

## E06. 材料基因工程

分会主席：张统一、谢建新、汪卫华、段文晖、杨明理

单元 E06-1: 7月11日下午

主持人：汪洪，项晓东

地点：9 馆雅安厅

主题：综述

14:00-14:35 E06-01(K)

Artificial Intelligence in Materials Innovation  
--- Materials Informatics

张统一

上海大学

14:35-15:10 E06-02(K)

材料大数据科学的瓶颈与破解

项晓东

南方科技大学

15:10-15:30 茶歇

15:30-16:05 E06-03(K)

高通量计算和多尺度耦合

王崇愚

清华大学

16:05-16:40 E06-04(K)

材料基因工程数据标准体系

汪洪，张澜庭，余宁

上海交通大学

16:40-17:05 E06-05(I)

基于大数据和结构化学新范式探索的新能源材料的“基因”

潘锋

北京大学深圳研究生院新材料学院

单元 E06-2: 7月12日上午

主持人：尹海清，高克玮

地点：9 馆雅安厅

主题：高通量实验，数据科学

08:30-08:55 E06-06(I)

基于高通量实验的 Ti 基合金抗腐蚀和电阻率性能调控研究

闫宗楷，宋宇，吴帅，刘奕，霍鹏宇，高天，向勇\*

1. 电子科技大学材料与能源学院

2. 电子科技大学先进能源技术研究院

08:55-09:20 E06-07 (I)

不锈钢氢致开裂行为的高通量评价技术研究

高克玮，晏倩，庞晓露，颜鲁春

北京科技大学

09:20-09:45 E06-08(I)

材料基因工程方法在非晶合金中的应用

柳延辉

中国科学院物理研究所

09:45-10:00 E06-09(O)

高通量实验的钛合金快速设计

吴迪，周科朝，刘立斌，张晓冰，刘彬

中南大学

10:00-10:15 E06-10(O)

材料基因工程方法在加速高温合金热加工工艺开发上的应用

张思宇<sup>1,2,3</sup>，王静哲<sup>1,2,3</sup>，黄再旺<sup>1,2,3</sup>，黄岚<sup>1,2,3</sup>，江亮<sup>1,2,3</sup>

1. 中南大学粉末冶金国家重点实验室

2. 中南大学粉末冶金研究院

3. 中南大学高温合金研究所

10:15-10:30 茶歇

10:30-10:55 E06-10(I)

材料科学数据在新材料研发与智能制造中的多维立体应用：以应用推动数据的整合

尹海清<sup>1</sup>，姜雪<sup>1</sup>，张瑞杰<sup>1</sup>，张聪<sup>1</sup>，曲选辉<sup>2</sup>，刘国权<sup>1</sup>

1. 北京科技大学钢铁共性技术协同创新中心

2. 北京科技大学新材料技术研究院

10:55-11:20 E06-12(I)

基于支持向量机的材料设计

陆文聪，卢凯亮，畅东平，卢天

上海大学

11:20-11:35 E06-13(O)

机器学习方法在钢铁微观组织标定中的应用

童周诺，王乐耘，曾小勤

上海交通大学

11:35-11:50 E06-14(O)

金属的冲击响应与结构破坏：基于原子模拟的取向分析与 X 射线衍射表征

王亮<sup>1</sup>，邓磊<sup>1</sup>，张兴明<sup>1</sup>，邓磊<sup>1</sup>，汤剑锋<sup>1</sup>，罗胜年<sup>2</sup>，胡望宇<sup>3</sup>

1. 湖南农业大学理学院

2. 顶峰多尺度科学研究所

3. 湖南大学

单元 E06-3: 7月12日上午

主持人：宋海峰，杨小渝

地点：9 馆资阳厅

主题：计算，数据科学

08:30-08:55 E06-15(I)

镍基高温合金定向凝固枝晶生长建模与仿真

许庆彦，杨聪

清华大学材料学院，先进成形制造教育部重点实验室

08:55-09:20 E06-16(I)

高通量材料计算和数据管理云平台 MatCloud 一材料数据的自动化学习

杨小渝

中国科学院计算机网络信息中心

09:20-09:45 E06-17(I)

CALPHAD-based High Throughput Calculation for Materials Design

Weisheng Cao<sup>1</sup>，Chuan Zhang<sup>1</sup>，Fan Zhang<sup>1</sup>，Shuanglin Chen<sup>1</sup>，Jun Zhu<sup>1</sup>，Duchao Lv<sup>1</sup>，Songmao Liang<sup>2</sup>，Dongke Sun<sup>3</sup>

1. CompuTherm LLC

2. University of Wisconsin-Madison

3. Southeast University

09:45-10:00 E06-18(O)

寻找材料描述符的数据驱动方法 SISO

欧阳润海

上海大学

10:00-10:15 E06-19 (O)

纳米晶合金溶质偏聚和相分离热稳定性调控机制的计算研究

唐法威，王奇，侯超，宋晓艳

北京工业大学

10:15-10:30 茶歇

10:30-10:55 E06-20(I)

材料微结构演化的微介观模拟研究

宋海峰<sup>1,2</sup>，林德焯<sup>1,2</sup>，高兴誉<sup>1</sup>，朱雪燕<sup>1,2</sup>，韩国民<sup>1,2</sup>，赵

亚帆<sup>1,2</sup>, 方俊<sup>1</sup>

1. 北京应用物理与计算数学研究所
2. 中物院高性能数值模拟软件中心

**10:55-11:20 E06-21(I)**

**基于 MGI 数据库的高性能 Sm-Co 基金属新体系的设计研制**

宋晓艳, 刘东, 唐法威, 郭凯, 毛斐  
北京工业大学

**11:20-11:35 E06-22(O)**

**低密度高强钢的集成计算研究**

郑伟森<sup>1</sup>, 何燕霖<sup>1</sup>, 鲁晓刚<sup>1,2</sup>

1. 上海大学材料科学与工程学院
2. 上海大学材料基因组工程研究院

**11:35-11:50 E06-23(O)**

**Rationalize the interphase stability of  
Li-doped-Li7La3Zr2O12 via automated reaction screening  
and machine learning**

刘波<sup>1,2</sup>, 杨宏亮<sup>2,3</sup>, 叶彩超<sup>2</sup>, 毛原清<sup>2</sup>, 王季平<sup>2</sup>, 施思齐<sup>1</sup>,  
杨炯<sup>1</sup>, 杨继辉<sup>4</sup>, 张文清<sup>2</sup>

1. 上海大学
2. 南方科技大学
3. 上海硅酸盐研究所
4. 美国华盛顿大学

**单元 E06-4: 7月12日下午**

**主持人: 钱权, 张澜庭**

**地点: 9 馆雅安厅**

**主题: 高通量实验, 数据科学**

**13:30-13:55 E06-24(I)**

**多层膜组合材料芯片制备与高通量结构成分表征**

张澜庭<sup>1</sup>, 惠健<sup>1</sup>, 赵冰冰<sup>1</sup>, 周元勋<sup>1</sup>, 汪晓平<sup>2</sup>, 项晓东<sup>3</sup>,  
汪洪<sup>1</sup>

1. 上海交通大学
2. 宁波英飞迈材料科技有限公司
3. 南方科技大学

**13:55-14:20 E06-25(I)**

**SA508-309L/308L 堆焊接头高通量微区电化学性能表征**

金莹, 赖召贵, 毕鹏, 黄菲菲  
北京科技大学 国家材料服役安全科学中心

**14:20-14:45 E06-26(I)**

**基于团簇模型的不锈钢合金化再认识**

董闯  
大连交通大学

**14:45-15:00 E06-27(O)**

**磁光克尔技术在高通量材料表征中的应用**

陈才<sup>1,2</sup>, 汪晓平<sup>1,2</sup>, 王子豪<sup>2,3</sup>, 张澜庭<sup>1,2</sup>, 汪洪<sup>1,2</sup>

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. 上海交通大学致远学院

**15:00-15:15 E06-28(O)**

**材料基因工程方法研究金属材料热处理工艺**

黄再旺<sup>1</sup>, 罗思华<sup>1</sup>, 李超<sup>1</sup>, 王毅<sup>2</sup>, 杨辉<sup>2</sup>, 周萍<sup>1</sup>, 江亮<sup>1</sup>

1. 中南大学
2. 华中科技大学

**15:15-15:35 茶歇**

**15:35-16:00 E06-29(I)**

**材料数据库与材料知识库**

钱权  
上海大学

**16:00-16:25 E06-30(I)**

**机器学习辅助高通量实验加速硬高熵合金成分设计**

刘轶<sup>1,2\*</sup>, 王炯<sup>1</sup>, 肖斌<sup>2</sup>

1. 上海大学材料基因组工程研究院
2. 上海大学物理系量子与分子结构国际中心

**16:25-16:40 E06-31(O)**

**跨尺度集成计算材料平台建设与计算数据研究**

魏江林  
成都材智科技有限公司

**16:45-17:30 墙报交流、墙报展示与评奖**

**单元 E06-5: 7月12日下午**

**主持人: 王毅, 徐东生**

**地点: 9 馆资阳厅**

**主题: 计算, 数据科学**

**13:30-13:55 E06-32(I)**

**应力下钛合金相变微观组织演化模拟**

徐东生  
中国科学院金属研究所

**13:55-14:20 E06-33(I)**

**生物医用材料的高通量计算研究进展**

徐定国<sup>1</sup>, 杨明理<sup>1</sup>, 张兴栋<sup>1,2</sup>

1. 四川大学材料工程研究中心
2. 四川大学生物材料国家工程中心

**14:20-14:45 E06-34(I)**

**通过计算模拟技术设计酸性析氧催化剂材料**

陈亮  
中科院宁波材料所

**14:45-15:00 E06-35(O)**

**基于机器学习的工模具钢硬度预测**

王家豪, 孙升, 何燕霖, 张统一  
上海大学

**15:00-15:15 E06-36(O)**

**将传统分子与最新的人工智能结合进行新材料设计**

许立芳  
北京创腾科技有限公司

**15:15-15:35 茶歇**

**15:35-16:00 E06-37(I)**

**An Integrated Computational Materials Engineering  
(ICME) Study for Mg Alloys**

William Yi Wang<sup>1,2\*</sup>, Shun-Li Shang<sup>2</sup>, Shilei Li<sup>3</sup>, Jian Zhu<sup>3</sup>, Bin  
Tang<sup>1</sup>, Jun Wang<sup>1</sup>, Yi Wang<sup>2</sup>, Kristopher A. Darling<sup>4</sup>,  
Hongchao Kou<sup>1</sup>, Xidong Hui<sup>3</sup>, Laszlo J. Keckes<sup>4</sup>, Jinshan Li<sup>1</sup>, and  
Zi-Kui Liu<sup>2</sup>

1. State Key Laboratory of Solidification Processing, Northwestern Polytechnical University, Xi'an
2. Department of Materials Science and Engineering, The Pennsylvania State University
3. State Key Laboratory for Advanced Metals and Materials, University of Science and Technology
4. U.S. Army Research Laboratory, USA

**16:00-16:15 E06-38(O)**

**基于 ESPEI 平台的 Ag-Cu 相图计算**

张海辉<sup>1,2</sup>, 吴彪<sup>1,2</sup>, 张澜庭<sup>1,2</sup>, 汪洪<sup>1,2</sup>

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

**16:15-16:30 E06-39(O)**

**高温高压条件下 S-O 化合物的结构相变与性质研究**

刘思瑜, 高朋越, 吕健, 王彦超  
吉林大学超硬材料国家重点实验室

**16:30-16:45 E06-40(O)**

**高压下 Al-S 化合物的新奇配比**

邵森<sup>1</sup>, 朱文吉<sup>1</sup>, 吕健<sup>1\*</sup>, 王彦超<sup>1</sup>, 陈粤<sup>2</sup>, 马琰铭<sup>1\*</sup>

1. 吉林大学超硬材料国家重点实验室
2. 香港大学机械工程系

**16:45-17:30 墙报交流、墙报展示与评奖**

单元 E06-6: 7月13日上午

主持人: 薛德祯, 李静媛

地点: 9 馆雅安厅

主题: 高通量实验, 数据科学

**08:30-08:55 E06-41(I)**

铝合金、镁合金及多组元合金棒材的螺旋梯度连铸与高通量表征

田少鲲, 李静媛, 祁明凡

北京科技大学

**08:55-09:20 E06-42 (I)**

电流变液软物质材料的设计与应用

巫金波

上海大学

**09:20-09:45 E06-43(I)**

稀土永磁材料的相图热力学数据库

王江, 卢照, 姚青荣, 饶光辉, 周怀营

桂林电子科技大学

**09:45-10:00 E06-44(O)**

Fabrication and atomic-scale Understanding of gradient nanostructured materials

杨许生<sup>1,2</sup>

1. 香港理工大学工业及系统工程学系

2. 香港理工大学深圳研究院

**10:00-10:15 E06-45 (O)**

高通量方法制备低熔点无铅焊料合金

耿川, 黄波, 王刚

上海大学

**10:15-10:30 茶歇**

**10:30-10:55 E06-46(I)**

领域知识结合贝叶斯优化加速高储能钛酸钒陶瓷的开发

薛德祯

西安交通大学

**10:55-11:20 E06-47(I)**

面向材料微观结构的图像处理方法

韩越兴, 宋磊磊, 王竞宇, 赖传滨

上海大学

**11:20-11:35 E06-48(O)**

机器学习和感知压缩对高通量纳米束衍射数据分析处理

吴彪<sup>1</sup>, 张海辉<sup>1,2</sup>, 邢辉<sup>1,2</sup>, 张澜庭<sup>1,2</sup>, 汪洪<sup>1,2</sup>

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

**11:35-11:50 E06-49(O)**

定位于数据驱动材料研发新模式的合金扩散多元节方法在多组元块体材料研究中的应用

王子<sup>1</sup>, 秦子珺<sup>1</sup>, 王泽鑫<sup>1</sup>, 戴贤创<sup>1</sup>, 朱礼龙<sup>2</sup>, 黄再旺<sup>1</sup>, 刘锋<sup>1</sup>, 刘咏<sup>1</sup>, 赵继成<sup>3</sup>, 江亮<sup>1</sup>, 周科朝<sup>1</sup>

1. 中南大学粉末冶金研究院

2. 美国佛罗里达大学材料科学与工程系

3. 美国俄亥俄州立大学材料科学与工程系

单元 E06-7: 7月13日上午

主持人: 张利军, 王彦超

地点: 9 馆资阳厅

主题: 计算, 数据科学

**08:30-08:55 E06-50(I)**

面向镍基单晶高温合金的多层多粒度的关联分析方法

刘悦<sup>1</sup>, 于涛<sup>5</sup>, 鲁晓刚<sup>2,3</sup>, 王崇愚<sup>4</sup>, 施思齐<sup>2,3</sup>

1. 上海大学计算机工程与科学学院

2. 上海大学材料科学与工程学院

3. 上海大学材料基因组工程研究院

4. 清华大学物理系

5. 钢铁研究总院功能材料研究所

**08:55-09:20 E06-51 (I)**

Crystal structure prediction method and its applications at high pressure

王彦超

State Key Lab of Superhard Materials& Innovation Center for

Computational Physics Methods and Software, College of

Physics, Jilin University

**09:20-09:45 E06-52(I)**

基于 MIP 平台材料基因研究简介

杨炯

上海大学

**09:45-10:00 E06-53(O)**

Mg-X (X=Al, Sn, Zn)体系热力学、扩散动力学及析出相显微结构模拟

张宇慧, 刘钰玲, 刘树红, 文诗艺, 李晓静

中南大学轻质高强结构材料国防科技重点实验室

**10:00-10:15 E06-54 (O)**

从机器学习理解金属纳米催化剂二氧化碳电还原活性

程涛<sup>1</sup>, 王璐<sup>1</sup>, 李有勇<sup>1</sup>, William A Goddard III<sup>2</sup>

1. 苏州大学

2. Materials and Process Simulation Center (MSC), and Joint

Center for Artificial Photosynthesis (JCAP) California Institute

of Technology, Pasadena, California 91125, United States

**10:15-10:30 茶歇**

**10:30-10:55 E06-55(I)**

MatAi 材料数字化研发平台的构建与应用

王卓, 罗薛超, 许莲玉, 魏江林

成都材智科技有限公司 (MatAi)

**10:55-11:20 E06-56(I)**

金属氧化物的原子移动性及其应用

张利军, 邢方舟, 塔娜, 马飒

中南大学

**11:20-11:35 E06-57(O)**

基于天河系列超级计算机构建高通量材料计算平台

李庚, 李菲菲, 康波, 菅晓东, 孟祥飞\*

国家超级计算天津中心

**11:35-11:50 E06-58(O)**

AutoCIC: Boltzmann-Matano 框架下互扩散系数自动化计算软件

吴晓科, 钟静, 魏明, 张利军

中南大学粉末冶金研究院

单元 E06-8: 7月13日下午

主持人: 常可可, 朱向东

地点: 9 馆雅安厅

主题: 高通量实验, 数据科学

**13:30-13:55 E06-59 (I)**

基于材料基因工程的生物活性表/界面研究

鲁雄

材料先进技术教育部重点实验室

西南交通大学材料科学与工程学院

**13:55-14:20 E06-60(I)**

基于材料基因工程的抗肿瘤/骨再生修复材料研究

朱向东

四川大学生物材料工程研究中心

14:20-14:45 E06-61 (I)

镍基高温合金梯度冷却高通量制备与性能表征

吴红宇<sup>1</sup>, 罗思华<sup>1</sup>, 邓文凯<sup>1</sup>, 黄再旺<sup>1</sup>, 李甲<sup>2</sup>, 方棋洪<sup>2</sup>, 江亮<sup>3</sup>

1. 中南大学
2. 湖南大学
3. 烟台大学

14:45-15:00 E06-62(O)

钛合金的高通量扩散研究

徐广龙<sup>1</sup>, 王川云<sup>2</sup>, 王静雅<sup>2</sup>, 崔予文<sup>1</sup>

1. 南京工业大学
2. 西班牙马德里先进材料研究院

15:00-15:15 E06-63(O)

简单合金化对铌基合金高温氧化行为的影响研究

舒锦涛, 陈建辉, 董自强\*, 刘轶\*

上海大学材料基因组工程研究院

15:15-15:35 茶歇

15:35-16:00 E06-64(I)

PVD 涂层材料基因数据库: 相图与材料设计

常可可, 徐凯, 黄焯琛

中国科学院宁波材料技术与工程研究所

16:00-16:15 E06-65(O)

钛铝系合金的高通量激光合成制备

刘世超<sup>1,2</sup>, Moataz Attallah<sup>2</sup>, Nicolas Adkins<sup>2</sup>, 周科朝<sup>1</sup>, 陈超<sup>1</sup>

1. 中南大学
2. 伯明翰大学

16:15-17:20 闭幕式及墙报颁奖仪式

单元 E06-9: 7月13日下午

主持人: 董超芳, 都时禹

地点: 9 馆资阳厅

主题: 计算, 数据科学

13:30-13:55 E06-66(I)

高温热电器件的界面热稳定性研究: 高通量第一原理计算耦合相图热力学模型

种晓宇<sup>1,2</sup>, 王义<sup>2</sup>, 刘梓葵<sup>2</sup>, Jorge Paz Soldan Palma<sup>2</sup>, Drymiotis Fivos<sup>3</sup>, Kurt Star<sup>3</sup>, Jean-Pierre Fleurial<sup>3</sup>, Vilupanur Ravi<sup>3</sup>

1. 昆明理工大学
2. 宾夕法尼亚州立大学
3. 喷气推进实验室

13:55-14:20 E06-67(I)

集成计算在钢的组织性能设计方面的应用

杨丽, 苏航, 柴锋, 罗小兵

钢铁研究总院

14:20-14:45 E06-68 (I)

The development of MGI methods and software in Multiscale calculations of some nuclear materials for ATF

都时禹

中国科学院宁波材料技术与工程研究所

14:45-15:00 E06-69(O)

机器学习方法探究 Li-argyrodite 型固态电解质材料中的构-效关系

赵倩<sup>1</sup>, 郭碧茹<sup>2</sup>, 刘悦<sup>2</sup>, 施思齐<sup>1,3</sup>

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

15:00-15:15 E06-70(O)

生物材料高通量计算平台 Biomaterial Finder

薛志宇<sup>1</sup>, 杨明理<sup>2</sup>, 徐定国<sup>1,2\*</sup>

1. 四川大学化学学院

2. 四川大学材料基因工程研究中心

15:15-15:35 茶歇

15:35-16:00 E06-71(I)

金属钝化理论的计算模拟与耐蚀设计

董超芳, 徐奥妮, 魏薪, 纪毓成, 孔德成, 肖葵, 李晓刚  
北京科技大学新材料技术研究院, 教育部腐蚀与防护重点实验室

16:00-16:15 E06-72(O)

第一性原理研究碳酸钙水合物新结构的稳定性、电子及力学性质

周云轩, 种晓宇\*, 冯晶\*

昆明理工大学材料科学与工程学院

16:15-17:20 闭幕式及墙报颁奖仪式 (9 馆雅安厅)

墙展

E06-P01

Ti-Nb-Hf-C 体系的相图热力学和析出碳化物的研究

邓子旋<sup>1,2</sup>, 赵大鹏<sup>2</sup>, 常可可<sup>1</sup>

1. 中国科学院宁波材料技术与工程研究所
2. 湖南大学生物学院

E06-P02

结合原子尺度机理的非连续介观尺度模型研究  $\eta'$  相对七系铝合金沿晶开裂的作用

纪毓成, 董超芳, 魏薪, 王深, 陈章华, 李晓刚

北京科技大学

E06-P03

Cu-Cr-Co 纳米多层膜相图及相分离的高通量研究

惠健<sup>1</sup>, 赵杰<sup>1</sup>, 马海乾<sup>1</sup>, 张展<sup>2</sup>, 杨丽霞<sup>3</sup>, 张澜庭<sup>1</sup>, 汪洪<sup>1</sup>

1. 上海交通大学
2. 美国阿贡实验室
3. 钢铁研究总院

E06-P04

支持向量回归模型辅助钙钛矿锰氧化物 奈尔温度的材料设计

卢凯亮, 畅东平, 陆文聪

上海大学材料基因组工程研究院

E06-P05

机器学习辅助高性能 N-并二萘嵌苯类染料敏化剂的材料设计

李李菲, 李敏杰, 陆文聪

上海大学

E06-P06

二维材料第一性原理计算数据库

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

1. 上海大学
2. 南方科技大学

E06-P07

基于数据挖掘的钙钛矿材料居里温度的研究

田璐敏<sup>1</sup>, 陆文聪<sup>1,2</sup>

1. 上海大学化学系
2. 上海大学材料基因组工程研究院

E06-P08

不锈钢中 MnS 夹杂物引起点蚀的有限元模型研究

李文超, 金莹

北京科技大学 国家材料服役安全科学中心

E06-P09

高通量制备 TiZrTa 高熵合金及表征

殷庆峰, 吴渊, 刘雄军, 王辉, 蒋虽何, 吕昭平

北京科技大学

**E06-P10****机器学习加速长寿命镍基单晶高温合金的成分设计**霍芊羽<sup>1</sup>, 陈金宾<sup>1,2</sup>, 陈晶阳<sup>1,2</sup>, 肖程波<sup>2</sup>, 惠希东<sup>1</sup>

1. 北京科技大学新金属材料国家重点实验室
2. 中国航空工业集团公司北京航空材料研究院

**E06-P11****反向设计高性能类金刚石结构热电材料**

盛晔, 杨炯, 陆文聪

上海大学

**E06-P12****组合材料芯片相结构高通量表征数据预处理及层次聚类方法的优化**

赵朝阳, 金莹, 时鹏, 薛彦鹏

北京科技大学 国家材料服役安全科学中心

**E06-P13****耐腐蚀 Ni 基高温合金的高通量制备与表征**邵帅<sup>1</sup>, 惠希东<sup>1</sup>, 陈金宾<sup>1,2</sup>, 陈晶阳<sup>2</sup>

1. 北京科技大学新金属材料国家重点实验室
2. 中国航空工业集团公司北京航空材料研究院

**E06-P14****HitDIC 2.0: 多元合金互扩散系数与原子移动性数据库的自动化、高通量获取**

钟静, 尚依静, 张利军

中南大学粉末冶金研究院

**E06-P15****铌硅基高温合金置换能的第一性原理与机器学习研究**唐宇超<sup>1</sup>, 肖斌<sup>1</sup>, 陈建辉<sup>2</sup>, 刘轶<sup>1,2</sup>

1. 上海大学物理系量子与分子结构国际中心
2. 上海大学材料基因组工程研究院

**E06-P16****高通量计算搜索 n 型 ABO<sub>3</sub> 的热电材料**

曹艳, 杨炯

上海大学

**E06-P17****介孔氧化钨和石墨烯复合物的构建和低温丙酮传感**

赵涛, 赵玉叶, 范宇驰, 王连军, 罗维

东华大学

**E06-P18****面向钴基高温合金的反应力场开发**郭静<sup>1</sup>, 肖斌<sup>1</sup>, 刘轶<sup>1,2</sup>

1. 上海大学物理系量子与分子结构国际中心
2. 上海大学材料基因组工程研究院

**E06-P19****机器学习加速镍基单晶高温合金的第一性原理置换能预测**肖斌<sup>1</sup>, 吴雨沁<sup>2</sup>, 刘轶<sup>1,2</sup>

1. 上海大学物理系量子与分子结构国际中心
2. 上海大学材料基因组工程研究院

**E06-P20****钙钛矿析氧反应催化剂的第一性原理和机器学习研究**王小梦<sup>1</sup>, 李一航<sup>1</sup>, 肖斌<sup>1</sup>, 刘轶<sup>1,2</sup>

1. 上海大学物理系量子与分子结构国际中心
2. 上海大学材料基因组工程研究院

**E06-P21****基于 Thermo-Calc 计算的新型超高强度不锈钢设计**

柳木桐, 盛伟, 钟平, 刘大博

中国航发北京航空材料研究院

**E06-P22****fcc 相 Co-V-W 合金扩散动力学研究**

文诗艺, 刘钰玲, 杜勇

中南大学, 粉末冶金国家重点实验室

**E06-P23****CALPHAD 在高熵合金中的应用**

尚根峰, 鲁晓刚

上海大学

**E06-P24****自动机器学习算法选择方法加速材料性能预测**田文杰<sup>1</sup>, 刘悦<sup>1</sup>, 唐爱华<sup>1</sup>, 施思齐<sup>2,3</sup>

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

**E06-P25****机器学习耦合多目标优化方法加速镍基单晶高温合金材料发现**吴军明<sup>1</sup>, 刘悦<sup>1</sup>, 于涛<sup>5</sup>, 鲁晓刚<sup>2,3</sup>, 王崇愚<sup>4</sup>, 施思齐<sup>2,3</sup>

1. 上海大学计算机工程与科学学院
2. 上海大学材料科学与工程学院
3. 上海大学材料基因组工程研究院
4. 清华大学物理系
5. 钢铁研究总院功能材料研究所

**E06-P26****合金材料数据驱动下的机器学习方法应用与示范**

张惠然, 徐涛, 范星月, 刘庆, 丁广太, 钱权, 戴东波

上海大学

**E06-P27****材料图像检索技术若干问题研究**

丁广太, 卿青, 李凯悦, 张惠然

上海大学

**E06-P28****高通量测定高组元镍基高温合金互扩散系数矩阵**

王泽鑫, 吴晓科, 钟静, 张利军, 秦子珺, 王子, 刘锋, 刘咏, 江亮

Central University