments comprehensively assess generation performance using both computer vision metrics (FID, LPIPS) and microstructural spatial statistics (one-point statistics, two-point correlation functions, and higher-order statistics). Results demonstrate that microstructures generated by our framework exhibit significantly superior morphological fidelity and compositional correlation compared to the baseline models in this study. To investigate generation quality variations under different composition conditions, we employ DensMap to quantify the local density of points in the composition space, characterizing the density level of neighboring composition distributions. We analyze the correlation between this density and generation quality, and thereby devise improvement strategies for low-density regions. This study offers new insights into the use of conditional diffusion models for microstructure generation and prediction.

拟交流类型：墙报

878

结合机器学习模型与第一性原理高通量计算加速搜索新型热电材料

樊涛*

中国科学院上海硅酸盐研究所

热电材料能够实现电能与热能之间的直接转换，因此可用于废热回收和固态制冷。新型热电材料的发现主要依赖于实验和第一性原理计算，但这些方法通常成本高昂且耗时。近年来，通过机器学习预测材料性质已成为材料科学中的热门方法。本研究基于公开数据库中的化合物，开展了第一性原理输运性质计算。我们构建了包含 796 种化合物的热电相关输运性质的数据库，其中包括多种新型且具有应用潜力的热电材料。例如， $\text{Ge}_5\text{Te}_4\text{Se}$ 、 KBiSe_2 、 GeTe ($Pnma$ 相) 和 BaCu_2Te_2 等材料的热电性能可能优于当前最先进的热电材料。为进一步加速新型热电材料的高通量筛选，我们分别针对 n 型和 p 型掺杂，训练了多种机器学习分类模型来区分候选化合物。首先，针对 n 型和 p 型数据，分别采用四类集成学习算法 (random forest, gradient boosting decision tree, adaptive boosting, extreme gradient boosting) 结合六种输入特征向量 (成分+结构信息) 进行训练与比较。测试集结果表明，采用合适特征向量作为输入的集成学习算法分类准确率可超过 85%，且精确率 (precision) 和召回率 (recall) 均高于 90%。后两项指标尤为重要，因为我们更关注对正样本 (好的热电材料) 的筛选能力。此外，我们还训练了两类图神经网络模型 (MEGNet 和 M3GNet)。尽管深度学习模型通常需依赖大数据，但通过超参数优化后，其在测试集上的性能与集成学习模型相当。尤其是针对 n 型数据的 M3GNet 模型，其准确率、精确率和召回率均超过 90%，为所有模型中表现最佳者。所有模型的 AUC 值均高于 0.9，且 ROC 曲线接近理想分类器。本文提出的模型可联合用于热电材料的预筛选，从而提高对未知数据的泛化能力和鲁棒性。最终，结合机器学习预测与高通量第一性原理计算，将极大加速高性能热电材料的发现进程。

拟交流类型：墙报

1897

基于相场信息和机器学习的镍基高温合金蠕变行为研究

宋俊鹏^{1,2}、单野^{1,2}、张赞^{1,2}、李永胜^{*1,2}

1. 南京理工大学材料科学与工程学院

2. 工信部先进金属及金属间化合物材料技术重点实验室

蠕变应变是表征高温合金的蠕变损伤程度和蠕变寿命的重要参数。蠕变过程常伴随着元素再分配和微观结构演变，因此研究蠕变组织和应变/应力的多特征关系对于高温合金的设计和预测至关重要。在这项工作中，开发了一种基于相场(PF)的机器学习(ML)来研究 Ni-12.2Al-6Co-2.5Ta(at.%)高温合金的蠕变应变。采用蠕变损伤晶体塑性 PF 模型模拟蠕变形态、成分和应变演化，使用全面的特征数据建立基于 ML 的蠕变应变定量预测模型，以评估成分和微观结构对蠕变行为的影响，并采用 SHAP 解释性分析方法进一步解释 γ' 相体积分数和蠕变应变的内在关系。在过程中所建立的相分类模型的准确率超过 99.2%和蠕变应变预测模型的均方误差为 0.304。后续引入两点相关分析和 PCA 降维方法使定量蠕变应变预测模型的均方误差从 0.304 降低到 0.235。本研究说明了将 PF 信息驱动的 ML 集成在开发高温合金图像识别和蠕变性能预测模型中的有效性。

拟交流类型：墙报

3261

材料领域知识嵌入的数据量治理 workflow

杨正伟、余振奎、徐梦、左维、刘悦、施思齐*

上海大学

充足的数据量是构建准确、可靠的材料构效关系模型的先决条件。然而，当前为摆脱材料结构化数据的小样本特性仅专注于“量”的积累，忽视“质”对于机器学习模型准确挖掘隐含客观规律的关键作用，进而造成“数据污染”等问题，且目前尚未有研究该问题展开研究。为弥补此方面空白，本研究提出了一种通用且模型无关的样本量评估与提升 workflow，从统计学以及领域知识出发，多维度、全方面评估生成数据质量并有效筛选出符合领域知识的材料结构化数据。首先，通过分析特征和样本的多样性和数据集在目标任务上的建模精度，设计基于平衡性和洞察力的样本量评估规则以准确筛选“问题”材料数据集；然后，利用多维度统计学评估指标结合机器学习洞察力综合评估生成样本质量；进一步，将领域知识编码为筛选规则用于筛选高质量且符合领域知识的生成样本。实验结果表明，该 workflow 能够在 60 份材料构效关系数据集以 93.33% 的准确率精准筛选出“问题”数据集，通过全面评估与筛选的数据集洞察力平均提升 7%，有效验证了该 workflow 在提升材料生成结构化数据质量的有效性，大大降低了“数据污染”风险，为数据驱动方法精准揭示构效关系提供高质量数据基础，进而加快材料研发进程。

拟交流类型：墙报

3385

领域知识协同大语言模型发现新型无机固态电解质

张王颖、杨正伟、余振奎、马晨旭、吴杰、刘悦、施思齐*

上海大学

无机固态电解质是下一代高安全、高能量密度电池的核心材料，其开发面临两大核心挑战：晶体结构与离子输运性能间复杂的构效关系，以及传统随机生成方法在巨大化合物空间中的低效率。针对这些挑战，本研究提出了一个融合材料领域知识和大语言模型的反向设计全流程。首先，基于无机固态电解质结构类型与电荷守恒定律等物化规则进行候选化学式的定向生成，实现从传统随机组合到知识引导的定向设计的范式转变。然后，利用领域知识微调大语言模型定向可控生成设计物化合理的晶体结构，并创新性地结合蒙特卡洛树搜索算法与图神经网络构建“性能评估-

优化迭代”的闭环系统。最后，采用多尺度计算方法（包括第一性原理计算和分子动力学模拟）高通量筛选与实验验证相结合的策略，确保候选化合物的可靠性。实验结果表明，以氧化物固态电解质体系为例，本方法成功生成了超过 30 万种候选化合物。经过系统筛选，新型氧化物固态电解质化合物 LiTa_2PO_8 展现出优异的综合性能：0.2 eV 的低激活能、1.2 mS/cm 的高室温离子电导率以及出色的结构稳定性，满足全固态电池对电解质材料的关键要求。本研究不仅为固态电解质的设计提供了新思路，更重要的是建立了一个可扩展的人工智能辅助材料发现框架，为其他功能材料的设计提供了方法论参考。

拟交流类型：墙报

3625

基于低成本自动化平台的液体滴定自驱动实验室

杨泉、蔡亮亮、孙强*

上海大学

传统化学实验高度依赖人工操作，而目前的自驱动实验室成本极高^[1]，限制了高通量材料研发的普及性。本研究提出了一种低成本，模块化的自动 PH 滴定系统，将机器学习与硬件控制结合，实现了无人值守的液体操作与实验闭环优化。系统核心由微型控制器，蠕动泵，传感器组成，利用嵌入式开发极大地降低了硬件成本。通过集成实时 PH 值监控与主动学习算法，系统可自主预测，并快速调节到目标 PH 值^[2]。模块化的设计使其能轻松地加入更多的功能以应对不同的液体实验需求，例如接入摄像头利用计算机视觉实现对视觉变化的捕捉，接入大语言模型使其自动设计实验。本工作为资源有限实验室提供了可扩展的选项，同时简易的设计也能让非专业领域快速上手。

参考文献：

[1] Lo, S.; Baird, S. G.; Schrier, J.; Blaiszik, B.; Carson, N.; Foster, I.; Aguilar-Granda, A.; Kalinin, S. V.; Maruyama, B.; Politi, M.; Tran, H.; Sparks, T. D.; Aspuru-Guzik, A. Review of Low-Cost Self-Driving Laboratories in Chemistry and Materials Science: The “Frugal Twin” Concept. *Digital Discovery* 2024, 3 (5), 842 – 868.

[2] Yang, Q.; Sun, Q.; Cai, L. Self-Driven Laboratory for Liquid Titration Based on a Low-Cost Automation Platform, in preparation.

拟交流类型：墙报

4202

高熵合金性能预测与智能设计平台

周天毅、尹佳宁、洪志炀、熊杰*

上海大学

高熵合金以其多元组分和复杂微观结构，展现出优异的力学性能和卓越的高温稳定性，成为航空航天、能源等领域关键的结构材料。然而，由于成分空间庞大且相互作用复杂，传统的“试错法”试验研发周期长、成本高，限制了高性能合金的快速设计与优化。而人工智能方法通过挖掘复杂材料数据中的潜在规律，能够大幅提升材料性能预测的准确性和设计效率，极大加速新材料的设计与开发进程，人工智能赋能材料设计已成为当代研究的潮流[1]。本工作开发设计了一个高熵合金智能预测及设计平台，通过对高熵合金数据进行系统预处理和特征工程，从而高效构建

性能预测模型，最终实现合金成分的优化设计。同时，团队基于该模型开发了一个交互式网页平台，供用户实时输入合金成分，预测高熵合金的力学性能、热稳定性及抗氧化性能。该平台界面直观、响应迅速，极大提升了材料设计的便捷性和精准性，充分展示了人工智能技术在材料科学领域的实际应用潜力[2]。本工作实现了高熵合金多性能的高效预测与优化设计，能够显著缩短高熵合金的研发周期，为材料科学与人工智能的融合提供了有力示范。

拟交流类型：墙报

4246

铅金属的第一性原理热力学计算

胡锦涛*、史腾玉、罗亚琪、谢玮

上海大学

金属铅具有高熔点、高硬度和优异的抗腐蚀能力，在航空航天、核工业等领域有广泛应用。为预测其在绝热冲击下的相变，需要准确的状态方程。此前热力学计算基于简谐近似，忽略了温度依赖声子重整、电声耦合等效应，在极端温压条件下误差积累显著，难以解释实验现象。

我们结合拉丁超立方采样和非谐特殊位移方法（A-SDM）开展铅单质的热力学计算。A-SDM 显著降低声子重整模型计算量，拉丁超立方采样显著降低描述不等轴热膨胀参数空间所需的采样数，两者结合使得完全基于第一性原理密度泛函理论计算材料热力学成为可能。基于上述方法计算纯铅单质的三种相态（ α 相、 ω 相、 β 相）的相图吉布斯自由能等热力学量包含温度依赖的声子重整、电子展宽、电声耦合等效应，预测的相边界和晶格膨胀均与实验表征定性一致、准度均优于传统的简谐近似模型

通过上述热力学计算，我们发现系统引入电子和声子温度效应可显著提升金属材料热力学量预测精度，为定量研究金属材料在极端服役条件下的性能提供新范式，为第一性原理计算指导实验优化合金热力学性质提供可能。

拟交流类型：墙报

5588

基于 HH130 机器学习势函数库的固溶体热电材料热导率快速预测

郭绍军、杨钰嫣、戴胜男、杨炯*

上海大学

热电材料是一种能够实现电能与热能相互转换的功能材料，主要通过提高功率因子和降低热导率来优化无量纲优值 ZT。在热电领域，高浓度掺杂往往能够形成固溶体，在优化电学性能的同时降低晶格热导率。一般地，实验上通过点缺陷模型对固溶体热导率的降幅进行参数拟合。为了计算固溶体晶格热导率，常用方法是在第一性原理（DFT）框架下，通过有限位移法获得力常数后求解玻尔兹曼输运（BTE）方程，最后得到体系晶格热导率及热输运相关物理量。但该方法需要构建多原子超胞进行计算，耗时耗力，相对低效。而机器学习势函数（MLIP）方法能够有效解决该问题。因此，本工作在课题组前期开发的 HH130 机器学习势函数库^[1]的基础上，选择半哈斯勒热电材料作为研究对象，通过合并组分相关的基体训练集，并利用少量的固溶体 DFT 结果微调初始势函数，得到的势函数模型就能实现对固溶体热导率的高精度和高效率预测。例如，基于双重自适应取样程序，通过 $\text{Ti}_{0.5}\text{Zr}_{0.25}\text{Hf}_{0.25}\text{NiSn}$ 微调模型，就能获得媲美 DFT 精度的势函数模型，该模型可以预测 $\text{Ti}_x\text{Zr}_y\text{Hf}_{1-x-y}\text{NiSn}$ 固溶体系的热导率，以及固溶体和基体的声子群速度、格林艾森常数、声声散射率等物理量的对比；其中 $\text{Ti}_{0.5}\text{Zr}_{0.5}\text{NiSn}$ ：DFT 与 MLIP 所得声子谱之间的平

均绝对误差 $MAE = 0.0382$ THz, 300 K 下 DFT-BTE 计算得到热导率为 10.476, 势函数模型预测为 10.946, 差距仅为 4.65%。此外, 只针对某一浓度固溶体的微调方法能够进一步提高模型的预测精度。最后, 本工作所使用的方法流程与框架为实现固溶体热导率的高效预测以及后续相关物理量的高效处理提供了一种兼顾效率与精度的方法。

参考文献

[1] YANG Y, LIN Y, DAI S, et al. HH130: a standardized database of machine learning interatomic potentials, datasets, and its applications in the thermal transport of half-Heusler thermoelectrics [J]. Digital Discovery, 2024, 3(11): 2201-10.

拟交流类型: 墙报

878

基于 PINN-UNet 网络架构的相场模拟求解加速策略

郭楷淇, 胡一鸣, 施荣沛*

哈尔滨工业大学(深圳)

材料科学研究中常涉及相场方程的数值求解, 然而该过程通常需要巨大的时间与计算空间开销, 这导致数值模拟过程成为了材料基因工程的一大瓶颈。基于深度学习的时间序列预测方法具有强大的高维特征提取能力, 可有效捕捉复杂时序关系, 为建立端到端的预测模型、加速计算过程、优化材料设计及提供潜在解释开辟了新途径。本研究将聚焦于微观组织演化预测, 旨在提高相场模拟求解效率。通过结合能够以物理控制方程信息优化模型训练效果的 PINN (Physics Informed Neural Network) 和能够有效提取图像高维特征的 UNet 架构, 并引入能够使得时间序列预测更为平滑的残差块 (Residual Block), 本研究提出了一个能够有效加速相场模拟求解的 PINN-UNet 框架, 该框架还可与 DNS 集成, 借助 pytorch 框架, 对 DNS 进行 GPU 并行加速式改写, 兼顾效率与精度, 此外, 还可以与间隔采样等策略相结合, 进一步提高预测效率。该集成框架相较于传统有限差分法实现了 5.3 倍的加速, 并能精确预测枝晶生长过程。该方法还可拓展至二维/三维调幅分解等场景, 在大尺度空间问题求解上展现出显著的效率优势。

拟交流类型: 墙报

6589

Ge-Bi-Te 体系的相图热力学研究

周佳强、汪炯*、崔东宇

中南大学

高效热电材料可以通过固态热电转换提高能源利用率, 同时可以减少温室气体的排放, 因此利用高效热电材料将废热转化为电能已成为可持续发展的重要一环。BiTe 基合金由于其良好的热电性能而受到研究者广泛关注。然而, 其室温下热电优值 () 并不突出, 在材料综合性能和规模化应用方面仍面临重大挑战。目前有报道称在 BiTe 基体系中掺杂 Ge 可以有效提高热电转换效率, 这为研究人员提供了一个重要的研究领域。然而, 关于 Ge-Bi-Te 体系的热力学研究尚未报道。在本工作中, 采用关键实验耦合 CALPHAD 的方法, 同时结合文献报道的 Ge-Bi-Te 体系实验平衡数据, 对该体系进行了系统地相图热力学研究。应用平衡合金法, 借助 SEM/EDX、EPMA、以及 XRD 等分析手段, 测量了 Ge-Bi-Te 三元系 573 K 和 673 K 的相关系。实验验证了 $Ge_3Bi_2Te_6$ 、 $Ge_1Bi_2Te_4$ 、 $Ge_1Bi_4Te_7$ 、 $Ge_2Bi_2Te_5$ 、 $Ge_5Bi_2Te_8$ 、 $Ge_4Bi_2Te_7$ 可以稳定存在于该体系中。另外, 利用

CALPHAD 方法对 Ge-Bi-Te 体系进行了热力学优化, 得到了一组自洽的 Ge-Bi-Te 体系热力学参数, 计算结果与文献实验数据的比较表明, 本模型能较好地反映可靠的实验信息。

拟交流类型: 墙报

7047

一种通用的合金杂质扩散激活能预测模型及其应用

杨静¹、吴晓科^{1,2}、张利军^{*1}

1. 中南大学
2. 兰州大学

扩散行为广泛存在于合金凝固、时效、析出和蠕变等过程。杂质扩散系数是构建多元合金扩散数据库的基础, 但其测定多集中于稳定相和常见体系, 而亚稳相和贵金属数据匮乏。现有物理模型可预测自扩散激活能, 从而获取自扩散系数, 但对于杂质扩散激活能尚未建立统一有效的计算模型。基于文献数据和评估的扩散系数结果, 采用机器学习筛选出影响杂质扩散系数及其激活能的关键特征参数, 揭示了杂质扩散的内禀机制, 构建了杂质扩散系数激活能的预测模型。随后将该模型应用于多种晶体结构合金、顺磁/铁磁态合金、高/低熔点合金以及亚稳相的杂质扩散激活能预测, 通过与实验数据和第一性原理计算结果对比, 验证了模型的准确性。论文发展的预测模型为多组分合金原子迁移率数据库构建提供了可靠的杂质扩散活化能计算方法, 尤其在亚稳态和有序/无序态的杂质扩散活化能预测方面展示出重要应用潜力。

拟交流类型: 墙报

7562

面向梯度蜂窝结构 RCS 特性预测的贝叶斯主动学习采样优化

张君涵、陆海鹏^{*}、白兴智、晏沪盈、王一帆、高锦程

电子科技大学清水河校区

梯度蜂窝结构因其灵活参数调控能力(如孔径、浆料厚度、高度等), 在雷达散射截面(RCS)性能优化中展现出显著潜力。然而, 传统仿真与实验方法受限于高维参数空间, 存在计算效率低、耗时长的瓶颈。机器学习方法虽能部分改善计算效率, 但随机采样策略因样本信息熵不足, 模型收敛速度与预测精度仍受严重制约。为此, 本研究提出一种融合贝叶斯神经网络(BNN)与主动学习(AL)的高效采样框架。该框架通过 BNN 量化预测不确定性, 驱动 AL 算法优先采集信息量最大的样本, 突破梯度蜂窝结构复杂建模导致的采样困境。实验表明: 在同等样本规模下, BNN-AL 采样模型的收敛损失仅为随机采样的 50% (500 轮训练); 相较于遍历采样, BNN-AL 以 10% 的时间成本实现相近精度(损失差异<5%)。本方法为复杂吸波材料 RCS 特性的快速精准优化提供了新范式。

拟交流类型: 墙报

7910

基于人工智能的铝合金多目标性能协同优化设计模型

郭泰^{1,2}、陈云^{*1}、巩桐兆¹、陈星秋¹

1. 中国科学院金属研究所 沈阳材料科学国家研究中心, 沈阳, 110016
2. 中国科学技术大学 材料科学与工程学院, 沈阳, 110016

铝合金作为一种轻质高强合金广泛应用于航空航天和交通运输等领域。设计出既强又韧的铝合金是研究者一直追求的目标。但是合金的强韧性能与工艺和成分密切相关, 并受到多种因素影响。人工智能技术是在多维度变量空间寻优和筛选的高效手段, 已在材料设计中得到大量应用。然而, 在铝合金材料设计中, 抗拉强度与延伸率的协同优化面临多目标耦合与样本稀缺的双重挑战。为提升模型在小样本条件下的泛化能力与设计效率, 本文提出一种融合生成建模与主动学习的多目标优化方法。采用基于表格数据的变分自编码器 (TVAE) 对 806 组铝合金样本的元素组成与工艺类别进行联合建模, 学习潜在特征以挖掘变量间高阶关联。为增强生成样本的物理可解释性, 引入 SHAP 方法对组合采样数据进行特征敏感性分析, 指导生成具有更高模型响应性与优化潜力的候选样本。所生成数据经集成模型进行性能预测和不确定性评估, 并通过期望超体积改进 (EHVI) 策略筛选高潜力合金组合。实验结果表明, 集成模型在原始数据集上对抗拉强度 (UTS) 预测准确率达 94.52%, 而延伸率 (EL) 预测精度相对较低 (约 75%); 在引入生成—采样—优化的迭代框架后, EL 预测性能显著提升。该方法在增强 Pareto 前沿覆盖性与分布均衡性的同时, 提升了多目标建模能力, 成功挖掘出高性能潜力的新型铝合金配方与工艺组合, 验证了其在数据稀缺条件下的实用性与有效性。

拟交流类型: 墙报

8057

基于“成分-性质”特征模型的铝合金硬度的机器学习预测

倪新宇*、余童昕、刘艳洁、刘轶*

上海大学材料基因组研究院

高强铝合金由于其低密度、高比强度和高延展性等特点成为新能源汽车等领域大量使用的轻量化结构材料。6061 高强铝合金组成元素高达十余种, 即使在国标成分范围内的细微变化也会对合金性能造成影响。确立精细合金成分和强度的对应关系对性能优化和品质控制具有重要意义。为探索 6061 铝合金成分和性能间的非线性关系, 摸索更加高效的新型铝合金的成分设计模式, 本研究以高通量实验数据 (154 条) 为基础, 结合特征工程、ML 模型和可解释策略将铝合金成分映射到硬度, 实现全局成分的硬度预测和领域知识的探索。特征工程首先构建了包含 17 个合金成分、性质描述符的初始特征集, 依次采用相关性法、单变量特征筛选法以及包装法进行逐级的特征筛选, 获得 10 个重要特征, 包含 4 个成分特征和 6 个性质的特征。采用随机森林回归、支持向量回归、自适应增强回归和多层感知器回归算法构建了基于“成分-性质 (CP)”特征的机器学习模型, 并通过均方根误差 (RMSE) 和平均绝对误差 (MAE) 进行模型评估, 其中随机森林模型在所有研究的 ML 算法中表现最佳。再通过沙普利模型解释法 (SHAP) 和部分依赖图法 (PDP) 对所构建的模型进行了特征解释。特征重要性分析结果表明, 在合金元素中, Zn 和 Si 两种元素对硬度影响最大, 均为正向贡献。本工作结合机器学习和高通量实验构建的预测模型为提高工业铝合金的产品质量和工艺控制提供了参考依据。

拟交流类型: 墙报

8269

基于双室样杯的蠕墨铸铁热分析系统的研究及开发

荆鹏智*

山东大学

蠕墨铸铁目前在我国发动机等行业有着重要的地位，在一定误差范围内合理的预测产品的蠕化率，对于蠕墨铸铁生产的调控，实现高质量产品生产具有极其重要的作用。在蠕化率检测技术方面，其依据时间可以分为炉前检测和炉后检测，热分析技术凭借其简单快捷的优点占据了炉前检测的市场。热分析技术通过观察铁液凝固过程中的温度-时间曲线及冷却曲线，能更加准确、快速、简便的对铸铁实际生产起到调控和预测作用。目前德国 OCC 和瑞典的 Sinter Cast 软件几乎垄断了全球的铸铁热分析市场，特别是蠕墨铸铁热分析技术。外国软件对于中国技术的封锁，使得我国在蠕墨铸铁热分析领域仍然处较为空白的状态，虽有研究者开始关注该领域，但是国内学者对其仍是知之甚少。本文作者通过对 OCC 系统的研究，蠕墨铸铁生产及凝固知识的了解，结合实际生产的数据通过人工智能算法试图寻找可以较为准确预测蠕化率的人工智能算法模型，并开发相对应的工业软件尝试突破外国软件对我国工业的限制。

本文作者使用自制的双室样杯(腔室为圆形、其中一室内加有 75FeSi)，采集某铸造公司的实际蠕墨铸铁生产过程中的冷却曲线，针对于亚共晶形式的冷却曲线(标准蠕墨铸铁冷却曲线)使用移动平均滤波对冷却曲线进行平滑处理；采用中心差商的方式求解冷却曲线的一阶微分曲线；对于一阶微分曲线使用中值滤波和移动平均滤波的方式进行平滑处理。通过微分曲线和冷却曲线的对应关系寻找到要提取的冷却曲线特征值，通过和专业的热分析软件对比发现，该种方法的提取精度可得到 0.07℃ 以下，完全符合特征值提取的要求。针对已有的研究选择出 20 个双室冷却曲线特征值，其中包含了温度特征值(如 T_{AL} 、 T_{EN} 、 T_{EU} 、 T_{EM} 、 T_{ER} 、 T_S 等)，温度差特征值(再辉过冷度)，时间差特征值(T_{EU} 和 T_{ER} 之间的差值， T_{AL} 和 T_S 之间的差值，双室 T_{EU} 时间差，双室 T_{EM} 时间差，双室 T_{ER} 时间差)，速度特征值(最大冷却速度、最小冷却速度)。针对提取出来的特征值进行相关性分析，研究发现，热分析曲线的特征值和蠕化率之间并不存在明显的线性关系，相关性最强的特征值为未添加孕育剂室的 T_{ER} ，其相关系数为 0.364679。使用 BP 神经网络训练，尝试不同的隐含层层数，网络节点数自动调节，训练集大小为 70%，测试集大小为 15%，验证集大小为 15%，通过训练发现隐藏层数为 3 时训练效果较好，且整体数据集的相关系数大小可以达到 0.9，说明该模型有一定的合理性和可取性。可碍于数据量大小有限，所得模型的泛化能力并不是很好，存在有一定的过拟合现象。通过使用 Python 语言编写热分析软件，并构建 SQLite 数据库用于存储数据，后续在数据量获得增长后对模型进行更新，有望获得性能更好的热分析预测蠕化率模型。

拟交流类型：墙报

8301

主动学习驱动超高饱和磁化强度合金设计

李亚豪*、叶益聪

国防科技大学

软磁高熵合金凭借其独特的多元协同效应、优异的磁性能以及良好的高频特性潜力，使得它可能具有较大的发展空间和应用价值。然而，长久以来，合金设计一直是一种知识引导配合实验试错的方法，高熵合金固有的巨大成分空间和复杂的“成分-结构-性能”关系，使得通过传统试错法高效筛选和优化具有目标性能合金成分面临巨大挑战。本研究旨在探索和实践 AI 加速材料研发的新模式，本研究主要内容为超高饱和磁化强度软磁高熵合金的智能设计方法。首先通过数据收集、分析、补充和预处理等步骤，构建了包含 128 条 FeCoNiAlSi 系合金成分-饱和磁化强度数据的数据集。进一步提出了一种主动学习策略，开展了合金迭代优化设计。通过高斯过程回归模型和期望提升(EI)查询函数，在包含 110198 种成分的空间中，经过 3 轮 9 组实验推荐，发现了比已知铸态时饱和磁化强度最大的 Fe65Co35 合金(218 emu/g)性能更优的 3 种新成分合金，其中 Fe70Co25Ni4Si1 合金达到了 225.76 emu/g，实现了软磁高熵合金饱和磁化强度提升的快速设计。

拟交流类型：墙报

8309

基于中心环境深度学习的钙钛矿析氧反应电催化剂高通量筛选

李一航、冯凌燕*

上海大学

本研究采用了一种融合深度学习、高通量筛选与第一性原理计算的集成计算-实验框架，用于加速高效钙钛矿基析氧反应（OER）催化剂的开发。我们构建了包含 171 种钙钛矿氧化物的 OER 过电位及关键中间体（*OH、*O、*OOH）吸附自由能的综合数据集，并开发了新型中心环境人工神经网络（ANN）模型，其催化性能预测精度达到 $R^2=0.99$ 。基于该模型，我们系统研究了 A/B 位点的 73 种阳离子取代方案，构建了 5,329 种新型钙钛矿构型，通过掺杂策略进一步将虚拟材料库扩展至 101,251 种结构，最终筛选出 17 种高性能候选材料。对其中 6 种材料的实验合成和性能测试表明， CrFeO_3 展现出最优异的催化性能，其过电位低至 319 mV，并且在超过 110 小时的稳定性测试中表现优异。

拟交流类型：墙报

8433

Phys-TSGAIN：领域知识嵌入的锂电池时间序列数据完整性治理方法

徐梦、左维、刘悦、施思齐*

上海大学

锂电池时间序列数据的完整性对其寿命预测和健康管理至关重要。然而，由于传感器故障、数据传输异常或人为疏漏，实际采集的时间序列往往存在多种类型的缺失。现有填补方法普遍缺乏领域知识指导，仅依赖数据统计特征进行建模填补，适用场景局限于完全随机缺失，且插补结果难以保证物理一致性。因此，本文提出了一种面向新能源领域的知识嵌入时间序列数据完整性治理方法，Phys-TSGAIN。该方法在基于生成对抗插补网络（GAIN）的框架中，融入电化学与材料衰退机理的先验知识，实现对不同缺失类型的可信插补。理论上，本文证明了所提方法的无偏性、有效性与收敛性；实验中，在多种工况、不同缺失率及不同缺失模式下，Phys-TSGAIN 均显著优于传统方法，不仅在统计量上插补数据与原始数据的一致性更高，而且在下游预测任务中，最终平均 RMSE=0.076、MAE=0.069，相较其他方法降低 73%，有效弥补了现有方法缺乏领域知识驱动的不足，为后续建模与预测提供了高质量的数据支持。

拟交流类型：墙报

8437

面向机器学习的材料数据质量评价体系与指标构建方法

左维、徐梦、刘悦、施思齐*

上海大学

随着机器学习在材料科学领域的广泛应用，高质量数据已成为保证模型可靠性与预测精度的前提。然而，现有研究多停留于数据清洗或单一指标评估，缺乏面向机器学习需求的系统化质量评价框架和评价指标。因此，本文提出了一种面向机器学习的材料数据质量评价体系与指标构建方法，从材料数据全生命周期和评价学五大公理出发，系统定义了材料数据的静态质量与动态质

量两类属性，并构建了可覆盖不同材料数据质量类型的抽象指标体系。在此基础上，该方法创新性地基于“继承—发展”思想，将抽象指标向多模态、不同粒度的数据延伸，能够系统性地形成适用于具体应用场景和任务需求的量化指标。最后，以材料结构化数据和文本数据为例，对所提方法进行了实例化应用，给出了统一的量化计算流程与分层级阈值标准，为后续的质量诊断提供了可量化的依据，保证了材料数据质量评价的客观性和可比性。所构建的评价体系与指标方法具有较强的系统性与可扩展性，可为材料领域的机器学习应用提供规范化技术支持。

拟交流类型：墙报

8450

有/无序固态电解质化合物化学式高可信度的生成框架

马晨旭、余振垚、张王颖、杨正伟、刘悦、施思齐*

上海大学

无序结构网络因其较大的自由体积和丰富的本征缺陷，有利于实现固态电解质的室温高离子电导率。然而，其原子混占的无序特性导致化学组成空间呈现出维度爆炸现象，导致传统试错法难以实现高效材料筛选。因此，本文提出针对无序固态电解质的三阶段生成框架，融合生成模型与基于化学规则的无监督优化，实现高可信度无序混占结构化学式生成。首先用 DW-VAE 模型学习空间特征与元素特征，并融合元素条件约束向量实现初步的晶体结构候选化学式生成。其次，结合高精度系数调整模型、最佳价态匹配和最小微调算法进行无监督优化，提升可信度。模型具备指定元素生成功能和轻量化设计，便于属性强化微调。经过高精度调整后，重构的无序化学式系数精度有 46.5%达到了千分位，48.6%达到百分位，58.3%达到十分位。在生成过程中，经过最佳价态匹配的每万条化学式平均总价态误差仅为 0.301 单位，其中 30.8%直接满足价态守恒。最后经过最小微调后，价态守恒率趋近于 100%。实验验证表明，该方法在化学式重构精度与生成有效性方面均显著优于现有方法。

拟交流类型：墙报

9263

机器学习加速设计时效强化型 Mg-Ca-Zn 合金及其力学性能优化

张宇慧、乔东发*

厦门理工学院材料科学与工程学院

时效强化型镁合金因其轻质与高比强度的特性，在航空航天、汽车工业等多个领域具有重要的应用价值。然而，合金成分的广泛变化及时效处理条件的复杂性使得快速识别和优化合金的时效响应的最佳组合仍面临挑战。在本研究中，收集了来自文献的 294 组 Mg-Ca-Zn 合金时效强化数据，通过对多种机器学习（ML）模型的适用性进行评估，包括线性回归、支持向量回归（SVR）、随机森林（RF）、XGBoost 和 AdaBoost，结合主动学习优化了合金的硬度。研究表明，随机森林模型在预测硬度和硬度变化方面表现最佳，其决定系数（ R^2 ）达到 0.91，平均绝对误差（MAE）为 2.51，平均绝对百分比误差（MAPE）为 4.65%，显示出优秀的预测精度。通过该模型优化合金的成分和时效过程，最终筛选出了一种新的合金组成和时效工艺。结果表明，在 175° C 下时效 8 小时后，合金硬度达到了 71.10Hv，相较于文献中数据集集中的最大硬度 74.07Hv 仅低 2.97Hv，但时效时间大幅缩短了 40 小时，体现了该合金在保持较高硬度的同时，具备更高的生产效率。此外，已有的文献结果表明，在该时效条件下，合金中析出了 $\text{Ca}_2\text{Mg}_5\text{Zn}_5$ 相和 CaMg_2 相，这些相的形成对合金的硬度和力学性能起到了显著的增强作用，进一步说明筛选出来的合金成分和工艺的合理性。

由此可见，机器学习方法能够有效优化时效强化型合金的成分和热处理工艺，实现快速时效响应，提升其综合性能，满足高强度轻质材料的设计目标。

拟交流类型：墙报

9325

材料领域知识图谱协同大语言模型的知识推理方法

吴杰、姚文轩、刘子图、刘悦、施思齐*

上海大学

材料科学文献中蕴藏着大量具有经验性的知识，其形成的知识图谱对于新型高性能材料的设计与研发具有重要的参考价值，但因其“实体-关系”的构成以及由此产生的复杂知识路径，导致知识呈现离散复杂的特性。现有知识推理方法存在推理性能弱、训练开销大、易产生幻觉、对 KG 形式有依赖、难以处理复杂问题等不足，且尚未涉及材料领域。因此，本文提出了材料领域知识图谱协同大语言模型的知识推理方法（Materials Knowledge Graph Reasoning with Large Language Models, MatKGR-LLM），包括基于智能体的解决方案链设计、基于推理规则的路径检索、基于材料事件转换的知识召回和基于双重思维链的知识推理四个部分，旨在无需训练的前提下，利用 KG 的全局知识信息与大语言模型（Large Language Model, LLM）的卓越推理能力，实现复杂材料科学问题的精准推理与智能解答。最后，在 Aqueous、Nasicon 和 Superalloy 三份自建材料知识图谱数据集的实验中，相比最优基准模型，MatKGR-LLM 在关系链接预测 (Relation Prediction, RP) 任务中的精度分别提升了 9.08%、8.09% 和 7.34%，充分展现了其卓越的推理能力、强大的泛化性能以及对复杂材料关系的精准捕获能力。

拟交流类型：墙报

9786

石墨原位电池 DIC 下的应力应变和 XRD 测试联动研究

郭皓*

上海大学

在电池充放电循环中，锂离子反复地从活性颗粒中嵌入/脱出，导致活性颗粒和电极反复地膨胀/收缩，经历较大的体积变化。由此产生的应力应变会导致电极结构的破坏，进而产生开裂、分层、粉化等一系列失效行为。因此深入探究电极在电化学循环过程中产生的应变对理解锂离子电池的失效、提高电池的循环性能至关重要，

石墨负极材料价格低廉，结构稳定，是锂电池中研究和应用最广泛的材料之一，也是目前商业化负极材料中的主要产品。在循环过程中，石墨电极完全锂化产生的体积变形可达 10%，这种可观的变形对电池的使用寿命会产生重要影响，本研究使用 DIC 技术表征石墨极片随着充放电反应进行由于脱锂嵌锂发生的应变，量化充放电反应程度和极片应变状态，但是部分的化学反应机理尚不明确，因此借助于 XRD 分析实时原位测试。

DIC 技术测量原理是通过跟踪参考图像和变形后的图像中每个点的灰度值，根据灰度不变原理，来匹配变形后散斑的位置，可以得到工件整体的位移场和应变场。

X 射线衍射是研究物质的物相和晶体结构的主要方法。XRD 技术具有不损伤样品、无污染、快捷、测量精度高、能得到有关晶体完整性的大量信息等优点。

本研究意图通过自行设计的原位电池装置，探究石墨原位电池在充放电循环中脱锂和嵌锂过程中极片的膨胀和收缩，以及在此过程中通过 DIC 技术收集到极片的应变，通过 X 光的图谱收集到石墨极片的相变，将极片的应力应变和相变做同步联动，可以有力地说明在确定的充放电时刻极片的脱锂嵌锂状态和相变转化之间的关联。

拟交流类型：墙报

10201

基于不变图神经网络的小分子表示算法研究

焦盼雨、谢玮*

上海大学

分子表示学习是材料信息学和药物设计领域的核心问题。分子指纹编码稀疏、扩展性低且通用性差，而 SMILES 等字符串表示无法全面反映原子间的拓扑关系，因此基于图神经网络的表示成了目前主流的做法。但是过去的图神经网络分子表示算法存在几何信息利用不足、3D 构象建模缺失、特征表示冗余和架构复杂度高缺点。

针对这些问题，我们设计了一个新的基于不变图神经网络的分子表示算法 EPIC-GNN。通过构建键-键角图解决几何信息利用不足问题——将化学键作为节点、键角作为边，直接在分子几何层面进行消息传递；通过坐标不变性设计解决 3D 构象建模问题——确保模型对分子旋转、平移的鲁棒性；通过单图架构和 Edge Update 模块解决架构复杂度问题——相比现有双图结构大幅简化网络的同时增强了键长和键角信息的利用效率。

在 QM9 等代表性数据集上的实验表明，EPIC-GNN 在 HOMO、LUMO、GAP 等量子化学性质预测任务上取得了有竞争力的结果，验证了直接编码分子几何信息的有效性。该研究为小分子性质预测和材料设计提供了更准确、更具泛化能力的表示学习方法，有望在材料基因工程和人工智能辅助材料设计中发挥重要作用

拟交流类型：邀请报告

10243

人工智能与多尺度计算协同驱动的超高温长寿命热障涂层材料逆向设计

种晓宇*

昆明理工大学

热障涂层是保障空天飞行器热端部件安全、稳定、长时服役的重要手段，但导致热障涂层失效的主要原因之一是其制备和服役过程产生的热应力超过界面结合强度和损伤容限。鉴于目前尚无高效、准确的试验方法量化热障涂层的热应力，我们基于材料基因工程的理念与方法，进行第一性原理计算、遗传算法-支持向量机（GA-SVR）、多场耦合有限元仿真和热冲击试验等多尺度方法的耦合，进行了核心软件的编写，实现了关键数据的高通量、智能化计算，搭建了参数数据库、实验数据库和模型数据库，实现了数据流的自动传递和关联建模，初步建立了热障涂层热应力快速量化计算与评价方法，为长寿命新型热障涂层材料的筛选、涂层结构设计和涂层工艺提升提供理论、方法和工具支撑。

拟交流类型：邀请报告

8509

机器学习研发高性能合金过程中的成分降维处理

王清*

大连理工大学

近年来，机器学习在先进材料研发领域日渐重要。对于任一材料体系而言，数据库大多都为小样本空间，会影响机器学习的预测精度，需要领域知识指导机器学习，即在机器学习过程中需要选取和确定特征参数。目前，选取的特征参数多与组织结构密切相关。然而，在机器学习模型逆向设计中，以性能为目标导向预测复杂合金成分时，由于处理单变量对多变量关系，采用全局寻优算法会输出过量的成分，造成后续实验验证的难度，并降低了模型的预测精度。本工作采用团簇成分式方法对多元复杂成分进行降维处理，由于团簇式方法对组元进行了强约束，大大提升了模型预测合金成分的精度和实验验证的效率。

Presenting Type: Invited

10187

Data-driven compositional and structural design in high-entropy materials

Wenyi Huo*

National Centre for Nuclear Research Poland

The vast compositional space and complex phase behavior of high-entropy materials (HEMs) present both opportunities and challenges for rational materials design. Traditional trial-and-error approaches are often inefficient in navigating this multidimensional space. Recent advances in data-driven methods, e.g., density functional theory and machine learning, offer powerful tools to accelerate the discovery and optimization of HEMs with tailored properties. In this invited presentation, I will introduce a data-driven framework for the compositional and structural design of HEMs. Several case studies will be presented, including the design of Co-free high-entropy alloys and the prediction of defect structures in high-entropy ceramics. This approach not only enables rapid screening of candidate materials but also provides deeper physical insights into the underlying mechanisms that control structure-property relationships in complex alloys. The results highlight the potential of combining computational tools with experimental validation to accelerate the development of next-generation advanced materials.

拟交流类型：口头报告

1493

基于机器学习和多尺度计算的硬质合金材料设计

吕皓、向日、王海滨、陈静洪、王晨、宋晓艳*

北京工业大学材料科学与工程学院，材料循环低碳再生全国重点实验室，新型功能材料教育部重点实验室

硬质合金是通过粉末冶金工艺制备的一类金属陶瓷复合材料，被广泛应用于制造切削刀具和耐磨部件等，其性能水平直接关联高端装备制造等战略新兴产业的发展。本研究构建了 WC-Co 硬质合金数据库，利用机器学习方法优化了高硬度和高韧性 WC-Co 硬质合金的成分和工艺，给出了常用 Co 含量硬质合金力学性能需求的设计方案。针对硬质合金微钻的服役寿命进行了数据驱动的预测分析，量化了硬度、韧性和强度等力学性能对不同直径硬质合金微钻服役寿命的影响权重，建立了多参数预测模型。通过建立成分、晶粒尺寸与等效综合力学性能的关联模型揭示了微钻服役寿命的调控策略。结合计算和预测分析，筛选出了多种具有高服役寿命的不同钴径硬质合金微钻的最佳成分和组织设计方案。

为了揭示机器学习预测的力学性能规律的机理，本研究进一步开发了基于多相复合材料真实微观组织和物相分布的有限元模型的构建方法，阐明了制备态应力在硬质合金微观组织中的分布规律及其与外加载荷的交互作用。构建了耦合应力状态的分子动力学模型进行跨尺度的应力分析，研究了制备态应力对硬质合金在承载过程中微观应力应变特征及晶体缺陷和微裂纹演化的影响。提出了通过优化微观组织来调控应力分布，降低硬质合金承载过程中的应力集中和应变局域化，以此提高合金的力学性能的设计思路。

拟交流类型：口头报告

958

基于多目标优化和机器学习的高性能 Sm-Co 基永磁合金研发

刘培鑫、吕皓、宋晓艳*

北京工业大学 材料科学与工程学院 新型功能材料教育部重点实验室 北京 100024

Sm-Co 基合金的磁性能之间存在互斥关系，尤其是饱和磁化强度和矫顽力通常此消彼长，相互制约，很大程度上阻碍了材料综合磁性能的提升。基于多目标优化和机器学习方法，本研究提出了一种数据驱动的具有优良综合磁性能的材料设计方法。以晶粒尺寸和掺杂元素作为输入特征，建立了以同步最大化饱和磁化强度和矫顽力为目标的成分设计和晶粒组织调控优化模型。通过特征工程研究，确定了同时影响饱和磁化强度和矫顽力的关键要素。利用 NSGA-II 多目标优化方法获得 Pareto 最优解，搜索最佳合金成分和晶粒尺寸，加速设计兼具高饱和磁化强度和高矫顽力的 Sm-Co 基永磁合金。该方法不仅能够处理单元素掺杂的情况，还能有效应对复杂的多元素掺杂体系。通过综合考虑多种掺杂元素的相互作用，模型能够准确预测合金的磁性能，为高性能永磁材料的设计提供有力支持。本研究建立的多目标优化方法破解了 Sm-Co 永磁合金饱和磁化强度与矫顽力的平衡难题，为互斥性能的协同提高提供了新的设计策略。该研究方案具有普适性，可应用于其他永磁材料的多目标优化设计。

拟交流类型：邀请报告

722

图深度学习揭示无序合金结构与弛豫动力学关联机制

王琦*

中国工程物理研究院材料研究所

在非晶材料中，链状协同运动 (string-like motions) 被认为是弛豫与玻璃化转变的重要动力学单元，但其产生与演化机制仍未被完全阐明。特别是，人们尚不清楚这些协同运动是否倾向于沿着特定“路径”发生，以及这种路径偏好能否从静态结构中预测。为此，我们构建了一类面向“路径”层次结构信息的深度图神经网络框架，能够直接从非晶静态原子构型中识别潜在的链状运动路径。模型进一步给出了一个可解释的“路径软度”指标，用于量化各候选路径参与链状

运动的倾向，并揭示该指标在玻璃转变过程中随温度和时间系统演化。结果表明，非晶体系不仅在原子或团簇尺度上呈现结构-动力学不均匀性，还存在明显的“路径”层面异质性。该发现为理解非晶材料的弛豫机制、动力学异质性及其与固有结构的关联提供了新的概念框架，也为人工智能驱动的无序合金设计与调控奠定了理论基础。

参考文献：

- [1] Qi Wang*, L.F. Zhang, Z.Y. Zhou and H. B. Yu*. Science Advances, 10: eadk2799 (2024).
- [2] Qi Wang* and L.F. Zhang. Nature Communications, 12: 5359 (2021).
- [3] Qi Wang* and A. Jain. Nature Communications, 10: 5537 (2019).

拟交流类型：邀请报告

6861

金属玻璃物理性能的遗传基因

杨卫明*

中国矿业大学

从金属玻璃材料研发历程和发展趋势来看，高性能金属玻璃将向高强度、优异的强韧性匹配、高均匀化、长寿命化等方向发展，以实现材料的绿色化、智能化及定制化生产制备。传统炒菜或试错设计从研发到应用至少需要 20 年，已难以满足上述需求。因此，基于材料基因工程的高性能金属玻璃设计研发模式将成为创新和引领材料设计研发的重大基础创新。报告阐述高性能金属玻璃成分-工艺-组织-性能-服役行为多尺度集成化计算方法，探索金属玻璃电子-原子层次每个“基因”片段对材料强度、软磁、非晶形成能力等各项性能的影响和相关机制。

拟交流类型：邀请报告

762

材料基因工程框架下的高性能合金设计

张利军^{*1}、高建宝^{1, 2}、黄在旺¹、杨涛³、高田创¹

1. 中南大学
2. 华中科技大学
3. 香港城市大学

高性能合金是推动现代工业进步的关键，实现其理论设计是材料科学与工程领域的终极目标。用于合金开发的传统“试错法”耗时耗力，且无法实现合金成分和工艺的精准设计。经过十几年的发展，材料基因工程已成为高性能材料开发的重要手段。

我们在前期所开发计算热/动力学方法/软件、精准热/动力学数据库和高通量实验/计算策略的基础上，进一步耦合机器学习/主动学习、自动化优化、多目标筛选等技术，搭建了材料基因工程框架下的高性能合金设计平台。基于该平台，我们成功实现了铝合金、镍基单晶高温合金、（难熔）高熵合金、铜合金、耐磨涂层等高性能合金的设计，并得到了实验/工业生产的验证。

Presenting Type: Oral

684

InvDesFlow-AL: Active Learning-based Workflow for Inverse Design of Functional Materials

Xiao-Qi Han, Peng-Jie Guo, Ze-Feng Gao, Hao Sun, Zhong-Yi Lu*

Renmin University of China

Developing inverse design methods for functional materials with specific properties is critical to advancing fields like renewable energy, catalysis, energy storage, and carbon capture. Generative models based on diffusion principles can directly produce new materials that meet performance constraints, thereby significantly accelerating the material design process. However, existing methods for generating and predicting crystal structures often remain limited by low success rates. In this work, we propose a novel inverse material design generative framework called InvDesFlow-AL, which is based on active learning strategies. This framework can iteratively optimize the material generation process to gradually guide it towards desired performance characteristics. In terms of crystal structure prediction, the InvDesFlow-AL model achieves an RMSE of 0.0423 Å, representing an 32.96% improvement in performance compared to existing generative models. Additionally, InvDesFlow-AL has been successfully validated in the design of low-formation-energy and low-Ehull materials. It can systematically generate materials with progressively lower formation energies while continuously expanding the exploration across diverse chemical spaces. Notably, through DFT structural relaxation validation, we identified 1,598,551 materials with $E_{\text{hull}} < 50$ meV, indicating their thermodynamic stability and atomic forces below $1\text{e-}4$ eV/Å. These results fully demonstrate the effectiveness of the proposed active learning-driven generative model in accelerating material discovery and inverse design. To further prove the effectiveness of this method, we took the search for BCS superconductors under ambient pressure as an example explored by InvDesFlow-AL. As a result, we successfully identified Li_2AuH_6 as a conventional BCS superconductor with an ultra-high transition temperature of 140 K. This discovery provides strong empirical support for the application of inverse design in materials science.

Presenting Type: Oral

308

Rational Design of Microwave Dielectric Materials from First-principles Calculation and Machine Learning

Yabei Wu, Wenqing Zhang*

南方科技大学

Microwave dielectric materials are crucial in modern communication systems, driving the development of compact, high-performance devices. Tungsten-bronze-type materials, such as $\text{Ba}_{6-3x}\text{RE}_{8+2x}\text{Ti}_{18}\text{O}_{54}$ (RE = rare earth elements), stand out due to their high dielectric constant, low loss, and tunability, making them promising candidates for future microwave applications. However, the complexity of these materials, with unit cells containing numerous atoms, poses significant challenges for theoretical

modeling and property prediction, often requiring extensive computational resources. To address these challenges, we have employed an elemental-unit decomposition (EUD) technique, which effectively reduces the computational effort needed for predicting properties of such complex systems. This approach not only enhances the accuracy and efficiency of first-principles calculations but also facilitates the prediction and design of advanced microwave dielectric materials that would otherwise be difficult to explore through conventional computational methods. Complementing these efforts, machine learning techniques, particularly the Sure Independence Screening and Sparsifying Operator (SISSO) method, have been applied to investigate the structure-property relationships in inorganic oxide microwave dielectrics. By constructing white-box models, the SISSO method has achieved remarkable accuracy, with R^2 values up to 0.8 for predicting dielectric constants of quaternary materials. Furthermore, a strategy to merge ternary and quaternary datasets has been proposed to tackle the issue of data scarcity in machine learning, offering a more unified and interpretable model for understanding the origins of dielectric properties. These integrated computational and machine learning approaches provide valuable insights for the rational design of microwave dielectric materials with tailored dielectric properties.

References:

1. **Yabei Wu**, Peihong Zhang*, Wenqing Zhang*, Advancing first-principles dielectric property prediction of complex microwave materials: An elemental unit-based approach. **npj Computational Materials** 10, 179 (2024).

2. Ye Sheng¹, **Yabei Wu**^{1,*}, Chang Jiang¹, Xiaowen Cui, Yuanqing Mao, Caichao Ye*, Wenqing Zhang*, Interpretable model of dielectric constant for rational design of microwave dielectric materials: A machine learning study. **Journal of Materials Informatics** 5, 7 (2025) [Cover]

拟交流类型：邀请报告

11796

相场建模耦合机器学习指导合金设计和工艺优化

赵宇宏^{*1,2}

1. 中北大学材料科学与工程学院，教育部共建铝/镁材料研发应用协同创新中心，新材料智能铸造先进成型山西省重点实验室，太原 030051

2. 北京科技大学，材料基因工程高精尖创新中心，北京 100083

针对具体问题设计相应的守恒/非守恒相场序参量，构建以序参量为变量的系统热力学自由能函数和演化动力学方程，描述各层级凝固/时效组织，捕捉实验手段不易观察的微结构演化现象，获得相变或组织生长特征，同时可结合数据驱动的机器学习模型预测和指导相应的材料设计和液态成型工艺优化。

拟交流类型：邀请报告

4471

面向超材料优化设计的机器学习平台开发和应用

孙升*

上海大学

超材料是一类通过结构设计来调控其宏观等效性能，从而实现超越原组成材料固有性能的“等效材料”。然而，超材料设计面临设计空间巨大、现有方法依赖经验多、搜索空间小、人工干预多和计算速度慢等问题。人工智能技术的发展为超材料计算设计提供了新的强大工具。本报告从样品空间生成、代理模型计算加速和优化方案三个方面，简要介绍我们课题组在人工智能小模型应用和大模型应用两个方向开发的软件平台及其应用示例。

拟交流类型：邀请报告

6672

富电子材料的智能设计与应用

王俊杰^{*1}、细野秀雄²、Gian-Marco Rignanesse^{1,3}

1. 西北工业大学

2. 东京科学大学 (Institute of Science Tokyo, 原东京工业大学)

3. 法语天主教鲁汶大学 (UCLouvain)

富电子金属间化合物，例如电子化合物和 MAX/MAB 相，具有低功函数、强给电子能力和强惰性键合力等关键特性。这些化合物在氨合成、氨分解、二氧化碳加氢和碱金属离子电池等各种催化反应中展现出巨大的潜力，引起了广泛的研究兴趣。然而，富电子材料具有广泛的成分变化和多样化的结构，这对高效设计此类新型多元素化合物提出了挑战。传统的材料设计和开发方法依赖于基于经验和实验的反复试验，效率低下且耗时，无法满足核心应用对新型富电子材料的迫切需求。为了解决这一问题，近期的探索性研究集中于利用材料基因工程技术，例如高通量计算筛选、结构预测和机器学习，来更高效地设计和开发新型富电子材料。通过高通量计算筛选，研究人员可以快速评估大量潜在的化合物构型，并确定有希望进一步研究的候选化合物。结构预测技术有助于预测这些化合物的原子排列和晶体结构。此外，机器学习算法可以用来分析大量现有数据，建立材料特性与成分之间的关系，从而有助于确定实现目标特性的最佳化学组合。本报告将介绍近期利用这些材料基因工程方法设计和开发新型富电子材料的研究成果。这些进展为加速发现过程和满足该领域对高效设计方法的迫切需求提供了一条充满希望的途径。

参考文献：

- 1) J. Wang, K. Hanzawa, H. Hiramatsu, J. Kim, N. Umezawa, K. Iwanaka, T. Tada, H. Hosono, J. Am. Chem. Soc. 139 (44), 15668–15680 (2017).
- 2) J. Wang, T. N. Ye, Y. Gong, J. Wu, N. Miao, T. Tada, H. Hosono, Nat. Commun. 10, 2284 (2019).
- 3) N. Miao, J. Wang, Y. Gong, J. Wu, H. Niu, S. Wang, K. Li, A. R. Oganov, T. Tada, H. Hosono, Chem. Mater. 32 (16), 6947–6957 (2020).
- 4) K. Li, Y. Gong, J. Wang, H. Hosono, J. Am. Chem. Soc. 143 (23), 8821–8828 (2021).
- 5) K. Li, V. A. Blatov, J. Wang, Adv. Funct. Mater. 32 (17), 2112198 (2022).
- 6) N. Miao, Y. Gong, H. Zhang, Q. Shen, R. Yang, J. Zhou, H. Hosono, J. Wang, Angew. Chem. Int. Ed. e202308436 (2023).

拟交流类型：邀请报告

6333

矩张量机器学习势模型发展与应用

刘培涛*

中国科学院金属研究所

机器学习势函数在量子力学和经验力场之间架起了一座桥梁，既保持了量子力学的高精度，又具备经验力场的高效率，正在推动计算材料科学原子模拟的范式变革。在本报告中，我将首先回顾机器学习势函数的发展过程，随后重点介绍我们围绕矩张量机器学习势模型的优化工作，在保持相同精度的前提下，计算效率提升近一个数量级[1]。此外，我还将介绍一种高效构建超越密度泛函理论精度机器学习势函数的“动态主动学习+ Δ 机器学习”方法[2]。最后，我将展示该模型在解决固-固相变机理和表面科学长期争议问题中的成功应用[3-5]。

[1] Jiantao Wang, Peitao Liu*, et al., Xing-Qiu Chen*, Phys. Rev. Materials 9, 053805 (2025)

[2] Peitao Liu*, et al., Georg Kresse, Phys. Rev. B 105, L060102 (2022) (Letter, Editors' Suggestions)

[3] Peitao Liu*, et al., Georg Kresse, Phys. Rev. Lett. 130, 078001 (2023)

[4] Mingfeng Liu, Peitao Liu*, et al., Xing-Qiu Chen, Nature Communications 15, 3079 (2024)

[5] Yu Cao, et al., Peitao Liu*, Phys. Rev. Lett. 134, 178001 (2025)

拟交流类型：邀请报告

4464

聚合反应动力学的分子模拟和机器学习

吴量*、陈新伟、朱新远

上海交通大学

聚合反应是合成聚合物材料的重要化学反应。在本工作中，我们应用反应分子动力学模拟以及机器学习模型预测聚合反应动力学。通过对于一元聚合反应的模拟研究发现尺寸外推的聚合反应模拟可以准确描述聚合物链生长和链转移反应的反应动力学。该方法应用于 Lennard-Jones 分子链模型以及聚苯乙烯（PS）以及聚四氟乙烯的自由基聚合反应动力学。进一步拓展至二元聚合体系，通过速率理论推导了二元聚合反应的速率方程和杂化函数的微观表达式，研究了四种不同类型的二元聚合反应（混合聚合、共聚、接枝聚合）的动力学，分析讨论了二元聚合动力学在分子层次的机制。在此基础上通过聚合反应速率方程构建聚合反应动力学数据空间，训练优化聚合反应动力学的机器学习预测模型。该方法在自由基聚合体系中表现出高精度，并成功扩展至阴离子和阳离子聚合体系，展示了机器学习对不同聚合反应机理的泛化能力。本工作为聚合反应的调控和设计提供理论依据和数据支撑。

拟交流类型：邀请报告

2970

基于“机器学习+多尺度物理模型”协同设计的 L12 相强化型高熵高温合金的组织调控及性能研究

袁晟堃¹、陶秋伶¹、李嘉慧¹、姚志富²、种晓宇³、刘兴军^{*1}

1. 哈尔滨工业大学（深圳）

2. 深圳技术大学

3. 昆明理工大学

高熵高温合金是将传统高温合金的相稳性与力学性能优势与高熵合金的多组元固溶效应有机结合，然而，高熵高温合金的成分空间十分庞大，采用传统“试错”式实验方法设计高熵高温合金将消耗大量的资源及时间。针对上述挑战，本研究构建了“机器学习+多尺度物理模型”协同框架，深度融合第一性原理、相图计算与机器学习算法。借助机器学习加速的第一性原理计算，系统量化了过渡金属元素对 L1₂相形成焓与弹性模量的影响规律，从而筛选出 Cu、Ti 等关键强化元素；再将筛选结果传输到相图模拟模块，确定了 Co₃₈Cr₂₃Ni₂₂Al₆Ti₆Cu₅等六种兼具宽 FCC+L1₂两相共格强化及优异综合性能的候选合金。微观结构表征与高温力学性能测试结果表明：Co₃₈Cr₂₃Ni₂₂Al₆Ti₆Cu₅合金形成了细小均匀的 FCC+L1₂共格双相组织，且在 700 °C 下压缩屈服强度达到 628 MPa，其 L1₂相溶解温度及熔点分别为 1030 °C 和 1220 °C。该策略为 L1₂相强化型高熵高温合金的高通量设计与应用提供了新范式。

拟交流类型：邀请报告

9296

结合人工智能的金属结构材料的多尺度集成计算

鲁晓刚*

上海大学材料学院

集成计算材料工程（ICME）和人工智能（AI）方法相结合，是设计新材料和新工艺的新途径。本报告介绍了 ICME 的多尺度计算模拟工具，包括第一性原理计算、由专用数据库支持的 CALPHAD 方法（即计算热力学）、扩散和相场模拟、有限元分析，以及大语言模型、机器学习等人工智能方法。其中 CALPHAD 方法是关键一环，与纳观计算（如第一性原理计算、分子动力学等）、微观模拟（如扩散和相场法，用于预测微观结构对外部条件的响应演变）和宏观有限元分析相结合，可应用于金属结构材料在宽广成分、温度、应力等复杂条件下的设计开发。报告也介绍了本团队运用集成计算和人工智能方法，结合生产线数据，进行钢种开发的实践。

拟交流类型：邀请报告

2953

AI 助力原子尺度显微表征：精准点云表征新路径

何孟伟*

澳大利亚悉尼大学、澳洲显微分析中心

随着材料科学向高通量、智能化和多尺度深度演进，人工智能（AI）正以前所未有的速度重塑结构表征方法，尤其在原子级分辨率的数据处理与理解中展现出重要价值。在“成分-结构-

性能”三元关系日益复杂的背景下，如何实现对关键结构单元（如短程有序、晶界、界面等）的精准识别与自动解析，成为制约材料设计效率与性能预测精度的关键瓶颈。

三维原子探针层析（Atom Probe Tomography, APT）是一种能够实现三维原子级成分与空间分布重建的先进表征技术，其输出数据可抽象为“原子点云”——由单原子的三维坐标与元素标签构成的稀疏空间数据集合。近年来，自动驾驶与机器人等领域对三维空间感知提出了更高的精度与实时性要求，推动了点云处理算法在计算机视觉中的迅速发展，其中激光雷达（LiDAR）等传感器为算法训练与测试提供了关键数据基础。APT 点云在数据结构上与 LiDAR 等三维探测系统生成的数据具有高度一致性，为跨学科点云算法的迁移与适配提供了重要契机。然而，APT 数据在稀疏性、分布非均匀性、尺度极小以及材料物理约束等方面具有独特挑战，使得现有通用点云算法在直接应用于原子尺度任务时面临障碍。

本研究系统性地梳理了点云算法在材料科学和计算机视觉中的发展路径，并以 LiDAR 与 APT 为典型代表，从数据采集方式、空间分辨率、点密度分布、噪声类型及物理先验等多个维度进行详细比较。研究重点探讨了如何将当前广泛应用于三维场景理解的 AI 算法（如 PointNet 系列、Point Transformer、VoxelNet 等）适配于原子尺度数据处理任务，包括原子定位去噪、缺失原子补全、成分-结构分割与多类别结构单元识别等。

同时，本文还深入分析了多模态数据融合（如 APT 与 S/TEM、EDS、AET 等）、新型数据集构建、基准评价指标体系设计、以及依托 GPU/TPU 的并行加速框架等关键配套技术在 APT 智能化处理中的前沿发展。通过引入材料物理知识嵌入机制、结合图神经网络与注意力机制等深度学习范式，初步构建了适用于 APT 点云的多尺度理解框架。我们发现真正实现基于点云的原子尺度结构-成分协同表征，需打破材料学与计算机科学之间的知识壁垒，推动术语体系、方法体系与思维模式的深度融合。本研究不仅为 APT 等原子级结构技术的智能化升级提供了路径探索，也为三维点云分析在材料设计、性能预测和高通量筛选中的深度应用奠定了理论与技术基础。

拟交流类型：邀请报告

2996

图像识别技术运用于材料微结构的探索

杨炯*

上海大学，材料基因组工程研究院

近年来，图像识别技术在材料科学领域的应用日益广泛，为材料微结构的快速表征与分析提供了新的技术手段。同时充分利用图像技术，结合材料背景，可助力新材料的发现，以及材料中构效关系的挖掘。我们通过高通量合成与扫描电子显微镜（SEM）技术，结合机器学习辅助的图像分析，成功发现了新型 Cu-Sn-S 热电材料。研究采用两种策略：基于全连接神经网络的主动学习循环实现快速图像分割，以及无监督聚类方法发现潜在的新相。通过该方法，研究者不仅高效识别了已知相（如 Cu_2SnS_3 ），还发现了具有优异热电性能的新相 $\text{Cu}_3\text{Sn}_3\text{S}_{10}$ ($zT > 0.6$) 和 Cu_4S 。此外，针对 $\text{AlCoCrFeNi}_{2.1}$ 共晶高熵合金中与硬度相关的微结构构效关系，提出了一种跨尺度电子显微镜图像生成系统（CEMI）。通过结合视频采集、图像去噪和拼接技术，实现了从亚微米到厘米级尺度的材料微结构全景成像。利用图像识别技术在全景图像中寻找不同微结构的分布情况，通过研究其与硬度分布的相关性，最终得到 BCC 相的分布与硬度最为相关的结论。这两项研究共同表明，图像识别技术能够显著提升材料微结构的表征效率和分析深度，为材料设计与性能优化提供了重要工具，为新材料研发和性能提升开辟新的可能性。

拟交流类型：邀请报告

1612

针对高温合金微观组织-拉伸性能关系的机器学习预测模型

刘芳宁*

中国航发北京航空材料研究院

采用传统“试错法”揭示高温合金微观组织和性能之间的关系具有成本高、周期长等特点，难以满足材料研发、设计和应用的快速发展。以高温合金 K4169 为基础，采用机器学习的方法建立了材料微观组织和力学性能之间关系的模型。首先设计实验，通过改变合金成分和热处理制度，获取了 70 组微观组织变化数据；其次通过室温和高温拉伸实验对不同微观组织的合金力学性能进行测量，分析了成分和热处理制度变化对合金室温、高温力学性能的影响；然后分别采用支持向量回归、随机森林回归、K-最近邻回归、多层感知器 4 种算法建立预测模型。预测了微观组织中 γ 相、 γ' 相、 γ'' 相、 δ 相、Laves 相和碳化物含量对合金室温、高温拉伸性能的影响，并采用交叉验证的方式验证了模型的准确性。误差分析结果显示，多层感知器模型对合金室温拉伸强度的预测结果均方误差为 0.17、平均绝对误差为 0.32、相关系数为 0.95、决定系数为 0.85；对合金高温拉伸强度的预测结果均方误差为 0.14、平均绝对误差为 0.29、相关系数为 0.97、决定系数为 0.91，与其余 3 种算法建立的模型相比，多层感知器模型的预测结果更准确。最后，通过敏感性分析评估了模型预测数据中拉伸性能对 γ 相、 γ' 相、 γ'' 相的敏感性，并根据结果提出了相应的工艺优化建议。

拟交流类型：口头报告

5434

面向超导混合态微观机制研究的磁通涡旋智能分析框架

刘行健¹、赫田¹、尹康鸿¹、高欣胜¹、何亚勋¹、陈婷¹、张嘉颖¹、葛军怡^{*1,2}

1. 材料基因组工程研究院，上海大学，上海，200444

2. 上海市高温超导重点实验室，上海大学，上海，200444

量子化磁通涡旋是超导体中宏观量子效应的核心体现之一，其拓扑构型、动力学和钉扎行为等可以提供超导混合态物理性质如临界电流、涡旋相变、电子配对机制等重要信息。然而，在实际磁力显微镜（MFM）等实空间成像观测中，涡旋图像的精准识别受到涡旋拖拽效应、仪器噪声及样品表面形貌干扰的严重制约，极大限制了从微观图像中定量提取超导本征参数（如局域磁通穿透深度、钉扎强度）的可靠性。为突破此瓶颈，本研究开发了一套基于高斯差分金字塔算法的磁通涡旋自动识别程序，并融合遗传算法等机器学习技术对涡旋分布进行多尺度统计分析。该方法能高效、准确地从多幅钉扎图像及大范围扫描数据中解析关键物理参量。本研究构建了一套适用于大范围、多批次扫描数据的快速自动化分析框架，为深入探究超导材料的微观物理机制提供了强有力的新工具，为将来进一步构建针对超导磁通涡旋物质的自主化测试、分析提供了参考。

拟交流类型：邀请报告

762

材料基因工程与智能科学：AI+时代的无尽前沿

王毅^{*1}、高兴誉²、宋海峰²、杨明理³、宿彦京⁴、李金山¹

1. 西北工业大学

2. 北京应用物理与计算数学研究所

3. 四川大学

4. 北京科技大学

面向 2040 现代化强国发展战略需求,以新材料、新质生产力和新产业融合发展为驱动,本报告全面梳理强国战略和相关国家政策与行动纲要对前沿性-颠覆性关键技术和关键材料发展的共性需求,阐述了材料基因工程(MGE)核心关键技术的发展与革新为人工智能数据基础设施、材料大模型基座、新材料研发及其产业应用等关键核心技术创新奠定重要基础,人工智能将进一步促进高通量智能计算软件/工具的开发、从高通量实验到自主实验范式革新并加速材料智能体的发展、数据资源节点和平台与数据标准规范的建设、新质生产力和新材料产业发展以及教育范式变革和新一代生力军培养。材料基因工程与智能科学的融合,正在以“理论重构、技术赋能、产业牵引”三位一体模式,重塑材料科学与技术以及教育的底层逻辑。本报告重点介绍人工智能(AI)在加速发现和智能制造先进材料中的应用,特别是在自动化研究工作流程中的重要作用。探讨大数据、数据库、标准和大数据系统的重要性,强调新材料数据资源节点等新兴平台在推动数据驱动研究中的关键作用。分析了经典工具包与基于 AI 的工具包之间的联系,以及 AI 驱动的材料设计计算在预测未来材料设计中的主导作用。同时,介绍了国内外最新开发的 AI 计算平台及其功能,特别是在材料发现、仿真、设计和优化等领域的应用,强调 AI 工具包在推动材料科学进步中的重要性。此外,通过 AI 代理辅助焊接的案例研究展示了大语言模型、图像处理、自动编码等技术如何用于新一代智能制造。从知识驱动到数据驱动的集成计算材料工程时代向 AI+时代的转型推动了智能设计和制造范式的变化,从“设计材料”向“用材料设计”的革新。AI+MGE 不仅是单一学科的升级,更是一场涉及科研范式、产业生态和人才培养模式的系统性变革,将为新材料、新兴产业和未来产业等重点领域培养复合型人才。

拟交流类型: 邀请报告

10190

面向应用的高熵合金多目标性能协同成分设计与优化

尹海清*、孙瑞霞、解树一、柴雨桐、张聪、曲选辉

北京科技大学

高熵合金(HEAs)因其独特的组成和优异的性能在航空航天、能源、生物医用等领域引发广泛关注。面对不同服役场景对材料性能提出的不同的要求,需要针对应用条件进行成分的设计与筛选。然而,对于多主元合金巨大的成分空间,传统的实验方法效率低,成本高,且难以进行全空间探索。结合领域知识和高通量计算,使用人工智能方法能够实现合金的多目标性能导向的精准设计与优化,并显著的提升合金设计效率,节约开发成本。

难熔高熵合金有望进一步突破应用温度,成为发动机涡轮盘的候选材料,该应用对合金的强度、塑性、密度和抗高温软化能力等性能提出了要求。针对此应用需求,通过密度和高通量热力学计算对 TiZrHfNbMoTa 六元难熔高熵合金超 34 万的成分空间进行筛选,获得满足密度、抗高温软化性能、单相区和抗热裂等性能的合金 6,216 个。基于特征工程思想,结合晶格畸变、化学短程有序和固溶强化等相关理论,建立机器学习模型,并使用主动学习方法对屈服强度与塑性进行同时优化,经过三轮迭代获得了强韧性匹配且满足多目标性能的合金成分,实现了性能的综合提升。

生物医用高熵合金(Bio-HEAs)同时结合了生物相容性元素及高熵合金的性能优势,是一种极具潜力的骨科内固定材料。本研究针对骨科内固定用生物医用金属材料低弹性模量的需求,基于键合力物理模型、热力学相图计算以及数据增强的深度学习模型,高效开发具有超低弹性模量的 Ti-Zr-Hf-Nb-Ta 系候选合金成分。该候选成分固溶态下具有 HCP 结构,弹性模量仅为

27.7±7.5GPa，断裂延伸率为 7.2±0.6%，突破了传统 TC4 钛合金弹性模量与塑性相协调的瓶颈，且细胞毒性检测结果显示出良好的细胞存活率。

拟交流类型：邀请报告

42

基于深度主动学习的再生球墨铸铁及其铸造工艺的智能设计

杨超*

上海交通大学

本文提出了一种基于深度主动学习框架的再生球墨铸铁及其铸造工艺的智能设计方法，旨在解决传统铸造合金和工艺设计中效率低、成本高、难以满足高性能需求等问题。首先通过在全自动生产线上部署探测器，实时采集并预处理再生球墨铸铁的化学成分、铸造工艺参数、微观组织图像和力学性能等多源跨尺度多模态数据，通过构建深度神经网络模型构建材料成分-工艺参数-微观组织-力学性能之间的依存关系，实现从成分-工艺-组织到性能的正向设计。同时，基于主动学习框架从大量未标注数据中选择最具信息量的样本进行标注，以最小化标注成本并最大化模型性能。通过模型迭代与优化，利用训练好的模型实现从性能到成分-工艺-组织的逆向设计，并通过实验进行验证。在此基础上，打造产线数字孪生系统，进一步构建“化学成分-工艺参数-微观组织-铸造缺陷”之间的构效关系，对再生球墨铸铁的铸件合格率和缺陷种类进行精准预测，初步实现了虚实交互和在线控制，为铸件的设计与优化提供指导。该方法可应用于高性能再生材料设计开发、产品工艺优化以及缺陷预测与控制等领域，具有重要的理论意义和应用价值，未来将进一步探索深度主动学习在材料科学领域的应用，推动材料设计和制造过程的智能化发展。

拟交流类型：口头报告

8089

增强型外推机器学习助力高性能多主元高温合金设计

陶秋伶¹、姚志富²、刘兴军*¹

1. 哈尔滨工业大学(深圳)

2. 深圳技术大学

机器学习（ML）已成为加速新材料设计与开发的强有力工具。在材料科学中，由于可用数据有限，传统的各种 ML 算法——尤其是基于决策树的集成学习方法——仍被广泛采用。然而，决策树在回归任务中通常只能在训练数据范围内进行插值，这限制了其在设计具备增强性能材料方面的实用性。为克服这一局限，我们在多主元高温合金（MPESAs）的关键性能优化中，引入了具有优异外推能力的分段符号回归树（PS-Tree）模型，针对 L_{12} 相溶解温度（ T_{L12} ）、密度和高温屈服强度（YS）进行设计与优化。PS-Tree 能够成功预测超出训练数据范围的新成分。我们对设计的新成分进行了实验验证，实验结果验证了 PS-Tree 模型的准确性，同时也证实了该方法外推的可靠性。基于该方法，我们成功开发出 4 种兼具低密度与高 T_{L12} 的新型 MPESAs，其 T_{L12} 值优于绝大多数多主元合金；同时还开发出 3 种在高温下表现出超高 YS 的新型高温合金，性能优于多种商业化镍基高温合金。上述成果验证了 PS-Tree 在辅助高性能材料设计与开发中的可行性与实用性，并为机器学习在材料设计领域的深化应用提供了新的思路与借鉴。

拟交流类型：口头报告

7854

材料基因工程技术应用于“不锈钢”设计

田野^{1,2}、杨智皓²、张弛³、苏辉²、田光元²、王俊升^{*1,2}

1. 北京理工大学 前沿交叉科学院 北京 100081
2. 北京理工大学 材料学院 北京 100081
3. 沈阳工业大学 材料学院 沈阳 110870

为了筛选出降低镁合金腐蚀速率的元素，本研究采用材料基因工程技术，开发了 Mg-Y、Mg-Ce、Mg-Mn 高通量计算模型，发现了耐蚀性能优异的元素配比，同时我们发现稀土元素（如 Ce 和 Y）有利于形成阳极第二相形成氧化膜保护基体，而 Mn 的溶解可钝化阴极活性并提高基体的功函数（从 3.66 eV 提高到 3.80 eV）。基于高通量计算，我们制备耐蚀四元镁合金，是吸纳了钝化阴极活性和促进阳极稀土氧化膜形成的腐蚀防护层，成功开发出耐蚀性能最高的镁合金（0.395 mm/y），打破“不锈钢”设计的瓶颈技术。

拟交流类型：邀请报告

878

融合物理与数据：深度学习驱动材料时间序列预测的新范式

胡一鸣，郭楷淇，施荣沛*

哈尔滨工业大学（深圳）

材料科学研究中蕴藏着丰富的时间序列数据。其中，部分时间序列数据遵循明确已知的物理控制方程（例如材料的微观组织演变受 Cahn-Hilliard 以及 Ginzburg-Landau 动力学方程控制）；而另一些（如锂电池容量退化过程）其内在物理机制尚未完全明晰，难以用确定性方程描述。基于深度学习的时间序列预测方法具有强大的高维特征提取能力，可有效捕捉复杂时序关系，为建立端到端的预测模型、加速计算过程、优化材料设计及提供潜在解释开辟了新途径。本研究将聚焦于材料科学中两类关键时序预测问题——微观组织演化预测与电池容量退化预测。通过结合无监督学习、监督学习、迁移学习以及物理信息神经网络（PINN）等多样化的深度学习方法，针对不同特性数据的建模挑战展开讨论：在相场模拟微观组织预测研究中，基于耦合直接数值模拟（DNS）与深度学习的通用型求解框架，显著提升了计算效率。该模型相较于传统有限差分法实现了 5.3 倍的加速，并能精确预测枝晶生长过程。该方法可拓展至二维/三维调幅分解等场景，在大尺度空间问题求解上展现出显著的效率优势。在电池容量退化预测研究中，我们针对小样本数据的挑战，构建了基于深度学习的容量全生命周期预测模型。该模型仅利用五个电池前 100 圈循环数据，即可实现对电池整个生命周期容量的精准预测，均方根误差误差低至 0.0054。因此，基于深度学习提出的模型与方法不仅解决了特定材料问题，也为复杂材料体系的设计、模拟与分析提供了强有力的新工具和研究范式。

拟交流类型：邀请报告

1560

金属材料缺陷性质和强度的预测描述符

高旺*

吉林大学

开发快速筛选和设计新材料的方法是材料科学发展的迫切需求，这促进了人工智能方法在材料科学领域的大量应用，但人工智能方法通常可解释性差且需要大量数据，因此发展有物理意义且数据要求较少的解析描述符成为了重要选择之一。针对金属材料晶界性质和强度等力学性能的优化问题，我们从经典的紧束缚模型出发，发展了参数易获取的解析描述符，建立了金属晶界能、晶界偏析能、H-P 关系系数和强度的定量预测模型。这些结果从电子结构角度构建了金属力学性能的新物理图像，并为高性能合金的开发提供了理论工具。

Presenting Type: Oral

9239

AI-Driven Discovery of Optically Transparent Terahertz Absorbers via High-Throughput Ionogel Synthesis and Machine Learning

Yulin Zhang, Jianwei Zhang*

National University of Defense Technology

Over the past decade, automation in materials experimentation has significantly enhanced reproducibility, reliability, and cost-efficiency. Integrating automation with machine learning (ML) accelerates advancements in material synthesis and structure-property relationships. This work presents an automated platform for high-throughput synthesis of ionogel polymers, featuring a robotic workstation with high-precision powder dispensing (<0.05 mg) and liquid handling (<1 droplet), alongside capabilities for homogenization, degassing, molding, and UV/thermal curing. To navigate the vast ionogel compositional space, we developed a data-driven molecular strategy. Analysis of 92 experimental datasets for electromagnetic absorption and mechanical properties. Rigorous feature selection combined top computational features with expert knowledge to identify key polymer/ionic liquid systems via optimized ML models. Subsequent tri-objective Bayesian optimization (electromagnetic absorption, mechanical properties, visible light transmittance) rapidly converged within five iterations, yielding high-performance ionogel terahertz absorbers. The optimized material achieved an average reflection loss of -27.07 dB (99.76% absorption) over $0.15 - 0.75$ THz and 87.88% visible light transmittance at 1 mm thickness. This study demonstrates the powerful synergy of automation, high-throughput data generation, and ML for accelerated discovery and optimization of advanced functional materials.

Presenting Type: Oral

9070

Inverse design of broadband electromagnetic absorption for laminated composites based on data-driven predictive model and progressive Bayesian optimization

Naifeng Yang*

National University of Defense Technology

With the development of radar detection technology, a superior broadband electromagnetic (EM) absorption ability of laminated composites should be designed. However, the rational design of EM property generally relies on the professional knowledge and requires considerable efforts. Here, we present a data-driven machine learning (ML) framework joint with a progressive Bayesian optimization (PBO) algorithm to realize the inverse design of broadband EM absorption. Specifically, a predictive model was trained iteratively to approximate the reflection loss (RL) of variable ply configurations, which has obtained a desirable robustness and generalization ability. Compared to traditional optimization, the PBO-ML framework without any prior knowledge designs a gradient ply configuration with ~20% broader effective absorption bandwidth (EAB) due to improved impedance matching. And a series of similar gradient designs were observed during iterative process, which demonstrates our framework is able for exploring the EM absorption mechanism. Furthermore, this framework is parameter-free, which can be employed in other material system with laminated structure for the inverse design of EM property.

拟交流类型：口头报告

8495

先进材料数据库示范应用：基于多模态数据融合的新型钛合金设计

赵平洛*、张洪梅、程兴旺

北京理工大学

围绕我国先进材料体系结构，开展了材料数据规范研究、数据库架构设计等工作，突破了材料多源异构数据采集汇交技术，构建了我国先进材料性能数据字典，编制了系列材料数据规范，开发了先进材料数据库，具备多模态材料数据采集、存储管理和应用功能，为我国先进材料科学发展和设计选材提供了统一的材料数据平台。并示范应用于新材料设计，面向多工况条件下的高性能钛合金高效研发需求，开发成分-工艺-组织-性能多模态数据融合技术，建立回归模型并实现基于启发式算法对材料高维特征空间的有效挖掘，完成了多目标性能需求的新型钛合金设计。

拟交流类型：口头报告

8558

融合领域知识与机器学习的 2025Cr 奥氏体不锈钢智能设计

刘艳洁*¹、余童昕²、刘轶*²

1. 上海电子信息职业技术学院

2. 上海大学

2025Cr 奥氏体不锈钢因其优异的综合性能（力学、抗高温氧化、耐蚀及抗中子辐照）将成为第四代核燃料包壳关键候选材料之一。我国亟需突破其自主牌号与批量化制备瓶颈，核心在于精准掌握合金成分-性能关系。本研究基于高通量实验建立的成分-硬度数据库，通过先进特征工程将 320 维特征降至 12 个关键特征，并构建机器学习模型。创新性地结合领域知识人工采样与贝叶斯优化采样策略，高效筛选潜在高硬度合金成分，并通过高通量实验快速验证。历经 5 轮“模型

优化-预测-验证-反馈”迭代，成功制备并表征了 160 种成分的 2025Cr 合金。研结果表明，依赖领域知识指导的成分设计可获得更优性能合金，脱离领域知识将显著降低模型优化效率。优化合金的室温抗拉强度最高达 604 MPa，超越国外同类商业合金水平。其中，3 种优选合金在模拟服役环境后性能稳定，保持 577 MPa 抗拉强度与 24.3% 延伸率。本研究有效探索并验证了领域知识在合金智能设计中的关键作用，为提升机器学习在小样本材料数据中的预测精度提供了新思路，加速高性能 2025Cr 不锈钢的自主开发进程。

拟交流类型：邀请报告

5377

高分子材料智能设计制备

林嘉平*

华东理工大学

先进高分子材料在航空、航天和民用领域发挥着越来越重要的作用。然而，传统试错法很难解决某些长期困扰材料设计制备的难题。科学研究已从实验观察、理论推演、计算模拟进入到基于人工智能（AI）的第四范式，基于 AI 的新研究范式已在生命、药学等领域取得重要进展。近年来，一个极具挑战的课题，就是将 AI 应用到材料领域。使材料研究手段发生变革，实现原始创新。

报告人及其团队针对高分子材料，通过收集数据，发展数字化方法，构建数据库。发展适用于高分子特点的机器学习方法，建立 AI 性能预测模型。建立了基于基因组合概念的结构设计新方法。运用新研究范式，设计制备了一系列新型高分子材料。例如，建立了环氧基体树脂的数据库，发展描述交联结构的描述符，基于高斯过程回归建立了环氧树脂力学性能的机器学习预测模型，在此基础上，设计出力学性能优异的树脂。此外，还进一步发展了基于 AI 的复合材料设计方法，获得性能优异的环氧树脂复合材料。

拟交流类型：邀请报告

11553

催化合成反应自动生成

柯卓锋*

中山大学

催化反应是合成和结构改性的科学基础。催化反应由于路径错综复杂，传统理论计算方法进行反应自动生成面临全局空间的路径搜索需要海量的计算资源和时间的瓶颈，很难适应大数据和人工智能发展趋势的需求。基于模式识别的反应生成则泛化能力有限，难以处理多步复杂变化。因此，开发自动化、高效经济、普适性的反应自动生成的方法和工具至关重要。针对目前对复杂反应路径搜索面临全局搜索耗时较大、适用体系范围有限等困境。我们课题组开发了自动反应生成程序 ARplorer。该程序基于大语言模型辅助梳理的化学逻辑库，通过多层并行高效筛选机制进行反应路径的全局搜索，借助主动学习采样提高反应路径搜索效率，具有分而治之的路径自动拼接特点，可以实现对反应的快速、高效、经济的自动化生成。ARplorer 反应自动搜索程序具有很好的通用性，可以适用于有机、过渡金属、手性体系等各类复杂化学反应类型，有望成为大数据驱动的反应开发和催化剂设计的有力工具。

关键词：反应机理；自动搜索；有机反应；过渡金属反应；不对称反应

参考文献

- [1] 柯卓锋, 陈汝钊, 刘裕邦, 李胤午; 软著 2024SR0569249.
- [2] (a) Chen, Z.; Ouyang, L.F.; Wang, N.; Li, W.K.; Ke, Z.F. Chem. Sci. 2025, 16, 163. (b) Cao, W.; Li, Y.; Yan, B.; Zeng, Z.; Liu, P.; Li, R.; Jiang, J.; Ke, Z.F.; Yang G. J. Am. Chem. Soc. 2024, 146, 14765. (c) Jin, Y.B.; Jing, Y.R.; Li, C.S.; Li, M.; Wu, W.Q.; Ke, Z.F.; Jiang, H.F. Nat. Chem., 2022, 14, 111. (d) Liu, C.; Tan, X.W.; Zhan, L.Z.; Jing, Y.R.; Wu, W.Q.; Ke, Z.F.; Jiang, H.F. Angew. Chem. Int. Ed., 2022, 61, e202215020. (e) Yan, B.; Li, Y.W.; Cao, W.W.; Zeng, Z.P.; Liu, P.; Ke, Z.F.; Yang, G.W. Joule, 2022, 6, 2735.

拟交流类型：邀请报告

642

多层陶瓷电容器 (MLCC) 服役寿命预测的物理信息机器学习 (PIML) 模型

刘志甫*

中国科学院上海硅酸盐研究所

多层陶瓷电容器 (MLCC) 是电子系统中应用最广泛的无源元件, 素有“电子工业大米”之称。随着 5G/6G 无线通信、新能源汽车、人工智能等产业的发展, 电子系统对 MLCC 的可靠性要求越来越高, 快速、高效、准确评价 MLCC 的服役特性和服役寿命是保障电子系统可靠性的关键。MLCC 服役寿命通常采用高加速实验 (HALT), 在加载温度、电场、湿度等应力条件下对元件进行加速老化, 采用统计分析获得 MLCC 平均服役寿命 (Mean Time To Failure, MTTF), 实验周期长效率低, 且不同供应商、不同规格乃至不同批次的产品都需要进行评估。

基于大数据的机器学习方法为 MLCC 服役寿命预测提供了新的方法和思路, 但纯数据驱动的机器学习模型进行无法外推。本研究提出了一种物理信息机器学习 (PIML) 方法, 用于预测 MLCC 的 MTTF。通过将 Eyring 模型的数学结构嵌入特征工程, 将领域知识与数据驱动的学习结合起来; 双损失函数进一步将 Eyring 方程整合为物理约束, 实现了经验准确性和热力学一致性的同步优化。实验结果表明, PIML 方法比独立的 Eyring 模型相比具有更高的 寿命预测准确性。

拟交流类型：邀请报告

8839

机器学习辅助生物功能材料设计及应用

冯凌燕*

上海大学

目前生物功能材料的研究大多仍以“试错法”经验寻优为主。鉴于新材料制备过程中系统环境的复杂性以及材料合成数据缺乏清晰度, 精确构建实验参数和目标性能之间的关系存在困难, 机器学习可以极大地优化材料设计合成和性能提升, 助力新型生物功能材料研究新范式。

报告人聚焦课题组近期工作, 汇报机器学习辅助的高灵敏手性圆偏振核酸功能材料设计, 通过“实验-预测-验证”的优化以及特征重要性筛选, 确定各种可能的合成实验参数及其组合与材

料目标性能之间的关系。通过机器学习和实验验证相结合，从累计 15640 个的实验和计算“组合样本”数据中进行大规模预测筛选，优化后精确合成的核酸功能水凝胶材料目标不对称因子可达 0.15，比未优化的材料性能提升 10 倍以上。同时，我们报道了一类新型的“分而治之”机器学习策略识别生物功能材料小数据机理，通过该模型预测了 24000 个虚拟的实验合成路径，推选出最优虚拟的实验合成路径进行实验验证。并有效结合了纳米酶及一氧化氮气体治疗，实现协同铁死亡/凋亡抗肿瘤疗法，进一步推动机器学习辅助的纳米酶复合材料体系抗肿瘤研究。

拟交流类型：邀请报告

1881

人工智能赋能的介电智能复合材料研究

巫金波*

深圳北理莫斯科大学

介电型智能材料主要包含电流变材料和介电弹性体两大类，两类材料组成成分有相似性但又各具特点，在电场下分别会产生流变学性能变化和致动行为。本课题从介电型智能材料的微观机理和实际需求出发，引入数据库和人工智能工具革新了介电型智能材料的研究范式，通过数据驱动实验研究制备得到了高性能的介电型智能材料，并开发了基于介电型智能材料的新型器件。本课题主要工作如下。

建设了世界上首个具备实用价值的介电型智能材料数据库：介电型智能材料数据库包含电流变弹性体数据库和介电弹性体数据库两个子库。根据电流变弹性体和介电弹性体两种材料各自的特点，分别确定了两个子库的结构和所包含的字段。从公开发表的研究文献中获取介电型智能材料的数据，基于 MySQL 建设了关系型数据库，实现了数据存储和数据管理。基于 Python 语言编写了介电型智能材料数据库的可视化操作界面，实现了用户友好的数据管理和数据查询。基于 HTML 语言搭建了在线开放的材料数据共享平台，首次实现了材料数据向全世界所有学者开放。

电流变弹性体的数据驱动研究：根据电流变弹性体数据库中数据的指导，选择巨电流变颗粒即尿素层包裹的钛氧基草酸钡颗粒作为分散相、聚二甲基硅氧烷作为连续相、二甲基硅油作为塑化剂，制备了高性能各向异性巨电流变弹性体。各向异性巨电流变弹性体的相对电流变效应超过 9,500%，性能远超传统的电流变弹性体和各向同性巨电流变弹性体，达到世界领先水平，满足了实际应用的要求。基于各向异性巨电流变弹性体开发了可用电场调控拍面软硬程度的智能乒乓球拍，并验证了其在日常体育活动和运动员非常规训练中的实用性。

介电弹性体的数据驱动研究：根据介电弹性体数据库中数据的指导以及数据挖掘技术和机器学习技术的辅助，选取丙烯酸正丁酯为单体、CN9021NS 为交联剂、2-羟基-2-甲基-1-苯基-1-丙酮为光引发剂，用紫外光引发自由基聚合的方法制备了高性能聚丙烯酸酯介电弹性体。用配体辅助再沉淀法制备了 CsPbBr₃ 钙钛矿量子点，并用量子点对介电弹性体进行改性，得到致动性能进一步提高并且能实现光致发光功能的多功能介电弹性体。高性能介电弹性体在 6 kV/mm 电场下的面积应变超过 101%，性能远超目前已发表的研究，达到世界领先水平，并解决了驱动电压过高的难题。基于聚丙烯酸酯介电弹性体开发了柔性仿生爬行机器人，证明了新型介电弹性体材料的应用价值。

拟交流类型：邀请报告

5432

基于主动学习的催化稳定构型搜索及 NH₃-SCO 合金催化剂逆向设计

杨家强*

郑州大学

氨气选择性氧化 ($\text{NH}_3\text{-SCO}$) 可将移动源和固定源的逃逸氨转化为无毒无害的氮气。试错型研发模式成本高和周期长,限制了 $\text{NH}_3\text{-SCO}$ 金属基催化剂的快速开发和理性设计。结合主动学习方法的数据驱动材料研究新范式为 $\text{NH}_3\text{-SCO}$ 合金催化剂的快速设计提供了新方案。首先,开发了结合主动学习和相似分布的催化稳定吸附构型的快速搜索方法。具体而言,结合最远点采样等数据抽样方法从吸附结构大空间构建了小样本数据集,高通量计算小样本集的反应物种吸附能并拟合吸附能高斯分布 $N(\mu, \sigma^2)$;考虑小样本和大空间数据的相似分布,判断小样本的最小点是否处于高斯分布 $\mu - 2\sigma$ 左侧,满足条件,则该构型即为全局的稳定构型;不满足,则结合高斯过程回归和贝叶斯优化算法从大数据空间采样 2 个新数据点加入小样本数据集;再次拟合小样本高斯分布判断是否收敛,重复以上过程直至搜索收敛。我们发现该策略可实现基于 <10% 大空间数据量的小样本发现全局的最稳定构型,可以极大加速催化构型的高通量计算。

进一步,基于过去研究构建 $\text{NH}_3\text{-SCO}$ 活性和选择性描述符和小样本数据集 (~300 种合金构型),建立由 3d, 4d 和 5d 过渡族元素组成的候选合金材料大空间;结合高斯过程回归、贝叶斯优化算法和帕累托双目标优化策略等,建立了基于主动学习的合金催化材料搜索框架。研究发现仅 3 次主动学习迭代即 30 个构型的高通量计算,帕累托前沿不在前进,这意味着主动学习搜索收敛,进而实现了在合金大空间 (>1000) 的潜在催化构型快速搜索。对候选体系的高通量计算和微反应动力学研究发现帕累托前沿点以及前沿附近点中的 9 种合金构型具有优异活性和选择性,即为新型 $\text{NH}_3\text{-SCO}$ 合金催化体系。本工作结合高通量计算、主动学习、帕累托最优解以及微反应动力学等方法,实现了基于小样本数据全局搜索催化结构或组分大空间中的潜在体系,为催化材料的理性设计开拓了新思路。

拟交流类型: 邀请报告

887

大语言模型启示的材料高维数字化表征: 嵌入特征的迁移学习

刘轶*, 高珺

上海大学

在材料信息学领域中特征工程是决定机器学习模型预测精度上限的关键。材料特征工程的实质是构建面向材料的数字化表征。传统的特征构建方法还存在形式简单、信息不完备、重要性和相关性不明、构造方法依赖经验和随机性太强等不足。材料的性能往往由其成分、结构、工艺等多方面因素及其组成元素或单质的基础物理化学性质共同决定,这些因素构成了高维度的材料特征空间。常用的特征筛选(降维)可能丢失重要的关键特征以及特征间的非线性关系和高阶交互信息,而这些信息对于准确预测复杂材料性能至关重要。为了应对现有材料数据处理中特征冗余筛选困难、特征表征能力不足以及模型适配性差导致模型精度差等挑战,本工作提出了一种面向材料数据高维特点的特征机器学习方法。该方法的核心是协同优化特征的降维与升维过程。在特征降维方面,利用多种机器学习特征降维和统计分析技术,采用层级筛选或集成学习的策略,系统地评估和筛选出对目标性质最关键的 material 特征子集,有效应对低相关和冗余性问题。在特征升维方面,首先通过非监督学习构建非线性升维映射的嵌入表示基座模型,然后设计了连续型和离散型的深度神经网络架构,针对预测目标性质对嵌入特征进行参数微调的迁移学习,旨在学习到更准确、更能体现复杂内在关联的特征表示,为构建精确的深度机器学习材料性质预测模型提供前提保障。

拟交流类型：邀请报告

9406

人工智能算法在团簇结构优化和物性预测中的应用

赵纪军*

华南师范大学

人工智能指的是计算机模仿人类认知能力来学习和解决问题，相关算法包括遗传算法、机器学习等。本研究团队长期致力于开发结合第一性原理计算的遗传算法程序 CGA，将之成功应用于搜索一百多种原子和分子团簇的基态结构。作为具体应用实例，我们系统研究了中等硼团簇结构的尺寸演化规律。通过与实验合作，我们发现了一系列具有异常稳定性和新奇电子性质的超原子团簇。利用深度学习技术，我们发展了图卷积网络对银团簇和硼氮笼型团簇进行了研究，能够快速确定团簇的基态结构并准确预测电子性质如 HOMO-LUMO 能隙。

拟交流类型：邀请报告

6343

二维 III-VI 族范德华异质结的高通量计算与机器学习研究

萨百晟*

福州大学

We present material screening and machine learning modeling to accelerate the discovery of promising photocatalytic and photovoltaic candidates in Janus III-VI vdW heterostructures. A comprehensive database with a total of 19926 heterostructures has been proposed according to the high-throughput first-principles calculations. It is highlighted that we develop an accurate machine learning model using only atoms and bonds as descriptors based on the crystal graph convolutional neural network framework. Besides, 1035 Janus III-VI vdW heterostructures have been screened out according to the essential criteria of stability. Moreover, we find 66 and 71 potential candidates for photocatalysis and solar cells, respectively, from further application-driven screening. Interestingly, the screened type-II SeInAlS/SeGaAlTe heterostructure with a band gap of 1.18 eV is highlighted as an internal electric field-driven asymmetrical photocatalyst. On the other hand, the type-II Al₂STe/Al₂SSe heterostructure solar cell presents power conversion efficiencies higher than 21% both from the microscopic and mesoscopic point of views.

拟交流类型：邀请报告

2

人工智能生成材料结构研究

方国勇*

温州大学

晶体结构预测 (CSP) 一直是材料设计领域的研究热点之一。本文提出了一种改进的生成对抗网络模型，旨在解决材料科学领域中高维数据驱动的晶体结构预测问题。该模型采用数据驱动的

潜在空间融合 (DDLSF) 方法, 通过将真实数据的统计特性与标准高斯分布相结合, 优化 GAN 的潜在空间, 有效缓解了“模式崩溃”问题。GAN-DDLSF 模型以晶格参数和分数原子坐标的连续表示构建了高效的晶体结构表示方法, 并应用于预测氮化镓 (GaN) 的二元晶体结构。模型生成了 9321 个 GaN 二元晶体结构, 其中 16.59% 达到稳定状态, 24.21% 处于亚稳态。与传统方法相比, GAN-DDLSF 显著提高了生成结构的物理现实性和多样性, 为材料科学研究提供了新视角和方法, 展现了其在材料发现和设计中的潜力。最后对人工智能生成材料结构研究进展进行综述和展望。

拟交流类型: 邀请报告

2463

机器学习与第一性计算协同加速析出强化型钴基高温合金的设计

许伟伟*、王翠萍、刘兴军

厦门大学

国防工业的快速发展对航空发动机热端部件合金的承温能力提出了更高要求。新型析出强化型钴基高温合金不仅继承了钴合金优异的环境抗性, 而且具备比第二代镍基高温合金 CMSX-4 高 50~150 °C 的熔点温度, 被认为是潜在的下一代高温合金材料而备受关注。然而, 窄小的 $\gamma + \gamma'$ 两相区范围、亚稳的 γ' 析出相结构等问题制约了现有钴基合金的进一步发展, 同时也给新型钴基合金的成分设计与开发带来了极大挑战。传统设计方法多依赖于经验积累与反复试验, 效率低且成本高昂。因此, 如何利用先进的理论数据信息加速钴基高温合金的创新设计, 成为当前材料科学领域的研究热点。本报告中, 我们借助于基于密度泛函理论的第一性原理计算、机器学习等理论方法, 构建多元化理论数据源, 并探索了一套全面而精确的钴基高温材料性能预测体系。通过对这些数据信息的深度挖掘与分析, 我们不仅揭示了添加元素对钴基合金中关键析出相的稳定性及力学性能的影响规律, 并阐明了影响规律背后的微观机制。基于此, 我们指导设计出了新的双相钴基高温合金, 不仅大幅提升了合金的综合性能, 还显著缩短了新材料从研发到应用的周期。本研究不仅为钴基高温合金的设计开辟了新的路径, 也为其他高温材料的创新研究提供了可借鉴的方法论指导。

拟交流类型: 口头报告

9404

介观尺度模拟: 加速先进核燃料微观组织演化和服务性能预测的研究

马聪¹、信天缘¹、侯氢²、付宝勤²、吴璐*¹

1. 中国核动力研究设计院

2. 四川大学

介观尺度的相场和速率理论方法为核燃料设计、寿命预测及安全评估提供了高效的计算工具, 尤其在揭示辐照损伤与热-机械性能关联机制方面具有不可替代性。采用相场模拟方法, 对不同温度下耐事故燃料候选材料 U_3Si_2 的纳米晶粒生长动力学进行了模拟分析。重点探讨了晶粒形核孕育时间与温度的依赖关系, 揭示了以不同生长机制为主导的动态演变过程。模拟获得的晶粒尺寸及其生长动力学特征与实验观测结果高度吻合。通过不同标度区间晶粒尺寸分布的统计分析, 验证了其普适性规律。针对 U_3Si_2 纳米晶粒结构生长过程中热导率变化的分析显示, 该结果与理论预测具有良好的一致性。通过改进的速率理论方法, 对不同辐照条件下的裂变气泡进行了系统研究, 揭示了气泡生长动力学与缺陷结构特性的演变规律。重点考察了温度与裂变速率对气泡生长、缺陷群演化以及材料性能 (弹性模量与热退化因子) 变化的耦合作用机制。研究论证了多种辐照条件下气泡尺寸分布的普适性特征, 并发现了气泡生长动力学机制的临界转变现象。结果表明: 当

主导机制从裂变气体原子主导转变为空位主导时，气泡尺寸生长规律会经历从抛物线型到亚抛物线型的动态转变。改进后的速率理论模型显著提升了预测精度，为晶体 U_3Si_2 燃料性能（尤其是裂变气体行为）研究提供了更精细的理论分析框架。

拟交流类型：口头报告

1750

相场信息驱动的高温合金蠕变机器学习研究

李永胜*、宋俊鹏、单野、王晟龙

高端装备铸造技术全国重点实验室 先进金属及金属间化合物材料技术工信部重点实验室 南京理工大学 南京 210094

相场模拟已经发展成为纳米-微米尺度融合热力学和动力学的重要研究方法，耦合应力和温度等场变量，实现了材料微观组织性能的模拟和预测。基于人工智能的机器学习在材料研发中表现出强的预测能力。通过提取相场模拟的组织性能特征，进行机器学习预测模型的优化，发掘图像识别和性能预测模型，实现相场信息驱动的机器学习预测和数据生成，加速材料研发并实现长时组织性能预测。开展相场信息驱动的镍基单晶高温合金蠕变行为机器学习研究。采用蠕变损伤晶体塑性相场模拟高温合金蠕变形态、成分和应变，基于机器学习方法建立了高精度的相分类模型和蠕变应变预测模型，评估成分和微观结构对蠕变行为的影响。采用两点相关分析和主成分降维添加统计特征，降低定量蠕变应变预测模型的误差，提高机器学习模型的准确性和泛化能力。利用解释性分析方法理解 γ' 筏化度、 γ' 析出相体积分数和蠕变应变的内在关系。相场信息驱动的机器学习提高加速了复杂条件下合金组织性能长时演化的研究效率，为材料性能预测和设计优化提供了新思路。

拟交流类型：口头报告

9793

数据驱动的树脂基防热材料逆向设计

王语阳、杨炯、谢玮*

上海大学

树脂基防热材料的宏观烧蚀热响应复杂，其优化设计也因涉及因素众多而面临巨大挑战。本工作提出一种整合有限元数值模拟、机器学习和贝叶斯优化的综合方法，用于树脂基防热材料物性参数的逆向设计。首先，建立了烧蚀热响应的数学模型，并通过有限元模拟系统采样 11 维物性参数空间，生成了 1488 组热响应数据。随后，利用这些模拟数据训练了机器学习代理模型以快速预测背温演化，预测准确性高 ($R^2 = 0.9933$)、预测速度相较于有限元模拟提升了 2000 倍以上。敏感性分析揭示，原始材料密度和热导率是影响宏观热响应的最关键参数。最后，采用贝叶斯优化算法进行材料物性组合的逆向设计，得到了如原始密度 658.01 kg/m^3 时背温可低至 465.21 K 的最优参数组合，通过了有限元验证确认。这些优化解是传统均匀采样未能发现的，凸显了人工智能方法在处理多因素优化问题上的优势，显著减少了迭代成本与时间。本研究为先进防热材料逆向设计提供了一个人工智能数据驱动范例。

拟交流类型：口头报告

7653

数据驱动的含能分子设计方法

刘英哲*、文琳元

西安近代化学研究所

随着科学范式的演进，人工智能与大数据技术为材料研发带来了新的变革，有望加速新型含能材料的创新发展。数据驱动下的含能材料理论设计方法是当前的研究前沿，将进一步推动含能材料研发范式由“实验试错”向“理性设计”的转变。本报告聚焦含能材料高通量设计与筛选方法，融合量子化学计算、机器学习、数据挖掘等先进技术，对高能致爆材料、笼形含能材料等高能量密度材料进行了探索研究，所建方法显著提升了设计效率，为新型含能材料的快速发现提供了新手段。后续，拟重点开展合成可行性评估方法等研究，解决新型含能材料由“设计端”到“合成端”的堵点难点问题。

拟交流类型：口头报告

1291

“聚合基元指纹”推动有机光伏材料机器学习设计

刘秀敏^{1,2}、叶财超^{*2}

1. 南京理工大学

2. 南方科技大学

为了提高有机光伏（OPV）电池的功率转换效率（PCE），在合成前预测高性能聚合物/大分子材料并了解其与光伏性能的关系是尤为重要。在这项研究中，我们构建了一个包含 1343 个实验验证的 OPV 非富勒烯受体（NFA）材料的数据集，并基于此开发了五种预测算法。其中，随机森林（RF）算法在材料设计与筛选中展现出最优异的预测性能。此外，研究创新性地探索了一种新型聚合物/大分子结构表征方法：聚合基元指纹（PUFp），该表征方法在多种机器学习（ML）算法中的表现均优于传统的分子访问系统（MACCS）。PUFp 不仅提升了结构-性质关系的可解释性，还实现了对由供体（D）和受体（A）单元构成的共轭聚合物/大分子的 PCE 预测。基于 PUFp-ML 模型，我们成功预评估并分类了多种受体材料，从中筛选出两种最具应用前景的 NFA 候选材料。该研究框架证实了利用 PUFp-ML 建立的特征/子结构与性能关系进行新材料设计的能力，为开发高性能 OPV 受体提供了系统性的设计指导。值得注意的是，该方法可进一步拓展至供体材料的研究，不仅加速了材料发现进程，更为创新性 OPV 材料的设计提供了新的研究思路 and 理论依据。

拟交流类型：口头报告

3591

人工智能辅助高效能有机能源小分子快速开发

郑玉杰*

重庆大学

有机小分子因为其轻质量、低成本、多样性可设计性强等突出优点，在众多领域具有极大的应用前景。然而，由于有机小分子化学空间丰富，传统的实验“试错法”和第一性原理计算方法已难以满足日益增长的高性能新型能源材料的开发需求。随着研究数据的积累、算力的提升和算

法的进步，人工智能技术为新型高性能材料开发提供了新的机遇。本报告将介绍我们团队在结合人工智能技术加速新型光伏、储能应用中的有机小分子开发的一些探索。首先是建立了有机小分子数据库，比较了多种机器学习模型及有机分子的数字描述方式，发现长度超过 1000 的分子指纹在结合速度和准确度综合考虑后最好，且通过实验验证了机器学习的可靠性。并基于此探索了利用机器学习识别一些功能基团，并研究了端基、侧链等主要官能团对光电性质的影响规律及机制。结合机器学习、量化计算和实验等，我们获得了一批具有应用潜力的有机光伏小分子和水系锌离子小分子添加剂。

拟交流类型：口头报告

6132

国产开源 DFT 软件 ABACUS——软件特点与机器学习探索

郑大也*

北京科学智能研究院

ABACUS 是一款国产开源密度泛函理论 (DFT) 软件，专注于材料科学的高精度模拟计算，兼具学术研究与工程应用价值。其核心优势在于平面波基组与数值原子轨道基组的协同支持。数值原子轨道基组在保持接近平面波精度的同时，显著减少基组规模，提升计算效率，尤其适用于大体系或复杂材料的模拟。ABACUS 在性能上支持高效并行计算及 CPU+GPU 异构计算，针对国产 CPU+DCU 硬件平台展现了优异的性价比。为提升易用性，ABACUS 提供多种安装支持、丰富教程及便捷工具，如结合 PYATB 性质便捷计算等前处理/后处理工具包，显著降低用户学习门槛。与 AI 结合方面，ABACUS 已支持多种机器学习方法，显著提升材料模拟的效率和精度。以“精度可靠、性能优秀、易用易开发，拥抱 AI”为核心目标，ABACUS 为材料科学提供了国产化、高效可靠的第一性原理计算解决方案。

拟交流类型：口头报告

3137

交联环氧树脂的反应性机器学习力场

司君山¹、吴楠¹、文明杰²、陈东平²、贺雍律¹、张鉴炜^{*1}、段科¹

1. 国防科技大学

2. 北京理工大学

实现大规模分子动力学模拟以精准表征交联环氧树脂体系，同时兼顾量子力学级别的计算精度与复杂化学反应过程的动态捕捉，是当前计算材料科学领域的一个尚未解决的挑战。本研究创新性地构建了基于化学环境导向的数据集，并据此开发了一种具有反应性的机器学习力场。该力场能够精准再现交联环氧树脂体系中的热-机械性能，在能量和力的预测中，其均方根误差分别为 1.3 meV/原子和 159 meV/Å，计算效率相较于传统从头算分子动力学方法提升了约 1200 倍。分子动力学模拟结果显示，该力场在径向分布函数、密度及弹性模量等关键热-机械性能的预测中展现了较高的精度，计算结果与实验数据吻合良好。特别是，该力场在典型化学键解离能的预测中表现优异，平均绝对误差仅为 7.8 kcal/mol。此外，该力场能够模拟聚合物的拉伸断裂行为。本研究验证了机器学习力场在处理交联环氧树脂体系复杂构效关系方面的能力，为开发面向通用聚合物的反应性机器学习力场提供了重要的参考。

拟交流类型：口头报告

10017

酚醛树脂的 phyneo 机器学习力场开发

陈意齐、谢玮*

上海大学

准确、通用且可扩展的力场在有机聚合物的分子动力学模拟中起着至关重要的作用。酚醛树脂的经验力场由于忽略了重要的物理现象（如极化、电荷穿透、多体色散等），往往无法捕捉精确的分子间相互作用；更精确的相关波函数（CW）方法会随着系统大小的增加而计算成本迅速增加。为此，我们引入了一种通用且完全基于第一性原理计算的力场——PhyNEO 力场。PhyNEO 力场结合了物理驱动和数据驱动的方法，能够仅使用酚醛树脂非常小的重复单元的量子化学数据生成具有化学精度的整体势能，不仅降低了计算成本，还可以准确预测酚醛树脂聚合大分子的整体性质。因此，该工作为酚醛树脂体系的力场发展提供了有力的证据。

拟交流类型：口头报告

9761

基于密度泛函理论和机器学习的卤化物钙钛矿理论研究

张国旭^{*1}、苗震雨¹、贾磊¹、杨琳^{1,2}、王振波¹

1. 哈尔滨工业大学

2. 西安交通大学

Cesium-based all-inorganic halide perovskites have shown excellent photovoltaic properties. However, phase stability and transformations in different polymorphs remain rather poorly understood. Here, we investigate the cohesive, electronic properties and structural instabilities of CsBI₃ (B=Pb, Sn, and rare-earth elements) based on first-principles density-functional theory (DFT) calculations and machine learning algorithm. Care has been taken to choose density functionals and zero-point vibrational effects have been included by performing phonon calculations. In particular, we compare different van der Waals (vdW) corrections to the DFT approaches. Our results demonstrate that nonlocal many-body dispersion interactions play a vital role in predicting the cohesive properties and phonon spectra of halide perovskites studied here. Furthermore, we find the anharmonicity cannot be neglected in order to correctly predict the phase stability and transitions of polymorphs. We stress that both nonlocal many-body dispersion and full anharmonic terms should be considered for accurate studies of such type of materials.

Keywords: Halide perovskites; Density-functional theory; van der Waals interactions; Structural instabilities; Many-body dispersion

拟交流类型：口头报告

999

金属锂热力学的第一性原理计算模拟

沈祎恒*、谢玮

上海大学

最轻金属单质锂的复杂热力学属性与其在能源领域的性能密切相关，而其在近常温条件下的相平衡热力学表征困难，亟需计算模拟提供理论支持。此前基于准谐近似的模型随忽略了声子重整、电声耦合等温度效应，影响相平衡热力学的机制分析。

我们结合等变图神经网络机器学习力场 MACE 和自洽声子模型计算 bcc、fcc 和马氏体 9R 相的等压膨胀，预测常压低温下实验制得的 9R 相为亚稳相、fcc 相为基态。然而，该模型忽略电声耦合，导致高估 fcc-bcc 相平衡温度。

进一步，我们采用特殊位移法 SDM 在声子重整计算中第一性原理地引入电声耦合，发现声子重整和电声耦合的自由能贡献相消，而熵稳定效应是稳化 bcc 相的驱动力；预测常压下 fcc-bcc 相界约 150 K，与实验值吻合。

在此基础上，我们结合机器学习力场和 SDM 计算核量子效应对自由能的贡献。结果显示，虽然其绝对值与振动自由能相当，但相态间倾向于抵消，对相平衡的影响有限。

通过上述热力学计算，我们从热膨胀、声子重整、电声耦合与核量子效应四个关键维度，系统且定量阐释其对锂金属自由能和相平衡的影响机制，为定量研究金属材料热力学性质提供新范式，为理论计算指导实验稳化锂金属电极提供可能。

拟交流类型：口头报告

75

固态电池原子界面优化设计

杨孟昊*

同济大学

构筑高稳定固态界面是实现固态电池优异性能的关键科学问题。申请人致力于构建多尺度智能模型优化界面，通过材料大数据学习来阐明界面的结构与性能关系，大幅度加快了全固态电池的研发速度。取得如下创新性成果：1) 建立了从微观到介观的跨尺度界面模型，开发了电池充放电循环新算法；2) 揭示了离子哑铃状传输路径，构建了界面结构扩散性能数据库；3) 阐明了无序原子层对界面结晶促进作用，发展了固态界面形核生长理论。今后将进一步构建生成式人工智能模型设计界面，深入研究固态界面的时空动态演变机制，建立新概念材料知识图谱数据平台。

Presenting Type: Oral

80

Artificial Intelligence Navigated Development of High-Performance Electrolytes for Next Generation Magnesium Batteries

Yao Liu*

Fuzhou University

Traditional trial-and-error methods are inefficient and costly for discovering novel electrolytes, including magnesium (Mg), essential to developing next-generation metalbased batteries. To advance the development, this work establishes, for the first time, a criterion for screening practical electrolytes using an artificial intelligence approach and a molecular database, offering the potential to revolutionize traditional electrolyte design principles. A total of 823 solvent molecules are generated using a self-developed matrix engineering algorithm, and their corresponding physicochemical properties are systematically analyzed through various machine learning (ML) models. LUMO, Δ LUMO, ESPmin, ESPmax, and Eb are identified as the most critical parameters and selected as the primary screening criteria. As a result, 18 target molecules are identified through statistical analysis and comparison of the physicochemical properties of the solvents. Two new solvents, abbreviated as DMP and DOX, are randomly selected and experimentally validated. The results demonstrate that DOX can significantly improve the electrochemical performance of the Mg boron-based electrolyte, i.e., $\text{Mg}[\text{B}(\text{hfp})_4]_2$, even compared to the commonly used DME. At a current density of 1.0mAcm^{-2} , the average Coulombic efficiency for Mg plating/stripping reaches 99.54% after 5200 cycles. As presented, this paper begins with the molecular physicochemical properties, and develops a streamlined methodology for rapidly screening potential electrolytes for Mg batteries through reducing the pool from 823 to 18 candidates and improving efficiency by nearly 50-fold. It is worth noting that this methodology is not limited to the theoretical guidance for the development of Mg batteries, but can also to explore other battery systems.

拟交流类型：口头报告

5296

Ge-Sb-Te 相变材料的热力学描述及在非晶稳定性研究中的应用

崔东宇、汪炯*、周佳强

中南大学粉末冶金研究院

相变存储器 (PCM) 具有高速、高稳定和低功耗等特点。化学计量变化、析出动力学、微观结构模拟、非等温非平衡条件的研究是 PCM 发展的重要内容, 其中热力学数据库的建立是必不可少的。目前尚无 Ge-Sb-Te 三元体系的数据库。本工作使用更新的实验数据、第一性原理方法和采用相图计算 (CALPHAD) 方法, 更新了 Ge-Te 和 Sb-Te 二元体的热力学描述。本还工作通过热力学分析发现并文献中报道的相关系中的矛盾, 并通过测量 673K 下 Ge-Sb-Te 三元体系的相关系, 阐明了这些矛盾, 并结合测量的 Ge-Sb-Te 三元体系相关系, 建立了该体系全成分范围内的热力学描述。最后, 利用本文提出的热力学描述方法预测了非晶形成能力。结果发现驱动力存在极小值, 表明该成分下的非晶形成能力良好。本研究有望为 Ge-Sb-Te 相变记忆的研究以及未来多组分体系的评估做出贡献。

拟交流类型：口头报告

9474

机器学习引导的高效稳定 OLED 材料设计及机理探究

石一茗、宋丹丹*

北京交通大学

有机发光二极管（OLED）技术在显示与照明领域展现出广阔的应用前景，但其材料的稳定性与效率仍是限制其发展的主要瓶颈。如何提升材料的本征化学稳定性，同时优化发光效率，已成为当前研究的核心议题。传统材料设计方法依赖于大量实验和高成本的量子化学计算，难以有效应对复杂的多变量和多态问题。本研究通过结合机器学习（ML）与量子化学计算，对 OLED 材料的稳定性及光输出耦合效率的优化进行了系统深入的探讨。采用变分自编码器（VAE）与主动学习相结合的方法，我们精准预测了 OLED 材料中 C-N 键在中性态、T1 态及阴离子态下的键解离能（BDE），并在测试集上取得了超过 0.90 的决定系数，无需依赖高成本的量子化学计算。同时，基于以中性 BDE 数据为预训练模型的方法，我们进一步揭示了不同态 BDE 之间的关联，实现了以高 BDE 值为目标的高通量材料筛选。此外，我们也利用 ML 方法探究了热激活延迟荧光（TADF）材料的分子结构与分子跃迁偶极矩（TDM）水平取向占比（ Θ ）间的量化关系，为提升外量子效率（EQE）提供了全新的设计思路。我们的工作不仅展现了机器学习在加速材料筛选和机制解析中的显著优势，也在理论框架上深化了对多态 BDE 与 TDM 取向的理解，还为有机材料的精确设计提供了关键见解，推动了高稳定性和高效率 OLED 的开发进程。

Presenting Type: Oral

7196

Theoretical Insights into Defect Engineering for Enhanced properties in Glass-Ceramics Scintillators

Ci Wang, Chunli Fan, Jing Ren*

Harbin Engineering University

This work explores theoretical strategies to enhance scintillation in glass-ceramics through band gap and defect engineering, which show promise for radiation detection and imaging due to their tunable properties. Here, band gap engineering entails the precise alignment of the material's electronic structure with incident radiation, while the synergistic effects of doping aim to suppress defects and optimize defect types and concentrations for efficient radiative recombination. Furthermore, the study investigates the intrinsic defect properties in scintillators, providing a theoretical foundation for donor-acceptor pair recombination processes. In summary, this work highlights the importance of theoretical insights in optimizing scintillation in glass-ceramics through band gap and defect engineering, with potential applications in radiation detection and imaging.

拟交流类型：闪报

3297

HH130: 用于半哈斯勒热电材料的通用机器学习力场开发的数据集及其在热输运中的应用

杨钰嫣、杨炯*

上海大学

从数据库中对热电材料进行高通量筛选需要高效且精确的计算方法。机器学习原子间势（MLIPs）提供了一条有前景的途径，通过高通量模拟促进了基于数据库的热输运应用的发展。然而，目前的挑战在于缺乏用于精确大规模模拟的标准化数据库和公开可用的模型。在此，我们介绍了 HH130，这是一个针对 MatHub-3d 中 130 种半哈斯勒（HH）化合物的数据库，包含 31,891 个

构型（共 54 种元素）和 390 个 MLIP 模型。利用 HH130 中的 MLIP 模型，我们能够精确预测对应 HH 化合物的能量、力和原子间力常数。此外，基于 HH130 中的数据，我们利用高阶等变消息传递神经网络 MACE 开发了预训练通用力场 MACE-HH-v1.0。MACE-HH-v1.0 的能量和受力的平均绝对误差（MAE）分别低至 1.22 meV/atom 和 8.4 meV/Å，显著低于当前先进的通用力场。结合声子玻尔兹曼输运方程，MACE-HH-v1.0 被用于 HH 化合物的热输运研究。对于数据集中包含的 HH 化合物及等价固溶体，其晶格热导率可达到与 DFT 相当的精度。这项工作表明，借助准确的数据集和通用力场模型，可以实现高阶力常数和热输运性质的精准预测。

拟交流类型：闪报

5529

基于机器学习设计高性能钛合金

汪鑫*、张金钰

西安交通大学 金属材料强度国家重点实验室 西安 710049

随着大数据和人工智能技术的迅速发展，数据驱动的材料研发正成为突破传统“试错—验证”模式的全新范式，被誉为“材料研发的第四范式”。在高性能合金领域，尤其是钛合金等多元复杂体系，传统实验筛选方法面临周期长、成本高的问题，亟需借助机器学习方法进行性能导向的组合筛选与优化设计。为此，本文基于集成学习方法，构建了用于钛合金抗拉强度（UTS）预测的机器学习模型。通过提取合金成分的物理冶金特征，结合热处理工艺参数等，建立包含随机森林、梯度提升树、极端随机树与 Bagging 回归器的堆叠回归框架，并以 Huber 回归作为元学习器提升稳健性。进一步引入期望改进值（Expected Improvement, EI）策略，对未知合金空间进行智能筛选，实现基于不确定性驱动的主动学习迭代优化流程。该方法可扩展至伸长率等其他力学性能的多目标建模，为高性能钛合金的智能设计提供理论支持与数据基础。

拟交流类型：闪报

10066

专家知识引导的耐腐蚀共晶高熵合金数据驱动设计方法

董淑亚、熊杰*、张统一

上海大学

Eutectic high-entropy alloys (EHEAs) leverage multiphase eutectic microstructures to achieve exceptional castability and mechanical properties. However, their inherent heterogeneity often leads to micro-galvanic corrosion, limiting practical utility in aggressive environments. Conventional alloy design approaches struggle to navigate the vast compositional space of EHEAs, necessitating the development of innovative strategies to balance performance trade-offs effectively. The present work proposes a hybrid approach that combines machine learning (ML) techniques and uncertainty quantification, with corrosion expertise to rapidly identify corrosion-resistant EHEAs. This yields the novel AlCoCrFeNi_{1.7} EHEA, which shows a 33.3% improvement in toughness and 58.97% increase in pitting corrosion resistance compared to the benchmark AlCoCrFeNi_{2.1} EHEA. The integration of ML techniques with materials science expertise provides a generalizable framework for designing multifunctional alloys.

拟交流类型：仅发表全文

3071

基于 MOF 及其衍生结构的锂金属负极三维离子输运网络

金志展、胡洪韬、朱宸越、刘杨*

上海大学

锂金属具有最低能工作电位和最高的理论能量密度，是锂电池最理想的负极材料。然而，锂金属负极在循环过程中由于锂离子的不均匀沉积，易导致 SEI 破损、界面阻抗增大及枝晶形成，导致电池容量衰减和安全隐患等问题。产生上述现象的重要原因之一在于锂离子在锂金属内部的扩散速率远低于其在电解液中的扩散速率。对此，可以考虑在锂金属体相构建锂离子的三维输运网络，诱导锂离子沉积于锂金属负极内部。

金属有机框架（MOFs）作为一类多孔晶体材料，有着比表面积大、密度低、孔结构易调控等特点，能够有效促进锂离子传输和均匀沉积，而 MOFs 衍生材料可转化为有序的碳基或金属氧化物结构，形成具有良好导电性和亲锂性的 3D 多孔骨架，从而引导锂的均匀沉积，抑制枝晶生长并提升电池的工作效率与循环寿命^[1]。已有的工作中，多采用 MOF 及其衍生结构组建 3D-HOST^[2]，并通过热熔锂灌注、电化学沉积、气相沉积等手段实现其预锂化^[3]。然而上述手段所需设备复杂、成本较高。对此，可以考虑采用机械复合手段，实现锂金属-导电结构的精确复合及导电结构锂化过程的调控。在此基础上，本课题组采用普鲁士蓝 MOFs 为有序导电结构前驱体，利用折叠辊压技术，通过调控 MOFs 材料的比例与颗粒尺寸，构建了锂负极体相导电网络。测试显示，该导电网络的存在可降低负极极化 90%以上，并有效提升电池的循环寿命。

参考文献：

[1] Shahzad A.; Ahmad F.; Atiq S., et al. JOURNAL OF ENERGY STORAGE, 2024, 87, 111447.

[2] Zhao H.J., Zhao G.D., Liu F.Q., et al. JOURNAL OF COLLOID AND INTERFACE SCIENCE, 2024, 666, 131-140.

[3] Zhou W.X.; Tang Y.J.; Zhang X.Y., et al. COORDINATION CHEMISTRY REVIEWS, 2023, 477, 214949.

拟交流类型：仅发表全文

5669

碳钢表面耐蚀薄膜的高通量电化学测试筛选

任晨浩*

中国核动力研究设计院

电化学阻抗测量作为一种不会破坏被测量表面的无损测试手段，常被用来评估耐蚀涂层、耐蚀薄膜的屏蔽性能，而且可以持续监测样品的耐蚀性能变化。丝束电极（WBE）作为一种新型高通量电化学测试工具，其具有通道数多、单个电极体积小等优点，常被用于表征金属表面的局部腐蚀行为。通过测量每个电极的电流和电位信号，可以绘制这些信号在整个丝束电极上的分布图。虽然丝束电极可以测量每个电极上的电流和电位信号，但是鲜有文献记载了针对丝束电极上每个电极表面性状单独定量控制的方法。在本研究中，结合基于液滴微阵列技术的高通量腐蚀实验方法和丝束电极，利用液滴微阵列点样仪在丝束电极表面高通量制备上述复合薄膜，再利用丝束电极高通量采集其阻抗模值。利用该方法测试了 6 种复合薄膜的缓蚀性能，主要包括没食子酸、植酸钠、磺基水杨酸钠三种缓蚀剂-偶联剂复合薄膜和氧化石墨烯、Ti₃C₂Mxene、蒙脱土三种片层-偶

联剂复合薄膜，每种复合薄膜中涉及 25 种浓度配方，其中没食子酸和磺基水杨酸钠的浓度为 0~4g/L；植酸钠的浓度为 0~2g/L；片层材料的浓度为 0~0.2g/L；偶联剂的浓度为 0~0.8g/L。利用 SEM、TEM、傅里叶光谱（FTIR）等方法，探究了氧化石墨烯对硅烷复合薄膜屏蔽性能的增强机制。片层-偶联剂复合薄膜的耐蚀性和稳定性要显著优于缓蚀剂-偶联剂复合薄膜。对于 3 种片层材料-偶联剂复合薄膜，片层材料的径向尺寸越大，与之对应材料的片层-偶联剂复合薄膜的耐蚀性能越好，其中氧化石墨烯-偶联剂复合薄膜在氧化石墨烯浓度为 0.05g/L，偶联剂浓度为 0.6g/L 时具有最佳的耐蚀性能。

拟交流类型：仅发表全文

8440

基于大语言模型的自适应表头生成用于材料科研文本数据抽取

杨一博*、尹海清

辽宁材料实验室

数据是人工智能与材料科学融合发展的关键基础，材料科研文献蕴含丰富的高质量数据，如何高效从非结构化文本中提取有用信息，是当前材料信息学研究的关键问题。本研究提出一种基于大语言模型的自适应表头生成方法，能够根据上下文语义自动构建结构化数据的抽取模板，提升数据抽取的通用性与准确性。该方法结合领域文献微调策略，使模型更适应材料领域的术语与句式结构。在高熵合金力学性能文献数据集上的实验表明，该方法在准确率和可扩展性方面均优于传统规则和标准问答式方法。