

论坛五十一 (051) . AI 赋能新材料设计与智造

分会主席: 张 锦 鄂维南 韩高荣

单元 051-1: 10 月 9 日下午

主持人: 莫凡洋, 郑家新

地点: B2-05

13:30-13:40

分会主席致辞

13:40-14:05 A051-01

大模型发展现状与未来展望

黄铁军

北京大学信息科学技术学院

北京智源人工智能研究院

14:05-14:30 A051-02

ALKEMIE 赋能新材料发现与性能调控

孙志梅

北京航空航天大学材料科学与工程学院

14:30-14:55 A051-03

人工智能加速从头算电化学

程俊

固体表面物理化学国家重点实验室

厦门大学化学化工学院

14:55-15:10 A051-04

AI 驱动的跨尺度材料模拟计算

钟志诚

中国科学院磁性材料与器件重点实验室

中国科学院宁波材料技术与工程研究所

15:10 -15:25 A051-05

面向材料智能优化的智能软件平台构造与演化技术

许可乐

国防科技大学计算机学院

15:25-15:35 茶歇

15:35-16:00 A051-06

基于图论和 AI 的材料基因探索: 应用于锂电池材料研发

潘锋

北京大学深圳研究生院新材料学院

16:00 -16:25 A051-07

机器学习辅助材料分子性质的研究

马晶

南京大学理论与计算化学研究所

16:25-16:40 A051-08

基于 AI for Science 方法的半导体工艺和器件设计

刘杰

湖南大学电气与信息工程学院

16:40-16:55 A051-09

机器学习助力锂电池材料研发

郑家新

北京大学深圳研究生院新材料学院

深圳屹良科技有限公司

16:55-17:10 A051-10

深度势能准确预测钛和镍金属中的缺陷性质

文通其

香港大学机械工程系

17:10-17:25 A051-11

机器学习辅助钙钛矿光电材料的开发与优化

刘哲

西北工业大学材料学院

17:25-17:40 A051-12

虚实融合赋能材料创新

张亮

达索系统技术咨询部 BIOVIA 技术总监

17:40-17:55 A051-12

AI4S 业界进展及 MindSpore 实践

于璠

华为技术有限公司

AI4Sci LAB

单元 051-2: 10 月 10 日上午

主持人: 张林峰, 王笑楠

地点: B2-05

08:30-08:55 A051-01

Construct exchange-correlation functional via machine learning and delta-learning method

陈冠华

WANG Hong Kong Quantum AI Lab

08:55-09:20 A051-02

锂键化学推动锂电池高质量发展

张强

清华大学化学工程系

09:20-09:35 A051-03

基于 AI4S 的化学材料高效设计合成表征与智造平台

王笑楠

清华大学化学工程系

09:35-09:50 A051-04

机器智能辅助有机化合物色谱分离

莫凡洋
北京大学材料科学与工程学院

09:50-10:05 A051-05

以模拟计算和数据驱动加快电池材料的研发

徐博
广汽埃安新能源汽车股份有限公司

10:05-10:20 A051-06

结合 ML 和 DFT 加速杂化钙钛矿光电材料设计

吴天敏
福建师范大学光电与信息工程学院

10:20-10:35 茶歇

10:35-11:00 A051-07

数据与物理驱动分子计算平台的构建

高毅勤
北京大学化学与分子工程学院

11:00-11:25 A051-08

理实交融的机器化学家探索

江俊
中国科学技术大学化学与材料科学学院

11:25-11:40 A051-09

高效筛选新型发光材料：结合机器学习和计算分析的研究

欧琪
中石化石油化工科学研究院有限公司

11:40-11:55 A051-10

AI-assisted materials modeling: from multi-scale to pre-trained models

张林峰
北京科学智能研究院
北京深势科技有限公司

单元 051-3: 10 月 10 日下午

主持人: 北京深势科技有限公司

地点: B2-05

主题: 深势科技特邀培训: AI4S 时代电池研发新范式

13:30-13:50

AI4S 时代电池研发新范式: BDA 研发与实践平台

Piloteye

邓斌

13:50-14:50

Piloteye 正极研发: 正极脱嵌过程的电压、晶体结构、电子结构和锂离子迁移研究

张琳爽

14:50-15:50

Piloteye 电解液研发: 基础性、氧化还原电位与动力学性质的综合评估

曾博深

15:50-16:30

三维分子预训练模型 Uni-Mol 在液流电池中的应用

谢启明

16:30-17:30

Piloteye 电芯研发: 短期电性能预测和电化学模型参数辨识

苗嘉伟