

# E06 材料基因组

时间：2021年7月9-11日

地点：海峡大剧院 316 会议室

## 分会主席：

张统一

上海大学

谢建新

北京科技大学

汪卫华

中国科学院物理研究所

段文晖

清华大学

## 联系人：

刘梦晗

上海大学

电话：18813132039

邮箱：xianlinliu@163.com

## E06. 材料基因组

分会主席：张统一、谢建新、汪卫华、段文晖

单元 E06-1: 7月9日上午

主持人：杜勇，种晓宇

地点：海峡大剧院 316 会议室

08:30-08:45 E06-01

多元合金变组分建模与计算 workflow: 从高通量第一原理计算到相图热力学

种晓宇<sup>1</sup>, 冯晶<sup>1</sup>, Shun-Li Shang<sup>2</sup>, Yi Wang<sup>2</sup>, Zi Kui Liu<sup>2</sup>

1. 昆明理工大学

2. Materials Genome Inc., State College

08:45-09:00 E06-02

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

09:00-09:15 E06-03

材料基因方法在热电领域中的应用

杨炯

上海大学

09:15-09:30 E06-04

两类润滑剂物性参数和摩擦系数的高通量分子动力学计算

周峰, 鲍路瑶

中国科学院兰州化学物理研究所

09:30-09:45 E06-05

基于材料基因工程技术的六方 MAB 相发现

王俊杰

西北工业大学材料学院

09:45-10:00 E06-06

基于数据, 不完备方程组和人工神经网络的正逆问题统一求解框架

孙升<sup>1</sup>, 吴越<sup>2</sup>, 张统一<sup>3</sup>

上海大学材料基因组工程研究院

10:00-10:15 茶歇

10:15-10:30 E06-07

一个计算热物理性质的智能软件 CALTPP

杜勇<sup>1</sup>, 刘钰玲<sup>1</sup>, 文诗艺<sup>1</sup>, 都昌发<sup>2</sup>

1. 中南大学粉末冶金国家重点实验室

2. 中南大学数学与统计学院

10:30-10:45 E06-08

林德曼判据是否能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<sup>1,2,3</sup>, 潘登<sup>1</sup>, 李默<sup>3</sup>

1. 上海大学材料基因组工程研究院

2. 上海理工大学材料科学与工程学院

10:45-11:00 E06-09

二维材料第一性原理计算数据库及其在高迁移率材料筛选上的应用

姚明佳<sup>1</sup>, 奚晋扬<sup>1</sup>, 杨炯<sup>1</sup>, 张文清<sup>2</sup>, 葛军铨<sup>1</sup>

1. 上海大学

2. 南方科技大学

11:00-11:15 E06-10

第一性原理研究有序无序铂铑合金的力学及热物理性质

周云轩<sup>1</sup>, 余威<sup>2</sup>, 许耿森<sup>3</sup>, 干梦迪<sup>4</sup>, 种晓宇<sup>5</sup>, 冯晶<sup>5</sup>

昆明理工大学

11:15-11:30 E06-11

高通量材料计算和筛选典型案例分析与讲解

杨小渝

中科院计算机网络信息中心

单元 E06-2: 7月9日下午

主持人：王毅，巫金波

地点：海峡大剧院 316 会议室

13:30-13:45 E06-12

基于高通量制备的多组元非晶合金的成分-结构-性能关联机制研究

赖建平<sup>1,3</sup>, 胡文<sup>3</sup>, Amit Datye<sup>2</sup>, Jan Schroers<sup>2</sup>, Udo D. Schwarz<sup>2</sup>, 余家欣<sup>3</sup>

1. 西南科技大学

2. 耶鲁大学机械工程与材料科学学院

3. 西南科技大学制造科学与工程学院

13:45-14:00 E06-13

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

上海大学基因组工程研究院

14:00-14:15 E06-14

原位电镜揭示钠离子电池高容量负极的反应和失效机理

李倩倩

上海大学材料基因组工程研究院

14:15-14:30 E06-15

高性能增材制造高温合金高效集成设计研究

李相伟<sup>1</sup>, 温冬辉<sup>2</sup>, 樊卓志<sup>3</sup>, 初铭强<sup>4</sup>, 温树文<sup>5</sup>, 张书彦<sup>6</sup>

东莞材料基因高等理工研究院

14:30-14:45 E06-16

Ni-Al-Os 三元系关系, 微观组织及力学性能研究

林彦<sup>1</sup>, 王建<sup>1</sup>, 张利军<sup>2</sup>

1. 西北有色金属研究院, 粉末冶金研究所

2. 中南大学, 粉末冶金研究院

14:45-15:00 茶歇

15:00-15:15 E06-17

基于数字孪生技术的金属材料铸造试样高通量制备与性能测试集成系统

王毅, 王军, 唐斌, 高文强, 谭超, 王一川, 寇宏超, 李金山

西北工业大学

15:15-15:30 E06-18

WC 基两相硬质合金热导率的实验测定及模型构建

文诗艺, 刘钰玲, 杜勇

中南大学粉末冶金国家重点实验室

15:30-15:45 E06-19

高通量制备研发用于析氧反应的三元 CeCoFeO<sub>x</sub> 非晶金属氧化物气凝胶催化剂

黄明成, 陈主阳, 李伟轩, 董易达, 徐晨, 项晓东  
南方科技大学

**15:45-16:00 E06-20**

**抗热腐蚀合金 DZ411 的梯度段制备及其应用**

师春伟<sup>1,2</sup>, 张少华<sup>1</sup>, 孙子舒<sup>1</sup>, 李辉<sup>1</sup>

1. 中国科学院金属研究所
2. 东北大学

**16:00-16:15 E06-21**

**Si 元素的添加对难熔金属 NbTiZr 涂层的结构和力学性能影响的研究**

詹程程

中国科学院宁波材料技术与工程研究所

**16:15-16:30 E06-22**

**Zr, Mo 协同增强 Nb 基高温合金抗氧化性能**

刘艳洁, 韩涛, 舒锦涛, 董自强, 刘轶

上海大学材料基因组工程研究院

**单元 E06-3: 7 月 10 日上午**

主持人: 董超芳, 刘轶

地点: 海峡大剧院 316 会议室

**08:30-08:45 E06-23**

**基于“中心-环境”特征工程的机器学习研究**

刘轶<sup>1</sup>, 李一航<sup>1</sup>, 王小梦<sup>1</sup>, 肖斌<sup>1</sup>

上海大学材料基因组工程研究院, 上海大学

**08:45-09:00 E06-24**

**领域知识指导机器学习小样本数据的  $\gamma$ -U 合金耐蚀性能**

苑峻豪<sup>1</sup>, 王清<sup>1</sup>, 李震<sup>1</sup>, 董闯<sup>1</sup>, 张鹏程<sup>2</sup>, 丁向东<sup>3</sup>

1. 大连理工大学
2. 中国工程物理研究院
3. 西安交通大学

**09:00-09:15 E06-25**

**基于机器学习算法的钴基高温合金微观信息加速预测方法**

裘晟堃<sup>1,3</sup>, 于金鑫<sup>2</sup>, 刘兴军<sup>1,3,4</sup>

1. 哈尔滨工业大学(深圳)材料基因与大数据研究院
2. 厦门大学材料学院
3. 哈尔滨工业大学(深圳)材料科学与工程学院
4. 哈尔滨工业大学先进焊接与连接国家重点实验室

**09:15-09:30 E06-26**

**用于材料研发的有效采样方法**

薛德祯

西安交通大学金属材料强度国家重点实验室

**09:30-09:45 E06-27**

**基于机器学习的双相钢在高温水环境中腐蚀行为研究**

董自强, 曹斌, 杨爽, 孙安康, 张统一

上海大学

**09:45-10:00 茶歇**

**10:00-10:15 E06-28**

**铝合金微电偶效应的腐蚀集成计算与机器学习预测**

董超芳<sup>1</sup>, 李妮<sup>2</sup>, 纪毓成<sup>3</sup>, 程占明<sup>4</sup>, 敖敏<sup>5</sup>, 李晓刚<sup>6</sup>

北京科技大学北京材料基因工程高精尖创新中心

**10:15-10:30 E06-29**

**若干新型机器学习方法在材料数据分析上的应用**

钱权<sup>1</sup>, 冯燕<sup>2</sup>, 曾毅<sup>3</sup>, 方昊堃<sup>4</sup>

上海大学计算机学院

**10:30-10:45 E06-30**

**多目标机器学习钢的四种力学性能**

魏清华<sup>1</sup>, 熊杰<sup>2</sup>, 孙升<sup>1</sup>, 张统一<sup>1</sup>

1. 上海大学
2. 香港理工大学

**10:45-11:00 E06-31**

**嵌入领域知识调和材料机器学习的三大矛盾**

刘悦<sup>1</sup>, 施思齐<sup>2</sup>, 邹欣欣<sup>3</sup>

1. 上海大学计算机工程与科学学院
2. 上海大学材料基因组工程研究院
3. 上海大学计算机工程与科学学院

**11:00-11:15 E06-32**

**机器学习辅助高性能银合金电接触材料的快速发现**

何兴群<sup>1,2,3</sup>, 付华栋<sup>1,2,3</sup>, 谢建新<sup>1,2,3</sup>

1. 北京科技大学, 北京材料基因工程高精尖创新中心
2. 北京科技大学, 现代交通金属材料与加工技术北京实验室
3. 北京科技大学, 材料先进制备技术教育部重点实验室

**11:15-11:30 E06-33**

**基于机器学习的锂离子电池正极材料预测**

洪子健<sup>1</sup>, 周麟铭<sup>2</sup>, 吴勇军<sup>3</sup>

浙江大学

**单元 E06-4: 7 月 10 日下午**

主持人: 尹海清, 王江

地点: 海峡大剧院 316 会议室

**13:30-13:45 E06-34**

**稀土 RE-Fe-B 永磁合金的相图热力学数据库及其应用**

王江<sup>1,2</sup>, 魏琪<sup>1</sup>, 苏迪<sup>1</sup>, 姚青荣<sup>1,2</sup>, 卢照<sup>1,2</sup>, 饶光辉<sup>1,2</sup>, 周怀营<sup>1,2</sup>

1. 桂林电子科技大学材料科学与工程学院
2. 广西电子信息材料构效关系重点实验室

**13:45-14:00 E06-35**

**从海量成分-距离曲线自动获取多组元/多主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

**14:00-14:15 E06-36**

**晶体塑性相场模拟钴基单晶高温合金蠕变组织性能**

李永胜<sup>1,2</sup>, 史淑静<sup>1,2</sup>, 桑鹏<sup>1,2</sup>, 张效源<sup>1,2</sup>, 居寅飞<sup>1,2</sup>

1. 南京理工大学
2. 先进金属与金属间化合物材料技术工信部重点实验室

**14:15-14:30 E06-37**

**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<sup>1</sup>, 王静雅<sup>2</sup>, 崔予文<sup>3</sup>

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
3. 南京工业大学材料科学与工程学院

**14:30-14:45 E06-38**

**Co-Ti 基高温合金热力学数据库的建立及合金设计**

李玲玲<sup>1</sup>, 王翠萍<sup>1</sup>, 郭毅慧<sup>1</sup>, 黄艺雄<sup>1</sup>, 卢勇<sup>1</sup>, 刘兴军<sup>2,3,1,4</sup>  
1. 厦门大学材料学院及福建省材料基因工程重点实验室  
2. 哈尔滨工业大学(深圳)材料基因与大数据研究院  
3. 哈尔滨工业大学(深圳)先进焊接与连接国家重点实验室  
4. 深圳铝基水解制氢材料研发工程研究中心

#### 14:45-15:00 茶歇

#### 15:00-15:15 E06-39 料数据库建设的生态系统

尹海清<sup>1</sup>, 张晓彤<sup>1</sup>, 宋晓艳<sup>2</sup>, 姜雪<sup>2</sup>, 姚磊江<sup>3</sup>, 崔丽娜<sup>4</sup>,  
周勇<sup>5</sup>, 陈宁<sup>1</sup>, 张洪梅<sup>6</sup>, 宿彦京<sup>1</sup>, 曲选辉<sup>1</sup>  
1. 北京科技大学北京材料基因工程高精尖创新中心  
2. 北京工业大学材料学院  
3. 西北工业大学无人机特种技术国防科技重点实验室  
4. 中国科学院金属研究所沈阳材料科学重点实验室  
5. 中国科学院化学研究所工程塑料院重点实验室  
6. 北京理工大学材料学院

#### 15:15-15:30 E06-40

#### 面向材料数据分析的图像处理方法

韩越兴  
上海大学计算机工程与科学学院  
上海大学上海先进通信与数据科学研究院

#### 15:30-15:45 E06-41

#### 一种提升材料领域机器学习模型外推预测能力的策略

雍维<sup>1</sup>, 付华栋<sup>1,2,3</sup>, 张洪涛<sup>1</sup>, 谢建新<sup>1,2,3</sup>  
1. 北京科技大学北京材料基因工程高精尖创新中心  
2. 北京科技大学现代交通金属材料与加工技术北京实验室  
3. 北京科技大学材料先进制备技术教育部重点实验室

#### 15:45-16:00 E06-42

#### 低成本与高回报: 材料数字化研发平台的建立与应用

王卓<sup>1,2</sup>  
1. 成都材智科技有限公司  
2. 中南大学轻合金研究院

#### 16:00-16:15 E06-43

#### Atomly 材料数据库: 数据驱动的材料研究

刘淼  
中国科学院物理研究所, 松山湖材料实验室

#### 16:15-16:30 E06-44

#### CNMGE 高通量材料计算平台与材料大数据应用管理系

李庚<sup>1</sup>, 孟祥飞<sup>1</sup>, 菅晓东<sup>1</sup>, 任凯<sup>1</sup>, 刘栋杰<sup>1</sup>  
国家超级计算天津中心

#### 单元 E06-5: 7月11日上午

主持人: 宋晓燕, 曹珊

地点: 海峡大剧院 316 会议室

#### 08:30-08:45 E06-45

#### Light and Tough Materials by Design: Mussel inspired and Nano-technology Realization

曹珊  
上海大学

#### 08:45-09:00 E06-46

#### 机器学习辅助时效析出强化铜合金成分快速优化设计

张洪涛<sup>1,2,3</sup>, 付华栋<sup>1,2,3</sup>, 谢建新<sup>1,2,3</sup>  
1. 北京科技大学, 北京材料基因工程高精尖创新中心

2. 北京科技大学, 材料先进制备技术教育部重点实验室  
3. 北京科技大学, 现代交通金属材料与加工技术北京实验室

#### 09:00-09:15 E06-47

#### 基于材料基因工程设计耐海洋盐雾环境的新型 NiSiAlY 合金

徐凯<sup>1</sup>, 常可可<sup>1</sup>, 杜勇<sup>2</sup>, 王立平<sup>1</sup>  
1. 中国科学院宁波材料技术与工程研究所海洋新材料与应用技术重点实验室  
2. 中南大学粉末冶金研究院

#### 09:15-09:30 E06-48

#### 基于“浓度梯度工程”的形状记忆合金高性能设计

朱家明<sup>1</sup>, 张统一<sup>2</sup>, 王云志<sup>3</sup>  
1. 山东大学工程力学系;  
2. 上海大学材料基因组工程研究院;  
3. 俄亥俄州立大学材料科学与工程学院

#### 09:30-09:45 E06-49

#### 耦合材料热力学的机器学习模型用于铝合金设计

梁婷婷, 王俊升

北京理工大学

#### 09:45-10:00 茶歇

#### 10:15-10:30 E06-50

#### 基于组织和物相稳定性调控的纳米晶合金体系设计

宋晓艳<sup>1</sup>, 唐法威<sup>2</sup>, 刘东<sup>3</sup>, 刘兴伟<sup>4</sup>

北京工业大学

#### 10:30-10:45 E06-51

#### 一类氮/氧杂烷烃类含能模型化合物的材料基因研究

钱文  
中国工程物理研究院化工材料研究所

#### 10:45-11:00 E06-52

#### The Integrated Design of Multi-solutes--property-enhancing high-performance Magnesium Alloys

袁媛<sup>1</sup>, 王俊<sup>2</sup>, 程雄鹰<sup>3</sup>, 杨丽<sup>4</sup>, 陈涛<sup>5</sup>, 汤爱涛<sup>6</sup>, 潘复生<sup>7</sup>  
重庆大学

#### 10:45-11:00 E06-53

#### 团簇成分式嵌入的机器学习低模量 beta-Ti 合金成分与性能

李震<sup>1</sup>, 王清<sup>1</sup>

大连理工大学

#### 11:00-11:15 E06-54

#### 高通量全流程加速发现新的热电材料——高通量合成, 表征及机器学习辅助图像分析

盛晔, 奚晋扬, 韩越兴, 杨炯  
上海大学材料基因组工程研究院

#### 墙报

#### E06-P01

#### 不同晶面及加载电荷下铜的溶解/吸附过程

朱勇, 孙升, 张统一  
上海大学材料基因组工程研究院

#### E06-P02

#### 电子文献中图表信息的自动化提取方法研究

夏锦桦<sup>1,2</sup>, 韩越兴<sup>2,3</sup>, 王迎港<sup>2</sup>, 张家旺<sup>2</sup>, 张瑞<sup>2</sup>, 陈桥川<sup>2</sup>

1. 上海大学
2. 上海大学计算机工程与科学学院
3. 上海大学上海先进通信与数据科学研究院

#### **E06-P03**

##### **基于 Radon 变换和累计概率霍夫变换的菊池带边界及交点检测**

李睿祺, 韩越兴  
上海大学

#### **E06-P04**

##### **基于不可复制的钙钛矿晶体薄膜图案的防伪验证方法**

张宏坤<sup>1</sup>, 韩越兴<sup>1,3</sup>, 巫金波<sup>2</sup>  
1. 上海大学计算机工程与科学学院  
2. 上海大学材料基因研究院  
3. 上海大学上海先进通信与数据科学研究院

#### **E06-P05**

##### **基于邻域信息的钢材料各相交交互式分割**

李睿祺, 杨坤, 韩越兴  
上海大学

#### **E06-P06**

##### **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<sup>1</sup>, 张承宗<sup>1</sup>, 李爽<sup>1</sup>, 刘微<sup>1</sup>, 鲁晓刚<sup>1</sup>, 施思齐<sup>1</sup>, 王崇愚<sup>2</sup>, 于涛<sup>3</sup>  
1. 上海大学  
2. 清华大学  
3. 钢铁研究总院

#### **E06-P07**

##### **基于多目标优化机器学习算法的高强度高导 CuCrZr 系合金优化设计**

郑晨<sup>1</sup>, 赵婉辰<sup>2</sup>, 余童昕<sup>3</sup>, 胡涵<sup>4</sup>, 韩涛<sup>5</sup>, 靳晓倩<sup>6</sup>, 刘艳洁<sup>7</sup>, 董自强<sup>8</sup>, 刘轶<sup>9</sup>  
上海大学材料基因组工程研究院

#### **E06-P08**

##### **铜-陶瓷复合材料的制备与力学性能研究**

胡涵<sup>1</sup>, 陈晨<sup>1</sup>, 董自强<sup>1</sup>, 刘轶<sup>1</sup>, 刘艳洁<sup>1</sup>  
上海大学材料基因组工程研究院

#### **E06-P09**

##### **纳米铜-石墨烯复合材料的电沉积法制备及其性能研究**

靳晓倩<sup>1</sup>, 胡涵<sup>1</sup>, 王子涵<sup>1</sup>, 刘艳洁<sup>1</sup>, 董自强<sup>1</sup>, 赵新洛<sup>2</sup>, 刘轶<sup>1</sup>  
1. 上海大学材料基因组工程研究院  
2. 上海大学理学院物理系

#### **E06-P10**

##### **具有高载流子迁移率和优异光学性能的 B5N3 和 B7N5 单层**

戚竞成<sup>1</sup>, 王诗尧<sup>1</sup>, 王俊杰<sup>1</sup>, Naoto Umezawa<sup>2</sup>, Vladislav A. Blatov<sup>3,1</sup>, Hideo Hosono<sup>4</sup>  
1. 西北工业大学  
2. 韩国三星电子  
3. 俄罗斯萨马拉国立技术大学  
4. 日本东京工业大学

#### **E06-P11**

##### **二元多相反应扩散偶生长动力学的解析模型**

马飒<sup>1</sup>, 邢方舟<sup>2</sup>, 钟静<sup>3</sup>, 张利军  
中南大学粉末冶金研究院