



中国材料大会 2024  
暨第二届世界材料大会  
**CMC 2024 & WMC 2024**

July 8-11, 2024  
Guangzhou, China

**E06-材料基因组**  
**E06-Materials Genome**

**Organized by**

Chinese Materials Research Society

Website: <https://cmc2024.scimeeting.cn>

**E06. 材料基因组**

分会主席：张统一、谢建新、段文晖、崔华晨

**E06-01****语言数据机器学习驱动新材料设计研究**

张磊\*

南京信息工程大学

自然语言处理(NLP)和语言模型(LM)等数据驱动方法作为新的研究范式已逐渐受到材料学家关注。新材料如铅卤钙钛矿材料可以提供有趣的光电特性，但是出于稳定性和光电性质等综合因素考量，研究人员需要使用新方法进一步探索材料虚拟设计空间、高效优化界面结构和光电性质并预测全新光伏材料。本次报告将讨论如何应用语言模型等新数据驱动方法对不同材料进行探索。报告人将从不同数据类型和数据来源角度，讨论课题组近几年在数据驱动材料设计与预测方面的工作。这些工作涉及了高通量计算/实验、数据挖掘、传统机器学习、遗传算法、第一性原理计算、分子动力学等方法。其中，结合语言模型、密度泛函理论、遗传算法的“LM+GA+DFT”方法值得关注，这种结合大小模型的新方法将提供描述符设计和材料预测的新思路。此外，报告人将汇报课题组开发的数据驱动材料数据与人工智能软件 NJmat 及其应用。

**E06-02****Computational Investigation of Solid State Refrigeration Materials**

Hui Wang\*

Central South University

Solid-state refrigeration based on barocaloric effect (BCE) holds out promise for environmentally friendly cooling with high energy-efficiency and downsize scalability, however, their comprehensive refrigeration performance is notably inferior in comparison to commercial refrigerant due to the lack of scientific guidance for material discovery and performance improvement. In this talk, we report recent progress on understanding and improving refrigeration performance in plastic crystals (PC), such as neopentylglycol (NPG), pentaerythritol (PE), neopentane (PA), etc., which represent a class of disordered molecular solids. We show that the intermolecular hydrogen bond plays a key role in the orientational order of PC molecules, while its broken due to thermal perturbation prominently weakens the activation barrier of orientational disorder. It is found that low concentration of defects and substitution is able to regulate the isothermal entropy, adiabatic temperature, and thermal hysteresis of PC. Furthermore, phase transition temperature of molecular order to disorder can be tuned by alloying PA or NPG into PE imbedded in carbon frame, meanwhile demonstrating both giant isothermal entropy changes  $DS$  ( $\sim 200 \text{ J kg}^{-1} \text{ K}^{-1}$ ) and adiabatic temperature change  $DT$  ( $\sim 18 \text{ K}$ ) near room temperature. The large BCE mainly comes from the order–disorder transition of PC molecules imbedded in carbon frame through analysis of the dynamic process of the composites. Importantly, the thermal conductivity of these composites is as high as  $10 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ , enabling efficient thermal exchange that is vital for improving cooling performance during the cyclic refrigeration process. These advances establish relatively complete microscopic mechanism of BCE in PCs and provides important guidance for the design and improvement of their refrigeration performance for next generation solid-state refrigeration technologies.

## References:

Nature 2019, 567, 506,

Nat. Commun. 2020, 11, 4190

Appl. Phys. Lett. 2022, 120, 073902

Appl. Phys. Lett. 2022, 121, 223902

Mater. Horiz. 2023, 10, 977

Appl. Phys. Lett. 2023, 122, 043901

Appl. Phys. Lett. 2023, 123, 183902

Appl. Phys. Lett. 2024, 124, 103905

### E06-03

#### 面向材料设计的集成计算材料工程：高通量制备表征、计算机建模和机器学习

崔予文\*

南京工业大学

本次报告讨论了我们在利用集成计算材料工程技术进行新型结构材料的设计和探索方面取得的最新进展，包括：

[1] 采用高通量动力学扩散结技术，开展了轻质铝、镁和钛合金的扩散、微观组织和微纳力学性能的快速制备、表征和筛选，为机理研究、微观组织计算机建模、数据库建设和机器学习模型训练提供高质量数据。

[2] 构建了镁、钛合金多组元热力学数据库。提出了基于流体力学、弹性力学和晶格动力学的融贯理论的新型朗道非线性动力学模型，可以在统一的理论框架下广泛应用于钢铁材料和形状记忆合金多晶马氏体相变的组织模拟与控制。

[3] 开发了基于材料知识和制备加工经验的机器学习模型，用于预测不同合金材料的力学性能和厚钢板的热轧工艺，具有良好的泛化能力和工程应用性，促进了 ICME 和 MGI 范式的工业应用。

### E06-04

#### 机器学习引导的有机发光材料高通量筛选

宋丹丹\*

北京交通大学

机器学习 (ML) 和定量结构-性质关系 (QSPR) 相结合正在彻底改变材料开发的模式。针对热激活延迟荧光 (TADF) 发光材料，基于量子化学计算的描述符和各种分子描述符，我们利用 ML 算法成功地建立了分子结构与跃迁偶极矩水平取向、能级结构之间的关系，为分子设计提供了指导。此外，我们建立了多重共振 TADF (MR-TADF) 材料的光致发光量子产率 (PLQY) 预测模型，并对生成的大空间的分子进行了快速高通量虚拟筛选。这些研究不仅有助于开发新型发光材料，也证明了 ML 在材料筛选中的有效性。

### E06-05

#### 晶态材料的智算预测架构与实践

于剑\*、胡志杰、李薇、付欢

之江实验室

现阶段，对高温、高压、强氧化腐蚀等极端环境应用材料的研发与服役评价存在实验检测手段缺失和计算仿真维度灾难等巨大困难，新材料探索面临着难求解、少参数、缺方程、小数据等困境。面对材料领域的小数据现实，本报告将展示一个知识与数据协同的材料智算预测架构、展示一种领域知识导引的小数据挖掘智能生成算法、展示一段预测式材料设计物理模型与新材料逆向设计实践。亮点在于采用数据科学

范式与智算方法创新揭示晶态材料的因果涌现与量化调控原理、实现新材料组成与工艺的预测式逆向设计, 示例材料包括金属与合金、超高温陶瓷、碳纤维、氧化物等材料体系, 已完成构建材料结构/性质参数与原子特征参数间、性质参数高温演化、氧化反应动力学速率等智算预测模型。

## E06-06

### 高弹体材料基因组研究

刘军\*、张立群

北京化工大学

基于材料基因工程的理念, 报告重点围绕橡胶材料的高性能化与绿色化: (1)建立了基于 ReaxFF 力场的高分子材料热分解温度的计算模拟方法, 构建了橡胶纳米复合材料从微观到介观的跨尺度计算模拟方法, 发展了高分子材料动态共价键分子动力学计算模拟方法, 提出了数据驱动预测高分子材料  $T_g$  的机器学习方法。(2)成功创制了面向深空探测的新型宽温域硅橡胶与优异自愈合性能的梳状弹性体材料, 提出了单链聚合物纳米球调节橡胶粘弹性的新策略, 解决了弹性与增强性不能兼顾的难题; 优化出了弹性纳米链构成橡胶纳米复合材料的新结构, 克服了轮胎“魔三角”(耐磨、抗湿滑与滚动阻力)难平衡的瓶颈。为兼顾最优动静力学性能, 基于计算模拟优化出的橡胶纳米复合材料的“理想网络”新结构, 进一步指导实验设计与合成, 实验结果验证了模拟预测, 成功实现“计算模拟预测→实验验证”的材料基因组学理念与构想, 为研发新型高分子材料提供示范。(3)通过调控动态共价键的键交换势垒, 优化出兼顾力学性能-滞后损失-自愈合性能-加工性能的目标参数。实现了动态共价键弹性体中各向异性纳米粒子的预取向控制。从分子水平解析了 vitrimer 弹性体各个尺度动力学行为的势垒和温度依赖性, 为进一步调控其加工流变性奠定理论基础。

## E06-07

### 基于层级微结构描述子的材料基因工程研究进展

黄智恒\*、郑凯文、曾鑫、廖紫嫣、颜辉

中山大学

一种材料的微结构其本身构成一个系统, 寻找微结构的定量描述是材料基因工程的应有之义。在理解多分辨率小波分析的本质以及材料结构层级概念的基础上, Mallat 散射变换 (Mallat Scattering Transform, MST) 不变量系统在 2019 年首次被应用于材料层级微结构系统特征的提取。MST 一阶不变量系统被用来描述烧结碳化硅陶瓷微结构并命名为  $\mu$ SHD, 一条  $\mu$ SHD 曲线是对一个微结构系统的定量描述, 从而结束了微结构用定性语言或者低阶统计指标描述的时代。进一步的研究发现了  $\mu$ SHD 曲线从小尺度到大尺度的变化规律与 SiC 陶瓷的力学、电学以及热学等性能的关联, 这一现象背后蕴含的理论可以使用生物材料多尺度结构与其力学性能的定量模型进行解释。 $\mu$ SHD 所描述的微结构包含其形貌信息, 使用  $\mu$ SHD 的衍生指标“平均尺度” $A_{sc}$  对陶瓷材料硬度与晶粒结构的研究表明, 使用  $A_{sc}$  可以统一正反 Hall-Petch 关系。由于其本质是微结构图像特征提取,  $\mu$ SHD 适用于各种材料体系, 其应用已从最初的烧结陶瓷成功扩展至金属合金、高分子以及食品领域。本报告在回顾  $\mu$ SHD 相关研究工作的基础上, 展示其在揭示材料层级结构与性能定量关系研究上的最新进展, 本报告还将展示  $\mu$ SHD 在微电子器件失效分析领域的工程应用。

## E06-08

## 深度学习在高分辨率分子图像中的应用

孙强\*

上海大学

在信息技术的驱动下,大数据结合人工智能技术给物质科学的发展带来了全新的理念。越来越多的复杂科学问题的解决和新材料的实现依赖于海量和高维数据的采集和分析。2012 年,在 ImageNet 图像识别大赛中 AlexNet 一鸣惊人,其引入了全新的深层结构、dropout 方法和 ReLU 激活函数的使用等,颠覆了图像识别领域,甚至被认为开启了深度学习革命。利用基于深度学习的人工智能技术可以有效的分析图像数据并获取重要的物理信息,进一步探索材料结构的形成机理以及构效关系。本次报告,我将重点展示利用基于深度学习的机器视觉方法如何分析和研究高分辨率分子图像。聚焦于利用新型的机器视觉方法进行图像中有机分子的自动检测、识别和分类和数据处理等应用。

### E06-09

#### Machine learning assisted design of bulk metallic glass with optimized strength and plasticity combination

Lanting Zhang\*,Ze Liu,Hong Wang

Shanghai Jiao Tong University

It is a long-standing challenge to search for metallic glasses (MGs) with high glass-forming ability (GFA) and optimized mechanical properties such as fracture strength and plasticity (measured by fracture strain  $\epsilon_f$ ) in the huge compositional space. Current MGs are designed with inefficient human-driven intuition-based methods, leaving them short of optimal solutions. In this study, we trained three machine learning (ML) models: 1) critical casting diameter ( $D_{max}$ ) as an indicator of the GFA; 2) compressive fracture strength ( $\sigma_c$ ); 3) Poisson ratio ( $\nu$ ) as an indicator of the plastic character, to accelerate the discovery of bulk metallic glasses (BMGs) with optimal trade-offs in  $\sigma_c$  and  $\epsilon_f$ , based on more than 1000 experimental observations sourced from more than 100 papers. The predicted results agree well with the measured values of the three models with correlation coefficient (R) being 0.85, 0.95 and 0.91 respectively on the unseen data. Three simple but relatively accurate mathematical expressions for  $D_{max}$ ,  $\sigma_c$  and  $\nu$  were derived with  $R = 0.78$  ( $D_{max}$ ), 0.91 ( $\sigma_c$ ) and 0.81 ( $\nu$ ) by symbol regression (SR) to establish the relationships between chemical compositions and designed properties intuitively. Then, we used a refined Pareto approach to optimize the strength-plasticity trade-off in the Zr-Cu-Al ternary and Zr-Cu-Ni-Al quaternary systems. Five compositions were identified and validated by experiment. A  $Zr_{53}Cu_{36}Ni_{5.5}Al_{5.5}$  BMG possesses an optimal combination of strength and ductility with  $\sigma_c = 2.190$  GPa and  $\epsilon_f = 10.2\%$ , which are superior to the reported ones in  $\sigma_c$  or  $\epsilon_f$  or both in the Zr-Cu-Ni-Al system.

### E06-10

#### AI 辅助的高导热聚合物高通量搜索与主动设计

鞠生宏\*

上海交通大学

探索和研发高导热聚合物性材料在柔性能源与电子器件散热具有广泛而重要的应用前景。由于聚合物热导率普遍较低,开发和设计高本征导热特性的聚合物具有挑战性。本报告将主要介绍团队近年来开展的系列 AI 辅助的高导热聚合物高通量筛选与主动设计工作,主要包括:(1)提出了一种基于可解释机器学习的混合设计框架,融合高通量分子动力学与自动化物理特征工程,实现了单根直链以及无定形高导热聚

合物的高通量搜索。(2) 基于功能基元序构理念, 建立了高导热聚合物基团库, 基于智能优化算法实现了高导热聚合物逆向设计。(3) 开发了基于采集函数帕累托前沿高效采样策略的聚合物多目标贝叶斯优化算法, 加速了多目标性能高导热聚合物的开发。以上提出的高导热聚合物高通量搜索与主动设计方法可为探索大分子结构与导热性能之间的关系提供借鉴与参考。

## E06-11

### 基于材料图像挖掘材料性能的研究

韩越兴\*、陈侨川

上海大学

机器学习的快速发展带动了人工智能在材料领域的广泛应用。基于机器学习对材料图像进行深度分析可以用来挖掘材料图像信息, 挖掘材料微观结构与性能的内禀关系, 对材料性能预测和新材料开发具有巨大意义。

针对材料图像语义分割中存在的小样本和微观结构特征复杂的问题, 本研究提出基于特征金字塔和十字交叉注意力的双分支语义分割网络。其主分支使用特征金字塔模型聚合多层级的图像特征来增强细节信息; 辅助分支使用骨干网络的低层特征分割图像, 辅助网络学习纹理和边界信息。基于语义分割结果, 统计分析同一类别的不同个体。通过拟合微观结构的生长速率推算出对应的材料性能变化情况, 完成小样本材料图像语义分割结果和材料性能的关系挖掘。进一步, 针对材料图像实例分割中更加显著的小样本问题, 从提高现有数据的利用率出发, 本研究提出基于多模态融合和伪标签技术的实例分割方法。该方法通过融合图像和文本的多模态数据, 提高网络对物体分类、定位和分割的准确度。本论文将训练分为两阶段: 全监督训练和半监督训练。在半监督训练阶段, 采用伪标签技术使未标注数据参与监督模型寻优。最后, 基于实例分割结果, 直接进行微观结构的统计分析, 完成材料性能挖掘。这个研究应用到双相不锈钢在 850°C、200h 的时效时间内 (分别为 10 min、20 min、30 min、1h、2h、4h、10 h、20 h、50 h、100 h、150 h 和 200h) 的熟化行为分析。双相不锈钢具有良好的机械性能和耐腐蚀性, 归因于在双相不锈钢中形成的铁氧体 ( $\alpha$  相) 和奥氏体 ( $\gamma$  相), 但在制备双相不锈钢的过程中容易产生不需要的二次相, 如  $x$  相、 $\sigma$  相。二次相的尺寸、形态和分布对钢的力学性能有很大的影响, 根据奥斯特瓦尔德熟化机制, 可以通过计算二次相与铁氧体或奥氏体之间的平均相界面能预测钢的性能变化。通过本研究的语义分割或实例分割方法, 可以获得二次相  $\sigma$  相的分布, 进而得到尺寸变化。使用最小二乘法拟合得到  $\sigma$  相的熟化速  $35.3491\text{nm/s}^{(1/3)}$ , 由奥斯特瓦尔德熟化机制得到  $\sigma$  相与  $\gamma$  相的界面能  $1.708 \times 10^4 \text{J/m}^2$ 。

针对目前方法对图像特征提取不全和材料小样本的问题, 本研究采用双分支多尺度结构策略, 提出了全局-局部特征聚焦协同网络, 能够独立提取材料图像的全局和局部特征, 并通过所提全局-局部特征融合模块进行特征融合。进一步利用设计的高维特征抽象与聚类重要性加权模块细化特征, 降低了信息损失, 提高了数据利用率, 减少了模型对于大量训练数据的需求。针对当前算法在复杂场景下对材料图像理解不足的问题, 提出了高效多模态特征融合网络。该方法分为多个模块处理不同的模态信息, 将材料的元素分布, 含量及微观结构作为多模态数据输入, 采用元素增强的策略辅助模型深刻理解材料微观结构, 从而实现更准确的性能预测。在此基础上, 可视化了模型预测的性能与具体微观结构之间的对应关系, 并在实验中发现元素分布会影响材料图像微观结构的形态。为了平衡模型性能与效率的关系, 强化模型的性能, 以及多个模态信息高效融合, 提出了不定尺度感知池化模块, 混合尺度注意力机制, 层次互补融合模块和交互式动态通道融合模块。为了验证上述算法的可靠性, 本研究采用大气等离子喷涂 (APS) 技术, 制备了含有不同比例 (5wt%, 10wt%, 15wt%, 和 25wt%)  $\text{Al}_2\text{O}_3$  掺杂的 YSZ 涂层材料, 并收集了 Cu-Cr-Zr 合金材料样本, 自行建立了材料微观结构图像和性能的数据集。所提方法经实验证明了其有效性, 在热导率和电导率分别取得了  $R^2=0.974$  和  $0.932$  的预测结果。

针对亚共晶铸造 Al-Si 合金, 采用 Improved FCN (Full convolutional network) 语义分割模型和基于轮廓的组织特征参数提取方法, 实现了共晶 Si 图像像素级的图像分割和显微组织特征参数自动化提取,

并将其与成分、拉伸样品尺寸等信息融合，构建了多模态数据集，在定量分析精度方面优于 Image-Pro Plus (IPP) 软件。通过三步特征筛选，明确了显著影响 Al-Si 合金抗拉强度的 12 个关键特征，包括基体合金成分 (Si、Ti、Sr)、添加元素 (为便于区分，记为 Nb、Ce、Zr、Gd、Eu)、 $\alpha$ -Al 晶粒尺寸、共晶 Si 等积圆直径和数密度以及与拉伸样品尺寸和拉伸速率相关的簇。最后，本研究构建了“成分和组织-抗拉强度”回归预测模型，实现了合金从成分、组织到抗拉强度的快速、准确预测。

本研究提出了多种基于机器学习和深度学习图像处理方法，并成功的应用到材料数据分析中，挖掘了几种材料中图像和性能内禀关系。本研究提出的方法具有普适性，可以应用到多种材料性能预测和分析中。

## E06-12

### 基于材料基因工程的高熵陶瓷固态电解质性能优化及应用研发

王永祯\*

太原理工大学

全固态电池因其高安全性、高能量密度等优点成为未来能源领域的重点研究方向。固态电解质作为固态电池的核心部件极其重要，石榴石型 ( $\text{Li}_7\text{La}_3\text{Zr}_2\text{O}_{12}$ ) 固态电解质具有高离子电导率、宽电化学窗口、高的电化学稳定性，被认为是最具有潜力的固态电解质之一。但是石榴石固态电解质的商业化还有很大的挑战，需要解决空气稳定性不高、界面阻抗大，离子电导率与液体电解质相比仍有差距等问题。本报告我们主要介绍了：(1) 利用试错法合成了优异空气稳定性的高熵石榴石固态电解质  $\text{LL}(\text{ZrHfTiNbTa})\text{O}$ ；(2) 采用机器学习预测和筛选具有高离子电导率的石榴石组分，通过构建数据库、特征工程、模型训练、性能评估和迭代优化等步骤精准预测合成 5 种高离子电导率石榴石型固态电解质，极大地缩短了研发周期、提高了研发效率；(3) 使用密度泛函理论计算固态电解质离子电导率，绘制相关差分电荷密度图分析不同原子对离子电导率影响，Zr 位点高价离子的引入会提高离子电导率，将相关数据录入数据库用于机器学习。材料基因工程对固态电解质研发范式具有变革意义，将极大推动固态电池领域的技术发展。

## E06-13

### 大小模型协同助力电池材料设计

练成\*

华东理工大学

面向锂离子电池研发与制造过程，开发了一类集成电池物理模型的大语言模型平台。采用小模型与大模型将采用协同进化策略，通过共享数据信息和模型输出来不断改进性能。大模型将向小模型提供全局知识，而小模型将提供局部问题的解决方案。锂离子电池专业小模型能够与在线计算、实验室或生产线相连接，实时产生、收集数据并提供反馈。这将允许持续的模型优化，以适应变化的条件和需求。通过利用大模型的知识提取能力和小模型的任务特性，加速电池研发和生产过程，助力电池智能制造。

## E06-14

### 基于材料基因组方法的新型固态电解质设计

朱虹\*

上海交通大学

固态电解质中金属离子的传导受诸多因素影响，例如与晶体拓扑结构相关的阴离子骨架结构，与晶格动力学相关的软晶格，与电子结构相关的低阴离子电荷等。目前，单一因子对离子传导的影响规律往往存在体系依赖性以及片面性，各因子的耦合交互作用也有待深入挖掘。本报告将重点介绍如何运用材料基因组方法，揭示结构、电子、声子等因素对离子传导动力学的协同作用机制，构建离子电导率的可解释预测模型，指出低库伦作用、软晶格等传统固态电解质设计原则的局限性，最终提出超离子导体的多因子协同调控策略以及基于这些认识所设计的新型固态电解质材料。

## E06-15

### 基于原子环境类型的预设注意力机制机器学习: 铌合金的局部合金化效应

刘轶\*

上海大学

以注意力机制为基础的 Transformer 架构为大语言模型 (LLM) 的成功奠定了技术基础，但是实践中需要昂贵的大数据和大模型的训练才能保证多头自注意力机制的有效应用。图论特征现在经常作为材料结构的数字化表述用于深度学习，但是基于图特征的深度学习模型也需要大量数据训练才能获得较高的精度。为了解决材料数据稀缺昂贵情景下的机器学习问题，我们首次提出了基于物理的预设注意力机制 (Pre-Attention Mechanism, PAM) 思想，以局域“中心-环境” (Center Environment, CE) 核壳结构为预设架构构建机器学习特征模型，其中的环境原子通过原子环境类型 (Atom Environment Type, AET) 进行定义。CE-AET 机器学习模型可以大大减少对训练数据的刚性需求，同时实现模型的高精度和迁移性。与基于图特征的深度学习方法相比，在模型预测的效率、精度和迁移性等方面均有提高。本报告以铌合金掺杂元素合金化效应为例进行介绍说明，结合第一性原理计算和机器学习方法讨论了合金化对多元铌合金的稳定性和力学性能的影响。CE-AET 模型可成为掺杂效应机器学习研究的普适方法和工具。

## E06-16

### 高速钢跨工序数字化模拟与机器学习协同研究探索

尹海清\*<sup>1,2,3</sup>、袁强强<sup>1</sup>、张聪<sup>1</sup>、王永伟<sup>1</sup>、张瑞杰<sup>1</sup>、姜雪<sup>1,2,3</sup>、曲选辉<sup>1,2</sup>

1. 北京科技大学钢铁共性技术协同创新中心，北京，100083
2. 北京科技大学北京材料基因工程高精尖创新中心，北京，100083
3. 辽宁省材料研究院智能技术研究所，沈阳，110004

摘要：M42 高速钢是具有高硬度、高耐磨性和高耐热性的工具钢材料。改善高速钢碳化物的非均匀性对高速钢的性能有着重要意义。一般变形工艺的制定，多采用试错法在产线进行多次调试，研发周期长，费用高。数值模拟技术在钢材变形工艺开发和优化中已经得到了广泛的应用，但是高速钢变形过程的数值模拟研究还没有全流程进行开展。本研究根据实际工况条件，模拟了不同工况下的钢坯温度，相对误差 5% 以内。结合炉温预测建立了锻造开坯和连轧全过程热力耦合计算模型，经过现场实际测量，数值模拟预测的坯料温度场准确率 ( $\pm 10^{\circ}\text{C}$ ) 均高于 90%。针对热加工变形过程共晶碳化物不均匀性问题，创新性地提出采用数值模拟与机器学习相结合的方法，建立共晶碳化物不均匀性机器学习模型，初步实现了复杂热力耦合状态下高速钢热塑性变形不同时刻局域同一位置的碳化物特征追踪，并打通了宏观变形计算和微观组织性能仿真的数据传递通道。模拟了退火过程炉内温度场、速度场和浓度场，分析了不同加热情况下的燃烧特性，获得了炉内气体流动规律和坯料换热规律。基于碳化物溶解析出动态过程机理及机器学习技术，构建了热加工过程工艺参数与碳化物尺寸的关联关系模型，以及球化退火过程中碳化物的溶解模型，实现了碳化物行为及特征尺寸的预测。

**E06-17****数据与人工智能双驱动陶瓷材料设计与制备**

刘建军\*

中科院上海硅酸盐研究所

具有多尺度结构陶瓷材料对制备工艺控制提出严重挑战，大量理论预测陶瓷材料难于实验制备，难于满足国家重大战略需求。通过材料智能体驱动的智能计算、自动化实验、人工智能模型等构建智能化全站式的陶瓷材料设计平台，实现新材料研发模式从传统“试错”到先进“智能化”的研发范式变革。本报告重点讨论数据科学和人工智能技术在陶瓷材料研发中的新进展。主要内容包括：建立陶瓷材料结构与物理化学特性数据库，开发用于材料结构设计和制备工艺优化的人工智能算法，以及进一步开发材料科学大模型、自动化混-压-烧固相合成工艺实验和多模态数据库。通过构建设计、制备和表征一体化的材料智能科学家系统。以此平台为基础，开展高熵富锂正极材料和高活性析氢析氧催化剂等方面的设计与制备，获得高性能材料。

**E06-18****材料数据跨节点发现、共享与应用**苏航\*<sup>1</sup>、王畅畅<sup>2</sup>

1. 中国钢研科技集团有限公司数字化研发中心
2. 北京钢研新材料科技有限公司

针对材料-装备全寿命期数据共享的发展需求，基于材料特征设计、区块链、隐私计算等技术手段提出了去中心化的跨节点数据发现与共享解决方案。在数据不公开、产权不转移的前提下实现节点间数据的关联发现和共享溯源。建立了 CSTM FC91 材料产业区块链标准化委员会，自主开发、并开源了材料数据区块链发现协议，可实现数据获取、上链、发现共享、隐私计算建模和价值估算。目前已建立了可服务于企业和机构间数据发现与共享的原型平台 InterMat，以及配套的自动机器学习、隐私计算、图谱识别应用体系，上链关联了研、产、检、造、用不同行业 40 多个企业私有云，覆盖 26 万种材料产品，多类应用场景，访问量超过 1000 万人次，并正在通过终端节点模式实现生态拓展。在此基础上，提出了以去中心化存储、多中心化运营、中心化监管、国际化拓展为核心特征的行业级新材料数据中心主体架构。

**E06-19****生成式人工智能及其在材料领域中的应用**

刘悦、施思齐\*

上海大学

生成式人工智能（GAI）因其能够针对使用者要求生成所需内容受到材料界的广泛关注。随着提示范式和人类反馈强化学习的引入，GAI 逐渐从特定任务模式转变为一般模式，能够与 AI for Science 进行深度耦合，在领域知识的指导下能够进一步挖掘材料数据中隐含的构效关系，从而大大加快新材料研发进程。本报告综述了 GAI 助力材料数据增强与反向设计的应用现状和发展前景，侧重剖析了 GAI 在材料科学中的应用所需解决的六大挑战性问题（即高质量数据和领域知识获取、模型泛化能力、可解释性和可信度、易用性、资源消耗以及安全性），并从高质量数据构建、可信知识获取与高效算法研发三方面介绍课题组

在 GAI 算法及其在材料领域中的应用方面的研究。

## E06-20

### 基于晶体图神经网络寻找新型高温超导体

黄海友\*<sup>1</sup>、顾亮<sup>1</sup>、刘洋<sup>1</sup>、陈品<sup>2</sup>、陈宁<sup>1</sup>、李阳<sup>3</sup>、Turab Lookman<sup>4</sup>、卢宇彤<sup>2</sup>、宿彦京<sup>1</sup>

1. 北京科技大学

2. 国家超级计算广州中心

3. University of Puerto Rico, USA

4. AiMaterials Research LLC, USA

超导体有着广泛的应用领域，然而目前发现的超导体只能在极低的温度下实现超导，发现室温超导体一直是物理学家和材料学家的梦想。但由于高温超导的机理尚不明确，难以指导新材料的发现，而基于实验方法寻找高温超导体的周期长，成本高，严重阻碍了超导材料的发展。然而，经过超过一个世纪的研究积累，人们已经拥有了超过 2 万条的超导材料数据。机器学习能够利用这些已发现的数据，短周期、低成本地搜索新型高温超导体，为材料学家提供了新的研究手段。

目前已有大量的超导机器学习工作，也取得了一定的成功，但绝大部分模型是基于材料成分信息预测新型超导体，而决定或影响超导转变温度 ( $T_c$ ) 的因素众多 (例如结构、晶格内部原子相互作用等)，导致使用仅考虑成分信息的  $T_c$  预测模型仍然难以支持新高温超导体的发现。

因此，本文针对目前超导机器学习输入信息不足的问题，开发了一种可处理晶体结构和晶格内部原子交互作用的新型图神经网络——GraphTTS。基于 GraphTTS，探索了影响超导材料晶体内部相互作用信息与  $T_c$  之间的关系因素，并通过搜索 ICSD 数据库以寻找新型高温超导体。

首先，构建了由晶体图表示(CGR)、交互式消息传递(CMP)和注意力(Attention)三个模块组成的 GraphTTS 图神经网络模型，CGR 模块将晶体学结构表示为机器学习可处理的图结构。CMP 模块模拟了原子间复杂的物理和化学相互作用。Attention 模块用于捕获与超导特性相关的关键特征。

为了提高超导体预测的准确性，采用多级筛选策略，即训练了金属-非金属、超导体-非超导体、高温超导体-低温超导体三个二分类模型，分别用于递进式辅助搜索金属，超导体，高温超导体。然后，采用回归模型预测经分类模型后保留的高温超导体的  $T_c$ 。采用近五年发现的超导体数据 (模型未知数据) 对模型进行了验证，分类模型的 AUC 均达到了 0.99，回归模型的  $R^2$  为 0.82。证明了模型的可靠性。

通过构建不同晶体学参数的“假想晶体”的方法进行模型解释，通过分析“假想晶体”预测  $T_c$  随键长、空间群和元素的变化后，发现：1.某些特定的原子间的交互作用主要决定了超导体的  $T_c$  值，例如  $\text{HgBa}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_y$  中的 Ca-O、LaH<sub>10</sub> 中的 H-H 等。2.当晶体内部相互作用增强 (键长更短) 时，超导体的预测  $T_c$  会上升。3.含有 F, Ca, H, Cl 的“假想晶体”往往具有较高的预测  $T_c$ ，含有这些元素的材料可能具有高温超导的潜力。

最后，基于 GraphTTS 模型和 ICSD 数据库，开展了新型高温超导体的搜索，发现了数个潜在的高温超导体，其中  $\text{NaB}_{0.08}\text{Cl}_{0.92}\text{H}_{0.32}$  的预测  $T_c$  的达到了 227 K。

本文的研究结果表明，基于图神经网络技术，融合材料晶体结构和晶格内部原子交互作用信息的 GraphTTS 机器学习模型具有更好的超导机理挖掘与超导材料预测能力。此外，GraphTTS 具有通用架构，也可应用于其它材料体系的新材料开发与机理研究工作。

## E06-21

### Delocalized, Asynchronous, Closed-Loop Discovery of Organic Laser Emitters

Han Hao\*, Felix Strieth-Kalthoff, Alan Aspuru-Guzik

## University of Toronto

Contemporary materials discovery requires intricate sequences of synthesis, fabrication and functional characterization that often span multiple locations with specialized expertise and instrumentation. In our collaborative effort of the Material Accelerated Discovery of Novelty Enabled by Synthetic Systems (MADNESS) campaign, we present a cloud-based solution enabling AI-guided, asynchronous, and delocalized design–make–test–analyze cycles to integrate these workflows. We applied a building-block strategy for assembling molecular function enables automated synthesis on geographically distributed yet connected platforms, orchestrated by a central cloud platform, with the integration of an AI-based experiment planner and an in-line property characterization module to accelerate the discovery of top-performing organic solid-state laser molecules as demonstrated by the best ever thin-film device performance. Empowered by asynchronous integration of five laboratories across the globe, this workflow provides a blueprint for delocalizing – and democratizing – scientific discovery, in which we are endeavoring a global community of accelerated material discovery and self-driving laboratories based on the framework of the Acceleration Consortium at the University of Toronto. Collectively, we aim to accelerate the discovery of materials and molecules needed for a sustainable future, with the power of artificial intelligence, robotics, and advanced computing—to reduce the time and cost of bringing advanced materials to market.

**E06-22****物理模型和机器学习协同驱动的热防护涂层材料设计与应用**

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。

**E06-23****WyCryst: Wyckoff Inorganic Crystal Generator Framework**Ruiming Zhu<sup>1,2</sup>, Wei Nong<sup>1</sup>, Shuya Yamazaki<sup>1</sup>, Kedar Hippalgaonkar<sup>\*1,2</sup>

1. Nanyang Technological University

2. Institute of Materials Research and Engineering, A\*STAR, Singapore 138634

The accelerated discovery of novel functional materials has taken a great step forward due to recent advancements in generative design strategies. This is particularly true in the realm of inorganic materials, where learning symmetry for crystal structure prediction (CSP) and subsequent prediction of their target properties are crucial. Over the past few years, generative models including variational autoencoders (VAE), generative adversarial networks, transformers, and diffusion models have been developed for this purpose. However, despite

their success in generating crystal structures, these previous generative design approaches often overlook the critical aspect of crystal symmetry. This symmetry is essential for predicting properties and stability, as well as for subsequent validation and synthesis. As a result, the energy relaxation on the generated crystal structures to find the ground state crystal structure, typically using density functional theory (DFT) often alters the symmetry of the structure, thereby changing the original design property and invalidating the original generative design approach. To address this issue, we present our data-driven generative design framework, WyCryst. This framework consists of three main components: 1) an invertible and symmetry-compliant representation of inorganic crystals based on Wyckoff positions, 2) a VAE model directed by property, and 3) an automated DFT workflow for structure refinement and estimation of phonon stability. By implementing loss functions that penalize non-realistic crystal structures, our model selectively generates materials that adhere to the ground truth of crystal symmetry in the form of Wyckoff representation for each space group (SG). In leave-one-out validation tests, we successfully reproduce a variety of existing materials:  $\text{CaTiO}_3$  (SG No. 62 and 221),  $\text{CsPbI}_3$  (SG No. 221),  $\text{BaTiO}_3$  (SG No. 160), and  $\text{CuInS}_2$  (SG No. 122). These validations encompass both ground state and polymorphic crystal structure predictions for the desired compositions. In our generation experiments, we predict new binary and ternary materials not listed in the inorganic materials database (Materials Project), which retain their symmetry and are proven to be stable by the energy above the convex hull and phonon dispersion obtained using the automated DFT workflow. Among the predicted crystals, a tetragonal structure,  $\text{Cu}_3\text{InSe}_4$  is advanced to experimental validation, with preliminary results confirming its successful synthesis, thereby strengthening the effectiveness of our methodology. We believe that our symmetry-aware WyCryst framework represents a significant step towards AI-driven inorganic materials discovery.

## E06-24

### 合金相中原子择优占位行为研究的必要性、方法和若干应用

吴波\*, 乔阳, 苏祥言, Ali Hamid, 乔阳

福州大学

合金相的精细微结构与相变过程的准确表达和理解, 是设计和调控合金性能的关键科学问题, 也是长期悬而未决的难题。不同晶态合金相中, 可能存在复杂成分和复杂结构, 例如, 合金组元可能包含若干种合金元素, 亚晶格可能从双亚晶格到五亚晶格不等, 因此合金合金元素在各个亚点阵上的占位必然存在占位倾向性 (Site Preference, 即择优占位)。目前原子择优占位行为的实验研究, 面临成本高、分析技术复杂, 迫切需要结合理论计算方法。另一方面, 目前尚缺乏合理有效的理论模型和求解方法, 也迫切需要建立一种普适化的研究方法, 并结合必要的精准实验验证, 来确定不同热处理温度下, 合金元素在各个亚点阵上的占位分数等精细结构信息。本报告梳理了若干长期悬而未决的原子择优占位暨有序—无序转变行为难题, 汇报了我们在探索普适化型和方法方面的新进展。采用基于晶体学结构信息的亚点阵模型, 结合合金热力学和第一性原理计算, 可以不受合金组元数和亚点阵个数的限制, 能够对任意复杂体系的晶体构型和热力学进行有效的描述和求解。我们对一系列简单合金相、复杂合金相的微结构和性质, 尤其是高熵合金四大效应进行了理论研究, 我们迫切需要采用包含精细中子散射技术在内的先进实验技术, 进行可靠性验证。

## E06-25

### 基于生成模型的合金成分设计

薛德祯\*

## 西安交通大学

多组元合金为进一步优化合金性能提供了一条新思路，但其组元复杂，导致成分空间接近无限。目前基于池的数据驱动设计方案通常需要生成所有候选成分，但对多组元合金巨大搜索空间进行遍历通常难以实现。针对这一成分设计难题，我们发展了基于主动学习的合金成分优化方法、基于强化学习的多组元合金成分设计方法以及基于条件变分自编码器的合金多目标性能优化方法，从而达到提升性能优化效率的目的。具体地，我们利用上述设计策略，融合材料性能预测模型与真实实验反馈，在高焓变多组元形状记忆合金的设计中进行了应用尝试，获得了多种具有高焓变的合金成分。

## E06-26

基于主动学习的催化稳定构型搜索及 NH<sub>3</sub>-SCO 合金催化剂理性设计

杨家强\*、王成铎、李庆奎

郑州大学

氨气选择性氧化 (NH<sub>3</sub>-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 NH<sub>3</sub>-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 NH<sub>3</sub>-SCO 合金催化剂的快速设计提供了新方案。首先，我们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 NH<sub>3</sub>-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 NH<sub>3</sub>-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。

## E06-27

Ni/Co 基高温合金蠕变与  $\gamma'$  相动力学的晶体塑性相场研究

李永胜\*、单野、王晟龙、牛堃宁、张赞、卓集成

南京理工大学

沉淀强化单晶高温合金具有优良的高温性能，是先进航空发动机涡轮叶片等高温部件的关键材料。由于组元及相的复杂性，高通量设计与计算模拟成为高温合金成分及组织性能优化的重要方法。多组元 Ni/Co 基高温合金在高温应力下发生定向粗化，粗化会引起高温蠕变抗力的退化。而高温合金的蠕变粗化微观机制与动力学行为及其与力学性能的关系仍存在诸多需要探索的问题。耦合晶体塑性理论和多相场模型，研究了 Co 对多组元镍基高温合金  $\gamma'$  析出动力学及蠕变性能的影响，明确了蠕变性能和微观组织演化动力

学的关系。研究发现, Co 含量增加使得  $\gamma'$  相体积分数和颗粒数提高,  $\gamma'$  相颗粒半径和粗化速率降低。Co 促进 Al 和 Ta 向  $\gamma'$  相中扩散, Co 向  $\gamma$  基体中扩散。高的 Co 含量具有较低的蠕变应变, 延长了蠕变寿命,  $\gamma'$  相 ( $\gamma'$  筏) 的稳定性提高。Co 作为一种重要的  $\gamma$  相形成元素, 研究结果为优化高温合金 Co 含量及提高蠕变性能提出了理论依据。

## E06-28

### 冷却速率对镍基高温合金性能影响的高通量研究

付佩\*<sup>1</sup>、周萍<sup>2</sup>、赵天阳<sup>2</sup>、刘卫<sup>1</sup>、解瑞珍<sup>1</sup>、刘兰<sup>1</sup>

1. 陕西应用物理化学研究所
2. 中南大学

镍基高温合金具有优异的高温综合性能, 是航空航天等领域高端装备中不可或缺的战略材料。冷却速率是镍基高温合金热处理过程中合金性能调控的关键工艺参数。以 CSU-A1 镍基高温合金为研究对象, 结合梯度热处理实验及微观组织、性能表征技术, 研究冷却速率对镍基高温合金微观组织及力学性能的影响规律。结果表明, 在 39.00~1206.54K/min 的冷却速率范围内, 随着冷却速率减小, CSU-A1 合金析出相  $\gamma'$  相的形貌由球形转变为接近方形或不规则的多边形, 尺寸及相分数均增加, 其范围分别为 27.80~194.62nm 及 18.47%~32.92%; 维氏硬度先增加后减小, 其范围为 429.37~494.55Hv, 并在冷却速率为 294 K/min 左右时达到峰值。

## E06-29

### 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。

## E06-30

### 人工智能驱动的晶体结构解析

曹斌\*

在材料科学的研究中，高效、精确的材料表征技术已成为推动材料设计革新的核心动力。传统的材料测试分析方法中，尤其是粉末衍射分析，虽能揭示材料的相组成、纯度和结构信息，但其繁琐的分析过程和强依赖于专家经验的特性，不仅限制了新材料开发的效率，同时阻碍了材料科学领域与自动化、智能化工作流程的深度融合。本研究通过材料信息学方法，依托丰富的晶体结构数据库，建立了高质量、大数据、多模态的谱学数据库。基于谱学数据库和先进的材料表征技术，构建了高效的材料性能预测模型和晶体结构自动识别模型，显著优于基于传统搜索匹配机制的初相识别方。这不仅将推动材料机器人实验室的发展，还将为材料设计、优化和性能预测的智能化提供有力支持。

### E06-31

#### 多尺度研究方法在工业材料设计中的应用初探

郑懿、张步宇\*

龙讯旷腾

以“大数据+AI”为标志的数据驱动，已成为材料科学发展的第四范式。弹性模量、强度与合金元素含量之间的关联关系以及金属的氢脆过程，一直是工业材料设计关心的重点话题。基于“DFT+CALPHAD+AI”的探索方案，我们针对不同钛合金成分体系，通过单个元素含量调整和多组元含量同时调整，分析合金元素变化对强度、弹性模量的影响规律，发现了  $\alpha$ -Ti 的杨氏模量随 Al 掺杂浓度增加而提高的变化关系，同时推广至多元组分，绘制出多元组分合金性能与成分的关系图谱。同时我们基于“DFT+CALPHAD+AI”的探索方案，探索了铁的氢脆过程的机理模型，发现影响裂纹传播的是裂纹尖端附近的氢浓度，而非整体氢浓度，氢含量对裂纹传播影响效果呈非线性关系，临界浓度约 13%。

### E06-32

#### CsPbI<sub>3</sub> 钙钛矿中热膨胀和声子重整非谐效应的交互和影响

沈祎恒\*、谢玮

上海大学

CsPbI<sub>3</sub> 光电性能优异但稳定性不足。其立方  $\alpha$ 、四方  $\beta$  与正交  $\gamma$  三个钙钛矿相的相平衡与相转变是影响材料制备与失效的核心因素，但此前基于简谐近似、准简谐近似和自恰声子理论的计算，因未同时妥善考虑热膨胀和声子重整，所预测的热力学性质和相图等较实验结果有定性或严重定量错误。针对上述问题我们基于 MACE 图神经网络模型开发了一个适用于 CsPbI<sub>3</sub> 各钙钛矿相的高精度机器学习力场，并基于它使用温度依赖有效势方法计算了 CsPbI<sub>3</sub> 各钙钛矿相在不同晶格参数和温度下的声子重整频率和亥姆霍兹自由能，通过拟合状态方程得到各相的温度依赖热膨胀系数与平衡吉布斯自由能，并预测了  $\gamma \rightarrow \beta$  与  $\beta \rightarrow \alpha$  相转变温度分别为 422 和 570 K，较实验值（457 和 555 K）十分接近。平衡晶格常数下，声子重整使声子硬化（即频率随温度升高而增大），而热膨胀使低频声子硬化、高频声子软化，两者共同作用总体导致低频声子硬化、高频声子软化，在  $\alpha$ 、 $\beta$  与  $\gamma$  三相中高低频的分界均约为 1.7 THz，振动模式分别对应于键长和键角的变化，表明三相的非谐机制相同、非谐性强度相近，精确计算均须同时考虑两类非谐效应。本研究定量表征了 CsPbI<sub>3</sub> 钙钛矿的声子重整和热膨胀非谐效应及其对相平衡和相转变影响，为设计优化更稳定的卤族钙钛矿材料提供了理论指导，所提出并验证的计算范式可望广泛应用于其他强非谐材料的精确计算。

## E06-33

## 可解释性机器学习设计同步提升高端铝合金的强度、韧性和抗应力腐蚀性能

姜磊、谢建新\*

北京科技大学

强度、韧性和抗应力腐蚀性能是高端装备制造用铝合金的 3 种关键性能，然而复杂的合金成分、多样的时效制度，以及互相矛盾的性能关系，使得 3 种性能同步提升的合金设计非常困难。本文提出了一种结合特征量筛选、SHAP (Shapley Additive explanation)分析和多目标优化设计的高端铝合金可解释性机器学习设计策略，挖掘出影响合金抗拉强度(UTS)、断裂韧性(KIC)和应力腐蚀敏感因子(ISSRT)的元素关键特征及其显性规律。具有 d 价电子轨道上电子数量多、高沸点、低核电子距离等特征的元素有助于提升合金的 UTS；具有低密度、与铝的第一电离能差值小等特征的元素有助于提升合金的 KIC；在铝中具有高扩散激活能、在海水中具有高腐蚀电位等特征的元素有助于降低合金的 ISSRT。基于上述 3 条准则，筛选出同步提升 3 种合金性能综合效果显著的 Ti、Cr、Zr 三种微合金元素，并设计出新型高端铝合金 Al-10.50Zn-2.31Mg-1.56Cu-0.09Ti-0.15Cr-0.10Zr。经回归再时效 RRA 处理后，新合金的 UTS 为 760±4MPa、KIC 为 34.9±0.3MPa·m<sup>1/2</sup>、ISSRT 为 13.3±1.7%。组织分析发现，新合金经 RRA 处理后几乎不存在微米级第二相，减少了点蚀与空洞形成的位点；Ti、Cr、Zr 三种元素的添加形成了纳米级弥散相 Al<sub>18</sub>(Cr,Ti)<sub>2</sub>Mg<sub>3</sub>和 Al<sub>3</sub>Zr，有助于强度、韧性和抗应力腐蚀性能的同时提升；高体积分数的晶内析出相显著提升了合金的强度。

## E06-34

## 基于机器学习的锂电池健康诊断技术

张云蔚\*

中山大学

预测锂离子电池的健康状态和剩余可用寿命是一个尚未解决的挑战，限制了储能技术的发展。这里，我们通过将电化学阻抗谱 (EIS)，一种实时、非侵入性且信息丰富的测量方法，结合机器学习方法，建立了一套准确的电池健康诊断技术。基于我们前期建立的开源商用锂离子电池 EIS 数据库（含有超过 20,000 个数据点，在不同的健康状态、充电状态和温度下收集），训练了多种机器学习模型准确评估电池健康状态以及预测剩余使用寿命。我们的模型将完整的 EIS 谱作为输入，无需进行特征工程处理，能够自动确定与电池老化最相关的谱学特征。研究结果证明了人工智能结合 EIS 数据在电池管理系统中的应用价值。

## E06-35

## 基于数据驱动的 Sm-Co 基稀土永磁合金成分设计

吕皓、许国婧、程锋、宋晓艳\*

北京工业大学

Sm-Co 基合金因具有良好的高温磁性能和热稳定性，成为最有潜力的高温永磁材料。但因其成分多样、相结构复杂，应用传统的实验试错方法和单一目标计算方法设计开发新材料成本高、周期长。元素掺杂是材料成分设计中非常重要的环节，但可选择的元素复杂多变，常常难以找到有效的理论进行指导。针对掺杂元素对 Sm-Co 基合金性能影响的问题，机器学习是一种有效的研究手段。

本研究基于自建的 Sm-Co 基合金数据库, 利用基于遗传程序的符号回归模型、基于逻辑回归的分类模型等机器学习方法研究了掺杂元素对 Sm-Co 基合金饱和磁化强度、居里温度、相稳定性的影响规律。发现饱和磁化强度对掺杂元素含量的分组线性回归参数是准确评价掺杂元素对 Sm-Co 合金饱和磁化强度影响的重要指标。相稳定性依赖于掺杂元素的熔点、掺杂浓度和合金的平均晶粒尺寸的共同作用。定义了居里温度敏感系数, 提出了关键物理描述符和居里温度敏感系数之间的数学表达, 发现电导率大且熔化热与 Sm 相似的掺杂元素有利于提高 Sm-Co 基合金的居里温度。基于以上研究, 从元素种类、掺杂浓度和晶粒尺寸等方面评估了掺杂元素对 Sm-Co 基合金磁体相稳定性和磁性能的影响, 并设计制备了两种具有高综合磁性能的新 SmCo<sub>7</sub> 基纳米晶稀土永磁合金。

### E06-36

#### 机器学习辅助设计具有低弹性模量和低成本的生物医用 Ti 合金

聂帅、金妮、袁睿豪、贺一轩\*

西北工业大学

Ti 合金是一种较为理想且具有发展前景的人体植入材料, 但与松质骨组织 (~27GPa) 相比, 其弹性模量较高, 易出现应力屏蔽现象。因此, 设计探索具有低弹性模量的钛合金成分具有重要意义, 然而传统的试错方法具有成本高、效率低以及效果不理想等缺点。本工作首先通过数据可视化、特征重要性分析等手段创建了原始数据库, 然后利用机器学习算法模型 (SVR.rbf) 成功建立了生物医用 Ti 合金成分与弹性模量之间复杂的非线性关系, 模型稳定性较好 ( $R^2=0.89$ ), 基于该机器学习算法, 设计了一种新型的低成本、低弹性模量 (57GPa)、无毒、制造简单的 Ti-Nb-Zr-Mo 系生物医学  $\beta$ -Ti 合金, 是一种很有前景的生物医学植入候选材料。本工作为设计开发新型生物医用 Ti 合金提供了新的视角, 对生物医用合金设计领域具有重大意义。

### E06-37

#### 基于阴离子旋转动力学的新型反钙钛矿固态电解质设计

官朝红、朱虹\*

上海交通大学

钠反钙钛矿超离子导体, 因其具有良好的结构容忍性与易合成性, 被认为是极具竞争力的固态电解质材料。但较低的离子电导率限制了钠反钙钛矿的进一步应用, 亟需探索未知的反钙钛矿相空间, 以实现电导率的有效提升。因此, 本次工作结合粒子群优化算法与高通量第一性原理计算, 设计具备阴离子旋转动力学的新型反钙钛矿固态电解质。结果表明阴离子位点互换与阴离子团簇的引入能在兼顾材料稳定性的同时提升离子电导率, 如设计的 Na<sub>3</sub>BrSO<sub>4</sub>, 其理论室温离子电导率为 39 mS/cm, 相比于 Na<sub>3</sub>OCl 有着数量级的提升。此项工作突出了阴离子旋转动力学在促进离子扩散上的重要作用, 为超离子导体离子电导率的进一步改进提供基于阴离子动力学的理论指导。

### E06-38

#### 机器学习和第一性原理协同加速新型 $\gamma/\gamma'$ 钴基高温合金研究

韩朝婧、许伟伟\*、夏声宝、古观成、王翠萍、刘兴军

厦门大学

高温合金是航空发动机热端部件的关键材料， $\gamma/\gamma'$ 钴基高温合金因其较高的熔点被认为是下一代高温合金的候选材料。然而，复杂庞大的多组分合金体系使得发现更多具有  $\gamma/\gamma'$  ( $L_{12}$ ) 相的新型钴基高温合金成为一大挑战。钴基高温合金优异的高温力学性能主要依赖于  $\gamma/\gamma'$  ( $L_{12}$ ) 相组织，其相的形成和稳定性受生成能和分解能的影响。本报告结合 DFT 计算和机器学习方法，通过预测能量快速搜索潜在的合金体系。首先利用 DFT 计算用于提供合金体系的生成能数据，分解能数据的获取基于 convex-hull 生成能量凸包原理获得。随后结合数据集训练并评估了 13 种机器学习回归模型，随机森林模型以高精度和模型简单性被选中来预测更多未知合金的能量。特征工程在模型训练中通过提取与能量密切相关的特征量，降低了模型的复杂性并提高模型的解释性。基于该模型，设计并成功预测了由 11 种元素组成的 150000+种钴基合金的  $L_{12}$  相生成能及分解能数据，以评估其相的生成和稳定性。最终筛选出 1049 个具有研究潜力的无 W、Ni、Fe 的新型钴基高温合金，主要分布在 11 个含 Al 体系和 25 个无 Al 体系中，借助实验技术，制备并表征了其中的两个新体系，均发现了  $\gamma/\gamma'$  双相结构的新钴基合金体系，验证了理论设计方法的有效性。

### E06-39

#### 知识赋能-数据驱动超硬高熵硼化物陶瓷智能设计

卢佳琦\*

西北工业大学

高熵陶瓷硼化物在极端条件下能保持稳定的物理和机械性能，是极具潜力的热防护候选材料。面对巨大材料组合空间，在材料基因组策略推动下，需要全面揭示连接分子水平到宏观性质的关键性质参数的设计策略，高效设计和验证具有目标性能的新型陶瓷以推进先进高熵材料研发进程。

本研究基于自主构建的多元-多相陶瓷数据库，集成领域知识与大数据关键技术，系统测试 149 种物性参量与 9 种机器学习算法，迭代寻优，确定关键物性参量与最优算法，发展超硬高熵硼化物陶瓷维氏硬度可解释成份-性能快速评估模型。挖掘材料硬度随电子特性变化影响趋势，从原子和电子角度表征分析高熵硼化物组分-性能交互作用。建立固溶强化和晶粒细化耦合作用三参数幂律关系模型，筛选出 14 种潜在超硬高熵硼化物并进一步完善设计策略，以经济高效方式实现先进高熵材料设计及验证。

### E06-40

#### 基于迁移学习的高疲劳极限强度镍基高温合金设计

陈泽宇、韩朝婧、许伟伟\*、李兆轩

厦门大学航空航天学院

摘要：沉淀硬化型镍基高温合金因其在高温环境下优异的力学性能、抗疲劳性能、蠕变性能和热稳定性而广泛应用于航空发动机涡轮叶片中。然而，疲劳失效作为涡轮叶片的主要失效方式，仍然是发动机可靠性的最大威胁。机器学习方法在材料科学中的兴起，为高疲劳强度镍基高温合金的设计提供便利和可能。针对目前镍基高温合金疲劳试验数据非常有限的局面，本报告基于卷积神经网络(CNN)方法，提出了一种基于迁移学习概念的疲劳极限强度预测和合金设计框架，有效提升了机器学习方法在极小数据集条件下，对镍基高温合金疲劳极限强度的回归精度，实现了对高疲劳强度镍基高温合金的成分、热处理工艺设计和疲劳极限强度的预测。该框架利用合金拉伸性能与疲劳强度之间的经验关系，以拥有大数据集(303 条数据)的镍基高温合金拉伸性能作为迁移学习的源域，将在拉伸性能上训练得到的源模型应用于小数据集(56 条数据)的目标域，即疲劳极限强度的预测中。源模型以合金成分、热处理工艺和测试条件为输入预测了镍基高温合金的屈服强度和极限拉伸强度，测试集上的  $R^2$  平均值分别为 84.2%和 87.7%，迁移模型以相同输入

预测了镍基高温合金的疲劳极限强度，测试集上的 R2 平均值达到 92.0%，能够有效预测不同成分和热处理条件下合金的疲劳极限强度。随后，采用蚁群优化算法和遗传算法进行合金设计，首先在七维合金成分空间中取点进行成分优化设计，接着同样对所选合金进行热处理工艺设计。利用建立的疲劳强度预测模型，成功预测出疲劳极限强度为 636MPa 的镍基高温合金，超越了现有数据中的最高值 500MPa。

## E06-41

### 最大化主动学习效率的特征选择加速高强高熵合金开发

张闰<sup>1</sup>、薛德祯<sup>2</sup>、宿彦京<sup>\*3</sup>

1. 西北有色金属研究院
2. 西安交通大学
3. 北京科技大学

针对高熵合金强度优化问题，以提升高熵合金性能优化效率为目标，研究了特征选择标准对合金性能开发效率的影响规律，提出了基于主动学习效率评估材料特征的新标准，实现了高强度高熵合金的快速研发。通过选择主动学习效率最大的材料特征子集，利用机器学习模型建立特征子集和屈服强度之间的映射关系，对成分空间内合金的屈服强度进行预测；仅通过 5 次实验迭代，筛选出了 AlVCrCoNiMo 和 AlCrFeCoNiMo 体系的超高强高熵合金，室温压缩屈服强度分别达到 2814MPa 和 3000MPa，AlVCrCoNiMo 合金在 800°C 下的比屈服强度是商用镍基高温合金 Inconel 718 和典型难熔高熵合金 VNbMoTaW 的两倍；对其微观结构进行了系统的研究，发现 AlVCrCoNiMo 合金表现出了独特的多尺度结构，由 BCC 基体相和具有共格界面的多尺度 B2 相组成；揭示了通过评估主动学习效率筛选出了对高性能区域预测更准确的材料特征，是此策略实现高效开发的内在原因，为性能需求导向下的特征选择提供了新的思路。

## E06-42

### 描述符的构造及加速表面催化的理论设计研究

李希波\*

暨南大学

电子/原子结构描述符不仅能够揭示表面催化中的物理、化学规律，合适的描述符亦能够加速表面催化的理论预测。针对表面金属合金结构的复杂性及氧还原过程，构造优化出合适的描述符计算氧还原中间态吸附能，理论预测密度泛函理论精度的催化活性，解决复杂结构与精度的平衡问题。

## E06-43

### Al-Cu-Mg-Ag 系合金组织与性能的高通量实验研究

李连洲<sup>1</sup>、阮晶晶<sup>1</sup>、周鑫<sup>1</sup>、肖纳敏<sup>2</sup>、朱礼龙<sup>\*1</sup>、江亮<sup>1</sup>

1. 烟台大学精准材料高等研究院
2. 中国航发北京航空材料研究院

作为一种高通量实验方法，多组元合金扩散多元可制备具有连续成分梯度的样品库，进而加速高性

能合金材料的设计研发。本研究以 Al-Cu-Mg-Ag 系合金为研究对象,设计并制备了包含 Cu、Mg、Ag、Si、Sc 等关键合金化元素交互作用的多组元合金扩散多元节;经 530°C 高温扩散处理,形成了宽广的成分梯度;并经 165°C 时效处理后,析出了多种微纳米级强化相。结合扫描电镜 (SEM)、微束 X 射线荧光光谱 (Micro XRF)、微束 X 射线衍射 (Micro XRD)、透射电镜 (TEM)、显微硬度测试系统等高通量高空间分辨率的材料测试表征技术,高效获取了成分、相结构/相组成、微观组织、显微硬度等关键实验数据,系统研究了 Cu、Mg、Ag、Si、Sc 元素对合金的相-组织-性能的影响规律和关联关系。实验结果可用于新型高性能铝合金的成分优化设计。

## E06-44

### 第一性原理计算方法辅助设计相变存储芯片关键材料的理论研究

宋文雄\*

中国科学院上海微系统与信息技术研究所

新型非易失性相变存储芯片利用硫系化合物的晶态 (低阻态, “1”) 和非晶态 (高阻态, “0”) 之间快速转变来实现“0”和“1”存储。硫系非晶结晶速度快慢是决定相变存储芯片操作速度的关键因素。实验表明引入少量其它合金元素或者引入组分空位可以明显的加快结晶速度,但合金元素和组分空位如何影响非晶形核过程仍然不清楚。通过第一性原理分子动力学,可原子级别地揭示合金元素和组分空位对硫系非晶形核过程的影响,为设计或优化相变存储芯片关键材料提供理论指导。

## E06-45

### 基于机器学习的高强 Mg-Zn-Y (Zr) 合金半固态工艺研究

曾崎<sup>1</sup>、朱凯<sup>1</sup>、张英波\*<sup>2</sup>、胡云峰<sup>2</sup>、王少阳<sup>1</sup>

1. 航空工业成飞
2. 西南交通大学

镁及其合金因其密度低、铸造性能好、比强度高而成为汽车工业中极具吸引力的结构材料。但仍需进一步提高镁合金的绝对强度,以提高其与铝合金或钢的竞争能力。准晶相由于高硬度,高热稳定性,以及与  $\alpha$ -Mg 基体界面结合强度高等优点,而成为镁合金的一种重要强化相,准晶相的特征(相、体积分数、尺寸分布等)影响其强化效果。研究表明,当准晶 (I-phase) 在 Mg 基体中破碎成细小而均匀的颗粒时,可以有效的强化合金强度。本课题组前期研究发现,将合金经过半固态等温热处理工艺后,可以获得纳米层片的准晶相,再经过热塑性工艺可以有效的使准晶纳米颗粒化,从而提高镁合金强度。然而半固态工艺参数范围宽,传统的方法(如试错法等)在费时费力的同时很难找到最优化的半固态工艺参数,机器学习是一种很有希望改变现状的方法。我们的目标是通过机器学习优化半固态工艺开发高强韧 Mg-Zn-Y (Zr) 合金。本文提出了一种改进的、基于 Kriging 模型的高效全局优化(EGO)算法,并将其应用于含准晶的 Mg-Zn-Y (Zr) 合金的半固态工艺参数优化。我们首先通过拉丁超立方取样的方法,选取了一个实验样本集,并通过实验获得半固态工艺参数和抗拉强度的一个实验数据库。利用这些数据构建了基于半固态工艺参数(温度和时间)和材料强度的 Kriging 代理模型。然后,采用最优代理模型进行主动学习,搜索新的具有较高强度值的合金的对应半固态工艺参数。经过 3 次迭代优化,得到具有抗拉强度超过 400 Mpa 的高强优化合金,其在最优半固态工艺参数下比初始态合金抗拉强度增加 68.02%。最后,对优化后的合金组织进行表征发现了高强度是由于典型的双峰晶粒结构和多尺度准晶相的协同作用。这项工作展示了机器学习可以用来优化工艺参数指导高强镁合金的开发。

**E06-46****Searching Materials Space for Ambient-Pressure Superconducting Hydrides**Yue-Wen Fang<sup>\*1</sup>, Ion Errea<sup>1,2</sup>

1. University of the Basque Country

2. Donostia International Physics Center (DIPC)

The recent report by Dasenbrock-Gammon et al. on the near-ambient superconductivity in N-doped lutetium hydride (Lu-N-H) [Nature 615, 244–250 (2023)] has gained much attention. Our ab initio study on the potential parent phases suggests that the Raman spectra can be explained by the phonon dispersions of Fm-3m LuH<sub>3</sub>, but this phase can only be stabilized by anharmonicity above 6 GPa and 300 K. Furthermore, the observed color change in the experiment can be explained by the optical properties of Fm-3m LuH<sub>2</sub> [1]. However, neither LuH<sub>3</sub> nor LuH<sub>2</sub> exhibit superconductivity at 1 GPa.

To find a possible clue of near-ambient superconductivity, we performed high-throughput DFT screening based on LuH<sub>2</sub> and LuH<sub>3</sub> with and without the involvement of N at 1 GPa [2]. However, N atoms exhibit a strong inclination towards covalent bonding with H, and lead to favoring insulating behavior rather than metallic properties. None high-temperature superconducting compounds are found. Despite the absence of high-T<sub>c</sub> superconductivity at 1 GPa, we find that cubic Lu<sub>4</sub>H<sub>11</sub>N exhibits a high T<sub>c</sub> of 100 K at 20 GPa. In addition, the LuH<sub>10</sub> and LuH<sub>6</sub> become near-room-temperature superconductors above 100 GPa.

While high-temperature superconductivity is predicted to be unattainable in Lu-based hydrides at 1 GPa, we performed a machine learning assisted search over more than 1 million compounds and predicted a series of ambient-pressure superconducting hydrides [3,4]. Our ab initio investigation yielded around 50 systems with transition temperatures surpassing 20 K, and some even reaching above 70 K. These compounds have very different crystal structures, with different dimensionality, chemical composition, stoichiometry, and arrangement of the hydrogens. Interestingly, most of these systems displayed slight thermodynamic instability, implying that their synthesis would require conditions beyond ambient equilibrium. Moreover, we found a consistent chemical composition in the majority of these systems, which combines alkali or alkali-earth elements with noble metals.

In addition to the high-throughput prediction of T<sub>c</sub> based on the density functional theory perturbation theory (DFPT), we have selected some promising superconducting hydrides for superconducting density functional theory (SCDFT) calculations. Compared to high-throughput DFPT, we have found the T<sub>c</sub> in SCDFT is reduced, which is due to the enhanced Coulomb interactions in most cases.

Among the predicted compounds, a family of compounds, of composition Mg<sub>2</sub>XH<sub>6</sub> with X=Rh, Ir, Pd, or Pt are particularly interesting [3,4]. Our ab initio study predict that their superconducting transition temperatures are in the range of 45–80 K, or even above 100 K with appropriate electron doping of the Pt compound. Our ab initio molecular dynamics simulations and stochastic self-consistent harmonic approximation calculations further suggest that these materials are kinetically stable at room temperature and are, therefore, excellent candidates for experimental synthesis and characterization [4].

[1] Đ. Dangić, P. Garcia-Goiricelaya, Y.-W. Fang, et al., Phys. Rev. B 108, 064517 (2023).

[2] Y.-W. Fang\*, Đ. Dangić\*, and Ion Errea\*, Communications Materials 5, 61 (2024)

[3] T. F.T. Cerqueira, A. Sanna, Y.-W. Fang, I. Errea and M.A.L. Marques, arXiv 2403.13496 (2024).

[4] A. Sanna, T. F.T. Cerqueira, Y.-W. Fang, I. Errea, A. Ludwig and M.A.L. Marques, npj Comput Mater 10, 44 (2024)

### E06-47

#### 耦合原位表征/三维重构技术与三维相场模拟：揭示 Ni-YSZ 电极服役过程 Ni 粗化和迁移机理

杨胜兰<sup>1,2,3</sup>、张利军\*<sup>2</sup>、陈铭<sup>3</sup>、李谦<sup>1</sup>

1. 重庆大学
2. 中南大学
3. 丹麦技术大学

固体氧化物电池 (Solid Oxide Cell, SOC) 在长期运行期间的耐久性对于低成本高效的储能至关重要。镍(Ni)和氧化钇稳定氧化锆(YSZ)复合多孔金属陶瓷电极是当前应用最广泛的 SOC 燃料电极。然而, Ni-YSZ 电极在长期运行过程中会出现不同程度的退化。Ni 颗粒的粗化和迁移是导致 Ni-YSZ 电极退化的最重要因素之一。为了理解 Ni-YSZ 电极的退化行为甚至预测其寿命, 定量描述 Ni-YSZ 电极在长期运行过程中 Ni 粗化和迁移是先决条件。本研究耦合原位表征/三维重构技术与三维相场模拟, 建立了能源材料服役过程微观结构演变定量描述的科学方法, 定量模拟了固体氧化物电池 Ni-YSZ 电极服役过程中 Ni 粗化现象。基于 Ni 粗化的定量模拟所获得的可靠热物性参数, 进一步通过考虑 Ni 与 YSZ 相之间的梯度接触角, 实现了 Ni-YSZ 电极分别在固体氧化物燃料电池 (Solid Oxide Fuel Cell, SOFC) 和固体氧化物电解池 (Solid Oxide Electrolysis Cell, SOEC) 模式下 Ni 迁移现象的三维相场模拟。通过深入分析 Ni-YSZ 电极服役过程中 Ni 粗化和迁移的模拟结果, 揭示了 Ni-YSZ 电极服役过程 Ni 粗化和迁移机理。本研究为理解 Ni-YSZ 电极的退化行为和 Ni-YSZ 电极性能的优化设计提供了重要科学依据。

### E06-48

#### 基于数据、计算与 AI 的材料数智化研发实践

梁坤\*

成都材智科技有限公司

材料科学与工程是现代工业领域的关键组成部分, 它们直接影响着产品性能、可持续性和创新能力。随着材料基因组理念的践行, 以及数据科学、计算能力和人工智能技术的快速发展, 传统的材料研发模式正逐步向数字化、智能化和高效协同的数智化研发范式转变。本文从数据、计算、人工智能应用三个方面, 阐述基于材料基因组理念的材料数智化研发实践。

在数据方面, 随着高通量制备与表征技术的发展, 以及数据传输与存储技术的持续升级, 可实现新材料的快速筛选和材料数据的快速积累, 借此优化材料组分和工艺, 缩短产品开发周期。通过建立的材料数据平台, 集成实验数据、第一性原理计算数据、热力学动力学计算数据、机器学习模型预测数据等多源异构数据。通过统一的数据标准和质量控制流程, 打通了数据在计算和实验环节中的流动, 实现了数据的累积和知识的迭代共享。

在计算方面, 第一性原理、分子动力学、热力学和有限元分析等工具已经在材料设计中发挥了关键作用。随着高通量计算技术和计算机技术的发展, 建立了从原子尺度到宏观尺度的多尺度计算材料集成计算平台, 能够实现集成密度泛函理论计算、相场、热力学、分子动力学、有限元等多尺度计算、模拟软件, 一站式为材料结构、性能及过程的预测与设计提供支撑。通过高性能计算集群和工作流引擎, 提高计算资源利用效率, 大幅度提升计算速度, 加速材料应用设计过程, 并提升计算数据积累高效复用与计算知识资源共享服务。

随着 AI 技术的发展，基于机器学习的高通量计算筛选、微观机理挖掘以及智能实验设计等技术，可以用于快速分析和解释复杂的材料性能数据，发现隐藏在数据中的关联性，大幅提升了材料研发的效率。同时，随着大模型技术的发展，经过特定领域数据训练后的领域大模型也发挥出其加速作用。基于通用大语言模型，通过材料领域数据训练建立起的材料领域大模型，已经在优化实验的设计方案、文献知识挖掘、报告生成方面有了成熟操作性，加速了新材料的发现和ación。此外，通过大模型技术建立的自动化实验平台与智能优化协同算法，能够高效提升材料实验效率。

基于材料基因组理念的数据、计算与 AI 的材料数智化研发，变革材料“试错法”的研发模式，促进新材料的快速研发与应用，正在快速改变材料科学与工程的面貌，这一方法为材料研发带来巨大的速度、效率和创新性提升，并逐步在各个材料领域实现性能突破、开发周期缩短和研制成本降低。

## E06-49

### 符号回归辅助难熔高熵合金逆向设计

赵上、李金山、袁睿豪\*

西北工业大学

在过去的十年里，机器学习在新材料设计方面得到了高速发展。然而，面对高熵合金近乎无限的未知成分空间，利用机器学习对所有可能的候选材料进行正向设计的策略仍然面临困境。这刺激了逆向设计策略的发展，例如基于生成模型的对抗网络和包括遗传算法在内的启发式算法，它们可以用来生成具有给定属性的候选材料。然而，生成模型的局限性在于它们模拟现有数据的分布来进行学习，因此不能很好地探索未知空间中的新材料。相比之下，启发式算法可以通过演化过程中的随机性产生新材料，但在广阔的未知空间中往往受制于大量的局部极值。因此，高效地设计具有优异性能的新材料仍然是一项艰巨的挑战。

本工作提出了一个闭环逆向设计框架，以符号回归为导向，结合不确定性量化和启发式算法，快速优化难熔高熵合金(RHEAs)的高温屈服强度。首先，我们从文献中提取与自主实验构建了 RHEAs 在 1000 °C 下屈服强度数据集，以及由材料基本物性参数组成的初始描述符空间。利用 Pearson 相关性分析和前向序列描述符筛选策略，从 62 个基本描述符中确定了 14 个最有可能影响目标属性的关键描述符子集。之后利用符号回归技术确定了一个简单的公式，将基本描述符(熔化焓)与高温屈服强度相关联，并识别出一种尚未报道的候选合金体系(V-Ti-Mo-Nb-Zr)。通过两种启发式算法生成具有高屈服强度的候选合金，并利用不确定性感知的效用函数从中识别最有希望的合金成分进行实验验证。将实验结果反馈到初始数据集，进行迭代循环。经过 4 次迭代，我们合成了 21 种合金。相比于初始数据集，其中 12 种合金的比屈服强度得到了提升，有两个合金的性能超过了 110 MPa/(g/cm<sup>3</sup>)，比已报道的最佳 BCC RHEAs 提高~32%，并具有中等断裂应变(1000 °C时≥15%)。经过实验测试和理论计算，新合金性能的增强可归因于密度的缓慢上升和晶格畸变的快速增加。

## E06-50

### 基于自监督学习高温合金微观结构表征提升服役性能预测

廖玮杰<sup>1</sup>、袁睿豪\*<sup>1</sup>、薛祥义<sup>1</sup>、Lookman Turab<sup>2</sup>、李金山<sup>1</sup>

1. 西北工业大学

2. AiMaterials Research LLC

Inconel 625 是一种固溶强化型镍基高温合金，因其优异的高温性能广泛应用于化工、航空航天和核能等领域。Inconel 625 合金在加工过程中的热力耦合作用下呈现出复杂和不均匀的微观结构，为力学性能的调控提供了较大可能性。构建合金微观结构与性能之间的关系模型对于阐明内在机理和设计新材料至关重要

要，其关键是实现微观结构的定量表征或表示。然而，材料微观图像的复杂性和高维性使其难以利用传统的表征手段如物理特征和统计函数等进行表征，导致结构-性能关系难以构建。

最近，数据驱动的深度神经网络（DL）模型可以直接从图像中提取有用的低维信息，在材料相分割、图像生成和逆向设计等领域展现出了卓越的性能，为微观结构的表征和性能预测提供了一种新的方法和手段。事实证明，卷积神经网络（CNN）等 DL 算法在可用数据量充足的模拟材料图像上非常有用。然而，在面对小而复杂的微观结构数据集时，基于标签训练的有监督 CNN 模型往往难以捕捉到完整的图像信息，在性能预测时常出现过拟合的现象。因此，我们提出了一种自监督预训练方法，用于改进微观结构表征和性能预测。该方法有别于以往的预训练策略，后者普遍侧重于使用现有的大型源数据库（如 ImageNet），但由于忽略了源数据与目标数据之间的相关性，因此并不一定能提供改进的目标模型。此外，大型数据库训练的模型往往更加复杂、成本高昂且难以理解。

我们的方法由用于微结构表征的自监督变分自动编码器（VAE）和用于性能预测的随机森林模型组成。仅在 25 张 Inconel 625 合金的电子背散射衍射（EBSD）图像上就完成了 VAE 模型的有效训练，获得了一个稳健、轻量级和可解释的模型。训练后的 VAE 模型能够从微观结构图像中提取出信息更全面的低维特征变量，并通过迁移学习实现了合金屈服强度的准确预测，对比传统表征方法具有更好的泛化性能，在测试集上的决定系数（ $R^2$ ）从 0.35 提升到了 0.74。并且，结合可解释算法，本研究可视化的揭示了 VAE 提取的低维变量的不同维度能够表示微观图像中不同取向晶粒的特定区域。并且，低维变量的方差平均晶粒尺寸呈明显的线性关系，与屈服强度呈幂函数关系，符合霍尔-佩奇定律。此外，通过异常检测算法对比了高性能和低性能合金的微观结构差异，发现了图像中的小晶粒区域是影响 Inconel 625 合金拉伸性能的关键区域，为材料设计提供了指导。

## E06-51

### 基于 CALPHAD 方法的 2507 双相不锈钢 $\sigma$ 相析出过程模拟研究

程挺<sup>1</sup>、杨丽\*<sup>1</sup>、陈兴润<sup>2</sup>、魏海霞<sup>2</sup>

1. 中国钢研科技集团有限公司 数字化研发中心
2. 酒钢集团宏兴钢铁股份有限公司

2507 双相不锈钢在连铸、堆垛以及后续热处理过程中，存在析出  $\sigma$  相的可能。 $\sigma$  相的存在极大增加了 2507 双相不锈钢板坯在修磨过程中出现脆断的风险。因此，如何控制并减少 2507 双相不锈钢在连铸、堆垛及热处理过程中的  $\sigma$  相析出，具有显著的实际意义。基于 CALPHAD 方法，论文首先发展了一种面向连铸—堆垛—热处理全流程应用场景的 2507 双相不锈钢  $\sigma$  相析出的扩散动力学模拟策略。基于该模拟策略，对 2507 双相不锈钢在连铸、堆垛以及热处理三个阶段  $\sigma$  相析出的可能性以及析出量，进行了预测和分析。模拟结果与实验结果取得了良好的一致，充分证明了当前发展的扩散动力学模拟策略的可靠性。在此基础上，进一步探究了合金成分以及冷却速率因素，对 2507 双相不锈钢在连铸—堆垛—热处理三个阶段  $\sigma$  相析出的影响规律。相关工作可为后续 2507 双相不锈钢成分及工艺的优化提供理论指导和技术支撑。

## E06-52

### 基于自然语言处理的钛合金设计

王萍、袁睿豪\*、李金山  
西北工业大学

钛合金因其优异的综合力学性能广泛用于航空航天、生物医疗等各个领域。由于钛合金化元素种类和比例对性能影响显著，使得合金成分组成空间巨大。传统试验方法耗时长、成本高，通常无法涵盖大规模

的成分空间。机器学习可以基于大量数据对候选合金进行性能评估从而实现高效筛选，但合金设计领域的机器学习方法几乎依赖手动描述符构建，例如合金成分、元素性质、微观结构状态以及加工测试条件等。这类描述符通常带有主观性和数据依赖性，且无法代表元素间相互作用。长期以来大量科学文献中蕴含着丰富的潜在知识和专家经验难以被机器直接理解。近两年自然语言处理方法在材料科学问题上被逐渐开发，这种自动的信息提取方法将非结构化的文本数据处理成高维向量进行端到端的表示学习，可以从原始数据中自动提取最相关的特征或特征表示、适应不同的任务和数据分布，这意味着可以使用相同的模型架构和特征学习过程来解决不同的钛合金设计问题，提升性能预测精度具备更好的泛化能力。

本研究旨在利用自然语言处理方法基于大量的非结构化无标签数据学习潜在钛合金设计知识，输出合金的特征表达嵌入；基于特征嵌入同步预测合金各项力学性能（抗拉强度、屈服强度、延伸率等），搜索合金组成空间以求得最佳性能匹配。采用 Transformer 基本架构在大数据集上训练一个具有强泛化能力的预训练模型，之后在下游任务上进行微调。不仅可以适用于不同的下游任务，还可以通过注意力机制提升模型可解释性，从而定向指导钛合金设计。

研究流程具体分为四部分，数据收集包括文本数据和数值型数据，文本数据经过一系列处理为语言模型可用；上游模型即语言模型经预训练用于对钛合金成分的重新表示；经嵌入表达后的合金成分描述符训练多个下游回归模型预测三种力学性能；最后基于语言模型对预测结果进行可解释性分析。研究思路核心是利用自监督学习的预训练模型，对成分进行高密度的信息表示。

上游模型训练过程中 MLM 和 NSP 任务的总 Loss 值随训练进行不断降低代表了语言模型不断优化的过程；验证损失不断降低且准确性不断提升，证明预训练模型的泛化能力在持续提高。由训练完毕的 Transformer 为所有样本生成的特征表达嵌入维度为 768，利用遗传算法进行搜索优化将维度控制在 19。结果表明针对相同的目标性能，随遗传代数增加不同下游模型的最高适应度个体不断被刷新，所有下游模型性能都在持续提高直至收敛到了最优个体。由于初始种群个体数设置较高，所有模型在第一代就能达到比较好的适应度。

从三种目标性能下无预训练和有预训练的 R2 指标对比情况来看，每种目标性能考虑六种常见的机器学习模型作为下游的回归头。可以看到使用合金特征表达嵌入之后大部分下游模型的泛化能力不同程度的提高，说明这种嵌入策略能够适应不同下游任务，可以一定程度上解决不同目标分布差异性对结果造成的影响。结果表明利用基于遗传算法优化后的合金特征表达嵌入向量替代未经预训练的原始成分-含量表达，令不同预测目标下的下游模型性能均得到了提升。证明了 Transformer 模型利用非结构化数据自动构建描述符的通用性。

## E06-53

### 图与超图及其在分子表示学习上的应用

钱权\*

上海大学

图与超图以其对非欧氏结构数据的强大处理能力，可运用于复杂材料数据的建模。本报告将基于深度学习视角下的图与超图机器学习的基本概念和原理，并将其应用于分子表征与分子间交互关系学习中。首先，我们提出了一种名为 IE-HGNN (Internal-External Bi-view Hypergraph Neural Network) 的双视图超图深度学习方法，以超图的方式建模分子，采用内外部双视图机制提取分子图表示，并预测分子对之间的交互作用。其中，双视图中的内部视图更新通过超图卷积神经网络在分子配对图的高阶连接中聚合信息并更新特征。而外部视图更新则通过交叉注意力机制整合配对分子之间的外部交互。通过迭代更新内外双视图，增强了模型表达分子间交互的能力。最后，采用分层池化读出机制保留每次更新后图的全局表示用于最后的预测任务。此外，我们进一步将对对比学习策略应用于分子关系的研究中，从大量无标签分子数据中基于对比图深度学习得到一个良好的图特征提取器，并将其用于下游任务中的分子材料性能抽取与预测，进一步增强了图神经网络在分子表示学习以及相关材料性能预测中的预测精度。

## E06-54

## 共聚高分子的图神经网络表示

陈力栋、陈水洲、钱权、谢玮\*

上海大学

合成高分子前通过机器学习模型预筛选预期性能优异的候选可以极大加速新型高分子的发现。将高分子重要特征表示学习为合适的描述符对下游机器学习模型性能影响极大，但此前高分子表示学习大多专注于线性均聚物但对共聚物涉及不多，表示学习时未充分考虑共聚单体类型和比例、共聚方式以及聚合度等重要化学信息，所得描述符在下游任务中表现不佳。针对上述问题我们设计实现了高分子图同构网络 polyGIN，并引入注意力机制用数据驱动方式学习不同类型和比例共聚单体和共聚方式（交替、嵌段和无规）。通过在多个主流均聚物和共聚物数据集测试发现，polyGIN 表示学习所得描述符在下游性质预测任务上性能相较于此前代表模型 polyGNN（佐治亚理工学院 Ramprasad 课题组）和 d-MPNN（麻省理工学院 Coley 课题组）均得到大幅提高，甚至超过了引入专家知识手工给定单体间“概率边”增强的 wd-MPNN。分析发现 polyGIN 结合注意力机制学到的各原子注意力得分很好吻合不同单体和共聚方式对应单体间键合的化学预期是表征能力大幅提高的关键。本研究提出的图神经网络表示方法为数据驱动共聚高分子性质预测提供了新的思路，可望加速新型高分子设计和发现。

## E06-55

## 数据和模型的不确定性在主动学习中的影响作用研究

李亚豪、姜尔睿、叶益聪\*

国防科技大学

基于不确定性的主动学习策略在材料小数据研究中展现出了较大的优越性。针对主动学习策略，基于一个硬度数据集，本研究分别考虑了机器学习模型不确定性和数据不确定性的对主动学习循环寻找最佳样本所需迭代次数的影响。其中在模型不确定性中，采用 SVR 模型和非参数重采样法来计算不确定度，对比了预测值策略、排名策略和 EI 三种查询函数。其中采用排名策略的主动学习模型所需的平均迭代次数最少（1.75 次）。在数据不确定性中，我们分别采用考虑观测值不确定性的高斯过程模型和考虑数据集不确定性的噪声样本来比较主动学习迭代次数，结果表明将观测值的不确定性纳入了考虑后，三种策略在最佳权重的主动学习迭代次数结果非常相近（EI 1.22 次、预测值策略 1.21 次、排名策略 1.18 次），达到了较高的一个水平。而将噪声样本融入原始样本后的增强数据集后会严重恶化主动学习推荐效率。根据上述研究结论，基于一个包含 128 条饱和磁化强度 ( $M_s$ ) 的磁性合金数据集，采用高斯过程模型 (GPR) 作为代理模型，采用期望提升 (EI) 作为查询函数，开展主动学习优化循环迭代工作。仅通过两轮迭代，在包含 110198 种成分空间中总计推荐合成了 6 组合金，发现了比数据集中已知  $M_s$  最大的 Fe<sub>65</sub>Co<sub>35</sub> (218 emu/g) 性能更优的 2 种新成分合金：Fe<sub>80</sub>Co<sub>14</sub>Ni<sub>5</sub>Si<sub>1</sub> (218.49 emu/g) 和 Fe<sub>70</sub>Co<sub>25</sub>Ni<sub>4</sub>Si<sub>1</sub> (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。

## E06-56

## 可解释机器学习在材料构效关系研究中的应用

熊杰\*、吕涛、魏亮、张统一

上海大学

可解释机器学习因其可提供透明和可理解的机器学习模型而备受材料科学研究人员的关注，线性模型和符号回归等基于规则的“白箱”模型能够以数学公式的形式展示输入特征与输出性能之间的关系，帮助研究人员寻找材料性能具有关键影响的因素，并直观地理解不同因素对材料性能的影响。此外，SHAP 值等模型解释方法，能够提取不同特征对预测结果的贡献与影响，将复杂的“黑箱”机器学习模型“灰度化”。

选取并应用合适的可解释机器学习方法，能够帮助研究人员理解不同因素如何单独或协同作用，以影响材料的相关性能，并进一步揭示复杂材料体系中的潜在机制和物理规律。可解释机器学习方法，能够为材料构效关系研究提供了强大的工具，在研究中提供有价值的洞见。同时，还能为材料科学的理论研究提供了新的视角，指导实验设计和新材料开发，并加速新材料的发现和应用过程。

## E06-57

### 大数据与机器学习赋能钢铁材料质量提升

王炫东\*<sup>2</sup>、张荣宝<sup>1</sup>

1. 北京钢研新材料科技有限公司
2. 中国钢研科技集团有限公司

**摘要：**在材料生产过程中，决定产品性能的参数分为两类：原材料参数（如化学成分、尺寸公差、冶金质量等）和加工工艺参数（如变形、热处理、焊接等）。材料科学研究的主要内容之一是研究这些参数之间的相关性，以发现新材料和优化现有材料。传统制造业的质量控制依赖于工艺规范和检验，包括设定原材料的合格阈值、设定制造的工艺窗口、对产品进行质量检验等。尽管如此，“合格”的原材料参数与“合格”的制造加工参数的不匹配，可能导致产品性能波动，最终导致产品质量不稳定或不合格。所谓“窄窗口”控制常被应用于解决产品质量波动的问题，但势必会增加生产成本。基于机器学习的材料数据分析是近年来的一个重要研究领域，正受到越来越多的关注。机器学习算法凭借其强大的非线性数学拟合能力，可以建立材料成分-工艺-性能之间的联系。

针对原材料参数与工艺参数不匹配造成的质量波动问题，本工作将机器学习算法与专家经验相结合，提出了用于工艺优化的质量滤波模型。当前工艺优化过程中，逆向寻优过程大都是纯粹的数学过程，生产过程中宝贵的参数选择专家经验并没有得到有效利用。而且在不设定合理工艺区间的情况下，优化结果可能违背实际的生产条件。本工作中提出的质量滤波模型以产品性能预测模型作为代理模型，融合专家经验和工艺窗口约束以构建损失函数。在给定原材料参数时，可以自动匹配合适的工艺参数，以稳定产品质量，提高产品整体性能。

采用包含 128 各样本的某钢厂风电用钢试生产数据集作为验证案例以对模型进行测试。对数据集初步分析可发现以成分为代表的原材料参数和轧制工艺参数均在一定范围内波动，并最终导致其屈服强度 (ReL) 与冲击功 (AKv-20°C) 分别在上下差 80MPa 与 147J 的范围内波动。

选择分类准确率为 82.81% 的椭圆判别分析模型作为性能预测的模型，给出了具有高度可解释性的可视化结果。工艺优化结果表明，对于同一组原材料参数，通过对冲调整工艺参数，能使产品的 ReL 和 AKv-20°C 分别提高 15-60MPa 和 30-40J。两种样本均达到或接近达到了 ReL $\geq$ 380MPa 和 AKv-20°C $\geq$ 190J 的优化目标。

## E06-58

### 智能化烯碳纤维制备平台：AI for Fiber

李梦蝶、罗家俊、赵博轩、莫凡洋、焦琨、张锦\*  
北京大学

芳纶纤维作为世界三大高性能纤维之一，在航空航天、国防军工等领域发挥重要作用。随着技术的飞速发展，各领域对纤维性能的需求也在不断攀升。石墨烯和碳纳米管等烯碳材料作为增强剂，显著提升了芳纶纤维的力学性能，并赋予了其独特的电、热等功能特性。当前，如何充分发挥烯碳材料的本征性质，以制备出超高性能的烯碳/杂环芳纶复合纤维，已成为迫切需要解决的问题。

烯碳/杂环芳纶复合纤维制备流程复杂，涉及变量多，人为操作引入大量不确定性因素，严重阻碍了复合纤维构效关系的建立和性能的精准调控。传统人工试错方法效率低，资源浪费严重。人工智能和数据科学的迅猛发展，正在加速新材料的发现与性能优化，从而深刻变革了材料科学的研究范式。

本研究采用了智能化实验平台与机器学习相结合的方法，建立全球首套 AI 赋能的自动化纤维制备平台——AI for Fiber。AI for Fiber 平台搭载了符合自动化行业标准的智能控制系统，创新性地融入机器学习技术，实现从配方工艺生成式设计到自动化任务下发、触发设备执行、数据实时回传存储的闭环 workflow。所有相关数据均被纳入 AI for Fiber 数据库，为后续研究提供了有力的数据支持。AI for Fiber 硬件平台集成了全自动化粉末称量溶液配制模块、聚合反应脱泡模块、连续化湿法纺丝模块及纤维在线表征模块，实现烯碳/芳纶复合纤维 7×24 小时全自动连续化制备，极大地提升了纤维制备效率及准确性。

通过机器学习技术，深入挖掘了数据库中复合纤维制备参数、结构与性能之间的内禀关系，建立复合纤维制备参数-结构-性能的定量关系，从而阐明烯碳/杂环芳纶复合纤维从微观到宏观的多尺度构效关系及性能传递规律，并指导制备超高性能复合纤维。AI for Fiber 平台也将进一步推动纤维材料研发与生产向智能化、自动化和信息化方向迈进，为材料科学领域带来革命性变革。

## E06-59

### 新型二维催化剂材料的智能设计

冉念\*

中国科学院上海硅酸盐研究所

电解水是大规模制氢技术中经济且可持续的制氢技术之一，设计和开发储量丰富、廉价的非贵金属析氢（HER）和析氧（OER）催化剂是电解水制氢技术的关键。汇报人针对新型催化剂材料候选空间大，原子特性、局域结构、组分与活性之间的构效关系不清楚等问题，开展了相关研究工作：（1）提出高 OER 活性 MoS<sub>2</sub> 电催化剂的结构设计新策略[1]，设计了碱性条件下高 HER 活性的 Pt-NiCoP 界面结构[4]；（2）基于高通量计算提出 VIB 二维 TMDs 催化剂的键电负性结构设计描述符[3]；（3）采用机器学习方法，提出金属相 TMDs 催化剂的结构设计描述符[2]；（4）开发了层状氢氧化物垂直领域大模型。

#### 参考文献

- [1] Ran N., Song E. H., Wang Y. W., et al., *Energy Environ. Sci.*, 2022, 15(5), 2071–2083.
- [2] Ran N., Sun B., Qiu W. J., et al., *J. Phys. Chem. Lett.*, 2021, 12(8): 2102-2111.
- [3] Ran N., Qiu W. J., Song E. H., et al., *Chem. Mater.*, 2020, 32(3): 1224-1234.
- [4] Liu J. H., Ran N.\*, Zhou W.\*, et al., *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2024, e202401819.

## E06-60

### 二维扩散数值反演法高通量获取三元系互扩散系数

尚根峰、鲁晓刚\*

上海大学材料科学与工程学院

互扩散系数是合金体系的重要性质之一，当前三元系单相中互扩散系数的获取主要通过数学解析法和

一维扩散数值反演法耦合 CALPHAD 方法来实现, 效率低下。本课题组基于现有 DICTRA 理论框架, 结合单相扩散多元节实验开发了二维扩散数值反演法, 通过拟合三元系单相扩散多元节在二维扩散区域中成分分布的计算值和实验值, 实现了二维成分范围中互扩散系数的高通量提取。这一方法的提出, 在互扩散系数的获取量上实现了从点、线到面的飞跃, 同时可高通量获取目标体系中各组元的原子迁移率参数。此外, 本课题组在 Al-Cu-Ni、Co-Ni-Ta、Ni-Cu-Fe、Ni-Al-Ta 和 Co-Al-Ta 等体系的最新研究中, 进一步结合二维扩散数值反演法在不同类别扩散多元节样品中的应用, 以及在同类扩散多元节但不同界面状态(原始界面弯曲、不规则或不对称)样品中的应用, 进一步调整和改进了该方法, 提高了其普适性和通用性, 降低了二维扩散实验的难度。

## E06-61

### Mn 元素对 Q690DR 钢微观组织及抗氢性能的影响研究

杨依霖\*<sup>1,2</sup>、杨才福<sup>1</sup>、杨丽<sup>2</sup>、程挺<sup>2</sup>

1. 钢铁研究总院有限公司工程用钢研究院
2. 中国钢研科技集团有限公司 数字化研发中心

摘要: 随着我国在氢能行业的快速布局, 大型氢储运装备及配套技术成为重要的发展方向之一。前期借助第一性原理计算+热力学计算+有限元的多尺度计算方法, 并结合实验室试制和工业试制, 开发了具备良好的强韧匹配性、焊接性能和抗氢性能的 Q690DR 低合金高强钢, 可满足百立方米级大型氢储罐材料性能要求。为了进一步确认不同合金元素、相含量对于材料抗氢性能的影响。基于第一性原理计算方法, 计算了不同合金元素对 Q690DR 钢氢结合能和氢扩散性质的影响, 结果表明 Mn 掺杂会降低氢结合能并导致更多的氢原子积累, 增加钢的氢脆敏感性。为了证明该结论, 通过试验试制含 Mn 的 Q690DR 以及无 Mn 的 Q690DR 两种材料, 并结合材料表征技术, 系统性评定了含 Mn-Q690DR 以及无 Mn-Q690DR 两种材料在微观组织上的差异, 包括相类型、相含量以及晶粒尺寸等信息, 并与热力学计算结果进行了对比。此外, 通过慢应变速率拉伸测试, 对含 Mn-Q690DR 以及无 Mn-Q690DR 两种材料氢致强度下降以及氢致塑性损失两项指标进行了测试和对比分析。结果表明, 与含 Mn-Q690DR 相比, 无 Mn-Q690 在保证优良强韧性能的同时, 具有更加优异的抗氢能力, 与第一性原理计算结果得到了相互印证。

## E06-62

### 高耐磨高强韧硬质材料的集成设计与构效关系研究

张伟彬\*<sup>1</sup>、杜勇<sup>2</sup>

1. 山东大学
2. 中南大学

硬质材料具有高强度、高耐磨性、高抗冲击韧性和热稳定性等优良特性, 是地矿开采、装备制造、电子信息及机械加工等领域健康发展的保障。本报告针对传统硬质材料耐磨性和强韧性难协同、传统试错法研制周期长等问题, 采用材料基因工程思想与技术, 基于科学数据库、跨尺度材料计算、高通量实验和机器学习等集成设计方法, 通过结构梯度化、粘结相强化、硬质相调控等微结构设计策略实现了硬质材料耐磨性和强韧性的协同提升并揭示了其内在机理。

## E06-63

**DFT 计算下电解质中离子是否总是整数电荷?**

孙升\*、刘明庆、张统一

上海大学

传统的理论认为,当电极电位上升时,金属表面的溶质原子会溶解并转化为整数电荷的离子,这一点早已被科学界所接受。然而,基于概率性的电子分布描述的密度泛函理论(DFT),能否预测溶解离子的整数电荷状态呢?我们的研究采用第一性原理与连续介质耦合的计算方法,对22种不同金属元素在一系列变化的电极电位下的溶解和沉积过程进行了深入探索。研究结果揭示了三种针对各种金属的不同溶解模型,为理解这一复杂现象提供了全新的视角。具体来说,一些金属原子的溶解符合经典理论,溶质原子经历整数价态转变后展现出整数电荷状态;而在另一种情况下,尽管最终达到整数值的电荷状态,但在溶解过程中其电荷变化呈现出非整数特性;最后,我们观察到了溶质原子具有非整数电荷状态的现象,这与传统理解相悖。此外,本研究提出了一套理论准则,用于在特定电位下确定电极溶解时离子价态模型分类。本工作对传统的离子溶解电荷认识提出一个有争议的问题,对结果的进一步研究和探讨将深化对离子电荷状态的理解。

**E06-64****高精度机器学习势函数训练集的建立及其热输运性质应用**

杨炯\*

上海大学

近年来发展的机器学习原子间势兼具经验势的速度和第一性原理的精度。在热电领域,机器学习原子间势可被用于解决复杂材料的晶格热导率,或高通量计算的基础上,得到热输运的系统性规律。前期基于矩张量势(MTP),发展了双重自适应采样(DAS)方法,结合非平衡分子动力学成功解决了快离子导体Cu<sub>2</sub>Se相的热导率模拟。近期,基于课题组MatHub-3d数据库中130个半哈斯勒体系,利用DAS-MTP方法构建了这些体系的势函数训练集HH130,同时定义了机器学习势的共享信息标准。HH130包含了53种元素,30000+结构构型,17M的原子受力信息等。基于HH130训练的机器学习势函数模型可用于半哈斯勒体系固溶体的热导率模拟,以及高精度的4声子相关计算。这些结果均接近第一性原理的计算精度。

**E06-65****基于扩散多元节的合金成分-关系的高通量实验方法和途径**

江亮

烟台大学

材料基因组工程(MGE)促进了高通量实验、集成计算材料工程和大数据方法与工具的开发和应用。围绕合金结构材料的独特重要性和特点,发展了基于扩散多元节的MGE高通量实验方法和工具,以高效建立复杂的合金成分-相-微结构关系。重点介绍基于扩散多元节的高通量实验方法和途径,包括生成成分分布、自动化表征和测试,大数据分析。针对高温合金研发实践中成分-关系和的典型问题,集成高通量实验、计算和机器学习等新方法和新工具加速高温合金的研发的途径。

**E06-66**

## 自动化固相合成单相材料研究

安唐林

合肥科晶材料技术有限公司

传统固相烧结如陶瓷靶材制作流程，称量-混料-焙烧-XRD 分析，在我们靶材制备和晶体生长二十多年的生产实践中发现，材料单一成相靶材对于单一组分薄膜制备以及得到完整不开裂的大单晶至关重要，对于多组分材料合成，在焙烧后增加压制、破碎后再烧结，多次循环后得到单相材料，我们的工作是利用合肥科晶自主开发的智能化自动化固相烧结一套设备实现高效率无人操作来合成氧化物材料，用于陶瓷靶材制备和单晶原料合成。

### 墙报

#### E06-P01

### 基于可解释性机器学习预测铁基非晶合金的磁热性能

刘城城、苏航\*

中国钢研科技集团有限公司

等温磁焓变(-SM)作为表征非晶合金磁热性能的重要参数，如何进行精确的预测是关注的重点。本文通过机器学习建立-SM 的预测模型，对比四种机器学习算法，etr 算法有着最好的表现(测试集: R2=0.90, MAPE=13.31%)。通过 PCC 和 RFE 进行特征选择，剔除无用特征，得到 7 个特征最佳子集，对应的特征为  $M_f$ 、 $\delta r$ 、 $\Delta H$ 、 $T_m$ 、 $\Delta T_m$ 、 $E_c$  和  $\Delta S$ 。之后引入 SHAP 对预测模型进行可解释性分析，得到特征的重要性排序以及临界特征值。又根据建立的预测模型，以 FeZrB 体系为例，提出新合金的设计策略，为合金设计提供一定的指导。最后加入其他体系非晶合金，验证了模型的泛化能力，提出机器学习在非晶合金领域应用的发展方向。

#### E06-P02

### 利用模拟计算与自动化实验系统加速锂电池电解液性能优化研究

韩致远\*

香港科技大学(广州)

在高性能锂电池的研发过程中，不计其数的电解液配方和复杂的实验测试流程，给研究工作带来了诸多挑战。传统的以人工为主的研发方法，难以直接判断配方的优劣，同时受到较低实验通量和操作稳定性的制约，造成了研发进展缓慢、数据可靠性低和人力物力成本较高等问题。因此引入模拟计算和自动化实验设备将从根源上解决上述问题，把模拟计算与高通量实验设备结合，能够显著缩短配方的优化周期，获取高质量的实验数据，充分节约科研资源。本研究利用第一性原理计算对电解液各组分进行仿真计算，对不同配方进行初步的分析和筛选，有效缩小了潜在优质配方的范围。在这个过程中，还引入了锂电池专家知识和既往数据作为指导，以此提高模拟的准确性和科学性。筛选后的配方会被导入自动实验系统，该系统相比人工操作大幅提升了效率和精度，从每小时处理约 10 粒提升至约 100 粒，同时还显著减少了因手动操作误差导致的数据失效。操作和测试结果全程可追溯，确保能对大量配方进行高效且高质量的验证。模拟计算和自动化实验设备的组合，在电解液的研发测试方面展现出巨大的应用潜力，解决了人工操作费时费力且精度较低的问题，能够以其高通量、高灵活性和连续稳定工作的特点，充分解放科研生产力，加速电解液材料的迭代和发展。下一步的工作将聚焦于进一步提升效率和通量，目标将组装速度提升至每小时约 200 粒，还将尝试通过扩展组件进行多批次供料来提高通量，减少人工干预，将自主运行时间延长三至五倍。此外还将强化通用性设计，完善各单元的封装，增强扩展和适应能力，为日后迁移应用于比如钠

电池或其他材料系统奠定良好的基础。

### E06-P03

#### 分而治之:机器学习加速高强高韧无铅焊料合金设计

魏清华<sup>1</sup>、曹斌<sup>2</sup>、元皓<sup>1</sup>、董自强<sup>1</sup>、张统一\*<sup>1,2</sup>

1. 上海大学
2. 香港科技大学(广州)

实现高强度和高韧性一直是结构材料的设计目标之一，因为这两种性能通常是互相竞争的，称为强度-韧性权衡。如今，数据驱动范式与专业领域知识相结合，成为了研究、设计和发现同时具有高强度和高韧性结构材料的新策略。本研究首先提出了以抗拉强度和断裂延伸率之积为一联合特征，提升该联合特征就同时提高了抗拉强度和断裂延伸率；然后采用“分而治之”的策略来解决材料实验数据的样品尺寸小、实验数据噪音大和设计空间巨大的问题。本研究开发了一种新的数据预处理算法，命名为高斯过程回归树分类器 (Tree-Classifier for Gaussian Process Regression, TCGPR)，从而将原始无铅锡基焊料数据集划分为三个子集，搜索空间也相应分为三个子空间，并采用三个机器学习模型分别完成对三个子空间的学习任务，从而显著提高了预测精度和模型泛化能力。随后，应用贝叶斯全局优化，在有实验误差和预报误差、平衡信息多区域和信息少区域的情况下，设计了下一步实验。实验结果验证了机器学习模型的预测，并开发出了一系列具有高抗拉强度和高断裂延伸率的新型无铅锡基焊料合金。此外，我们还结合多种材料表征技术探讨了这些新型无铅锡基焊料合金的高强度和韧性机制。

### E06-P04

#### 不确定性量化方法对主动学习加速材料设计的影响

兰子硕<sup>1</sup>、薛德祯<sup>2</sup>、王锦程\*<sup>1</sup>

1. 西北工业大学
2. 西安交通大学

在材料科学领域，通过考虑模型预测不确定性来平衡开发和探索的主动学习策略被广泛应用于加速新材料的搜索和发现。不确定性量化在主动学习中扮演关键角色，由于大多数机器学习模型通常无法提供预测不确定性，基于重采样的 bootstrap 方法作为一种替代方案被广泛用于不确定性量化。然而，在小样本数据下，bootstrap 方法对不确定性的估计存在偏差，其原因尚未被充分阐明。本研究发现在小样本数据集下，bootstrap 不确定性量化方法的偏差主要来源于对峰值样本附近预测不确定性的过高估计，并阐明了造成这一现象的原因。进一步研究了不确定性量化方法对主动学习采样行为及优化效率的影响，并最终提出了用于材料性能优化设计的主动学习策略的不确定性量化方法的选择准则。

### E06-P05

#### MLMD: a programming-free AI platform to predict and design materials

Jiaxuan Ma\*  
Shanghai University

Accelerating the discovery of advanced materials is crucial for modern industries, aerospace, biomedicine, and energy. Nevertheless, only a small fraction of materials are currently under experimental investigation within

the vast chemical space. Materials scientists are plagued by time-consuming and labor-intensive experiments due to lacking efficient material discovery strategies. Artificial intelligence (AI) has emerged as a promising instrument to bridge this gap. Although numerous AI toolkits or platforms for material science have been developed, they suffer from many shortcomings. These include primarily focusing on material property prediction and being unfriendly to material scientists lacking programming experience, especially performing poorly with limited data. Here, we developed MLMD, an AI platform for materials design. It is capable of effectively discovering novel materials with high-potential advanced properties end-to-end, utilizing model inference, surrogate optimization, and even working in situations of data scarcity based on active learning. Additionally, it integrates data analysis, descriptor refactoring, hyper-parameters auto-optimizing, and properties prediction. It also provides a web-based friendly interface without need programming and can be used anywhere, anytime. MLMD is dedicated to the integration of material experiment/computation and design, and accelerate the new material discovery with desired one or multiple properties. It demonstrates the strong power to direct experiments on various materials (perovskites, steel, high-entropy alloy, etc). MLMD will be an essential tool for materials scientists and facilitate the advancement of materials informatics.

## E06-P06

### 大型语言模型实现表面化学合成文献挖掘

向娟、何宇、孙强\*

上海大学

随着人工智能技术的迅猛发展，计算机科学与化学学科的融合受到人们的日益关注。自然语言处理（NLP）在此过程中扮演着关键角色，特别是帮助研究人员准确理解并有效地利用大量学术论文中的科学知识进行深入研究。近年来，在材料科学的文本处理方面，通过自然语言处理算法的应用，研究人员已经取得了显著进展，成功构建了材料科学知识体系。[1-4] 此外，大型语言模型（LLMs）的出现[5]可以实现复杂数据的精确提取。预训练的会话式 LLMs，特别是其 Zero-Shot 学习功能，展示了如何在几乎无需额外训练的情况下改进信息提取方法。由于微调或重新训练这些模型通常需要大量的资源和时间[6,7]，预训练模型为资源受限的研究提供了一种可行解决方案。

在这样的技术背景下，本地大语言模型提供了一种灵活且独立于互联网的解决方案，并且提高了数据保密性。本研究希望在表面化学合成领域应用通用化、轻量级的本地大语言模型，实现在表面合成领域文本自动提取以获取结构化数据。我们设计了一系列处理流程与 Prompt Engineering 相结合的方法，从而高效、全面地从各种复杂的科学文献中自动提取表面化学合成反应的重要信息。我们的系统能自动完成解析、搜索、筛选、摘要及分类等多个步骤，有效地从同行评审的研究文章中提取了约 300 个表面合成实体(OSS) 的超过 2546 个合成参数。这不仅显著提升了数据处理的效率，也增强了信息的准确性。我们的研究成果表明，在结合 Prompt Engineering 策略进行文本挖掘时，本地大语言模型能够有效识别和提取化学实体，并实现了超过 80% 的 F1 分数。本研究展示了本地大型语言模型辅助方法在表面化学合成及化学学科领域的潜力与价值，为特定学科和领域应大语言模型提供了新思路。

#### 参考文献

- [1] Kononova, O.; He, T., Huo, H., Trewartha, A., Ceder, G. *iScience*, 2021, 24: 102155.
- [2] Wilary, D. M., and Cole J. M. *J. Chem. Inf. Model.*, 2023, 63: 6053-6067.
- [3] Wang, W., Jiang, X., Tian, S., Liu, P., Su, Y., et al. *npj Comput. Mater.*, 2023, 9: 183.
- [4] Mavračić, J., Court, C. J., Isazawa, T., Elliott, S. R., Cole, J. M. *J. Chem. Inf. Model.*, 2021, 61, 4280–4289.
- [5] Zhang S., Roller S., Goyal N., Artetxe M., Chen M., Chen S., Dewan C., Diab M., Li X., Lin X. V.,

Mihaylov T., Ott M., Shleifer S., Shuster K., Simig D., Koura P. S., Sridhar A., Wang T., Zettlemoyer L., <https://arxiv.org/abs/2205.01068>.

[6] Dagdelen J., Dunn A., Lee S., Walker N., Rosen A.S., Ceder G., Persson K. A., Jain A., Nat. Commun, 2024, 15: 1418.

[7] Polak M, P., Modi S., Latosinska A., Zhang J., Wang C. W., Wang S., Hazra A. D., Morgan D., <https://arxiv.org/abs/2302.04914>.

## E06-P07

### 基于双材料面投影微立体光刻的高通量异质界面自主表征系统

谭铃川、支瀚漳、崔华晨\*

香港科技大学（广州）

多材料增材制造是增材制造的热点方向之一，在半导体封装、航空航天和汽车制造领域有着众多应用。不同材料的组合和比例、异质界面性能等参数制约了增材制造在应用中的表现，大量材料参数、异质界面参数亟待优化。目前，这些参数的优化主要依赖于人工实验，但是随着参数规模的扩大，因为不可避免的问题，人工实验的方法不再适用。这些问题包括实验耗时长、实验稳定性较低、多次重复实验不可避免人为误差、严苛实验环境下人工操作需要复杂的实验准备等等。虽然现有多材料增材制造系统试图解决以上问题，但是这些系统只能完成部分打印的自动化步骤，全流程的打印参数的自主优化仍具有很大的挑战性。我们团队以双材料面投影微立体光刻打印技术为例，设计了一种自动实现双材料打印和材料接合面表征的自主系统。相比于人工操作，这套系统可以应用于高通量的自动化增材制造材料参数调试和异质界面参数调试实验，可以高效完成各种实验操作和海量的数据处理等任务，极大缩短了多材料增材制造调试时间。团队针对该系统特别设计了自主双材料打印机，助力整套系统完成高通量实验的自动化操作。可以自主获取的实验数据包括不同材料的接合面图像、力学拉伸实验处理后的断面图像、以及力学拉伸实验的应力-应变曲线。能够通过对材料结合界面的图像分析和力学测试结果的对比，实现最优参数的探索，包括最佳的打印材料种类和材料浓度、曝光时间、清洗时间、打印层厚等参数。该系统可以为多材料增材制造领域提供更快更稳定可追溯的打印参数及异质界面测试结果，助力增材制造技术的发展。

## E06-P08

### 一种新颖的基于深度学习的锂电池剩余循环容量预测方法

胡一鸣、施荣沛\*、刘兴军

哈尔滨工业大学（深圳）

锂离子电池是如今使用最多的移动储能材料之一，然而其固有的安全性和可靠性问题始终影响着锂离子电池的进一步发展。近些年来，随着机器学习技术的蓬勃发展，已经有许多机器学习方法被应用在电池管理系统中以对锂电池的循环寿命进行预测。本文通过使用一种新颖的深度学习方法，对图像化处理的电池放电信号进行学习及预测。结果证明，这种方法具有较高的精度，并且需要较少的数据。

## E06-P09

### 高熵合金/石墨烯纳米复合材料力学性能的机器学习预测

吴青青、高廷红\*、刘贵阳、马永

贵州大学

近年来, 实验和模拟中均证明了在高熵合金(HEAs)中添加石墨烯(Gr)可以赋予合金更高的强度和塑性。然而, 由于 Gr 的特殊结构和组成的复杂性, 在实验过程中很难确定各种因素对其力学性能的影响。通过实验和模拟研究不同模拟条件下高熵合金和石墨烯复合材料(HEA/Gr)的力学性能(杨氏模量、屈服强度和韧性), 不仅原材料成本高, 而且耗时长。本研究旨在解决上述问题, 研究不同条件(合金组分、工作温度)下 HEA/Gr 的力学性能。首先, 使用分子动力学模拟构建机器学习模型所需的数据集, 并使用主成分分析将数据集从 59 个特征缩减到 21 个特征。然后, 采用 XGBoost、LGBost、随机森林、AdaBoost 和决策树五种机器学习模型。最后, 在训练过程中利用 10 倍交叉验证和网格搜索来搜索最佳参数模型, 并以决定系数  $R^2$  和均方误差 MSE 为指标。结果表明, XGBoost 和 LGBost 模型在预测 HEA/Gr 力学性能方面优于其他模型。在研究的三种性能中, 预测杨氏模量和韧性的模型显示  $R^2$  值大于 85%。两种机器学习模型预测杨氏模量的  $R^2$  大于 90%, 而三种机器学习模型预测韧性的  $R^2$  均大于 85%。

## E06-P10

### 锂二次电池电极包覆材料的计算设计与实验研究

刘波\*<sup>1</sup>、施思齐<sup>2</sup>、张文清<sup>3</sup>

1. 井冈山大学
2. 上海大学
3. 南方科技大学

正极表面包覆已经证明了可以有效地改善电池的倍率性能和循环稳定性。但是, 开发具有高离子电导率与正极材料良好界面稳定性的正极包覆层仍然面临着巨大挑战。在以往的研究工作中, 包覆材料的选择主要是通过实验试错来实现的。近年来, “材料基因组”作为一种新的研究方法, 将高通量计算、数据分析和实验研究相结合, 有效加速了新型电池材料从研究到应用的进程, 降低了材料研发成本。本次报告中, 我们将从材料数据库出发, 以含锂化合物为研究对象, 开发一套评估候选材料的相稳定性、电化学稳定性、化学稳定性和电子/离子运输的计算流程, 籍此筛选出综合性能最优的正极包覆材料, 再结合快速制备、表征、测试实验手段, 对目标材料进行验证和评价。此外, 正极包覆层的计算方法也可以扩展到开发设计出高离子电导率和高界面稳定的固态电解质材料。

#### 参考文献:

1. Bo Liu, et al., Ab initio thermodynamic optimization of Ni-rich Ni-Co-Mn Oxide Cathode Coatings, *Journal of Power Sources*, 2020, 450:227693.
2. Bo Liu, et al., High-throughput Computational Screening of Li-containing Fluorides for Battery Cathode Coatings, *ACS Sustainable Chemistry & Engineering*, 2020, 8(2):948-957.
3. Bo Liu, et al., Computational insights into the ionic transport mechanism and interfacial stability of the Li<sub>2</sub>OHCl solid-state electrolyte, *Journal of Materiomics*, 2022, 8:59-67.
4. Bo Liu, et al., Insights into the LiMXO<sub>4</sub>F (M-X=Al-P, Mg-S) as Cathode Coatings for High-performance Lithium-ion Batteries, *ACS Appl. Mater. Interfaces*, 2022.

## E06-P11

### Platyper: 用于预测蛋白质-材料表面相互作用的双感知模型

黄健<sup>1</sup>、洪楚航<sup>2</sup>、戴红莲\*<sup>2</sup>

1. 上海大学
2. 武汉理工大学

预测蛋白质与材料表面的结合方式仍然是一个挑战。本研究发展了一种新的方法——鸭嘴兽双感知神经网络模型 (Platyper)，用于描述 BMPs 蛋白质和生物陶瓷表面的相互作用。本模型基于原子间势能的图卷积神经网络 (GCN) 与基于分子结构图像的卷积神经网络 (CNN) 模型相结合。这种双视觉方法是受到鸭嘴兽自适应感知系统的启发，解决了在受控分子动力学 (SMD) 模拟中难以准确预测复杂结合和解离动力学的问题。该模型的有效性通过其在蛋白质-配体系统中预测表面相互作用的应用得到了证明。与经典的基于 SMD 的方法相比，Platyper 提高了计算效率，并克服了基于 GNN 的方法在大规模原子模拟中的局限性。热图的引入增强了模型的可解释性，提升了其预测能力。综上所述，Platyper 模型在生物陶瓷表面和生长因子相关蛋白质相互作用的准确高效预测方面具有应用前景。

## E06-P12

### 结构分而治之：融合领域知识的固态电解质离子输运性能预测

刘悦、吴林翰、杨正伟、施思齐\*

上海大学

图神经网络因其能够有效表征并捕捉晶体结构中的几何与拓扑信息被广泛应用于材料构效关系研究，但仅通过表征骨架离子堆积形成的晶体结构难以准确挖掘晶体内部的离子输运构效关系。值得注意的是，晶体材料内部空隙所形成的间隙网络对于直观刻画离子输运性能构效关系具有重要作用。因此，本研究提出融合领域知识的双视角材料表征学习方法，通过几何分析算法解析复杂晶体空间获取晶体结构与间隙网络，深入探索不同视角微观结构的建模方法及融合策略，将键价位能、导通阈值等材料领域知识进行结构化表示后嵌入至消息传递机制，实现材料领域知识在图神经网络建模过程的有机融入，从而在数据与知识的双向驱动下建立高精度且具有一定可解释性的图神经网络预测模型，以充分揭示固态电解质结构和输运过程等动力学行为之间的科学规律。该方法对 11 种不同迁移离子的无机晶体材料实现了高精度激活能预测 ( $R^2=0.8886$ )，相较于 CGCNN、MEGNET、GATGNN 等图神经网络模型分别提高了 15.8%，13.1%，13.2%，验证了在深度学习模型中嵌入领域知识对于材料构效关系挖掘的有效性，为全面刻画固态电解质离子输运性能构效关系提供了一种全新的表征视角和学习方法。

## E06-P13

### 材料领域知识指导的机器学习样本量评估与提升方法

刘悦、傅清山、余振垚、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，由于材料的设计和制备过程较为复杂，诸多不确定性因素往往导致材料数据获取困难，数据集具有小样本特性，这使得其驱动机器学习模型准确挖掘材料描述符和目标属性之间的关系。另一方面，纯数据驱动方法受学习样本分布的制约，导致模型学习结果易与专家知识不一致甚至相悖。因此，本研究提出了材料领域知识指导的机器学习样本量评估与提升方法。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，并将表示特征内在规律和影响关系等领域知识进行规则化表示并嵌入至生成模型，实现了材料领域知识和数据生成过程的有机融合，从而在数据与知识双向驱动下建立高质量的数据增强模型，以解决样本量不足导致材料机器学习建模任务性能不高等问题。在 60 份材料构效关系研究数据

集上的实验结果表明,该方法能为数据集自适应匹配最佳筛选规则,从而在样本量不足情况下获取高质量生成样本,与目前最优的 CTGAN 相比,机器学习模型在该方法生成的扩展数据集上 RMSE 平均提升 7%,验证了在生成模型中嵌入领域知识对于材料数据增强的有效性,为准确的构效关系构建提供高质量数据基础,加快材料研发进程。

#### E06-P14

##### **CrySPR: A Python interface for implementation of crystal structure pre-relaxation and prediction using machine-learning interatomic potentials**

Wei Nong<sup>1,2</sup>, Ruiming Zhu<sup>1,3</sup>, Kedar Hippalgaonkar<sup>\*1,3</sup>

1. Nanyang Technological University
2. Institute of High Performance Computing, A\*STAR, Singapore 138632
3. Institute of Materials Research and Engineering, A\*STAR, Singapore 138634

Crystal structure prediction (CSP) aims to locate global energy minima or local minima, as well as, critically, the most stable or metastable structures from a hyperdimensional potential energy surface of a chemical space of interest. Such task is of great benefit, though computationally intensive, for the discovery of new materials for functional applications. Conventionally, the local optimization of energy, i.e., structure relaxation, is realized by high-fidelity, but expensive and time-consuming density functional theory (DFT) calculations. Herein, we developed an open-source package, CrySPR (**C**ystal **S**tructure **P**re-**R**elaxation and **P**rediction), which is for accelerating the CSP implementation. The package employs machine-learning interatomic potentials (ML-IAPs) in the pre-trained models with sub-DFT accuracy, including M3GNet, CHGNet and MACE, for local energy minimization. Considering a typical perovskite material, polymorphic calcium titanate ( $\text{CaTiO}_3$ ) as an example, we performed CSP task for space group numbers from 16 to 230 and number of chemical formulae from 1 to 4, within a half-day's work on a one-node 48-core server. The prediction successfully identifies the ground-state crystal structure and metastable polymorphs with various energy above the current convex hull ( $E_{\text{hull}}$ ). The predicted results include three experimentally observed phases, i.e., i)  $Pnma$  (62) with  $E_{\text{hull}}$  of 0 meV/atom, a low-temperature (0–1500 K) phase; ii)  $I4/mcm$  (140) with  $E_{\text{hull}}$  of 16 meV/atom, a mid-temperature (1500–1600 K) phase; and iii)  $Pm-3m$  (221) with  $E_{\text{hull}}$  of 60 meV/atom, a high-temperature (> 1600 K) phase. Moreover, several not-yet-explored phases with low  $E_{\text{hull}}$  are also predicted: (I) two distinct non-perovskite phases formed by square-pyramid  $[\text{TiO}_5]$  pentahedra and distorted  $[\text{CaO}_6]$  octahedra, and specifically they are, i)  $Pna2_1$  (33) or  $Pnma$  (62) with  $E_{\text{hull}}$  of  $-7$  meV/atom, a new below-the-hull phase; ii)  $Pbcm$  (29) with  $E_{\text{hull}}$  of 8 meV/atom; (II) several trigonal meta-stable perovskite phases with  $E_{\text{hull}}$  of *ca.* 30–60 meV/atom and structurally analogous to rhombohedral  $\text{CaTiO}_3$ ,  $R-3$  (148), which has a slightly lower  $E_{\text{hull}}$ . The two non-perovskite phases were further confirmed to be dynamically stable through additional phonon calculations. We develop this as a package<sup>[a]</sup>, that performs computationally lightweight implementation of CSP, and is expected to significantly accelerate the discovery of inorganic crystal materials.

<sup>[a]</sup>CrySPR is written in Python and the dev version of package is distributed as “cryspr” at the Python Package Index (PyPI). To get the code simply via `pip install cryspr` or source code at <https://github.com/Tosykie/CrySPR>

#### E06-P15

## 数据驱动的医用高熵合金材料设计

栗周\*

山东第一医科大学

近年来，高熵合金研究的快速发展将高熵概念推广到了材料应用的各个领域。含钛高熵合金由于其良好的生物相容性、出色的耐腐蚀性等优点，成为了医用金属材料领域的研究热点。本工作拟通过 Thermo-Calc 等软件对医用高熵合金的已知相平衡信息进行高通量点计算进行获取。计算结果将给出该点的成分、温度、相区以及相成分等信息；包含上万个数据点的计算结果将被保存成标准的数据格式存储于数据库中。以元素性质信息（绝大多数元素的信息都已知）为主构建的材料描述符则作为数据集的特征，然后将这些数据用于机器学习模型的训练，从而实现对医用高熵合金相关性能的预测。

### E06-P16

#### 无序金镍合金结构、振动和热力学性质的第一性原理研究

孙宏飞<sup>1</sup>、宋平<sup>1</sup>、余威<sup>1</sup>、林洋<sup>1</sup>、张健康<sup>2</sup>、武海军<sup>2</sup>、冯晶<sup>1</sup>、种晓宇\*<sup>1</sup>

1. 昆明理工大学
2. 云南省贵金属研究所

本文通过第一性原理计算结合准谐波近似方法，计算并讨论了无序  $Au_{1-x}Ni_x$  合金的相稳定性、弹性和热力学性质，并采用特殊的准随机结构方法对晶体单元的原子无序性进行了建模。结果表明，无序  $Au_{1-x}Ni_x$  合金在平衡状态下的形成能总是负的，表明其热力学是稳定的。剪切模量和杨氏模量随着镍浓度的增加而增加，而 B/G 和泊松比则逐渐减小。随着镍浓度的增加，无序合金的本征层错能值逐渐增大。此外，无序合金的总热力学熵主要来源于振动熵的贡献，合金的晶体结构随着镍浓度的增加而更难扩展。最后，分析了电子态密度，阐明了合金的磁性行为和电子特性的物理根源。

### E06-P17

#### Property-oriented machine learning accelerated design of ultra-strength and high-toughness niobium alloys

Zhenqiang Xiong\*

Xi'an jiaotong university

**Abstract:** With the rapid development of the aerospace industry, there is a desire to obtain high-performance new niobium alloys at lower cost, however, the complex coupling between multiple alloying elements will lead to the strengthening mechanism of niobium alloys becoming more and more ambiguous. The traditional empirical trial-and-error method is ineffective and costly, which makes it difficult to improve the development efficiency of high-performance multi-component alloys. Machine learning has been introduced into the materials field because of its computational efficiency and has been used to study the effects of alloy composition and processing parameters on properties. In this study, an efficient and high-precision alloy design system was established for designing high-performance niobium alloys. A database was established by collecting experimental data with uniform performance evaluation criteria. A model combining the optimization algorithm NSGA-III and the prediction algorithm GWO-ELM was established to design niobium alloys with excellent overall performance quickly and accurately. Typical alloys designed were used for validation. The results show that the MAPE of the GWO-ELM model for tensile and yield strengths are 1.80% and 10.76%, respectively, and the validation of the designed alloys shows that the two designed alloys have a superior overall performance compared to the

conventional alloys (16.0% and 11.1% improvement, respectively). These results provide a reference for the design of niobium alloys with multi-targeted properties and offer new ideas for the design of high-performance alloys.

### E06-P18

#### 局域原子环境畸变诱导立方 Pt3Al 相稳定性

余威、冯晶、种晓宇\*

昆明理工大学

针对  $\gamma$ - $\gamma'$  两相共格 Pt 基高温合金中立方 Pt3Al\_L12 相不稳定的问题, 采用合金化的方法, 通过高通量计算结合关键实验, 实现新型 Pt 基高温合金的开发。研究表明: Pt3Al\_L12 相动力学不稳定的原因来源于弱的 Pt-Al 键及 Pt-Pt 键负力常数的共同作用。Ti, Nb, Hf, Ta, Zr, Sc, Y, Ag 或 La 与 Pt 形成的原子对具有较大的力常数, 使 Pt3Al\_L12 相转变为动力学稳定状态。此外, 增加 Cr, Mo 或 W 的浓度, 可以使 Pt3Al\_L12 相的声子软模由 R 点转向 GAMMA 点, 最终消除虚频。同时, 考虑晶格失配度和剪切模量, Ti, Hf, Ta 和 Cr 作为潜在元素, 制备出的合金试样呈现出明显的  $\gamma$ - $\gamma'$  两相共格微观组织结构, EDS 表明合金元素倾向于占据 Al 位, 纳米压痕结果显示, Hf 元素能够显著增强 Pt3Al\_L12 相的硬度和弹性模量, Pt-Al-Hf 合金的硬度与商用 Ni 基高温合金 (Udimet720Li) 相当, 大大节约了研发成本和研发时间。

### E06-P19

#### RETaO4 超低晶格热导率的起源: 声-光学支声子抗交叉性

干梦迪\*

昆明理工大学

稀土钽酸盐(RETaO4)是一种潜在的热障涂层材料, 热导率较低。但其低热导率的本征起源还未可知。本文采用第一性原理计算和解玻尔兹曼输运方程结合的方法, 首先对 RETaO4 的热输运性质进行深入研究, 并引入 YSZ 的主要成分 ZrO2 进行对比。结果表明, RETaO4 存在强烈的非谐性和散射, 这主要是由声子谱中强烈的声光避免交叉引起的。这些机制有效的减小声子群速度, 增强声子散射, 最终导致 RETaO4 有较低的热导率。我们成功筛选出两个衡量热导率相对大小的描述符, 包括 RE-O 多面体畸变程度和拉伸力常数, 可以用来快速筛选 RETaO4 掺杂或高熵体系中较低热导率的陶瓷成分。

### E06-P20

#### PREDICTING SUPERCONDUCTING CRITICAL TEMPERATURE BASED ON MACHINE LEARNING

Jingzi Zhang\*

Harbin Institute of Technology Shenzhen

Integrated machine learning model for exploring potential high-temperature superconducting materials based on elemental composition. A high-quality superconducting material database containing 13,138 experimental data points was established through an automated data cleaning framework for superconducting material data. A total of 277 elemental descriptors were constructed based on the elemental composition attributes of superconducting

materials, and 115 descriptors were selected using the correlation coefficient method for the construction of machine learning models. Eleven machine learning regression models were used to predict the critical transition temperature of superconductors, with outstanding performances achieved by LightGBM ( $R^2 = 0.934$ , RMSE = 8.112 K), Extra Trees ( $R^2 = 0.930$ , RMSE = 8.212 K), and Gradient Boosting Decision Trees ( $R^2 = 0.929$ , RMSE = 8.303 K). The SHAP (Shapley Additive Explanation) method was employed to analyze the importance and influence of descriptors in the prediction process of the models. By integrating the three models mentioned above, an ensemble machine learning regression model was established to predict the critical transition temperature of superconductors, achieving an improved  $R^2$  of 0.959 and RMSE of 6.331 K.

### E06-P21

#### 电磁屏蔽复合材料智能设计：基于领域知识的模拟优先策略

曹文静、丁鹏\*

上海大学

为了消除日益严重的电磁波污染，通过智能手段开发高性能的电磁干扰屏蔽材料势在必行。将多孔结构和/或层状结构与高分子聚合物相结合以屏蔽电磁波是被广泛认可的有效方法。在领域知识的指导下，本文提出了用于高效开发电磁干扰屏蔽材料的“模拟优先”策略，设计了具有不同泡泡直径  $a$  和泡泡密度  $b$  的 MXene 泡泡纸状气凝胶(MBa-bA)的屏蔽结构。通过有限元分析(FEA)模拟预测了相应的 MBa-bA/聚合物复合材料的电磁屏蔽效率。在 X 波段，当  $a=10 \mu\text{m}$  且  $b=0.50$  时，通过冰模板法和牺牲模板法制备的 MBa-bA/聚合物复合材料的电磁屏蔽效率高达 83.1 dB，对电磁波的吸收效能高达 75.1 dB，与模拟结果相吻合。此外，结合宏观有限元模拟和实验验证，证实了 MBa-bA/聚合物复合材料具有明显的电磁波衰减效应，且储热/释放和力学性能均有所提高。在此基础上，本工作通过模拟和实验结果的相互验证证实了智能开发策略的可行性，为以领域知识为指导开发先进的电磁干扰屏蔽材料提供了研究基础。

### E06-P22

#### 利用可解释的机器学习预测不同形态的共聚聚酰亚胺的热稳定性

张瑜、丁鹏\*

上海大学

为了解决共聚聚酰亚胺的分子表征问题，并研究聚酰亚胺形态对热稳定性的影响。我们利用加权-加和的摩根频率指纹为聚酰亚胺薄膜和粉末数据集构建了可解释的机器学习模型。为了提高聚酰亚胺薄膜和粉末的热稳定性（5% 失重时的温度），建议在二胺中添加共轭官能团，控制苯环侧链，减少吡啶和羟基，选择共聚多亚胺，并确保酸酐直接连接到二酐中的苯环上，避免脂肪族基团。特别的是，实验结果与预测结果之间的一致性进一步验证了该模型是一种可靠的预测工具。希望这种聚合物信息学方法能为其他功能材料的实际应用提供进一步的实施方案。

### E06-P23

#### 基于增强版主动学习框架预测端际化合物的形成能

查炆、刘微、李颖、鲁晓刚\*

上海大学

准确预测复杂晶体结构化合物的形成能是理解材料中相稳定性和微观结构的核心挑战。为解决这一问题，我们引入了一个精心设计的多尺度特征集，该特征集考虑了材料的固有性质和晶体结构。通过应用这一新颖的特征集，我们在多个数据集上实现了显著的准确性提升。具体而言，在 9974 个样本的开源数据集上，平均绝对误差 (MAE) 从 1254 J/(mol·atom) 降低到 631 J/(mol·atom)；在我们专有的 Cr-Fe-Co-Ni 磁性数据集上，MAE 进一步减少至 244 J/(mol·atom)。我们的研究引入了一种改进的主动学习工作流程，使用增强型委员会查询策略 (EQBC)，在减少密度泛函理论 (DFT) 计算需求的同时，准确且高效地预测了形成能。此外，我们引入了平均绝对百分比误差估计 (MAPEE) 以展示未识别样本的误差分布，显著增强了机器学习 (ML) 模型结果的可解释性。值得注意的是，在增强版主动学习的第五次迭代后，我们的模型在测试集上的预期准确性达到了 500 J/(mol·atom)。最终，我们的研究应用这些结果构建了 Cr-Fe-Co-Ni 多组分热力学数据库 (TDB)，并在 Cr-Fe-Co 系统中，计算结果与实验数据表现出高度一致性。该框架在保持形成能预测准确性的同时，显著降低了 DFT 计算需求。

## E06-P24

### 金属表面有机配体的配位选择性研究

李蝉羽<sup>1</sup>、陆佳宜<sup>2</sup>、郑凤如<sup>2</sup>、江昊<sup>2</sup>、黄琦<sup>2</sup>、李易璋<sup>2</sup>、孙强\*<sup>2</sup>

1. 上海大学钱伟长学院

2. 上海大学材料基因组工程研究院

一直以来，金属有机杂化材料因其可调的电子结构、丰富的配位模式和良好的光电性能等独特性质，成为材料科学研究的热点之一<sup>[1,2]</sup>。金属有机框架材料的表面配位结构与材料的化学性、催化性能等有着密切的关系，并且可以通过化学修饰、晶体形状控制等手段来调控表面配位结构，以此来优化材料性能，满足特定的应用需求<sup>[3]</sup>。吡啶基分子是一类具有强电子供体能力的配体，能够与多种金属离子形成稳定的配合物。然而，在对多种吡啶基分子在表面上的配位行为的研究过程中，我们发现铜原子与不同对称性和配位位点的分子的配位键形成具有偏好性，这在以往的研究中鲜有报道。

在本墙报中，我们将展示在银 (111) 表面上铜原子与三种具有吡啶基团的分子的配位偏好<sup>[4]</sup>。这些分子分别具有 2、3、4 个配位位点及不同对称性的芳香结构骨架，能够通过配位键或氢键形成有序的网络或密排结构。我们通过扫描隧道显微镜表征发现三种分子与铜原子配位具有不同优先级。我们推测这样的现象可能是由配位位点数量的不同，分子在表面上的迁移率不同及分子的三维结构等原因导致的。这项研究有利于深入理解有机分子与金属表面的吸附金属原子之间的相互作用，以及其复杂的共同作用下形成组装结构的机理。这为进一步研究具有特殊性能的新型金属-有机配合物或金属有机框架材料提供了基础。

#### 参考文献

[1] Alshamrani M. *Journal of Coordination Chemistry* 2023.76: 1-19.

[2] Ilmi R, I., A., et al. *Journal of Coordination Chemistry* 2018.71: 3045-3076.

[3] Liu P, R., G., et al. *Journal of the American Chemical Society* 2017.139: 2122-2131.

[4] Unpublished work

## 仅发表论文

## E06-PO01

### PAN 基碳纤维预氧化反应智算模型及其应用

李薇、胡志杰、于剑\*

## 之江实验室

人工智能的快速发展为材料领域带来了新的机遇，数据驱动机器学习已在材料“构效关系”分析上进行了一些应用。然而，数据驱动机器学习方法在材料领域应用时存在以下问题：材料领域数据通常为小数据且因受多种物理化学因素影响而具有高维度，使得机器学习模型的复杂度增加、预测准确度下降；目前应用的机器学习方法多为纯数据驱动，所得模型为“黑盒”模型、可解释性较差。近年来，我们开发了一种知识与数据协同的智算方法，通过对材料数据分层分段分类、明确因果关系与相关关系，建立材料组分与性质、工艺与性质之间物理化学意义明确、可解释性高的量化数理模型，进而应用于材料、工艺及其装备设计与计算仿真。

以碳纤维材料制备过程中耗时最长、耗能最大的预氧化反应为例，基于阿伦尼乌斯公式等化学反应动力学方程，对 17 篇文献中获得的小数据进行了工艺参数-性质指标关系分析。结果表明，领域知识导引的小数据挖掘成功建立了工艺参数温度、时间与预氧化反应主要性质参数（元素含量、环化度、体密度）之间的动力学量化模型。该模型的建立不仅可以帮助我们对预氧丝不同温度和时间下的性质指标进行预测，还可以为后续预氧炉的设计与仿真提供参数、提高仿真准确性，本工作为提高碳纤维及复合材料品质奠定了基础。

**E06-PO02****Mechanics-Guided Approaches to Solid Electrolyte Interphase (SEI) Optimization**

Yao GAO\*

Department of Physics, Chinese University of Hong Kong

The inevitable volume expansion of secondary battery anodes during cycling exerts forces on the solid electrolyte interphase (SEI). Battery performance is closely related to the ability of the SEI to remain intact under cyclic loading conditions. However, the nanoscale thickness of SEI makes it difficult to fully characterize its mechanical properties. In this work, we developed a two-step atomic force microscopy (AFM)-based nanoindentation test that can accurately probe the Young's modulus ( $E$ ) and elastic strain limit ( $\epsilon Y$ ) of the SEI. Based on these mechanical measurements, we proposed a "maximum elastic deformation energy" ( $U$ ) metric to represent the stability of the SEI. This mechanics-guided approach has been successfully demonstrated in studying the SEI formed on Li/K metal anodes as well as Sn and Sb particle anodes. The SEI often exhibits an organic-inorganic heterogeneous composite structure, formed from the decomposition of electrolyte components. We found that the mechanical properties, size, distribution, and interfacial strength of these different phases within the SEI can significantly impact its stability during battery cycling. Specifically, increasing the inorganic content of the SEI, by using higher concentrations of carbonate electrolytes, resulted in higher  $E$  and lower  $\epsilon Y$  values. Integrating the measured mechanical properties into our  $U$  metric, we were able to identify an optimal electrolyte concentration (0.5 M) that maximized the SEI stability. These findings underscore the importance of mechanics-guided approaches for optimizing SEI design and electrolyte formulation to enable robust, high-performance battery systems.

**E06-PO03****基于机器学习方法设计高导热导电镁合金**

陈俊伟、王心笛、栾俊、于之刚\*、周国治

上海大学

镁合金因其优异的热导率 ( $\kappa$ ) 和电导率 ( $\sigma$ ) 在汽车、航空航天和电子领域备受关注，尤其是 Mg-Zn、

Mg-Sn 和 Mg-Al 等高导热导电体系在灯具照明系统的散热应用和电子封装系统的电磁屏蔽应用展现出巨大潜力。本研究首先收集了文献中 1216 组合金的成分和性能数据，并利用相图计算和密度泛函理论（DFT）扩充了合金物相特征和热电输运性质数据集。在此基础上，我们利用机器学习方法构建了成分-电导率预测模型，并结合该模型对高导热导电镁合金的成分进行了优化设计，通过实验验证了设计合金优异的导热导电性能。研究表明，通过机器学习方法能够有效指导高性能热电镁合金的设计与优化。本研究不仅为合金设计提供了新思路，也为高导热导电镁合金的研发提供了科学支撑。