

E06. 材料基因工程

分会主席：张统一、谢建新、汪卫华、段文晖

单元 E06-1: 10月25日下午

主持人：宋晓艳，苏航

地点：青岛国际会展中心7号馆7110A

13:30-13:55 E06-01

数据库与机器学习助力低速重载轴承材料 Cu-Al 合金的设计与制备

尹海清，邓正华，姜雪，张聪，张瑞杰，曲选辉
北京科技大学钢铁共性技术协同创新中心

13:55-14:20 E06-02

从 MGI 到材料数字化研发

苏航

中国钢研科技集团数字化研发中心

14:20-14:45 E06-03

材料基因方法在热电中的应用

杨炯

上海大学材料基因组工程研究院

14:45-15:10 E06-04

稀土 RE-Fe-B 永磁合金的相图热力学数据库及其应用

王江，魏琪，苏迪，戎茂华，姚青荣，饶光辉，周怀营
桂林电子科技大学材料科学与工程学院

15:10-15:35 E06-05

苛刻环境服役涂层材料设计

常可可

中国科学院宁波材料技术与工程研究所

15:35-15:50 茶歇

15:50-16:15 E06-06

Sm-Co 基多元合金体系掺杂元素的优选—基于自建数据库和机器学习的研究

宋晓艳，刘东，郭凯，毛斐

北京工业大学

16:15-16:40 E06-07

基于机器学习的镍基单晶高温合金性能预测与优化设计

刘悦，吴军明，刘微，鲁晓刚，施思齐，王崇愚，于涛
上海大学

16:40-16:55 E06-08

基于机器学习预测 Mn-Fe-P-Si 合金的磁热效应

涂德芳¹，李军^{1,3}，冯硕²，夏明许¹，李建国^{1,3}

1. 上海交通大学材料科学与工程学院

2. 莱斯特大学工程系

3. 上海市先进高温材料及其精密成形重点实验室

16:55-17:10 E06-09

团簇成分式嵌入的机器学习低模量 β -Ti 合金成分与性能

杨飞，李震，王清

大连理工大学

17:10-17:25 E06-10

主动学习预测类金刚石热电材料的功率因子

盛晔，杨炯

上海大学

单元 E06-2: 10月26日上午

主持人：刘轶、杨小渝

地点：青岛国际会展中心7号馆7110A

08:30-08:55 E06-11

高通量材料计算和筛选典型案例分析与讲解

杨小渝¹，马新杰²，许立芳²

1. 中科院计算机网络信息中心

2. 北京迈高材云科技有限公司

08:55-09:20 E06-12

从海量成分-距离曲线自动获取多组元/多元合金高质量互扩散系数矩阵与原子迁移率数据库

张利军，钟静

中南大学粉末冶金国家重点实验室

09:20-09:45 E06-13

低成本与高回报：材料数字化研发平台的建立与应用

王卓^{1,2}

1. 成都材智科技有限公司

2. 中南大学轻合金研究院

09:45-10:10 E06-14

Mg 合金相图热力学、扩散动力学和微观组织性能数据库

徐广龙¹，王静雅²，崔予文¹

1. 南京工业大学材料科学与工程学院

2. 上海交通大学材料科学与工程学院

10:10-10:20 茶歇

10:20-10:45 E06-15

基于“中心-环境”特征工程的计算和机器学习材料设计

刘轶，肖斌，李一航，王小梦，唐宇超

上海大学

10:45-11:10 E06-16

Computational Design of Two-Dimensional Magnetic Semiconductors

缪奶华

北京航空航天大学

11:10-11:25 E06-17

基于主动机器学习指导的自主化相图构建方法

张恒睿^{1,2}，胡清云^{1,2}，来天行^{1,2}，惠健^{1,2}，鞠生宏^{2,3}，汪洪^{1,2}

1. 上海交通大学材料科学与工程学院

2. 上海交通大学材料基因组联合研究中心

3. 上海交通大学中英国际低碳学院

11:25-11:40 E06-18

一种基于集成计算材料工程的镁合金铸造工艺优化方法

常星阳，沈琪，范文学，郝海

大连理工大学

11:40-11:55 E06-19

二维过渡金属硫属化合物电催化剂的计算筛选与设计

冉念

中国科学院上海硅酸盐研究所

单元 E06-3: 10月26日下午

主持人：尹海清，薛德祯

地点：青岛国际会展中心7号馆7110A

13:30-13:55 E06-20

基于主动学习的多目标优化材料性能

薛德祯

西安交通大学金属材料强度国家重点实验室

13:55-14:20 E06-21

基于团簇展开方法的多组元材料计算研究及算法改进

祝令刚，陈明威，陈启凡，程影星，周健，孙志梅

北京航空航天大学材料科学与工程学院

14:20-14:45 E06-22

通过机器学习探究材料的性能：以 Al、Ni 和 Pt 基稀固溶体

合金层错能计算为例

种晓宇¹, 冯晶¹, Shun-Li Shang², Yi Wang², Zi-Kui Liu²

1. 昆明理工大学
2. 宾夕法尼亚州立大学

14:45-15:10 E06-23

基于液滴蒸发自组装的全无机钙钛矿微纳结构高通量制备
巫金波

上海大学

15:10-15:35 E06-24

Order in disorder: Short-range order of element
distribution in high entropy alloys

Shan Cecilia Cao^{1,2,3}, Rui Feng⁴, C.T. Liu⁵, Robert O. Ritchie⁶

1. University of California
2. Shanghai University
3. University of West Florida
4. University of Tennessee at Knoxville
5. City University of Hong Kong
6. Lawrence Berkeley National Laboratory

15:35-15:50 茶歇

15:50-16:15 E06-25

基于机器学习的不同大气环境中铝的腐蚀速率预测与影响因素分析

董自强, 赵婉辰, 游康东, 魏清华, 刘艳洁, 刘轶

上海大学材料基因组工程研究院

16:15-16:40 E06-26

CNMGE 高通量材料计算平台构建

李庚, 李菲菲, 菅晓东, 孟祥飞

国家超级计算天津中心

16:40-16:55 E06-27

林德曼判据是否可描述金属的表面熔化: 金属钽表面熔化的分子动力学研究

范雪^{1,3}, 潘登², 李默³

1. 上海理工大学
2. 上海大学
3. 佐治亚理工大学

16:55-17:10 E06-28

机器学习助力 Sm-Co 合金饱和磁化强度的预测

郭凯, 许国婧, Marwen Hannachi, 宋晓艳

北京工业大学

17:10-17:25 E06-29

以本征描述符预测合金催化活性的机器学习方案

杨泽, 高旺, 蒋青

吉林大学材料科学与工程学院

墙报

E06-P01

层状磷化锆作为锂、钠离子电池负极的机理和电化学研究
沈海林, 李倩倩

上海大学

E06-P02

基于自然语言处理的材料领域知识发现方法研究

刘悦, 丁琳, 葛献远, 刘微, 鲁晓刚, 施思齐, 王崇愚, 于涛

上海大学

E06-P03

基于 GAN 数据增强的合金蠕变性能预测方法

刘悦, 张承宗, 刘微, 鲁晓刚, 施思齐, 王崇愚, 于涛

上海大学

E06-P04

基于机器学习的 NASICON 型固态电解质激活能预测方法研究

刘悦, 邹欣欣, 郭碧茹, 孙拾雨, 邹喆义, 施思齐

上海大学

E06-P05

基于元胞自动机寻边的自主实验相图构建方法

胡清云^{1,2}, 张恒睿^{1,2}, 来天行^{1,2}, 惠健^{1,2}, 鞠生宏^{2,3}, 汪洪^{1,2}

1. 上海交通大学 材料科学与工程学院
2. 上海交通大学 材料基因组联合研究中心
3. 上海交通大学 中英国际低碳学院

E06-P06

μ 相二元系原子占位行为研究

吴学志¹, 刘微², 鲁晓刚^{2,3}, 姜岳衫³, 何燕霖³

1. 中国原子能研究院
2. 上海大学材料基因组工程研究院
3. 上海大学材料科学与工程学院

E06-P07

双相纳米晶钛合金微观结构与力学性能研究

郭孝云, 张统一, 孙升

上海大学材料基因组工程研究院

E06-P08

CuNi 合金纳米薄膜表面偏析研究

纪响, 张统一, 孙升

上海大学材料基因组工程研究院

E06-P09

Nb 成分对四元 Ti-Nb-4Zr-8Sn 合金力学性能的影响

杨燕, 张统一, 孙升

上海大学材料基因组工程研究院

E06-P10

跨尺度计算研究铜电极的溶解机制

朱勇, 孙升, 张统一

上海大学材料基因组工程研究院