

AI辅助先进电池设计与应用专刊



机器学习辅助相场模拟预测锂离子输运参数对电池枝晶最大生长高度和空间利用率的影响

李亚捷<sup>1</sup>, 王依平<sup>1</sup>, 陈斌<sup>1</sup>, 林海龙<sup>1</sup>, 张更<sup>2</sup>, 施思齐<sup>1,3</sup>

(<sup>1</sup>上海大学材料科学与工程学院, 上海 200444; <sup>2</sup>湖南理工学院机械工程学院, 湖南 岳阳 414006; <sup>3</sup>上海大学材料基因组工程研究院, 上海 200444)

**摘要:** 在锂电池反复充放电的过程中, 锂离子在负极表面的不均匀沉积会导致不可控的枝晶生长, 进而严重影响电池的安全性能。相场模拟方法是描述和预测枝晶生长的有力手段, 然而求解描述场变量演化的偏微分方程组对计算资源的要求较高。机器学习因能快速拟合历史数据中的潜在规律以实现材料性能的预测, 已被广泛应用于电池材料性能预测与筛选、电池健康状况评估等方面。本文以锂离子输运参数对电池枝晶形貌的影响为例, 通过相场模拟收集不同锂离子扩散系数与离子电导率对应的枝晶图像, 基于这些数据训练机器学习模型, 进而预测给定离子输运参数所对应的枝晶描述因子(枝晶最大生长高度和空间利用率)。结果表明K-最邻近(K-nearest neighbors)模型可以较为精准地刻画离子输运参数与两种枝晶描述因子之间的联系( $R^2$ 为0.995和0.992), 同时机器学习模型对锂离子输运参数与枝晶描述因子间构效关系的挖掘方式及枝晶描述因子的区间范围都会影响预测结果的准确性。本文能够有效降低计算成本, 有助于指导高效地设计具有枝晶抑制性能的电池材料体系。

**关键词:** 扩散系数; 离子电导率; 枝晶描述因子; 相场模拟; 机器学习

doi: 10.19799/j.cnki.2095-4239.2024.0513

中图分类号: TM 911

文献标志码: A

文章编号: 2095-4239 (2024) 09-2864-07

Machine learning-assisted phase-field simulation for predicting the impact of lithium-ion transport parameters on maximum battery dendrite height and space utilization rate

LI Yajie<sup>1</sup>, WANG Yiping<sup>1</sup>, CHEN Bin<sup>1</sup>, LIN Hailong<sup>1</sup>, ZHANG Geng<sup>2</sup>, SHI Siqi<sup>1,3</sup>

(<sup>1</sup>School of Materials Science and Engineering, Shanghai University, Shanghai 200444, China; <sup>2</sup>College of Mechanical Engineering, Hunan Institute of Science and Technology, Yueyang 414006, Hunan, China; <sup>3</sup>Materials Genome Institute, Shanghai University, Shanghai 200444, China)

**Abstract:** During the repeated charging and discharging processes of lithium-ion batteries, the uneven Li<sup>+</sup> deposition leads to uncontrollable dendrite growth on the electrode surface, severely affecting the battery's safety use. A phase-field simulation is a powerful tool for describing and predicting dendrite growth, while solving partial differential equations that describe the evolution of field variables requires high computational resources. Machine learning approaches that can quickly fit the underlying laws in historical data to predict

收稿日期: 2024-06-06; 修改稿日期: 2024-06-26。

基金项目: 国家自然科学基金(52102280, U2030206, 11874254), 国家重点研发计划(2021YFB3802104)。

第一作者: 李亚捷(1990—), 女, 博士, 研究方向为电池安全性能及相场模拟研究, E-mail: liyajiejuly@shu.edu.cn; 通信作者: 张更, 博士, 研究方向为相场模拟和数值算法, E-mail: geng.zhang@kaust.edu.sa; 施思齐, 教授, 研究方向为电化学储能材料的计算与设计、材料数据库与机器学习, E-mail: sqshi@shu.edu.cn。

引用本文: 李亚捷, 王依平, 陈斌, 等. 机器学习辅助相场模拟预测锂离子输运参数对电池枝晶最大生长高度和空间利用率的影响[J]. 储能科学与技术, 2024, 13(9): 2864-2870.

**Citation:** LI Yajie, WANG Yiping, CHEN Bin, et al. Machine learning-assisted phase-field simulation for predicting the impact of lithium-ion transport parameters on maximum battery dendrite height and space utilization rate[J]. Energy Storage Science and Technology, 2024, 13(9): 2864-2870.

material performance have been widely used in battery materials. This paper focuses on the effects of lithium-ion transport parameters on dendrite morphology. The corresponding dendrite images were first obtained from the phase-field simulation. The machine learning models were then trained to predict the dendrite metrics (maximum dendrite height and space utilization rate). The results show that the K-nearest neighbors model can accurately capture the relationship between lithium-ion transport parameters and dendrite metrics ( $R^2 = 0.995$  and  $0.992$ ). Meanwhile, the choice of machine learning models and the intervals of dendrite metrics all affect the accuracy of the results. This study can effectively save computational costs and contribute to the effective design of battery materials with dendrite suppression performance.

**Keywords:** diffusion coefficient; ionic conductivity; dendrite metrics; phase-field simulation; machine learning

在锂离子电池反复充放电过程中, 锂离子的不均匀沉积会导致枝晶的生长, 造成电池容量下降、库仑效率降低以及循环寿命缩短等<sup>[1]</sup>。在电池工作的过程中, 难以直接通过实验测量的方法实时观测枝晶微结构的演化等。相场模拟在微观和宏观模拟之间架起了桥梁, 是描述和预测材料微结构演化的有力计算方法<sup>[2-9]</sup>。在我们的前期工作中, 提炼出了相场模型在电池枝晶问题中的研究范式<sup>[10-11]</sup>, 自主开发了一套电化学相场模拟软件<sup>[12-13]</sup>, 借此厘清了隔膜微结构(孔径、厚度、表面涂覆粒子、基体倾斜角等)、电解液各向异性、交换电流密度、电解液浓度、温度及电压等因素对枝晶生长的影响规律与内在机理<sup>[14-19]</sup>, 推进了高安全性电池材料的设计。目前常见的相场模拟软件可以分为两类, 第一类是以 COMSOL Multiphysics 和 MOOSE(multiphysics object-oriented simulation environment) framework 等为代表的具有成熟框架的软件<sup>[2, 4, 20-21]</sup>, 它们的特点是研究者们主要需要关注要探究的问题本身, 根据模拟的体系确定场变量及其演化方程, 并构建出体系的自由能密度, 设置初始值和边界条件, 随后开始求解; 第二类是以 Fortran、MATLAB 等编程语言为代表的用户自行编写算法求解的模拟软件, 除了上述流程外, 还需要灵活根据具体研究内容设计收敛性好、计算效率高的算法<sup>[22]</sup>。由于在相场模拟的过程中, 需要求解描述场变量演化过程的耦合偏微分方程组, 为了达到较高的计算精度, 上述两类软件均需要较高的计算成本。

机器学习是基于数据驱动的方法, 针对特定的目标属性选取合适的描述符, 并对其进行有效表

征, 完成学习样本的构建, 进而进行机器学习建模和应用<sup>[23-25]</sup>。因其能快速拟合历史数据中的潜在规律并实现材料性能的预测, 已被广泛应用于电极/电解质材料的性能预测与筛选、电池健康状况评估等方面<sup>[26-29]</sup>。在我们的前期工作中, 厘清了数据驱动的机器学习应用于材料领域面临的三大矛盾: 高维度与小样本数据的矛盾、模型准确性与易用性的矛盾、模型学习结果与领域知识的矛盾, 并提出领域知识嵌入的机器学习方法以调和上述矛盾<sup>[23-24]</sup>。随后, 我们将材料领域专家对晶体结构影响锂固态电解质离子电导率的认知转化为特征重要度, 嵌入特征选择方法中, 成功遴选出 5 个符合认知的描述符, 借此构建的激活能预测模型的均方误差比特征选择前降低了 19%<sup>[30]</sup>。近期, 我们还定义并构建了钠离子超快离子导体(NASICON)型固态电解质离子输运性能描述符树, 预测了 NASICON 型固态电解质的离子输运性能<sup>[31]</sup>。

基于上述对相场模拟及机器学习方法的深入理解, 本文尝试将机器学习算法与相场模拟相结合来探究锂离子输运特性参数对电池枝晶生长的影响规律。在锂离子电池充放电过程中, 锂离子在电极及电解液中的输运过程及相关输运特性参数对电沉积过程至关重要。本文首先通过相场模拟方法得到了不同的离子输运参数(锂离子在电极和电解液中的扩散系数及离子电导率)所对应的描述因子(最大枝晶生长高度、空间利用率<sup>[19]</sup>)数值, 然后通过训练机器学习模型, 预测给定离子输运参数所对应的枝晶形貌描述因子数值, 以期最大限度地降低计算成本, 高效地设计具有枝晶抑制性能的电池材料体系。

## 1 方法

相场模拟涉及的模型、边界条件、参数等参照我们前期的研究工作<sup>[14, 16]</sup>。本文主要调节的参数为锂离子在电极和电解液中的扩散系数与离子电导率。

机器学习模型辅助相场模拟预测锂离子输运参数对电池枝晶最大生长高度和空间利用率的影响具体流程如下<sup>[32]</sup>。

(1) 目标定义：为了降低相场模拟的计算成本，我们使用机器学习辅助相场模拟预测枝晶形貌描述因子数值，将待研究的问题转化为机器学习建模任务。

(2) 数据准备：基于电化学相场模拟软件<sup>[12-13]</sup>，调节锂离子输运参数(锂离子在电极中的扩散系数 $D_s$ 、锂离子在电解液中的扩散系数 $D_l$ 、锂离子在电极中的离子电导率 $\sigma_s$ 、锂离子在电解液中的离子电导率 $\sigma_l$ )，进行了929次相场模拟，耗时310 h。

(3) 数据预处理：对相场模拟得到的枝晶图像进行预处理，引入最大枝晶生长高度及空间利用率来量化描述枝晶形貌，将复杂的图像转化为计算机可读、可理解的数据形式，并融入数据驱动的特征选择过程中，确保机器学习模型能够在领域知识的指导下对目标描述符进行精准选取。在整理相场数据时，筛选收敛结果差和明显偏离实际情况的数据，共保留了860条数据用于机器学习。随后，将相场模拟中用到的锂离子输运参数( $D_s$ 、 $D_l$ 、 $\sigma_s$ 、 $\sigma_l$ )和相场模拟得到枝晶描述因子数值以机器学习模型能识别的文件格式进行存储。

(4) 特征工程：选择锂离子输运参数( $D_s$ 、 $D_l$ 、 $\sigma_s$ 、 $\sigma_l$ )作为特征，同时选择枝晶描述因子中的最大枝晶生长高度( $\mu\text{m}$ )和空间利用率(%)作为目标性能。

(5) 模型选择与应用：本文采用了包括多层感知机(multilayer perceptron, MLP)、岭回归(ridge regression, Ridge)、支持向量回归(support vector regression, SVR)、K-最近邻算法(K-nearest neighbors, KNN)、决策树(decision tree)、极端随机树(extremely randomized tree)、随机森林(random forest)、自适应增强算法(AdaBoost)、梯度提升算法(gradient boosting)、装袋算法(Bagging)等10个候选机器学习模型。样本数据集按8:2划分为训练集和测试集，所有方

法结果均执行10次后取平均值。模型预测精度的评估指标主要采用决定系数(R-square,  $R^2$ )和均方根误差(root mean square error, RMSE)。

## 2 结果与讨论

图1展示了更改锂离子输运参数(将 $D_s$ 、 $D_l$ 、 $\sigma_s$ 、 $\sigma_l$ 更改为 $D'_s$ 、 $D'_l$ 、 $\sigma'_s$ 、 $\sigma'_l$ )后所得到的锂枝晶形貌(7 s时)。其中第2列所对应的模拟参数与我们前期论文中的模拟参数一致<sup>[16]</sup>，被用作基准组。将基准对照组中的 $D_s$ 乘以不同的系数(0.5、1、1.5、2)，得到图1中第1行的模拟结果，将基准对照组中的 $D_l$ 乘以不同的系数(0.5、1、1.5、2)，得到图1中第2行的模拟结果，将基准对照组中的 $\sigma_s$ 乘以不同的系数(0.5、1、1.5、2)，得到图1中第3行的模拟结果，将基准对照组中的 $\sigma_l$ 乘以不同的系数(0.5、1、1.5、2)，得到图1中第4行的模拟结果。

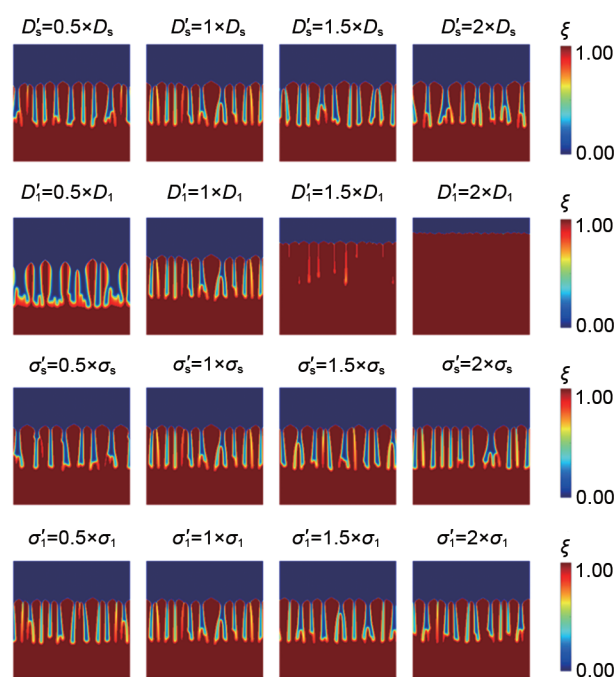


图1 在基准组<sup>[16]</sup>(第2列)的基础上，更改锂离子输运参数( $D'_s$ 、 $D'_l$ 、 $\sigma'_s$ 、 $\sigma'_l$ )后得到的锂枝晶形貌(7 s)

Fig. 1 Dendrite morphology in electrochemical system with different lithium-ion transport parameters ( $D'_s$ ,  $D'_l$ ,  $\sigma'_s$ ,  $\sigma'_l$ ) at 7 s, detailed simulation parameters of the benchmark group (the second column) are listed in ref<sup>[16]</sup>

可以看出，每个参数对枝晶形貌的影响程度不同。在实际的不同电池体系中，锂离子输运参数也很难保持独立改变而不影响其他参数。另外，相场模拟



应用门槛较高、模拟耗时较长、计算成本较高，这促使我们思考利用机器学习辅助相场模拟，来预测多种离子输运特性参数对枝晶形貌的影响。

随后，我们将不同机器学习模型预测的最大枝晶生长高度与实际相场模拟得到的最大枝晶生长高度的数值绘制在图2中，图中横坐标代表测试集索引，纵坐标所对应的数值为相场模拟和机器学习模型预测的最大枝晶生长高度，两者的趋势一致性越高代表机器学习模型拟合的效果越好。可以看出，在枝晶最大生长高度为 110  $\mu\text{m}$  附近，机器学习模型的拟合效果最好，这是由于相场模拟的结果多数分布在该范围内。当枝晶最大生长高度较低(80~100  $\mu\text{m}$ )和较高(130~140  $\mu\text{m}$ )时，提供给机器学习

的训练样本较少，导致如Ridge、SVR等模型在该范围内的拟合较差。这也证明了将机器学习应用于材料领域需要大量的数据及材料领域专业知识支撑。同样地，我们将不同机器学习模型预测的空间利用率与实际相场模拟得到的空间利用率的数值绘制在图3中。可以看出，当空间利用率为85%左右时，机器学习的拟合效果最好，这是由于在我们给定的离子输运参数范围内，枝晶的空间利用率大多在85%附近。从图2和图3可以看出，SVR模型的拟合效果最差，这是由于离子输运参数和枝晶描述因子之间存在一定线性关系，而SVR模型在处理线性数据时效果较差，因此根据特征和目标性能的关系对模型进行筛选也是必要的。

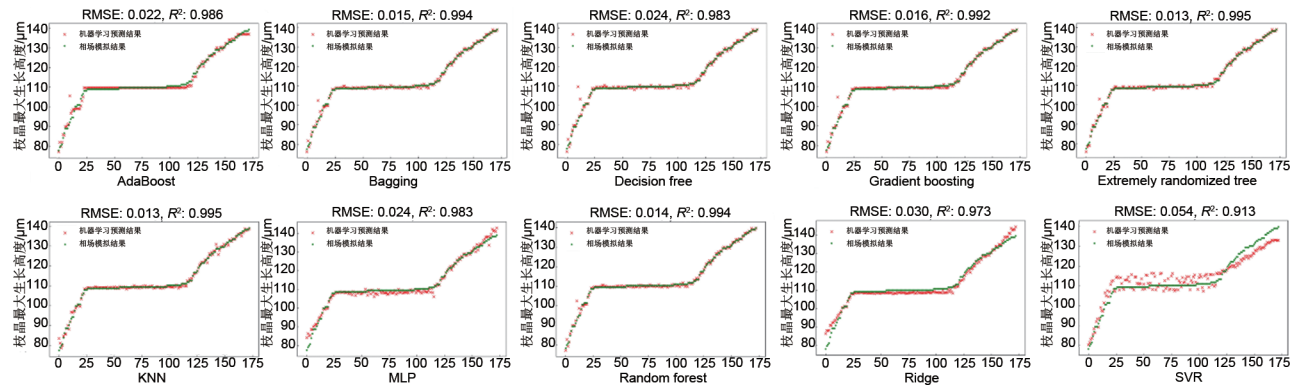


图2 10种机器学习模型预测的最大枝晶生长高度与实际相场模拟得到的最大枝晶生长高度对比  
Fig. 2 Maximum dendrite heights obtained from 10 machine learning models and phase-field simulations

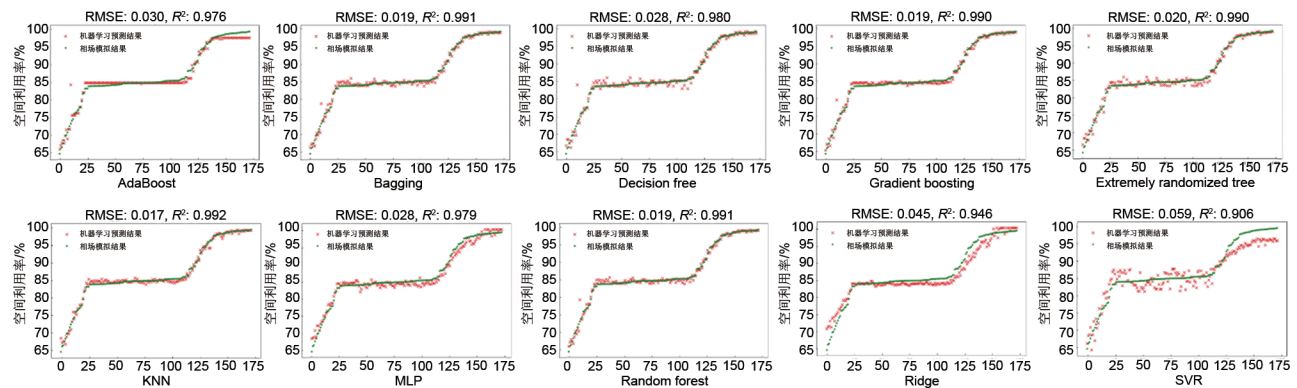


图3 10种机器学习模型预测的空间利用率与实际相场模拟得到的空间利用率对比  
Fig. 3 Space utilization rates obtained from 10 machine learning models and phase-field simulations

随后我们选定 $R^2$ (模型的 $R^2$ 越高拟合效果越好)和RMSE(模型的RMSE越低拟合效果越好)作为评估指标，计算了上述模型的 $R^2$ 和RMSE并总结于表1。从表1中可以看出，不同模型的模拟准确性不同，在本文中，最优模型为KNN，该模型在预测两种枝晶描述因子时，对应的 $R^2$ 最高，分别为

0.995 和 0.992，RMSE 最低，分别为 0.013 和 0.017。全部机器学习模型的 $R^2$ 均在0.9以上，表明传统机器学习模型可以很好地模拟离子输运参数对枝晶形貌的影响。与此同时，各机器学习模型对空间利用率的预测难度都要大于其对枝晶最大生长高度的预测难度(各机器学习模型对枝晶最大生长

表 1 10 种机器学习模型预测的最大枝晶生长高度和空间利用率的  $R^2$  和 RMSE

Table 1  $R^2$  and RMSE of 10 machine learning models in predicting maximum dendrite height and space utilization rate

机器学习模型	最大枝晶生长高度		空间利用率	
	$R^2$	RMSE	$R^2$	RMSE
AdaBoost	0.986	0.022	0.976	0.030
bagging	0.994	0.015	0.991	0.019
decision tree	0.983	0.024	0.980	0.028
gradient boosting	0.992	0.016	0.990	0.019
extremely randomized tree	0.995	0.013	0.990	0.020
KNN	0.995	0.013	0.992	0.017
MLP	0.983	0.024	0.979	0.028
random forest	0.994	0.014	0.991	0.019
Ridge	0.973	0.030	0.946	0.045
SVR	0.913	0.054	0.906	0.059

高度组的  $R^2$  高于空间利用率组，RMSE 低于空间利用率组)。

为了探究在不同的枝晶描述因子数值区间段中，机器学习模型预测结果的准确性，图 4 和图 5 中呈现了不同模型在不同枝晶最大生长高度区间与空间利用率区间内的 RMSE 分布。结果表明，不同模型在不同数据区间内的准确度不同，以综合准确度最优的 KNN 模型为例，当枝晶最大生长高度在

112~120  $\mu\text{m}$  时，预测最为精确，当空间利用率在 95%~100% 时，预测最为精确，而 SVR 模型在上述区间范围内预测效果不佳。同时可以发现，这 10 种模型在枝晶最大生长高度 88~96  $\mu\text{m}$  和空间利用率 65%~75% 的预测均具有较大的误差，这是由于上述两个区间对应的枝晶生长情况均较为极端，整体数据量较少，导致模型预测准确度下降。上述机器学习计算过程共耗时 25 s，相比于相场模拟，

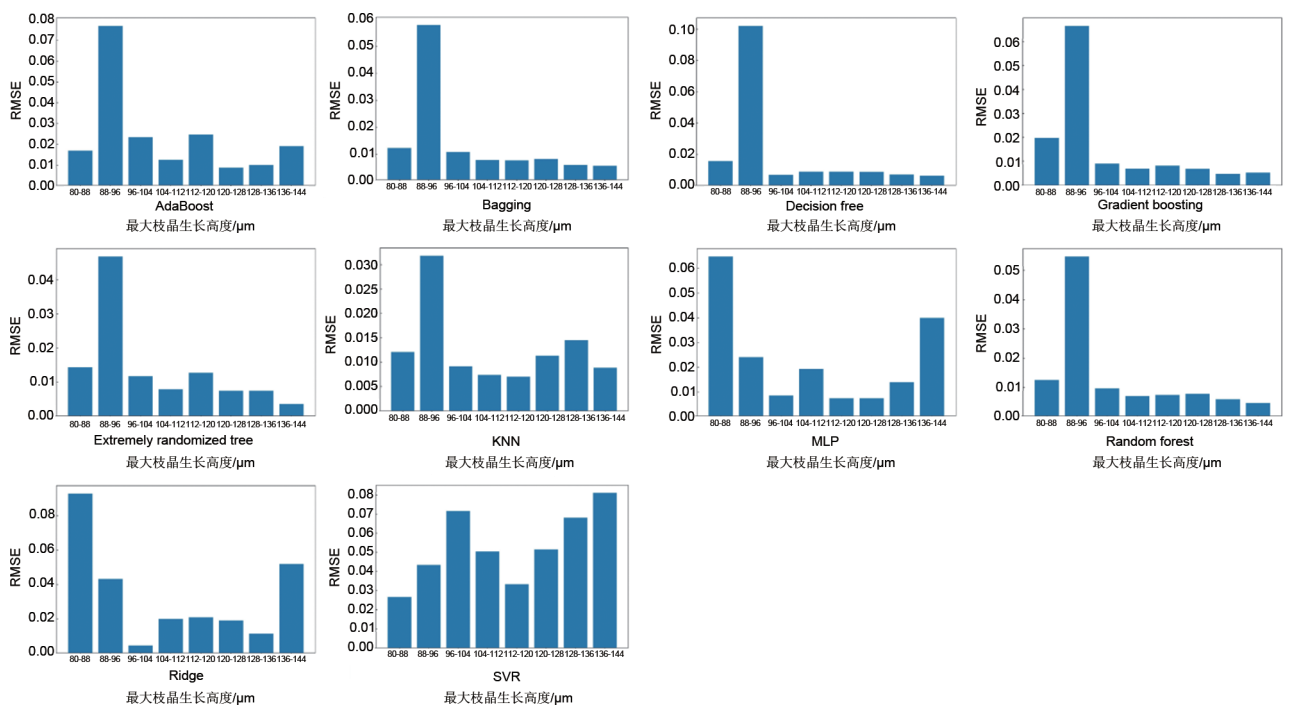


图 4 10 种机器学习模型在不同最大枝晶生长高度的 RMSE

Fig. 4 RMSE of 10 machine learning models in different maximum dendrite height intervals

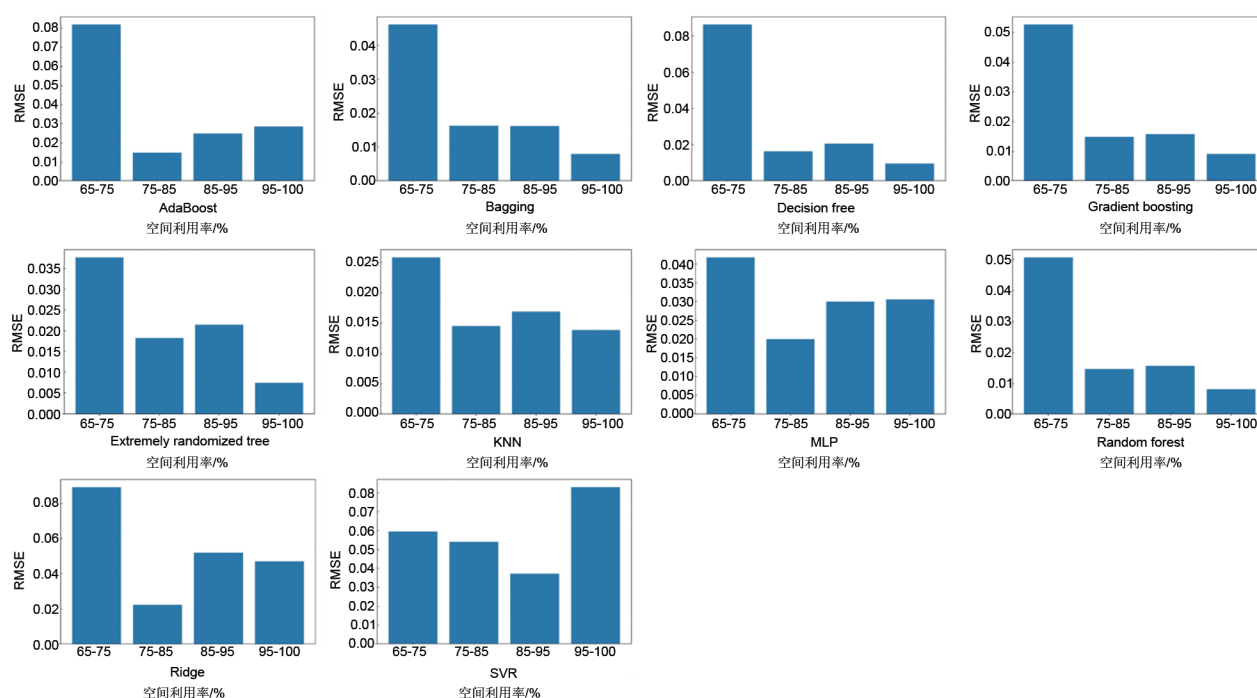


图 5 10 种机器学习模型在不同空间利用率的 RMSE

Fig. 5 RMSE of 10 machine learning models in different space utilization rate intervals

效率显著增高，需要的计算资源更少。

## 参考文献

## 3 总结与展望

在电池枝晶问题的研究中，将相场模拟与机器学习方法相结合能够更加高效地挖掘和揭示各模拟参数与枝晶生长形貌之间的关联，从而深入理解枝晶生长机理并提供枝晶抑制策略。本文的研究结果表明，机器学习模型可以有效预测离子输运参数与枝晶生长描述因子之间的关系，不同机器学习模型对枝晶描述因子的预测准确度和难度不同，同时枝晶描述因子数值的区间也影响着模型的准确性。机器学习技术可以大幅缩短计算时间，节约计算资源。

本文基于仅包含电极与电解液两相的简单电化学体系，对于实际较为复杂的电化学体系(例如考虑隔膜的影响等)，离子输运参数与枝晶生长描述因子之间的关系会受到更多因素的协同影响(如隔膜厚度，隔膜到电极表面距离等)，因而对相场模拟数据的数量及质量的要求更高，机器学习的难度也会增大。在接下来的工作中，我们将构建相场-电池枝晶专题数据库，以进一步提高机器学习结果的准确性并拓宽本方法的适用范围。

- [1] CHENG X B, ZHANG R, ZHAO C Z, et al. Toward safe lithium metal anode in rechargeable batteries: A review[J]. Chemical Reviews, 2017, 117(15): 10403-10473. DOI: 10.1021/acs.chemrev.7b00115.
- [2] CHEN L, ZHANG H W, LIANG L Y, et al. Modulation of dendritic patterns during electrodeposition: A nonlinear phase-field model [J]. Journal of Power Sources, 2015, 300: 376-385. DOI: 10.1016/j.jpowsour.2015.09.055.
- [3] LIU Z, LI Y S, JI Y Z, et al. Dendrite-free lithium based on lessons learned from lithium and magnesium electrodeposition morphology simulations[J]. Cell Reports Physical Science, 2021, 2(1): 100294. DOI: 10.1016/j.xcrp.2020.100294.
- [4] HONG Z J, VISWANATHAN V. Phase-field simulations of lithium dendrite growth with open-source software[J]. ACS Energy Letters, 2018, 3(7): 1737-1743. DOI: 10.1021/acseenergylett.8b01009.
- [5] SHI S Q, GAO J, LIU Y, et al. Multi-scale computation methods: Their applications in lithium-ion battery research and development [J]. Chinese Physics B, 2016, 25(1): 018212. DOI: 10.1088/1674-1056/25/1/018212.
- [6] 施思齐. 电化学储能中的计算、建模与仿真[M]. 北京: 化学工业出版社, 2023: 11.
- [7] SHI S Q. Calculation, modeling and simulation in electrochemical energy storage[M]. Beijing: Chemical Industry Press, 2023: 11.
- [7] LIANG L Y, QI Y, XUE F, et al. Nonlinear phase-field model for electrode-electrolyte interface evolution[J]. Physical Review E,

- Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics, 2012, 86(5 Pt 1): 051609. DOI: 10.1103/PhysRevE.86.051609.
- [8] JÄCKLE M, GROß A. Microscopic properties of lithium, sodium, and magnesium battery anode materials related to possible dendrite growth[J]. The Journal of Chemical Physics, 2014, 141(17): 174710. DOI: 10.1063/1.4901055.
- [9] JING H X, XING H, DONG X L, et al. Nonlinear phase-field modeling of lithium dendritic growth during electrodeposition[J]. Journal of the Electrochemical Society, 2022, 169(3): 032511. DOI: 10.1149/1945-7111/ac5fed.
- [10] WANG Q, ZHANG G, LI Y J, et al. Application of phase-field method in rechargeable batteries[J]. NPJ Computational Materials, 2020, 6: 176. DOI: 10.1038/s41524-020-00445-w.
- [11] 李亚捷, 张更, 沙立婷, 等. 可充电电池中枝晶问题的相场模拟[J]. 储能科学与技术, 2022, 11(3): 929-938. DOI: 10.19799/j.cnki.2095-4239.2022.0049.
- LI Y J, ZHANG G, SHA L T, et al. Phase-field simulation of dendrite growth in rechargeable batteries[J]. Energy Storage Science and Technology, 2022, 11(3): 929-938. DOI: 10.19799/j.cnki.2095-4239.2022.0049.
- [12] 李亚捷, 施思齐, 张更, 等. 锂离子电池隔膜结构与枝晶形貌分析软件: 2022SR0147340[P]. 2022.
- [13] 李亚捷, 施思齐, 张更, 等. 基于相场模型模拟电池枝晶生长计算程序: 2022SR0147443[P]. 2022.
- [14] LI Y J, ZHANG G, CHEN B, et al. Understanding the separator pore size inhibition effect on lithium dendrite via phase-field simulations[J]. Chinese Chemical Letters, 2022, 33(6): 3287-3290. DOI: 10.1016/j.ccl.2022.03.065.
- [15] LI Y J, SHA L T, ZHANG G, et al. Phase-field simulation tending to depict practical electrodeposition process in lithium-based batteries[J]. Chinese Chemical Letters, 2023, 34(2): 107993. DOI: 10.1016/j.ccl.2022.107993.
- [16] LI Y J, CHEN B, WANG Y P, et al. Inhibiting dendrite growth by customizing electrolyte or separator to achieve anisotropic lithium-ion transport: A phase-field study[J]. Acta Physico Chimica Sinica, 2023: 2305053. DOI: 10.3866/pku.whxb202305053.
- [17] LI Y J, ZHAO W, ZHANG G, et al. Unified picture on temperature dependence of lithium dendrite growth via phase-field simulation [J]. Energy Material Advances, 2023, 4: DOI: 10.34133/energymatadv.0053.
- [18] 张更, 王巧, 沙立婷, 等. 相场模型及其在电化学储能材料中的应用 [J]. 物理学报, 2020, 69(22): 27-39. DOI: 10.7498/aps.69.20201411.
- ZHANG G, WANG Q, SHA L T, et al. Phase-field model and its application in electrochemical energy storage materials[J]. Acta Physica Sinica, 2020, 69(22): 27-39. DOI: 10.7498/aps.69.20201411.
- [19] LI Y J, SHA L T, LV P L, et al. Influences of separator thickness and surface coating on lithium dendrite growth: A phase-field study[J]. Materials, 2022, 15(22): 7912. DOI: 10.3390/ma15227912.
- [20] HONG Z J, VISWANATHAN V. Prospect of thermal shock induced healing of lithium dendrite[J]. ACS Energy Letters, 2019, 4(5): 1012-1019. DOI: 10.1021/acsenenergylett.9b00433.
- [21] GAO L T, GUO Z S. Phase-field simulation of Li dendrites with multiple parameters influence[J]. Computational Materials Science, 2020, 183: 109919. DOI: 10.1016/j.commatsci.2020.109919.
- [22] YANG C, LI S L, WANG X T, et al. Phase-field simulation of multi-phase interactions in Fe-C peritectic solidification[J]. Computational Materials Science, 2020, 171: 109220. DOI: 10.1016/j.commatsci.2019.109220.
- [23] LIU Y, GUO B R, ZOU X X, et al. Machine learning assisted materials design and discovery for rechargeable batteries[J]. Energy Storage Materials, 2020, 31: 434-450. DOI: 10.1016/j.ensm.2020.06.033.
- [24] LIU Y, ZHAO T L, JU W W, et al. Materials discovery and design using machine learning[J]. Journal of Materiomics, 2017, 3(3): 159-177. DOI: 10.1016/j.jmat.2017.08.002.
- [25] 施思齐, 涂章伟, 邹欣欣, 等. 数据驱动的机器学习在电化学储能材料研究中的应用[J]. 储能科学与技术, 2022, 11(3): 739-759. DOI: 10.19799/j.cnki.2095-4239.2022.0051.
- SHI S Q, TU Z W, ZOU X X, et al. Applying data-driven machine learning to studying electrochemical energy storage materials[J]. Energy Storage Science and Technology, 2022, 11(3): 739-759. DOI: 10.19799/j.cnki.2095-4239.2022.0051.
- [26] LAMA B, SMIRNOVA A L, PAUDEL T R. Enhanced Li-ion diffusivity of  $\text{LiFePO}_4$  by Ru doping: Ab initio and machine learning force field results[J]. ACS Applied Energy Materials, 2023, 6(20): 10424-10431. DOI: 10.1021/acsaem.3c01429.
- [27] MA Y, HAN S X, SUN Y, et al. Improving ionic conductivity of garnet solid-state electrolytes using Gradient boosting regression optimized machine learning[J]. Journal of Power Sources, 2024, 604: 234492. DOI: 10.1016/j.jpowsour.2024.234492.
- [28] DHAKAL P, SHAH J K. A generalized machine learning model for predicting ionic conductivity of ionic liquids[J]. Molecular Systems Design & Engineering, 2022, 7(10): 1344-1353. DOI: 10.1039/D2ME00046F.
- [29] JAGAD H D, FU J T, FULLERTON W R, et al. A physics-based model assisted by machine-learning for sodium-ion batteries with both liquid and solid electrolytes[J]. Journal of the Electrochemical Society, 2024, 171(6): 060516. DOI: 10.1149/1945-7111/ad4a11.
- [30] LIU Y, WU J M, AVDEEV M, et al. Multi-layer feature selection incorporating weighted score-based expert knowledge toward modeling materials with targeted properties[J]. Advanced Theory and Simulations, 2020, 3(2): DOI: 10.1002/adts.201900215.
- [31] LIU Y, GE X Y, YANG Z W, et al. An automatic descriptors recognizer customized for materials science literature[J]. Journal of Power Sources, 2022, 545: 231946. DOI: 10.1016/j.jpowsour.2022.231946.
- [32] 刘悦, 邹欣欣, 杨正伟, 等. 材料领域知识嵌入的机器学习[J]. 硅酸盐学报, 2022, 50(3): 863-876. DOI: 10.14062/j.issn.0454-5648.20220093.
- LIU Y, ZOU X X, YANG Z W, et al. Machine learning embedded with materials domain knowledge[J]. Journal of the Chinese Ceramic Society, 2022, 50(3): 863-876. DOI: 10.14062/j.issn.0454-5648.20220093.