

## E06.材料基因组

分会主席：张统一、谢建新、汪卫华、段文晖、刘兴军

单元 E06-1：7月13日下午

主持人：张统一，孙志梅

地点：会议中心 1B 会议室（一楼）

主题：综述，多尺度材料设计

13:30-14:30 E06-01(I)

高通量计算和多尺度耦合

王崇愚

清华大学

14:30-14:55 E06-02(I)

深圳大科学装置-材料基因组平台

项晓东

南方科技大学

14:55-15:20 E06-03(I)

集成计算材料工程用于新型高强铝合金设计

王俊升

北京理工大学

15:20-15:40 茶歇

15:40-16:05 E06-04(I)

数据是材料基因工程当前的核心问题

汪洪

上海交通大学

材料基因组联合研究中心/材料科学与工程学院

16:05-16:30 E06-05(I)

基于 Ai 与材料基因组科学和工程探索新型锂电池材料

潘锋

北京大学深圳研究生院新材料学院

16:30-16:55 E06-06(I)

钛基合金形变与断裂机制的多尺度模拟

徐东生

中国科学院金属研究所

16:55-17:20 E06-07(I)

The application of MGI and theoretical methods for some important nuclear materials

都时禹

中国科学院宁波材料技术与工程研究所

17:20-17:45 E06-08(I)

高通量集成计算软件及新一代高温合金研制

许庆彦<sup>1</sup>，王崇愚<sup>1</sup>，张武<sup>2</sup>，张平<sup>3</sup>，李嘉荣<sup>4</sup>

1.清华大学

2.上海大学

3.北京应用物理与计算数学研究所

4.中国航发北京航空材料研究院

17:45-18:10 E06-09(I)

基于第一性原理的多尺度计算模拟在催化与分离材料设计中的应用

陈亮

中科院宁波材料所

单元 E06-2：7月14日上午

主持人：宋海峰，刘轶

地点：会议中心 1C 会议室（一楼）

主题：计算，数据科学

09:00-09:25 E06-10(I)

高通量第一性原理计算筛选 Sb<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> 相变存储材料的最佳掺杂元素

孙志梅

北京航空航天大学

09:25-09:50 E06-11(I)

机器学习加速材料性能预测

肖斌，金倩，吴雨沁，王成洁，刘轶\*

上海大学材料基因组工程研究院

上海大学物理系量子分子结构国际中心

09:50-10:05 E06-12(O)

稳定 MAX 相的高通量计算筛选

胡前库，吴庆华，周爱国，王李波

河南理工大学材料科学与工程学院

10:05-10:20 E06-13(O)

二氧化锆的高压相变行为第一性原理研究

姬德朋，冯晶

昆明理工大学

10:20-10:40 茶歇

10:40-11:05 E06-14(I)

锆氢化产物的有序结构预测及无序结构建模方法研究

宋海峰<sup>1,2</sup>，朱雪燕<sup>1,2</sup>，赵亚帆<sup>1,2</sup>，田付阳<sup>3</sup>，高兴誉<sup>1,2</sup>，林德焯<sup>1,2</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

3.北京科技大学

11:05-11:30 E06-15(I)

集成计算材料工程在先进轻质金属合金中的示例研究

王毅，李金山，邹程雄，张颖，唐斌，王军，樊江昆，薛祥义，寇宏超

西北工业大学

11:30-11:45 E06-16(O)

Atomic Movement Mechanisms of Polymorphic Deformation-Induced Martensitic Transformations in Steels

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

11:45-12:00 E06-17(O)

基于材料信息学预测高速压制生坯密度的新方法

张凯琦，尹海清，姜雪，邓正华

北京科技大学

单元 E06-3：7月14日上午

主持人：江亮，宿彦京

地点：会议中心 1B 会议室（一楼）

主题：高通量实验，数据科学

09:00-09:25 E06-18(I)

基于机器学习的高熵合金设计与优化

宿彦京

北京科技大学

09:25-09:50 E06-19(I)

高通量超导研究新进展

金魁

中国科学院物理研究所

09:50-10:05 E06-20(O)

微透镜阵列的高通量可控制备

林银银，丁叶凯

上海大学材料基因组工程研究院

10:05-10:20 E06-21(O)

高通量组合薄膜技术在 FeSe 物性研究中的应用

冯中沛

中国科学院物理研究所

10:20-10:40 茶歇

10:40-11:05 E06-22(I)

高通量块体材料制备方法、技术和装置研究进展  
王子、吴宏宇、罗思华、朱礼龙、黄再望、江亮  
粉末冶金国家重点实验室, 湖南长沙, 410083  
中南大学粉末冶金研究院, 湖南长沙, 410083

11:05-11:30 E06-23(I)

材料基因工程数据库建设的挑战与实践  
尹海清, 姜雪, 张聪, 张瑞杰, 刘国权, 曲选辉  
北京科技大学, 北京, 100083

11:30-11:45 E06-24(O)

基于数据挖掘的无铅钙钛矿压电陶瓷材料电学特性研究  
纪晓波, 畅东平, 连正亨, 陆文聪  
上海大学

11:45-12:00 E06-25(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>, 张兴明<sup>1</sup>, 邓磊<sup>1</sup>, 汤剑锋<sup>1</sup>, 肖时芳<sup>2</sup>, 邓辉球<sup>2</sup>,  
胡望宇<sup>3</sup>, 罗胜年<sup>4</sup>

- 1.湖南农业大学理学院
- 2.湖南大学物理与微电子科学学院
- 3.湖南大学材料科学与工程学院
- 4.顶峰多尺度科学研究

单元 E06-4: 7月14日下午

主持人: 杜勇, 杨小渝

地点: 会议中心 1C 会议室 (一楼)

主题: 计算, 数据科学

13:30-13:55 E06-26(I)

高通量热力学计算与微观组织模拟的直接耦合

陈双林<sup>1</sup>, 孙东科<sup>2</sup>, 吕杜超<sup>1</sup>, 曹伟生<sup>1</sup>, 朱军<sup>1</sup>, 张传<sup>1</sup>,  
张帆<sup>1</sup>, 王云志<sup>3</sup>

- 1.CompuTherm LLC
- 2.东南大学
- 3.The Ohio State University

13:55-14:20 E06-27(I)

高通量材料集成计算和数据管理云平台 MatCloud: 现状, 未来和挑战

杨小渝

中国科学院计算机网络信息中心

14:20-14:45 E06-28(I)

材料数据及数据管理

钱权

上海大学材料基因组工程研究院

14:45-15:00 E06-29(O)

锆中辐照空洞异性生长行为的相场模拟

韩国民<sup>1,2</sup>, 王涵<sup>1,2</sup>, 林德焯<sup>1,2</sup>, 朱雪燕<sup>1,2</sup>, Shenyang, Hu<sup>3</sup>,  
宋海峰<sup>1,2</sup>

- 1.中物院高性能数值模拟软件中心
- 2.北京应用物理与计算数学研究所
- 3.Pacific Northwest National Laboratory

15:00-15:15 E06-30(O)

用于高效二氧化碳捕获的先进多孔材料的理论设计与模拟

田子奇

中国科学院宁波材料技术与工程研究所

15:15-15:35 茶歇

15:35-16:00 E06-31(I)

轻合金的热力学、热物性数据库及其应用

杜勇<sup>1</sup>, 刘树红<sup>1</sup>, 刘钰玲<sup>1</sup>, 徐凯<sup>1</sup>, 刘立斌<sup>2</sup>

- 1.中南大学粉末冶金研究院
- 2.中南大学材料科学与工程学院

16:00-16:15 E06-32(O)

钛合金硬度的理论计算及实验验证

林成<sup>1</sup>, 黄土星<sup>1</sup>, 尹桂丽<sup>1</sup>, 赵志伟<sup>1</sup>, 赵永庆<sup>2</sup>

- 1.辽宁工业大学
- 2.西北有色金属研究院

16:15-17:30 墙报交流、墙报展示与评奖

单元 E06-5: 7月14日下午

主持人: 刘兴军, 向勇

地点: 会议中心 1B 会议室 (一楼)

主题: 高通量实验, 数据科学

13:30-13:55 E06-33(I)

薄膜材料高通量实验技术研究进展

向勇, 吴帅, 闫宗楷, 张晓琨

电子科技大学

13:55-14:20 E06-34(I)

新型钙钛矿材料的筛选: 从经验规律到人工智能

尹万健<sup>1</sup>, 孙庆德<sup>1</sup>, 李珍珠<sup>1</sup>, 徐其琛<sup>1</sup>, 侯柱锋<sup>1,2</sup>

- 1.Soochow University
- 2.NIMS, Japan

14:20-14:45 E06-35(I)

智能的材料数据挖掘平台与应用

陆文聪\*, 张庆, 畅东平

上海大学材料基因组工程研究院, 上海市宝山区上大路 99  
号, 200444

14:45-15:00 E06-36(O)

铀钕合金度材料的高通量实验研究

张雷, 莫文林, 张德志, 法涛

中国工程物理研究院材料研究所

15:00-15:15 E06-37(O)

Cu-2.3Ni-0.5Si 合金高能 X 射线原位实验研究

华艳红, 聂志华, 谭成文, 于晓东

北京理工大学

15:15-15:35 茶歇

15:35-16:00 E06-38(I)

数据挖掘技术在材料设计应用中的探索

于金鑫<sup>1,2</sup>, 郭顺<sup>2</sup>, 姜青山<sup>2</sup>, 王翠萍<sup>1</sup>, 刘兴军<sup>3,1</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.中国科学院深圳先进技术研究院
- 3.哈工大(深圳)材料基因与大数据研究院

16:00-16:15 E06-39(O)

高通量扫描纳米束衍射技术的数据分析处理

吴彪<sup>1,2</sup>, 刘梅<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, 上海 200240
- 2.上海交通大学 材料基因组联合研究中心, 上海 200240

16:15-17:30 墙报交流、墙报展示与评奖

单元 E06-6: 7月15日上午

主持人: 宋晓艳, 张利军

地点: 会议中心 1C 会议室 (一楼)

主题: 计算, 数据科学

08:45-09:10 E06-40(I)

高通量第一原理计算方法在合金结构搜索和材料设计中的应用

杨小宝

华南理工大学物理与光电学院

09:10-09:35 E06-41(I)

多元合金互扩散系数矩阵及原子移动性参数数据库的自动化获取

张利军, 钟静

中南大学粉末冶金国家重点实验室

09:35-09:50 E06-42(O)

基于人工神经网络的原子多体势研究

吴妃锋, 单斌

华中科技大学先进材料设计实验室

09:50-10:05 E06-43(O)

多组元铜合金精准相图热力学和扩散动力学数据库的开发及其在铜合金设计中的应用

汤颖<sup>1,2</sup>, Qing Chen<sup>2</sup>

1.河北工业大学 材料科学与工程学院, 天津, 300131

2.Thermo-Calc Software, Råsundavägen 18, SE-169 67 Solna, Sweden

10:05-10:20 E06-44(O)

合金微观组织-力学性能集成模拟的初探

徐广龙, 崔予文

南京工业大学材料科学与工程学院

10:20-10:40 茶歇

10:40-11:05 E06-45(I)

纳米晶固溶体合金体系稳定性的多尺度耦合计算

宋晓艳, 唐法威, 王奇, 刘东

北京工业大学

11:05-11:30 E06-46(I)

锂离子电池离子电导率描述因子的多层级过滤式特征分析方法

刘悦, 郭碧茹, 赵天霖, 王达, 施思齐

上海大学

11:30-11:45 E06-47(O)

合金相析出动力学的多维度研究

李永胜, 朱礼慧, 闫志龙

南京理工大学

11:45-12:00 E06-48(O)

过渡金属离子在统一半导体材料及宽禁带化合物电子结构尺度上的应用

屈冰雁, 王雷\*, 周如龙

合肥工业大学 材料科学与工程学院 合肥市屯溪路 193 号

单元 E06-7: 7 月 15 日上午

主持人: 巫金波, 崔予文

地点: 会议中心 1B 会议室 (一楼)

主题: 高通量实验, 数据科学

09:00-09:25 E06-49(I)

高通量扩散多元结技术

崔予文

南京工业大学

09:25-09:50 E06-50(I)

螺旋梯度连铸高通量制备方法的研究

李静媛<sup>1</sup>, 金充<sup>1</sup>, 谢建新<sup>2</sup>

1.北京科技大学材料科学与工程学院

2.北京科技大学新材料技术研究院

09:50-10:05 E06-51(O)

Al-Si-La 三元系 600°C 和 800°C 等温截面相关系

涂浩, 杜巨峰, 苏旭平

常州大学材料科学与工程学院

10:05-10:20 E06-52(O)

Ti-Nb-(Zr, Cr)体系富 Ti 端体心立方相互扩散和原子移动性

陈伟民

暨南大学先进耐磨蚀及功能材料研究院

10:20-10:40 茶歇

10:40-11:05 E06-53(I)

基于液滴阵列微流控技术的高通量材料筛选平台

巫金波

上海大学

11:05-11:30 E06-54(I)

基于材料基因组工程的稀土永磁材料的成相规律研究

王江

桂林电子科技大学

11:30-11:45 E06-55(O)

光催化材料的并行合成与高通量表征

孙松\*, 高琛

中国科学技术大学国家同步辐射实验室、能源材料化学协同创新中心, 安徽合肥, 邮编 230029

11:45-12:00 E06-56(O)

高通量梯度材料制备方法

徐玉召<sup>1</sup>, 李静媛<sup>1</sup>, 赖慧颖<sup>1</sup>, 张源<sup>1</sup>, 祁明凡<sup>1</sup>, 谢建新<sup>2</sup>

1.北京科技大学材料科学与工程学院

2.北京科技大学新材料技术研究院

单元 E06-8: 7 月 15 日下午

主持人: 曾庆丰, 冯晶

地点: 会议中心 1C 会议室 (一楼)

主题: 计算, 数据科学

13:30-13:55 E06-57(I)

第一原理研究稀土钽酸盐的相变机理及陶瓷孪晶形成机制

冯晶

昆明理工大学

13:55-14:20 E06-58(I)

第一性原理高通量计算平台与材料应用案例

杨炯<sup>1</sup>, 席丽丽<sup>1</sup>, 骆军<sup>2,1</sup>, 刘斌<sup>2</sup>, 朱文浩<sup>3</sup>, 张文清<sup>4,1</sup>

1.上海大学 材料基因组工程研究院

2.上海大学 材料学院

3.上海大学 计算机学院

4.南方科技大学 物理系

14:20-14:45 E06-59(I)

特种防护材料基因数据库: 相图与材料设计

常可可

中国科学院宁波材料技术与工程研究所

14:45-15:00 E06-60(O)

新型钴基高温合金热/动力学数据库和相场法的耦合设计探索

卢勇<sup>1,2</sup>, 王翠萍<sup>1,2</sup>, 黄剑洪<sup>1</sup>, 刘兴军<sup>3,1,2</sup>

1.厦门大学厦门大学材料学院

2.福建省材料基因工程重点实验室

3.哈尔滨工业大学(深圳)材料科学与工程学院

15:00-15:15 E06-61(O)

ATF 包壳材料高通量计算设计初步研究

龚恒风<sup>1</sup>, 王宗国<sup>2</sup>, 徐伟<sup>1</sup>, 刘彤<sup>1</sup>, 李锐<sup>1</sup>

1.中广核研究院有限公司

2.中国科学院网络信息中心

15:15-15:30 E06-62(O)

纳米晶硬质合金室温和高温变形行为的分子动力学模拟研究

方婧, 刘雪梅, 王海滨, 宋晓艳

北京工业大学

15:30-15:50 茶歇

15:50-16:15 E06-63(I)

高通量航宇新材料的计算发现

曾庆丰, 张立同, 成来飞

西北工业大学材料学院超高温结构符合材料重点实验室

16:15-16:40 E06-64(I)

利用高通量计算和机器学习研究材料中点缺陷形成能与原子环境的关联

程影星, 祝令刚, 王冠杰, 周健, 孙志梅

北京航空航天大学

16:40-16:55 E06-65(O)

基于 BP 神经网络算法铝合金熔体粘度预测模型的研究

高源, 廖恒成, 锁晓静

东南大学 材料科学与工程学院, 江苏省先进金属材料高技术重点实验室 南京 211189

16:55-17:10 E06-66(O)

通过第一性原理研究 Pd-V 金属间化合物的稳定性、弹性及电子结构

周云轩<sup>1</sup>, 闫佩<sup>1</sup>, 种晓宇<sup>2</sup>, 冯晶<sup>1\*</sup>

1. 昆明理工大学材料科学与工程学院, 中国昆明, 650093

2. 美国宾夕法尼亚州立大学材料科学与工程系, 美国宾夕法尼亚州, 16802

17:15-17:30 闭幕式及墙报奖颁奖仪式(会议中心 1B 会议室(一楼))

单元 E06-9: 7 月 15 日下午

主持人: 尹海清, 薛德祯

地点: 会议中心 1B 会议室(一楼)

主题: 高通量实验, 数据科学

13:30-13:55 E06-67(I)

机器学习辅助快速材料设计

薛德祯<sup>1</sup>, 袁瑞豪<sup>1</sup>, 丁向东<sup>1</sup>, 孙军<sup>1</sup>, Turab Lookman<sup>2</sup>

1. 西安交通大学

2. 美国洛斯阿拉莫斯国家实验室

13:55-14:20 E06-68(I)

Uncertainty quantification in the estimation of bulk modulus

王鹏

北京航空航天大学

14:20-14:35 E06-69(O)

基于晶格结构相似性筛选层状铜-硫族化合物热电材料

高彦华, 张睿智

西北大学物理学院

14:35-14:50 E06-70(O)

基于数据挖掘技术的阻燃镁合金起燃温度研究

邓正华<sup>1</sup>, 尹海清<sup>1</sup>, 石鑫<sup>2</sup>

1. 北京科技大学

2. 重庆三峡学院

14:50-15:05 E06-71(O)

多组元 fcc 相铜合金扩散及原子移动性数据库

刘钰玲, 刘辉新, 刘树红, 杜勇

中南大学, 粉末冶金国家重点实验室, 湖南长沙 410083

15:05-15:20 E06-72(O)

利用机器学习预测对应不同化学成分的晶体结构

吴哲宇<sup>1,3</sup>, 惠健<sup>1,2</sup>, 张文浩<sup>1,2</sup>, 张澜庭<sup>1,2,4</sup>, 汪洪<sup>1,2</sup>

1. 上海交通大学 材料科学与工程学院, 上海

2. 上海交通大学 材料基因组联合研究中心, 上海

3. 上海交通大学 致远学院, 上海

4. 上海市先进高温材料及其精密成型重点实验室, 上海

15:20-15:50 茶歇

15:50-16:15 E06-73(I)

材料 4.0 时代下的材料数字化研发平台应用实践

王卓, 王磻

成都材智科技有限公司 (MatAi)

16:15-16:30 E06-74(O)

基于支持向量回归的铝合金收缩性的预测模型

赵宝军, 廖恒成, 锁晓静

东南大学

16:30-16:45 E06-75(O)

高丰度稀土永磁合金 RE-Fe-B 相图热力学数据库构建

姚青荣, 王江

桂林电子科技大学

16:45-17:00 E06-76(O)

超轻质多元合金的设计与高通量探索

贾岳飞, 王刚

上海大学材料研究所微结构重点实验室

17:15-17:30 闭幕式及墙报奖颁奖仪式(会议中心 1B 会议室(一楼))

墙展

E06-P01

一种多相相场计算框架 Phi++

吴平平

厦门工学院

E06-P02

基于深度学习的材料图像虚拟边界检测方法

赖传滨

上海大学

E06-P03

基于复杂网络的 TiB<sub>2</sub>-Ti 复合材料图像分割

宋磊磊

上海大学

E06-P04

不同材料表面电催化氮还原反应的理论研究

郭浩然<sup>1,2</sup>, 田子奇<sup>2</sup>, 李白海<sup>1,\*</sup>

1. 电子科技大学材料与能源学院, 四川省成都市高新西区西源大道 2006 号, 邮编: 611731

2. 中国科学院宁波工业技术研究院, 浙江省宁波市镇海区中官西路 1219 号, 邮编: 315201

E06-P05

钴基高温合金置换能的第一性原理计算与数据挖掘研究

肖斌, 金倩, 郭静, 王小梦, 刘轶\*

1. 上海大学材料基因组工程研究院, 上海大学

2. 上海大学物理系量子与分子结构国际中心, 上海大学

E06-P06

面向镍基高温合金的反应力场开发

杜婉<sup>1</sup>, 李慧<sup>1</sup>, 孙浚晔<sup>1</sup>, 刘轶<sup>1,2</sup>

1. 上海大学材料基因组工程研究院, 上海市

2. 上海大学物理系量子与分子结构国际中心, 上海市

E06-P07

纳米金属多层膜低温扩散的高通量研究方法

惠健<sup>1,2</sup>, 李伟喆<sup>1,3</sup>, 赵杰<sup>1,3</sup>, 马海乾<sup>1,3</sup>, ZhangXiaoyi<sup>4</sup>, 任杨<sup>4</sup>, 张澜庭<sup>1,2,5</sup>, 汪洪<sup>1,2</sup>

1. 上海交通大学 材料科学与工程学院, 上海

2. 上海交通大学 材料基因组联合研究中心, 上海

3. 上海交通大学 致远学院, 上海

4. 美国阿贡国家实验室, 芝加哥

5. 上海市先进高温材料及其精密成型重点实验室, 上海

E06-P08

Ni 基高温合金体系扩散动力学数据库的建立

王翠萍<sup>1</sup>, 秦诗洋<sup>1</sup>, 林远靖<sup>1</sup>, 卢勇<sup>1</sup>, 刘兴军<sup>2,1,\*</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, 福建厦门

2. 哈尔滨工业大学(深圳)材料科学与工程学院, 广东深圳

E06-P09

通过磷掺杂或空位的表面修饰制备 MXene (Ti<sub>2</sub>CO<sub>2</sub>) 的高活性和高电导率 HER 催化剂

王硕<sup>1,2</sup>, 吴阳<sup>1,\*</sup>, 张秋菊<sup>2,\*</sup>

1. 辽宁大学化学学院, 辽宁省沈阳市崇山中路 66 号

2. 中国科学院宁波工业技术研究院, 浙江省宁波市镇海区中官西路 1219 号

#### E06-P10

##### 基于统计理论的概率依赖的析出相强化模型

李甲<sup>1,2</sup>, 方棋洪<sup>1,2</sup>

- 1.湖南大学汽车车身先进设计制造国家重点实验室, 长沙
- 2.湖南大学机械与运载工程学院工程力学系, 长沙

#### E06-P11

##### 基于物理的 $\sigma$ 相二元摩尔体积建模

刘微<sup>1</sup>, 刘轶<sup>1,2,\*</sup>

- 1.上海大学, 材料基因组工程研究院, 上海
- 2.上海大学, 材料科学与工程学院, 上海

#### E06-P12

##### Zr-Fe-Cu 体系热力学优化及非晶形成能力预测

邹楠<sup>1</sup>, 陆海进<sup>1,2</sup>, 顾培文<sup>3</sup>, 王佳赞<sup>3</sup>, 沈剑韵<sup>4</sup>, 何燕霖<sup>1</sup>, 李麟<sup>1</sup>

- 1.上海大学材料科学与工程学院
- 2.Department of Materials Science and Engineering, University of Wisconsin-Madison
- 3.上海核工程研究设计院
- 4.北京有色金属研究院

#### E06-P13

##### Co-Mn-Mo 三元系 fcc 相互扩散系数的研究

吴雪婷

上海大学材料基因组工程研究院, 上海, 200444

#### E06-P14

##### 单相扩散偶模拟与 Kirkendall 面的计算

夏成辉<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

#### E06-P15

##### 机器学习在 EMTO-CPA 计算中的应用—Ni-Co-X 体系 Fcc 相形成能的集成计算

熊文浩<sup>1</sup>, 吴军明<sup>2</sup>, 刘悦<sup>2</sup>, 施思齐<sup>1,3</sup>, 鲁晓刚<sup>1,3</sup>

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

#### E06-P16

##### 结合机器学习对镍基合金中温蠕变模型的验证及完善

王治超<sup>1</sup>, 唐爱华<sup>2</sup>, 刘悦<sup>2</sup>, 施思齐<sup>1</sup>

- 1.上海大学材料科学与工程学院
- 2.上海大学计算机工程与科学学院

#### E06-P17

##### 基于机器学习的多尺度镍基单晶高温合金蠕变寿命预测

唐爱华<sup>1</sup>, 王治超<sup>2</sup>, 刘悦<sup>1</sup>, 施思齐<sup>2</sup>, 鲁晓刚<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-P18

##### 镍基高温合金置换能的第一性原理计算与数据挖掘研究 First-principles calculations and data mining of substitution energy in Ni-based superalloy

肖斌<sup>2</sup>, 吴雨沁<sup>1</sup>, 金倩<sup>1</sup>, 刘轶<sup>\*1, 2</sup>

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