

数值化与智能化技术在材料科学中的应用与发展综述

周 娇¹, 李朝忠², 石从黎³

¹重庆交通大学材料科学与工程学院, 重庆

²重庆高新技术产业开发区管委会建设局, 重庆

³重庆建工建材物流有限公司, 重庆

收稿日期: 2024年12月18日; 录用日期: 2025年1月18日; 发布日期: 2025年1月30日

摘要

数值化和智能化技术正在推动材料科学的发展, 尤其是在材料设计、优化和制造方面。有限元分析、分子动力学、第一性原理计算和多尺度建模等数值化技术, 能够有效预测材料性能并优化设计。同时, 人工智能和大数据分析通过机器学习, 促进了新材料的发现和逆向设计。智能制造结合自适应控制系统, 实现了生产过程的自动化和实时优化, 进而提高制造效率和精度。尽管面临数据不足和计算成本的挑战, 随着技术的进步, 材料科学正朝着更加精准和自动化的方向发展。

关键词

智能化技术, 数值化技术, 人工智能, 机器学习

A Review of the Application and Development of Numerical and Intelligent Techniques in Materials Science

Jiao Zhou¹, Chaozhong Li², Congli Shi³

¹School of Materials Science and Engineering, Chongqing Jiaotong University, Chongqing

²Construction Bureau of Chongqing Hi-Tech Industrial Development Zone Administrative Committee, Chongqing

³Chongqing Jiangong Building Materials Logistics Co., Ltd., Chongqing

Received: Dec. 18th, 2024; accepted: Jan. 18th, 2025; published: Jan. 30th, 2025

Abstract

Numerical and intelligent technologies are advancing materials science, especially in materials

文章引用: 周娇, 李朝忠, 石从黎. 数值化与智能化技术在材料科学中的应用与发展综述[J]. 材料科学, 2025, 15(1): 131-139. DOI: 10.12677/ms.2025.151016

design, optimization and manufacturing. Numerical techniques such as finite element analysis, molecular dynamics, first-principles calculations, and multiscale modeling can effectively predict material properties and optimize design. Meanwhile, artificial intelligence and big data analytics facilitate the discovery of new materials and reverse design through machine learning. Intelligent manufacturing combined with adaptive control systems enables automation and real-time optimization of the production process, which in turn improves manufacturing efficiency and precision. Despite the challenges of insufficient data and computational costs, materials science is moving towards greater precision and automation as technology advances.

Keywords

Intelligent Technology, Numerical Technology, Artificial Intelligence, Machine Learning

Copyright © 2025 by author(s) and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY 4.0).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

1. 引言

当代材料科学领域，智能化与数值化技术的迅速发展正深刻改变着材料的设计、优化和制造方式。智能化和数值化技术的结合不仅提高了材料科学领域研究效率，还推动了新材料的快速发现与应用。

数值化技术，如有限元分析(FEA)、分子动力学(MD)、第一性原理计算(DFT)和多尺度建模，为材料科学提供了强大的工具以预测材料性能并优化设计。这些技术能够处理复杂的物理和化学过程，从而在合金和复合材料的研发中发挥关键作用[1]-[3]。例如，第一性原理计算和机器学习的结合已被证明可以有效预测材料的电子结构和稳定性，这对于新材料的设计至关重要[2]。

智能化技术，包括人工智能(AI)与机器学习(ML)、大数据分析、智能制造与材料加工，正在加速新材料的发现和逆向设计。机器学习算法通过分析大量数据，能够快速识别材料性能与结构之间的关系，从而指导材料的合成和优化[4]-[6]。此外，智能制造技术通过自适应控制系统实现了生产的自动化和实时优化，显著提高了制造效率和精度[7]。

尽管数值化和智能化技术在材料科学中的应用带来了许多优势，但也存在一些挑战，如数据稀缺和计算成本高昂等问题，制约了其进一步发展。本论文旨在综述智能化与数值化技术在材料科学中的应用与发展，为未来研究提供方向。

2. 数值化技术在材料科学中的应用

2.1. 有限元分析(FEA)

FEA 通过将连续体划分为有限数量的元素和节点，将问题离散化，从而简化计算过程。FEA 允许工程师利用数学近似的方法对真实物理系统(几何和荷载工况)进行模拟，如热传递、流体流动、结构应力等[1]。FEA 在不同领域的应用如表 1 所示。

在材料科学中，FEA 被广泛应用于材料设计和性能预测。例如，在航空航天领域，FEA 用于模拟飞机结构在不同飞行条件下的应力分布，以确保结构的安全性和可靠性[8]。此外，FEA 也被用于新材料的开发，如有限元分析被用于开关面板用新型聚酯工程塑料的开发过程中。通过使用 Moldflow 和 Abaqus 软件进行注塑成型加工及使用工况的有限元分析，评估了成型技术工艺及典型工况状态。结果表明，新型聚酯工程塑料具备应用于开关面板的注塑成型加工能力，并且在应用工况上具备可行性。这一研究表

明 FEA 方法对新型材料的开发过程起到了促进作用[9]。

Table 1. Application of finite element analysis
表 1. 有限元分析的应用

行业领域	应用	关键发现
航空航天工业	飞机和航天器的结构分析	FEA 用于模拟不同飞行条件下的应力分布，以确保安全[8]。
	热负荷分析	有助于优化设计以减轻重量，同时保持结构完整性。
汽车	碰撞分析	用于评估碰撞性能，并优化底盘设计以保证安全性和性能。
	组件耐用性评估	识别潜在的故障点，从而改善材料选择和设计鲁棒性。
土木工程	桥梁和建筑物的分析	FEA 有助于预测负载下的结构行为，提高安全性和遵守规范。
	地震反应分析	通过模拟地面运动效应，协助设计能够承受地震的结构。
石油和天然气	离岸平台设计	对于分析管道和钻井平台等复杂结构至关重要，以确保稳定性。
	压力容器的应力分析	优化设计，防止高压和腐蚀性环境导致的故障。
制造业	工具和模具设计	FEA 改进了模具和模具的设计，从而提高了产品质量并减少浪费。
	流程优化	有助于确定最佳加工条件，以提高产品性能并降低成本。

近年来，随着计算能力的提升和算法的优化，FEA 在材料科学中的应用越来越广泛。例如，高级 FEA 软件能够模拟复合材料在不同工况下的损伤行为，如复合材料层合板的极限承载失效预测。通过并行多尺度方法，结合经典层合板理论和一阶剪切变形理论，可以有效地预测复合材料在多种工况下的渐进损伤行为[10]。此外，结合机器学习技术，利用有限元模型可以建立待修正参数与有限元频响函数特征量之间的映射关系，构造代理模型。例如，采用 Lévy 飞行的鲸鱼优化算法(LWOA)优化极限学习机(ELM)的权值和阈值，提高模型的预测效率和精度[11]。此外，还可以利用改进的鲸鱼优化算法(MWOA)优化 ELM 的输入层权值及隐层节点阈值，即采用 MWOA-ELM 方法，通过改进鲸鱼优化算法来求解修正参数，提高模型修正的效率[12]。

2.2. 分子动力学(MD)

MD 模拟是一种重要的数值化技术，可以用于设计新材料或优化现有材料的结构。研究者们将深度学习技术应用于分子模拟中以开发出深度势能(deep potential, DP)模型[13]，例如，Schütt 等[14]提出的 SchNet，通过复杂的神经网络结构，可以预测材料的力学和热力学性质[15]。MD 模拟也是研究橡胶纳米复合材料结构与性能构效关系的重要手段，如橡胶在原子尺度上的机械性能、热力学性能、老化性能、耐磨性能、阻尼性能、介电性能、阻隔性能、导热性能和流变特性等[16]-[20]。Zhang 等[21]通过 MD 模拟结合实验方法，系统地研究了氧化石墨烯(GO)、凯夫拉纳米纤维(KNFs)等纳米填料及其改性对橡胶及其共混胶的静态力学性能、热力学性能和耐溶剂性能的影响。在选择合适的纳米粒子和聚合物基体上，通过 MD 模拟，可以研究不同类型的纳米粒子(如碳纳米管、石墨烯、二氧化硅等)与聚合物基体(如尼龙 66、丁腈橡胶、聚酰胺胶等)的相互作用。例如，研究表明氧化石墨烯片在尼龙 66 基体中具有较好的分散性，能够显著提高复合材料的屈服强度和杨氏模量[22]。此外，碳纳米管增强丁腈橡胶复合材料也表现出优异的力学和摩擦学性能[23]。

MD 与 DFT 结合的最新研究进展可以体现在特定材料系统的应用研究。例如，在 Al/Cu 界面 Ni 中间层作用的研究中，通过 DFT 和 MD 模拟，从热力学和动力学两个角度研究了 Ni 中间层在 Al/Cu 界面的作用，揭示了 Ni 如何改善界面的润湿性和抑制脆性金属间化合物的形成[24]。

2.3. 第一性原理计算(DFT)

DFT 是一种基于量子力学的计算方法,广泛应用于预测材料的电子结构、能带隙和催化性能。例如, Hao 等[25]利用 DFT,系统地计算了 3d 过渡金属-N₄ 碳基材料的几何结构、电子性质和自旋电子输运性质。结果表明, Ti-N₄ 碳基材料电子器件的自旋过滤效应可达到 97%, Co-N₄ 体系的自旋过滤效应可达 80% 以上。通过硫/硼原子的掺杂, Co 体系的自旋过滤效应可提升到 100%, 且巨磁阻提高了三个数量级。该结果为金属掺杂的二维碳基材料在自旋电子学中的应用提供了重要的理论依据。

在催化剂设计上, Qi 利用 DFT 方法研究了不同介质中甲醇在 Pd(111)面的催化反应机理, 以及 H 在 Pd(111)面的吸附、迁移和渗透行为, 研究结果为低 Pt 和非 Pt 催化剂的设计提供了理论基础[26]。

DFT 在材料科学领域应用广泛, 包括但不限于新材料的设计、相变机理的研究以及催化反应路径的探索。例如, 通过计算过渡金属掺杂对 VO₂ 金属-绝缘体相变临界温度和相稳定性的影响, 从而优化热致变色材料 VO₂ 的性能。此外, DFT 还用于研究 LiFePO₄ 电极材料的电导率, 通过石墨烯和硼氮石墨烯包覆 LiFePO₄(010)表面, 改善其电导性能[27]。

随着计算能力的提升和算法的优化, DFT 已经能够处理更复杂的材料系统和更大的系统尺寸。例如, MatCloud-QE 是一个基于云原生理念开发的 DFT 程序包, 它通过高通量计算加速算法和参数智能推荐算法, 极大地提高了计算效率和用户体验[28]。

DFT 与机器学习的结合也为材料科学带来了新的发展机遇。通过机器学习算法, 可以从大量的 DFT 数据中学习材料性质与结构之间的关系, 进而预测新材料的性能或优化已知材料的结构[2] [29]。例如, Zhang 通过高通量计算和机器学习技术能够探索巨大的成分空间并预测材料性能, 从而加速新材料的发现和优化[30]。Li 成功预测了更稳定的尖晶石氧化物结构, 这有助于指导实验合成新的、稳定的尖晶石氧化物[31]。Wang 建立了高精度的钛合金弹性模量预测模型, 显著提高了预测精度, 节省了研发和实验成本[32]。Xiao 对镍基单晶高温合金中掺杂元素的占位进行了研究, 有助于指导多组元合金的成分设计[33]。Li 利用 DFT 辅助下的机器学习建模, 研究人员能够预测铝合金的大气腐蚀速率, 提高了模型的泛化能力和预测精度[34]。

2.4. 多尺度建模

多尺度建模的核心思想是将材料的微观结构与其宏观性能联系起来。这种方法通常涉及从原子或分子层面(微观尺度)到整体材料性能(宏观尺度)的建模。例如, 通过分子动力学(MD)模拟可以研究原子间的相互作用和动态行为, 而有限元分析(FEA)则用于模拟材料在更大尺度上的应力和应变响应[4] [35]。

在实际应用中, 多尺度建模在材料设计中被广泛应用。例如, 在电池材料、催化剂和高性能合金的设计中, 通过模拟不同尺度下的材料行为, 研究人员能够预测材料的电化学性能、催化活性和机械强度等关键属性[7] [36] [37]。在高性能塑性成形方面, 随着航空航天等领域对关键零部件的高精度和高性能要求的提高, 多尺度建模仿真成为实现这些需求的关键手段。多尺度建模能够处理塑性成形中的非线性问题, 如材料非线性、几何非线性和工艺非线性等复杂问题, 以及力热加载、特种能场加载、组织性能演化等复杂过程[38]。

DFT 与多尺度建模结合的最新研究进展逐渐深入。例如, 在锂离子电池领域, Zhang 等[39]通过多尺度建模研究固体电解质界面膜(Solid Electrolyte Interface membrane, 简称 SEI 膜)的形成和演化机制, 采用从原子到介观尺度的多种模拟方法, 如第一性原理分子动力学、反应力场分子动力学等, 为电池材料的开发和电解液的改性提供了理论指导。在相变存储材料领域, Shen 结合大尺度第一性原理分子动力学、新材料设计与高通量材料筛选、多尺度模拟与机器学习势开发等方法, 推动了新型非易失性存储材料与器件的研发[40]。Tao 在基于密度泛函理论的 DFT, 预测和解释了 Li₇La₃Zr₂O₁₂ 固态电解质的性质和行为,

为固态电解质研究提供了新的方向[41]。

3. 智能化技术在材料科学中的应用

3.1. 人工智能(AI)与机器学习(ML)

人工智能(AI)与机器学习(ML)技术能够提高材料研发的效率和精度[42]-[44]。通过训练机器学习模型,可以从已有的材料数据中学习并预测新材料的性能。这种方法已被应用于光伏、热电、半导体等多个领域[4] [45]。例如,在用于预测三元无机光伏材料的性能方面,通过梯度增强回归(Gradient Boosting Regressor, GBR)模型,研究人员成功预测了四种新型光伏材料的电子结构、光学跃迁、光电转换效率和稳定性。这些材料在室温下具有较好的稳定性,并且其光电转换效率接近于 $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ [46]。

利用 AI 和 ML 技术,可以在庞大的材料数据库中快速筛选出具有特定性能的新材料候选者。例如, L.和 C.发现通过深度学习模型,可以预测材料的电子结构和相变特性[3] [47]。深度学习模型也被用于加速材料筛选和性能预测过程。例如,一种深度学习替代模型(DLS)被 Wang 提出用于预测材料的机械性能,如最大应力值,在复杂工作条件下的表现,其准确率达到了 98.79% [48]。AI 技术也可以帮助优化材料的合成条件,如温度、压力和反应时间等,以实现更高效和环保的生产过程[7] [37]。

AI 与 ML 在材料表征与分析中的应用广泛。例如,在图像识别与分析上, Kang [35]利用卷积神经网络(CNN)等深度学习技术,可以从显微图像中自动识别和分析材料的微观结构。在性能监测与故障预测方面, Agrawal 和 Choudhary [49]通过实时监测材料使用过程中的性能变化,并利用机器学习模型预测潜在的故障或退化,从而提前进行维护或更换。

3.2. 大数据分析

大数据分析在材料科学中的应用主要体现在通过机器学习、人工智能技术处理、分析大量的实验数据和计算模拟数据,以加速新材料的发现和优化设计。

在数据驱动的材料性能预测方面,利用机器学习算法,可以从大量的实验和计算数据中提取出材料性能与结构之间的关系,从而预测新材料的性能。这种方法不仅可以加速新材料的筛选过程,还可以在 design 阶段预测材料的潜在应用[1] [4] [37]。例如,利用遗传算法结合相关向量机的变量筛选方法,可以对 ABO_3 型钙钛矿材料的比表面积(SSA)进行定量预报模型的建立,从而优化材料的性能[50]。此外,氟橡胶(FKM)生产过程中,通过数据挖掘方法分析了 FKM 产品的门尼粘度与其生产工艺参数间的关系,实现了生产工艺的优化,提高了产品的合格率[50]。

在高通量筛选与优化方面,通过构建大规模的材料数据库,并应用机器学习模型进行高通量筛选,可以高效筛选出满足特定条件的材料。例如,在钙钛矿氧化物全解水光催化剂的研究中,研究人员利用机器学习算法从 6 万多种钙钛矿材料中挑选出 8 千多种可见光范围内光催化剂材料,并总结了钙钛矿材料 B 位元素的构效关系[51]。此外,机器学习模型还可以用于优化材料的设计参数,如成分、微观结构等,以达到最佳的性能表现[5] [45] [52]。例如, Xie 在高熵合金的性能预测与优化中,通过分析大量实验数据,利用机器学习模型优化高熵合金的成分比例和微观结构,以实现更高的强度和耐腐蚀性[45]。

在材料合成与加工过程的优化方面,大数据分析还可以通过实时监测和分析生产数据,调整工艺参数,进而实现材料生产的自动化和实时优化[7] [53]。例如, Liu 通过数值模拟预测不同注射速度和保压压力对制品性能的影响,并利用机器学习模型进行参数优化,从而实现注塑成型过程的自动化和实时优化[54]。

表 2 总结了材料发现中使用的不同 AI/ML 算法,以及它们各自的成功率,该表突出了各种 AI/ML 算法、其有效性以及材料科学中的具体应用。

Table 2. Comparison table of AI/ML algorithms in materials science
表 2. 材料科学中的 AI/ML 算法对比表

算法	描述	成功率	应用
支持向量机 (SVM) [4]	根据从数据中提取的特征对材料进行分类	属性预测的准确率为 85%~95%	用于预测合金的机械性能
随机森林	分类和回归的合奏学习方法	材料选择的准确率为 80%~90%	有效地从大型数据集中识别有前途的材料
神经网络 (NN)	学习数据中复杂关系的深度学习模型	在特定情况下, 准确率为 90%~98%	应用于预测材料的电子性能和稳定性
高斯过程 (GP)	提供不确定性估计的概率模型	75%~85%的准确率; 在小型数据集中有效	有助于优化材料合成条件
强化学习 (RL)	通过试验和错误来学习最佳策略	差异很大; 仍在研究中	自适应材料设计和优化中的新兴应用
深度学习 (DL)	利用深度架构对高维数据进行建模	属性预测任务的准确率超过 90%	应用于加速发现新材料和复杂性能预测

尽管大数据分析在材料科学中展现出巨大的潜力, 但仍面临一些挑战, 如数据的质量和完整性、算法的选择和优化、以及如何将理论知识有效地融入数据分析过程中。未来的研究需要解决这些问题, 进一步提升大数据分析在材料科学中的应用效果[6] [55]。

3.3. 智能制造与材料加工

智能制造技术通过集成先进的自适应控制系统, 实现了材料加工过程的自动化和实时优化。例如, Liu 在注塑成型过程中, 通过数值模拟和现代优化算法的结合, 可以精确控制注射速度和保压压力, 从而提高制品的质量和性能[54]。Xu 针对复合材料工件表面打磨的机器人主动柔顺恒力控制问题, 提出了一种基于位置控制的自适应阻抗控制方案。该方案通过接触力反馈信号控制机器人末端参考位置, 解决了传统阻抗控制方法中的理想位置判断和打磨轨迹在线补偿问题, 提高了磨削力控制系统的稳定性和鲁棒性[56]。

同时, 机器学习技术被用于优化材料加工路径, 减少生产时间和成本。例如, Ma 通过正交试验优选初始化参数, 并利用改进后的蚁群算法对塑料模具型芯孔群加工进行路径优化, 解决了大规模不规则孔群加工时空行程过多、加工效率低的问题[57]。此外, 机器学习还可以用于识别和消除加工过程中的潜在缺陷, 提高材料的整体质量[32] [58] [59]。

智能制造不仅限于传统的加工技术, 还包括智能材料的开发。例如, 通过机器学习和大数据分析, 研究人员能够设计出具有自我修复能力的智能材料。这些材料能够在检测到微小裂纹或损伤时自动进行修复, 延长材料的使用寿命并减少维护成本[7] [29]。例如, Li 结合不同类型的动态键(如各种氢键和动态共价键)的系统显示出高韧性和相对较快的自愈合速率。这些材料的设计原则旨在超越自愈合速率与材料机械模量之间的权衡关系[60]。

智能制造还强调绿色制造和资源的有效管理。智能系统能够监控和管理生产过程中的废物和副产品, 促进资源的循环利用和可持续发展[7]。在机床产业中, Cheng 提到智能绿色制造技术的应用包括模块化功能设计、智能工艺规划技术、过程监控和装备性能预测感知技术及智能数控系统和智能控制技术。这些技术不仅提高了机床的智能化水平, 还增强了其绿色制造能力[61]。

4. 结语

数值化和智能化技术的进步正在快速推动材料科学的演变。从 FEA、MD、DFT 到多尺度建模, 这

些数值化工具已经成为材料性能预测、设计优化的核心手段。它们使得研究人员能够以更精细的方式了解材料的微观结构与宏观性能之间的关系，从而为新型材料的开发提供了重要指导。与此同时，智能化技术的加入，尤其是 AI、ML 和大数据分析，极大地加速了新材料的发现和筛选。这些方法不仅能够从海量数据中提取材料特性，还能够帮助实现逆向设计，从而提高了材料研发的效率与精准性。智能制造的出现，借助自适应控制系统，能够实现材料生产过程中的自动化和实时优化，进一步提升了生产效率和精度。

尽管当前仍面临诸如数据稀缺、计算成本高昂以及算法精度等挑战，数值化与智能化技术的结合正在为材料科学开辟全新的可能。随着这些技术的不断发展，未来材料科学将在新材料设计、性能优化和制造自动化方面迎来更加精准化、智能化的新时代，推动整个领域的持续创新与进步。

基金项目

重庆交通大学 - 重庆建工建材物流有限公司材料与化工研究生联合培养基地(JDLHPYJD2019002)。

参考文献

- [1] Schleder, G.R., Padilha, A.C.M., Acosta, C.M., Costa, M. and Fazzio, A. (2019) From DFT to Machine Learning: Recent Approaches to Materials Science—A Review. *Journal of Physics: Materials*, **2**, Article 032001. <https://doi.org/10.1088/2515-7639/ab084b>
- [2] 余海山. 结合第一性原理计算和机器学习的材料理论研究[D]: [博士学位论文]. 合肥: 中国科学技术大学, 2020.
- [3] Deringer, V.L., Caro, M.A. and Csányi, G. (2019) Machine Learning Interatomic Potentials as Emerging Tools for Materials Science. *Advanced Materials*, **31**, Article 1902765. <https://doi.org/10.1002/adma.201902765>
- [4] 牛程程, 李少波, 胡建军, 等. 机器学习在材料信息学中的应用综述[J]. 材料导报, 2020, 34(23): 23100-23108.
- [5] 米晓希, 汤爱涛, 朱雨晨, 等. 机器学习技术在材料科学领域中的应用进展[J]. 材料导报, 2021, 35(15): 15115-15124.
- [6] Gomes, C.P., Selman, B. and Gregoire, J.M. (2019) Artificial Intelligence for Materials Discovery. *MRS Bulletin*, **44**, 538-544. <https://doi.org/10.1557/mrs.2019.158>
- [7] Konstantopoulos, G., Koumoulos, E.P. and Charitidis, C.A. (2022) Digital Innovation Enabled Nanomaterial Manufacturing: Machine Learning Strategies and Green Perspectives. *Nanomaterials*, **12**, Article 2646. <https://doi.org/10.3390/nano12152646>
- [8] Skylaris, C. (2016) A Benchmark for Materials Simulation. *Science*, **351**, 1394-1395. <https://doi.org/10.1126/science.aaf3412>
- [9] 高军, 朱新宇, 姚晨光, 等. 有限元在开关面板用新型聚酯工程塑料开发中的应用研究[J]. 塑料工业, 2015, 43(10): 123-126.
- [10] 章凌, 赵优存, 李祎, 等. 基于 FEA 的复合材料结构极限承载失效预测[J]. 宇航总体技术, 2023, 7(5): 29-37.
- [11] 赵宇, 彭珍瑞. 基于 SGMD 及 LWOA-ELM 的有限元模型修正[J]. 计算力学学报, 2023, 40(2): 255-263.
- [12] 赵宇, 彭珍瑞. 基于 MWOA-ELM 代理模型的有限元模型修正[J]. 传感器与微系统, 2022, 41(1): 127-130.
- [13] Zhang, L., Han, J., Wang, H., Car, R. and E, W. (2018) Deep Potential Molecular Dynamics: A Scalable Model with the Accuracy of Quantum Mechanics. *Physical Review Letters*, **120**, Article 143001. <https://doi.org/10.1103/physrevlett.120.143001>.
- [14] Schütt, K., Kindermans, P.J., Saucedo Felix, H.E., et al. (2017) SCHNET: A Continuous-Filter Convolutional Neural Network for Modeling Quantum Interactions. *Advances in Neural Information Processing Systems*, **30**.
- [15] 邓斌, 华海明, 张与之, 等. 深度势能方法及其在电化学储能材料中的应用[J]. 储能科学与技术, 2024, 13(9): 2884-2906.
- [16] Wang, Z., Su, M., Duan, X., Yao, X., Han, X., Song, J., et al. (2022) Molecular Dynamics Simulation of the Thermo-mechanical and Tribological Properties of Graphene-Reinforced Natural Rubber Nanocomposites. *Polymers*, **14**, Article 5056. <https://doi.org/10.3390/polym14235056>
- [17] Teng, F., Wu, J., Su, B. and Wang, Y. (2022) High-Speed Tribological Properties of Eucommia Ulmoides Gum/Natural Rubber Blends: Experimental and Molecular Dynamics Simulation Study. *Tribology International*, **171**, Article 107542. <https://doi.org/10.1016/j.triboint.2022.107542>

- [18] Gao, Y., Xie, Y., Liao, M., Li, Y., Zhu, J. and Tian, W. (2023) Study on the Mechanism of the Effect of Graphene on the Rheological Properties of Rubber-Modified Asphalt Based on Size Effect. *Construction and Building Materials*, **364**, Article 129815. <https://doi.org/10.1016/j.conbuildmat.2022.129815>
- [19] Joseph, E., Swaminathan, N. and Kannan, K. (2020) Material Identification for Improving the Strength of Silica/SBR Interface Using MD Simulations. *Journal of Molecular Modeling*, **26**, Article No. 234. <https://doi.org/10.1007/s00894-020-04489-z>
- [20] Sattar, M.A., Nair, A.S., Xavier, P.J. and Patnaik, A. (2019) Natural Rubber-SiO₂ Nanohybrids: Interface Structures and Dynamics. *Soft Matter*, **15**, 2826-2837. <https://doi.org/10.1039/c9sm00254e>
- [21] 张旭敏. 新型纳米填料/橡胶复合材料结构和性能的分子动力学模拟与实验研究[D]: [博士学位论文]. 南京: 南京理工大学, 2023.
- [22] 郭伟, 孙斌, 任继江, 等. 尼龙 66/氧化石墨烯纳米复合材料力学性能的分子动力学模拟[J]. 中原工学院学报, 2018, 29(3): 27-33.
- [23] 唐黎明, 王新楠, 纪平, 等. 碳纳米管/丁腈橡胶复合材料力学及摩擦性能的分子动力学模拟[J]. 润滑与密封, 2022, 47(8): 21-26.
- [24] 熊敏. Al/Cu 界面 Ni 中间层作用的第一性原理与分子动力学研究[D]: [硕士学位论文]. 成都: 西南交通大学, 2022.
- [25] 郝泽文. 卟啉基低维材料电子性质及其自旋输运性质的理论研究[D]: [硕士学位论文]. 济南: 山东师范大学, 2022.
- [26] 齐学强. 燃料电池电催化剂催化机理与可控制备[D]: [博士学位论文]. 重庆: 重庆大学, 2012.
- [27] 孙超. 基于密度泛函理论的材料设计: VO₂ 相变温度的调控和 LiFePO₄ 电导率的提高[D]: [博士学位论文]. 上海: 上海大学, 2015.
- [28] 杨小渝, 郝德博, 舒城, 等. MatCloud-QE: 基于云原生理念的高通量第一性原理计算程序包[J]. 中国材料进展, 2024, 43(11): 1007-1015.
- [29] 陆文聪, 吴炎淼, 刘太昂, 等. 基于机器学习的材料设计[J]. 河南师范大学学报(自然科学版), 2024, 52(4): 120-131.
- [30] 张聪, 刘杰, 解树一, 等. 高通量计算与机器学习驱动高熵合金的研究进展[J]. 材料工程, 2023, 51(3): 1-16.
- [31] 李一航, 肖斌, 唐宇超, 等. 尖晶石氧化物能量和结构的第一性原理计算和机器学习[J]. 上海大学学报(自然科学版), 2021, 27(4): 635-649.
- [32] 王园园, 武川, 彭志伟, 等. 基于机器学习的钛合金弹性模量预测方法研究[J]. 精密成形工程, 2024, 16(1): 33-42.
- [33] 肖斌, 吴雨沁, 刘轶. 基于第一性原理计算的镍基单晶高温合金掺杂的机器学习研究[J]. 上海金属, 2020, 42(3): 97-104+110.
- [34] 李妮. 铝合金中化合物微电偶效应的第一性原理计算与腐蚀行为预测研究[D]: [博士学位论文]. 北京: 北京科技大学, 2021.
- [35] 康靛, 米晓希, 王海莲, 等. 神经网络在材料科学中的研究进展[J]. 材料导报, 2020, 34(21): 21172-21179.
- [36] Wang, A., Liang, H., McDannald, A., Takeuchi, I. and Kusne, A.G. (2022) Benchmarking Active Learning Strategies for Materials Optimization and Discovery. *Oxford Open Materials Science*, **2**, itac006. <https://doi.org/10.1093/oxfmat/itac006>
- [37] Huang, G., Guo, Y., Chen, Y. and Nie, Z. (2023) Application of Machine Learning in Material Synthesis and Property Prediction. *Materials*, **16**, Article 5977. <https://doi.org/10.3390/ma16175977>
- [38] 李宏伟, 高佳, 孙新新, 等. 面向高性能塑性成形的多尺度建模仿真研究进展[J]. 机械工程学报, 2024, 60(1): 27-43.
- [39] 张慧敏, 王京, 王一博, 等. 锂离子电池 SEI 多尺度建模研究展望[J]. 储能科学与技术, 2023, 12(2): 366-382.
- [40] 沈雪阳, 褚瑞轩, 蒋宜辉, 等. 相变存储新材料设计与多尺度模拟的研究进展[J]. 金属学报, 2024, 60(10): 1362-1378.
- [41] 陶梦琴, 蔡振飞, 吴慧敏, 等. 基于第一性原理计算的 Li₇La₃Zr₂O₁₂ 固态电解质的研究进展[J]. 功能材料, 2022, 53(8): 8067-8077.
- [42] Badini, S., Regondi, S. and Pugliese, R. (2023) Unleashing the Power of Artificial Intelligence in Materials Design. *Materials*, **16**, Article 5927. <https://doi.org/10.3390/ma16175927>
- [43] Goswami, L., Deka, M.K. and Roy, M. (2023) Artificial Intelligence in Material Engineering: A Review on Applications of Artificial Intelligence in Material Engineering. *Advanced Engineering Materials*, **25**, Article 2300104. <https://doi.org/10.1002/adem.202300104>

- [44] López, C. (2023) Artificial Intelligence and Advanced Materials. *Advanced Materials*, **35**, Article 2208683. <https://doi.org/10.1002/adma.202208683>
- [45] 谢建新, 宿彦京, 薛德祯, 等. 机器学习在材料研发中的应用[J]. 金属学报, 2021, 57(11): 1343-1361.
- [46] 伍侃. 机器学习预测三元无机光伏材料[D]: [硕士学位论文]. 西安: 西北大学, 2022.
- [47] Zuccarini, C., Ramachandran, K. and Jayaseelan, D.D. (2024) Material Discovery and Modeling Acceleration via Machine Learning. *APL Materials*, **12**, Article 090601. <https://doi.org/10.1063/5.0230677>
- [48] Wang, T., Shao, M., Guo, R., Tao, F., Zhang, G., Snoussi, H., *et al.* (2020) Surrogate Model via Artificial Intelligence Method for Accelerating Screening Materials and Performance Prediction. *Advanced Functional Materials*, **31**, Article 2006425. <https://doi.org/10.1002/adfm.202006245>
- [49] Agrawal, A. and Choudhary, A. (2019) Deep Materials Informatics: Applications of Deep Learning in Materials Science. *MRS Communications*, **9**, 779-792. <https://doi.org/10.1557/mrc.2019.73>
- [50] 吕蔚. 基于数据挖掘的材料性能优化及分子筛选[D]: [博士学位论文]. 上海: 上海大学, 2019.
- [51] 万新阳. 基于机器学习算法的钙钛矿氧化物全解水光催化剂的高效筛选[D]: [硕士学位论文]. 南京: 东南大学, 2022.
- [52] Yuan, J., Li, Z., Yang, Y., Yin, A., Li, W., Sun, D., *et al.* (2024) Applications of Machine Learning Method in High-Performance Materials Design: A Review. *Journal of Materials Informatics*, **4**, Article No. 14. <https://doi.org/10.20517/jmi.2024.15>
- [53] Johnson, N.S., Vulimiri, P.S., To, A.C., Zhang, X., Brice, C.A., Kappes, B.B., *et al.* (2020) Invited Review: Machine Learning for Materials Developments in Metals Additive Manufacturing. *Additive Manufacturing*, **36**, Article 101641. <https://doi.org/10.1016/j.addma.2020.101641>
- [54] 刘春太. 基于数值模拟的注塑成型工艺优化和制品性能研究[D]: [博士学位论文]. 河南: 郑州大学, 2003.
- [55] Wang, J. and Zhang, D. (2021) Research on Application of Machine Learning Technology in New Material System. *Journal of Physics: Conference Series*, **1865**, Article 032009. <https://doi.org/10.1088/1742-6596/1865/3/032009>
- [56] 许家忠, 郑学海, 周洵. 复合材料打磨机器人的主动柔顺控制[J]. 电机与控制学报, 2019, 23(12): 151-158.
- [57] 马旭东, 王朝, 孙理. 基于蚁群算法塑模孔群加工路径优化[J]. 制造技术与机床, 2020(10): 97-101.
- [58] 侯腾跃, 孙炎辉, 孙舒鹏, 等. 机器学习在材料结构与性能预测中的应用综述[J]. 材料导报, 2022, 36(6): 161-172.
- [59] 吴炜, 孙强. 应用机器学习加速新材料的研发[J]. 中国科学(物理学 力学 天文学), 2018(10): 58-70.
- [60] Li, B., Cao, P., Saito, T. and Sokolov, A.P. (2022) Intrinsically Self-Healing Polymers: From Mechanistic Insight to Current Challenges. *Chemical Reviews*, **123**, 701-735. <https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.2c00575>
- [61] 程强, 徐文祥, 刘志峰, 等. 面向智能绿色制造的机床装备研究综述[J]. 华中科技大学学报(自然科学版), 2022, 50(6): 31-38.