

超级电容器关键材料与器件专刊



人工智能赋能的超级电容器材料研发与器件管理
——方法演进与前沿进展

赵衍博^{1,2,3}, 刘盼^{2,3}, 张雯^{2,3}, 张庆印^{2,3}, 张鹏⁴, 时志强^{1,2,3}

(¹天津工业大学电子与信息工程学院, 天津 300387; ²容创未来(沧州)新能源有限公司, 河北 沧州 061000; ³天津市先进纤维与储能技术重点实验室, 天津 300387; ⁴天津工业大学材料科学与工程学院, 天津 300387)

摘要: 超级电容器凭借其高功率密度、充放电速度快以及长循环寿命等显著优势, 已成为现代储能技术的重要组成部分。然而其相对偏低的能量密度制约了其在新能源汽车与智能电网等长续航需求领域的进一步应用拓展。近年来, 人工智能技术的快速发展为突破这一性能瓶颈提供了全新的研究路径。本文遵循“材料研发-器件管理”双阶段框架, 系统综述了人工智能在超级电容器全生命周期中的研究进展。在材料研发阶段, 回顾了开放式计算材料数据库及面向超级电容器的专用电化学数据库的发展现状, 介绍了描述符的特征工程演进路径。重点综述了深度学习预测模型的技术演进, 包括早期图神经网络、通用神经网络及大规模基础模型, 阐述了从人工特征工程向端到端表示学习的范式转变及其对高通量虚拟筛选效率的显著提升。介绍了贝叶斯优化与主动学习驱动的合成工艺优化策略及“预测-合成-验证-反馈”闭环范式, 阐述了基于扩散模型与自回归模型的生成式逆向设计方法, 分析了其根据目标性能约束直接生成候选材料结构的应用潜力。在器件运维阶段, 以锂电池领域的成熟方法论为参照, 系统综述了健康状态评估与剩余使用寿命预测的技术演进, 涵盖物理模型、传统机器学习、深度学习、状态空间模型、生成式预训练及物理信息神经网络, 介绍了迁移学习与联邦学习在数据稀缺与隐私保护场景中的应用。展望未来, 构建遵循原则的统一超级电容器数据库、发展适配孔网络拓扑特征的全局描述符、实现自主实验平台与闭环反馈系统的深度整合, 将是推动人工智能从辅助分析工具向全链条核心研究基础设施转变的关键路径。

关键词: 超级电容器; 人工智能; 深度学习; 材料设计; 图神经网络; 生成式模型; 数据驱动

doi: 10.19799/j.cnki.2095-4239.2026.0243

中图分类号: TM 53

文献标志码: A

文章编号: 2095-4239 (2026) 05-1716-16

AI-Empowered supercapacitor materials development and device management: Methodological evolution and frontier advances

ZHAO Yanbo^{1,2,3}, LIU Pan^{2,3}, ZHANG Wen^{2,3}, ZHANG Qingyin^{2,3}, ZHANG Peng⁴,
SHI Zhiqiang^{1,2,3}

(¹School of Electronics and Information Engineering, Tiangong University, Tianjin 300387, China;

²Rongchuang Future Energy Storage Technology (Cangzhou) Co., Ltd. Cangzhou 061000, Hebei, China;

³Tianjin Key Laboratory of Advanced Fibers and Energy Storage Technology, Tianjin 300387, China; ⁴School

收稿日期: 2026-03-26; 修改稿日期: 2026-04-26。

基金项目: 国家自然科学基金(22179094)、河北省博士创新工作站(195)。

第一作者: 赵衍博(1999—), 男, 博士研究生, 从事人工智能与储能工程, E-mail: x6@outlook.lv; 通信作者: 时志强, 教授, 研究电化学储能材料与器件, E-mail: shizhiqiang@tiangong.edu.cn。

引用本文: 赵衍博, 刘盼, 张雯, 等. 人工智能赋能的超级电容器材料研发与器件管理[J]. 储能科学与技术, 2026, 15(5): 1716-1731.

Citation: ZHAO Yanbo, LIU Pan, ZHANG Wen, et al. AI-Empowered supercapacitor materials development and device management: methodological evolution and frontier advances[J]. Energy Storage Science and Technology, 2026, 15(5): 1716-1731.

of Material Science and Engineering, Tiangong University, Tianjin 300387, China)

Abstract: Supercapacitors (SCs) play a crucial role in modern energy storage technologies, offering advantages, including high power density, fast charge/discharge rates, and a long cycle life. However, their relatively low energy density limits applications in fields requiring prolonged endurance, such as new energy vehicles and smart grids. Recently, the rapid development of artificial intelligence (AI) has opened new avenues for overcoming this performance limitation. Based on a dual-stage framework of "materials development-device management," this review systematically surveys recent AI advancements across the full lifecycle of SCs. In the materials development phase, we assess the current landscape of open computational materials databases and specialized electrochemical databases for supercapacitors. We also discuss the evolutionary trajectory of feature engineering for descriptors. The evolution of deep learning prediction models is comprehensively surveyed, highlighting early graph neural networks, universal neural networks, and large-scale foundation models. We examine the paradigm shift from manual feature engineering to end-to-end representation learning and its significant enhancement of high-throughput virtual screening efficiency. We also introduce Bayesian optimization and active learning-driven synthesis optimization strategies, as well as the closed-loop paradigm of "prediction-synthesis-validation-feedback." In addition, we describe generative inverse design methods based on diffusion models and autoregressive models, analyzing their potential for the direct generation of candidate material structures under target property constraints. In the device operational stage, we draw insights from established methodologies in the lithium-ion battery field to systematically survey the evolution of state-of-health assessment and remaining useful life prediction. This encompasses physics-based models, traditional machine learning, deep learning, state-space models, generative pre-training, and physics-informed neural networks, as well as applications of transfer learning and federated learning in data-scarce and privacy-sensitive contexts. Looking ahead, we identify several key pathways for advancing AI from a supplementary analytical tool to a central research infrastructure across the entire value chain. These include constructing unified supercapacitor databases based on established principles, developing global descriptors tailored to pore network topology, and achieving deep integration of autonomous experimental platforms with closed-loop feedback systems.

Keywords: supercapacitors; artificial intelligence; deep learning; materials design; graph neural networks; generative models; data-driven approaches

近年来，新能源汽车与智能电网技术快速迭代，使得高性能储能器件的需求更为迫切^[1]。在众多储能技术中，超级电容器以其功率密度高 (>10 kW/kg)、循环寿命长 (>10 万次)、充放电速度快等显著优势，引发学术界与工业界的持续关注^[1]。超级电容器借助电极-电解质界面的快速离子吸附或快速法拉第反应实现电荷存储^[2]。与电池体系相比，超级电容器在瞬间大功率输出（如再生制动）及高频充放电（如电网调频）场景中具有独特的优势^[3]。然

而，目前商用超级电容器的能量密度仍普遍较低，显著低于锂电池，难以满足长续航储能需求。因此，如何在保持高功率特性的前提下提升综合电化学性能，是当前超级电容器研究面临的核心挑战^[1]。

电极材料的本征特性是影响超级电容器比电容、倍率性能及循环稳定性的关键因素^[1]。其在精准构建构效关系方面仍面临诸多困难^[1]。首要挑战在于电化学性能受多重结构因素的协同耦合影响。以多孔碳材料为例，不同尺度的孔隙结构承担着差

异化的功能角色。微孔提供主要的离子吸附位点并贡献于电荷存储容量，介孔构建高效的离子传输通道以降低扩散阻力，大孔则作为电解质储库保障离

子的持续供给^[1,4]。然而，三者间的最佳配比并非固定不变，而是随电解质体系及实际工况条件呈现动态变化特征^[1]。

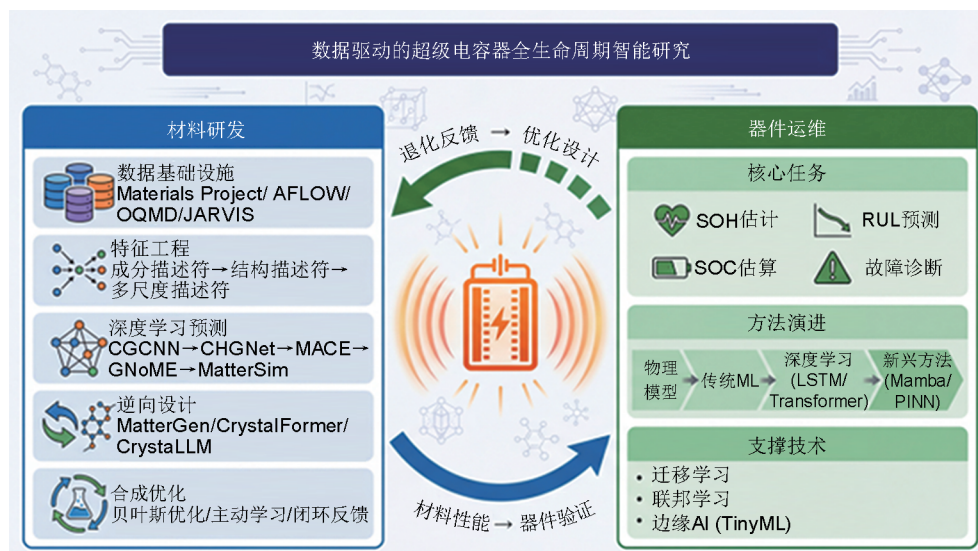


图1 数据驱动的超级电容器研究 从AI辅助材料设计到智能器件管理

Fig. 1 Graphical abstract: Data-driven supercapacitor research from AI-assisted materials design to intelligent device management

目前已有研究对上述传统孔功能分工框架进行了进阶探索。Kress等人^[9]通过脉冲梯度场核磁共振(PFG NMR)技术,系统测量了多种多孔碳电极中离子的长程扩散系数,发现介孔面积与倍率性能之间并不存在预期的正相关关系;真正决定快充性能的关键参数是孔网络曲折度(tortuosity),即孔道连通性而非单纯的介孔含量。与此同时,杂原子掺杂策略亦面临机理认识尚不充分的困境,以氮掺杂为例,尽管其能够显著改善碳材料表面浸润性并增强电解质离子的可及性,但吡啶氮、吡咯氮及石墨氮等不同氮物种对电容性能的具体贡献机制,目前仍缺乏系统的理论体系予以阐明^[9]。综上这种多尺度结构特征与多物理场效应的复杂耦合关系,使得传统“试错-优化”实验范式难以建立具有普适性的构效关系模型,亟需引入新的研究策略与技术手段加以突破。

长期以来,新型电极材料的开发主要依赖于实验试错法,即通过“合成-表征-测试”的循环迭代来优化性能。这一范式在推动领域发展方面发挥了关键作用,但其固有的低效性已逐渐成为制约材料创新突破的瓶颈。一方面,材料合成涉及庞大的参数空间,即从前驱体选择、活化策略到热处理制

度,任一环节的微小变动均可能引发最终性能的显著波动,由此构成了传统实验手段难以系统遍历的设计空间^[9];另一方面,不同实验室间测试标准与表征方法的差异,导致文献数据的一致性与可复现性较差,难以形成有效的知识累积^[9]。此外,尽管基于经典电化学理论或密度泛函理论(Density Functional Theory, DFT)的物理模型可提供一定的机理阐释,但此类方法往往难以捕捉真实电极体系中结构异质性、动态界面演变等多尺度复杂现象,难以直接指导材料的逆向设计^[1]。

针对传统实验试错与物理模型的双重局限,数据驱动的机器学习方法展现出了新的核心优势。它无需依赖预设的物理假设或承担第一性原理计算的高昂算力成本,而是直接从海量数据中挖掘高维隐含关联。这种数据驱动的特性,使其能够穿透庞大且复杂的参数空间,捕捉传统模型难以刻画的多尺度构效关系,从而实现电极材料逆向设计的高效赋能。通过从大规模数据中自动学习高维非线性映射关系,这类方法可有效捕捉传统物理模型难以刻画的复杂构效关联,同时规避第一性原理计算的高昂成本。这一特性使其特别适合应对上述超级电容器研究中的多尺度耦合与庞大参数空间问题。近年

来，人工智能在材料发现领域取得的一系列突破性成果，印证了其广阔的应用前景。材料科学研究正经历从“经验直觉引导”向“人工智能加速发现”的历史性转变。

在超级电容器领域，机器学习的应用近年来快速增长。早期探索性工作已证明数据驱动方法在碳基双电层电容器电容预测^[7]及杂原子掺杂碳电极构效关系解析方面的可行性。针对赝电容材料体系，已有综述系统梳理了机器学习方法在超级电容器比电容预测与寿命评估中的应用进展^[8]。与此同时，借助SHAP (shapley additive explanations) 等分析方法，研究者得以从传统“黑箱”模型中提取具有物理可解释性的特征贡献关系，有力推动了研究路径从纯数据驱动向“数据-知识”协同驱动的深层次转变^[9]。人工智能不仅加速了材料发现过程，更在修正领域内长期持有的经验认知方面发挥着关键作用，即从“定性经验”到“定量数据驱动认知”的转变，有望成为超级电容器研究的新范式特征。

具体而言，人工智能可从材料研发和器件运维两个维度，助力突破超级电容器的能量密度瓶颈。在材料研发端，能量密度 $(E = \frac{1}{2}CV^2)$ 的提升本质上取决于电极材料比电容(C)与电化学窗口(V)的协同优化。人工智能通过高通量虚拟筛选与逆向设计，可高效收窄候选材料的搜索空间，加速筛选兼顾比电容与电化学窗口的候选电极材料，显著缩短传统试错法的研发周期。已有研究将机器学习用于超级电容器能量密度与功率密度的预测建模^[1]，为面向能量密度的定向材料设计提供了新的技术手段。在器件运维端，人工智能驱动的健康状态评估与智能能量管理，能够在保障运行可靠性的前提下提升器件在全生命周期内的能量输出效率，从系统层面提高超级电容器能量的有效利用率。

本综述旨在系统梳理人工智能技术在超级电容器从材料研发到器件运维的研究中的最新进展与核心应用范式，全文遵循“材料研发-器件管理”的双阶段逻辑框架展开论述(图1)。在材料研发阶段，本文深入探讨基于大数据的材料性能预测与高通量虚拟筛选策略，分析机器学习方法如何构建“合成前驱体/工艺条件-微观结构-电化学性能”的多层级映射关系，以指导高性能电极材料的定向设

计与合成工艺优化。在器件应用阶段，本文系统阐述智能健康管理技术体系：从单体层面的健康状态(state of health, SOH)在线评估与剩余使用寿命(remaining useful life, RUL)预测，到系统层面在复杂动态工况下的荷电状态(state of charge, SOC)精准估算与故障诊断策略。最后在总结现有技术挑战的基础上，对未来发展方向进行前瞻性展望。

1 人工智能辅助电极材料的筛选与定向设计

材料学的快速发展与数据驱动研究路径的日趋成熟，为电极材料的高效筛选与理性设计开辟了新途径。传统“试错-优化”范式受制于庞大的参数空间与错综复杂的构效关系，研发效率难以满足日益迫切的应用需求。人工智能技术的快速演进为突破这一瓶颈提供了新思路：借助数据驱动的学习方式，机器学习模型可从海量材料数据中自主提取隐含规律，实现高通量虚拟筛选、性能精准预测乃至逆向定向设计。本章将系统阐述人工智能辅助电极材料研发的两大核心策略：基于大数据的材料性能预测与筛选，以及机器学习指导的合成工艺优化。

1.1 基于大数据的材料性能预测与筛选

材料性能的有效预测是实现高通量虚拟筛选的关键基础，典型工作流程如图2所示。机器学习模型的构建依赖三个关键要素：高质量的训练数据、有效的特征表示以及适宜的模型架构。本节首先介绍数据库基础设施，继而探讨特征工程与描述符设计的核心策略，最后重点阐述深度学习预测模型的技术演进。

1.1.1 材料数据库基础设施

材料数据库构成了数据驱动研究的坚实根基。近年来，以Materials Project^[10]、AFLOW^[11]、OQMD^[12]及JARVIS^[13]为代表的开放式计算材料数据库持续发展，为机器学习模型的训练与验证提供了可靠的数据支撑。在众多开放式数据库中，Materials Project凭借其庞大的数据规模和标准化计算流程，已成为材料信息学研究的核心基础数据库^[10]。该平台采用的自动化高通量计算 workflow，实现了数据生成的一致性与可复现性。AFLOW侧重于自动化计算流程的标准化与规模化，推进了模式化高通量结构搜索与性质计算^[11]。OQMD专注于合金与化合物的热力学稳

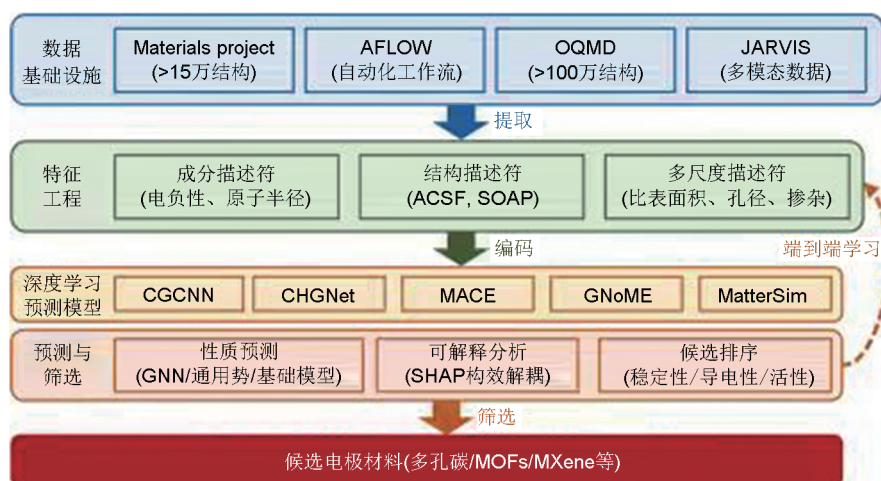


图2 AI辅助电极材料发现工作流程

Fig. 2 Workflow of AI-assisted electrode material discovery

定性评估，其整合了晶体结构的DFT计算结果^[12]。JARVIS数据库则覆盖二维材料、分子晶体等多元体系，并将机器学习预测与实验验证数据有机融合^[13]。

然而，上述数据库主要基于DFT计算生成，缺乏对强关联电子效应的精确修正，且计算工况单一^[14]，导致其在预测复杂电化学界面时存在明显的“理论-实验鸿沟”。为弥合此差距，领域内正向两个方向演进：一是数据规范化与跨平台融合。FAIR原则为材料数据的规范化存储与跨平台共享确立了指导框架^[15]，同时OPTIMADE协议通过统一的应用程序接口（API）规范，使研究者得以利用单一查询语法检索多个数据库的结构与性质信息^[16]。二是补充特定应用场景的专用数据库。QMOF数据库汇聚了超过2万种DFT优化的MOF结构及其电子性质数据，为MOF基电极材料的机器学习筛选提供了系统化的数据支撑^[17]。Merlet等人^[18]将恒电位分子动力学模拟应用于超级电容器研究，有效规避了不同实验室间测试标准差异所带来的系统偏差。这类计算电化学数据库在条件一致性与数据可比性方面的优势，使其成为连接DFT计算数据库与实验测量数据之间的重要桥梁。

1.1.2 特征工程与描述符设计

实现从复杂晶体与孔隙结构到可量化描述符表示的映射，是构建高效机器学习模型的核心环节。早期研究主要采用基于组分的描述符，通过整合元素周期表中各原子的物理化学性质（如电负性、原子半径、价电子数等）对材料加以刻画。Matminer

软件包汇聚了超过60种预定义的组分描述符，可快速生成适用于传统机器学习模型（如随机森林、梯度提升）的特征向量^[19]。

为进一步提升结构细节减少同质异构体带来的扰动作用，结构描述符应运而生。ACSF描述符由Behler与Parrinello提出，利用径向与角度对称函数刻画原子局部环境，是神经网络势能面模型的经典输入表示。SOAP描述符则借助球谐函数展开，可系统地编码原子局部几何结构的完整信息^[20]。这些描述符在分子动力学模拟与局部性质预测中取得了良好性能。

针对复杂材料体系，多尺度描述符的开发旨在捕捉多层面的结构特征。Tawfik等人^[21]综合考虑了比表面积、原子掺杂浓度等多维特征，构建了面向电容性能预测的描述符集合。基于图神经网络的端到端学习方法可直接从原子坐标与化学组成中自动学习有效表示，在一定程度上缓解了人工特征设计的负担^[22]。

1.1.3 传统机器学习预测模型

传统机器学习模型凭借较低的数据需求与良好的可解释性，率先在超级电容器电极材料性能预测中得到应用。Tawfik等人^[21]较早地采用人工神经网络（ANN）建立了多孔碳电极结构参数（比表面积、孔径分布、杂原子含量）与比电容之间的非线性映射模型，验证了数据驱动方法在该领域的基本可行性。Zhao等人^[7]采用随机森林模型系统评估了比表面积、孔结构参数与杂原子掺杂类型对生物质碳基超级电容器比电容的权重贡献，为实验优化提

多体相关项,得以用更少的消息传递轮次捕捉复杂的多体相互作用^[30]; EquiformerV2将注意力机制推广到等变表示空间,在催化剂吸附能预测等方面有显著的性能提升^[31]。

在基础模型与大规模预训练方面,材料科学领域见证了基础模型的兴起。Google DeepMind发布的GNoME模型通过主动学习策略,在约220万种候选晶体结构上进行迭代训练与筛选,最终识别出约38万种热力学稳定的新材料,显著扩充了超级电容器电极材料的候选库^[32]。MatterSim是微软研究院推出的通用材料模拟基础模型,在超过1700万个DFT计算构型上进行预训练,覆盖元素周期表中的绝大多数元素,支持不同温度与压力条件下的模拟,有望成为加速多元电极材料体系性能评估的通用工具^[33]。

模型的可解释性是连接预测精度与物理认知的关键桥梁。借助SHAP分析,研究者可从“黑箱”模型中提取描述符与目标性质之间的定量贡献关系。Wang等人^[9]在MOF超级电容器数据库中的SHAP分析进一步展示了从“特征排序”到“贡献解耦”的应用深化:在结构描述符高度复杂的条件下,SHAP可解耦各描述符的独立边际贡献,揭示出简单相关性分析无法捕捉的反直觉规律。SHAP分析本质上量化的特征是对模型预测输出的边际影响,其反映的仍是统计学相关性而非严格的物理因果关系。

表1系统梳理了上述深度学习预测模型的核心创新及其在超级电容器领域的应用潜力。

上述深度学习预测模型的技术演进,为超级电容器电极材料的高通量虚拟筛选及性能的初步评估

表1 深度学习预测模型在材料性质预测中的技术演进

Table 1 Technical evolution of deep learning predictive models in materials property prediction

模型	核心创新	评估任务
CGCNN	晶体图卷积	形成能预测
MEGNet	全局状态向量+门控更新	分子/晶体多性质
M3GNet	通用势能面预训练	能量/力/应力预测
CHGNet	电荷感知原子建模	能量/力预测
NequIP	旋转等变卷积	势能面拟合
MACE	高阶等变消息传递	分子力场拟合
EquiformerV2	等变注意力机制	催化吸附能
GNoME	主动学习+大规模筛选	稳定性筛选
MatterSim	通用模拟基础模型	跨体系模拟

提供了参考手段。在能量密度提升的目标驱动下,这类模型在预测比电容的同时,还可综合考察电化学窗口、循环稳定性等多重指标,使材料筛选从单一性能优化转向多目标权衡,更直接地服务于能量密度的提升。在此基础上,合成工艺优化进一步将模型预测的理想材料参数转化为可实现的制备方案。

1.2 人工智能指导的合成工艺优化

在筛选出理想的候选材料后,实现从理论预测到实验合成的跨越仍面临巨大的“参数鸿沟”。传统合成工艺的优化高度依赖研究者的经验直觉与试错法,难以在庞大的参数空间中进行系统性探索。机器学习的引入为打破这一困局提供了系统化方案:通过构建“前驱体-工艺条件-微观结构-性能”的多层级映射模型,实现了合成路径的理性规划与工艺参数的智能寻优。

机器学习模型能够高效地从历史合成数据中提取多维映射关系^[34,6]。在多保真度学习框架下,研究者利用梯度提升回归等算法,结合大规模材料配方数据集实现了器件性能的有效预测;同时,通过跨源数据融合策略,有效缓解了实验数据稀缺带来的预测偏差^[35]。Szymanski等人^[36]展示的全自主实验室在17天内成功合成了41种新无机材料,标志着“预测-合成-表征”全自动闭环的初步实现。Noh等人^[9]将高通量机器人平台与贝叶斯优化相结合,开发了电解质配方自动筛选系统,其筛选效率较传统随机搜索实现了显著提升。作为贝叶斯优化的自然延伸,主动学习通过策略性地标注高不确定性样本,能以极低的实验成本快速提升模型的泛化能力,尤为契合新材料体系的早期探索需求^[34]。

上述方法多采用“模型预测→实验验证”的单向流程。Wang等人^[37]的工作则展示了一种更为完整的“预测-合成-验证-反馈”闭环范式。该研究从文献数据训练人工神经网络ANN(Artificial Neural Network),预测N/O共掺杂多孔碳电极的最优结构参数组合及理论电容上限。以此预测为指导,研究者设计了高交联聚合物(HCP)前驱体结合低温活化的合成策略,成功合成了超高比表面积的多孔碳,其实测比电容与预测值高度吻合。在过程中,新增的实验数据被实时反馈至ANN模型中,驱动了最优参数预测的迭代更新与模型预测能力的自我进化。此外,该工作还借助准弹性中子散射

(QENS) 技术, 深度揭示了氧含量在影响离子存储活性与输运动力学上的博弈关系, 即高氧掺杂虽能增强电解质与碳壁的作用力从而提升电容, 但会显著阻碍离子扩散, 制约倍率性能的发挥。Chen 等人^[38]利用层次聚类与有机电化学原理, 从 240 种候选分子中筛选出功能性有机锂盐 LiSO_2CF_3 , 实现外部补锂使商业 LiFePO_4 电池循环寿命延长一个数量级。Zheng 等人^[39]和 Kang 等人^[40]分别面向钠离子电池和锂离子电池中首圈不可逆活性离子损失问题, 利用机器学习方法加速牺牲型有机盐补偿剂的筛选。Zheng 等人通过无监督学习和 K 均值聚类筛选出硼中心有机钠盐, 该分子可实现钠离子补偿并在正极表面原位形成保护层, 从而提升钠离子电池的首圈库仑效率和循环稳定性。Kang 等人^[40]则采用半监督学习聚类方法筛选出氮中心有机锂盐, 该分子在补充锂离子的同时生成具有界面稳定作用的副产物, 有效提升了高能量密度电池的初始容量和循环寿命。

值得注意的是, 上述合成工艺优化研究主要聚焦于实验室尺度的材料制备环节, 而从实验室材料到可量产器件之间仍存在显著的“工程鸿沟”。在实际产线制造中, 电极制备涉及一条多环节、强耦合的参数链路: 材料本征物理参数(粒径分布、比表面积、振实密度等)→浆料工艺参数(固含量、黏度、分散工艺)→涂布/干法工艺→电极辊压(压实密度、孔隙率)→电芯装配→化成制度→最终电化学性能。该链路中任一环节的参数偏移均可能引发下游性能的非线性波动, 传统的基于经验和简单规则的工艺管理已难以应对日益复杂的多参数优化需求。

近年来, 在电化学储能器件制造领域, 人工智能技术已开始渗透到上述产线链路的多个关键环节。以技术相对成熟的锂电池制造为例^[41], 在浆料制备阶段, 机器学习模型可根据活性材料物理特性(粒径、比表面积)预测最优固含量与分散工艺参数; 在涂布与辊压阶段, 离散元法 (DEM) 与有限元法 (FEM) 结合机器学习的混合建模策略可预测电极微观结构(孔隙率、曲折度)随辊压参数的演变规律^[42]; 在电芯成型与化成阶段, 数字孪生技术通过构建与物理产线同步的虚拟模型, 实现工艺参数的实时优化与异常工况的早期预警^[43]。在系统集成层面, 生产执行系统 (MES) 的工艺管理模块

已开始引入人工智能技术, 通过建立跨工序的参数关联模型, 实现工艺参数组合的自动推荐与在线动态调整, 人工智能的角色也从传统的排产调度, 逐步拓展至工艺质量的智能优化。由于超级电容器与锂电池在电极制备工艺上具有高度共性(均涉及浆料配制、涂布/干法成型、辊压等核心环节), 上述技术路线可为超级电容器制造提供直接参照, 即构建覆盖“材料-浆料-电极-器件”全链路的数据驱动工艺优化框架, 有望成为弥合材料研发与器件制造之间断层的关键技术路径。

传统材料研发长期遵循“正向筛选”逻辑: 即基于已知结构预测潜在性质, 再从中遴选符合目标要求的候选者。这一方式的效率受制于候选空间的枚举规模, 难以触及结构空间的未探索区域。生成式人工智能的兴起开辟了“逆向设计”的全新路径: 直接根据目标性能约束生成满足要求的材料结构(如图 4 所示)^[41]。

在扩散模型方面, 微软研究院开发了无机材料生成模型 MatterGen^[44]。该模型基于扩散生成框架, 将复杂的晶体结构的构建转化为去噪扩散过程。其核心优势在于能够支持化学组成、空间群对称性以及目标物理化学性质的多模态条件协同约束生成。实验验证表明, MatterGen 生成的候选结构具有较高的 DFT 稳定性验证通过率, 研究团队进一步选取若干高置信度预测进行实验合成, 成功制备出具有预期性质的新型材料, 印证了逆向设计策略的可行性。

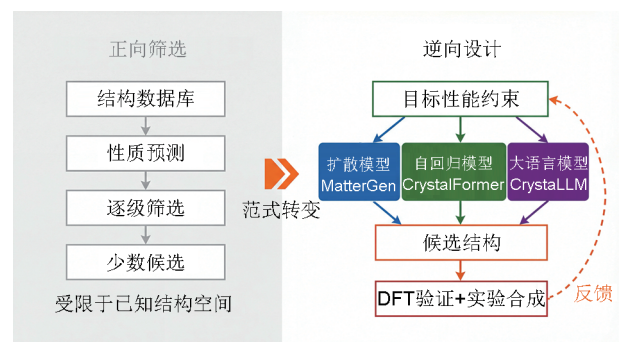


图 4 从正向筛选到生成式逆向设计的范式转变
Fig. 4 From forward screening to generative inverse design

在自回归模型方面, CrystalFormer 采用 Transformer 架构, 将晶体结构表示为原子类型与坐标的序列, 以自回归方式逐原子生成完整结

构^[45]。CrystaLLM则直接借助大语言模型的序列建模能力，以CIF格式的晶体结构文件为文本输入生成新结构，开创性地将大语言模型引入材料生成领域^[46]。

在超级电容器领域，生成模型为电极材料设计带来了新的可能。研究者可通过设定热力学稳定性、电子导电性及氧化还原活性位点等目标约束，直接生成满足要求的候选结构。然而当前生成模型主要针对体相晶体材料设计，对于多孔材料、非晶结构及界面体系的适用性仍显不足。未来研究亟需发展针对介孔/微孔结构、杂原子掺杂位点及电极-电解质界面的专用生成模型，以推动超级电容器电极材料从“数据驱

动筛选”向“智能定向设计”的转变^[47,44]。

2 健康状态评估、剩余使用寿命预测与系统级智能运维

本章将视角从上游的材料研发转向下游的器件运维，系统探讨数据驱动方法在储能器件健康管理中的应用。首先梳理单体层面的健康状态（SOH）与剩余使用寿命（RUL）预测方法演进（如图5所示），进而扩展至系统级的荷电状态（SOC）估算与故障诊断。考虑到超级电容器的智能管理多借鉴自成熟的锂电池方法论，本章在梳理技术脉络的同时，重点探讨跨体系迁移的适配策略。

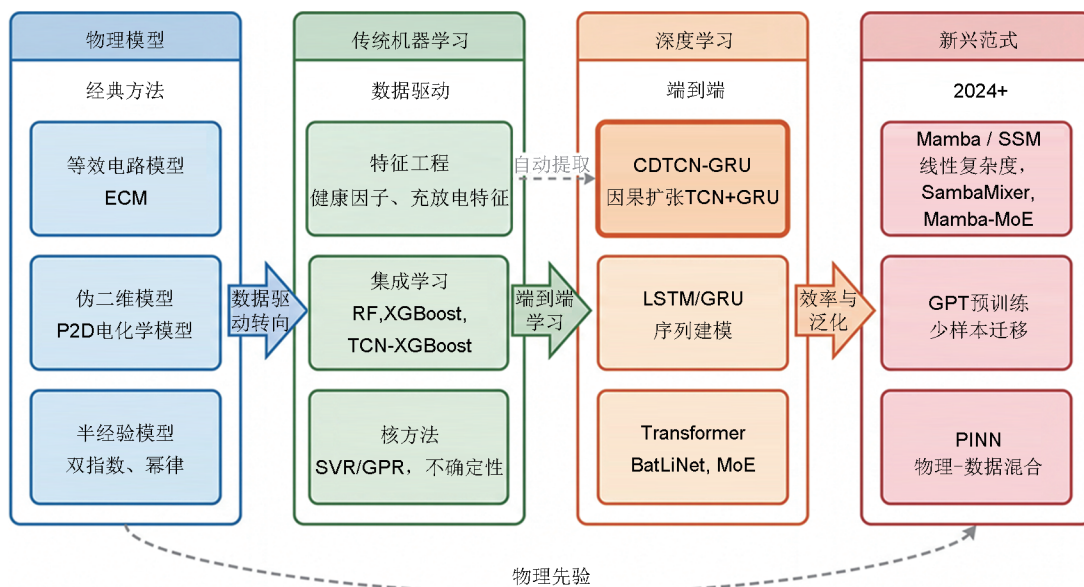


图5 SOH估算与RUL预测方法的演进

Fig. 5 Evolution of SOH estimation and RUL prediction methods

2.1 单体层面的健康状态评估与寿命预测

2.1.1 储能器件老化机理与状态指标定义

超级电容器与锂电池的老化过程均由多重物理化学机制协同驱动，但两者的退化本质存在较为明显的差异。超级电容器（尤其是双电层电容器）以静电吸附为主要储能机理，其老化主要源于电极表面钝化、电解液分解与内阻增长，锂电池则以嵌入反应为基础，老化涉及SEI膜生长、活性材料相变与锂损耗等多重耦合过程^[48]。此外，超级电容器的容量衰减数据分布通常呈现更高的变异系数^[49]，对数据驱动模型的鲁棒性提出了更高要求。

健康状态（state of health, SOH）是量化器

件老化演变与评估其当前服役能力的核心宏观指标。在电化学储能领域，SOH通常以当前最大可用容量的衰减或内阻的增长百分比来表征。基于容量衰减的SOH定义如下：

$$\text{SOH} = \frac{C_{\text{current}}}{C_{\text{initial}}} \times 100\%$$

其中， C_{current} 与 C_{initial} 分别表示当前容量与初始容量。当SOH降至预设阈值（通常为80%）时，器件即被判定为寿命终止状态。

剩余使用寿命（RUL）则表征器件从当前时刻至达到寿命终止条件所经历的循环次数或运行时间。实现高精度RUL预测的核心挑战在于：器件的老化衰退不仅具备高度的非线性与时变随机性，

且极易受到复杂动态工况（如环境温度、充放电倍率、荷电状态（SOC）区间等）的深度耦合影响，导致传统的经验物理公式难以精准刻画其全生命周期的退化轨迹^[50]。

超级电容器与锂电池的老化机理存在本质差异，但序列建模、状态估计与回归预测等通用数学框架在架构层面具有一定的共通性。然而由于两类器件退化动力学的根本差异，锂电池领域的驱动方法在迁移至超级电容器体系时，特征工程、损失函数设计和模型评估指标均需进行针对性重设计。这一迁移并非简单的直接应用，而是需要系统性的方法适配。

2.1.2 物理模型与半经验方法

在数据驱动方法兴起之前，物理模型方法长期主导储能器件的老化建模与寿命预测，其优势在于可解释性强、外推能力好。

等效电路模型（ECM）以集总参数将器件抽象为电阻-电容网络，通过跟踪参数演化间接评估健康状态^[51]。然而ECM的参数受温度与老化程度的多重影响，且集总参数模型难以刻画器件内部的空间非均匀性^[50]。电化学模型如伪二维（pseudo-two-dimensional, P2D）模型从微观尺度出发，可精细描述器件内部的扩散与反应过程^[50]。此外，双指数模型、幂律模型等半经验方法以较低的计算成本刻画容量衰减的宏观趋势，适用于在线部署，但外推能力受限于训练数据的工况覆盖范围。在超级电容器领域，Uno与Tanaka^[52]提出了基于加速充放电循环测试的退化预测模型，以极少的参数即可刻画超级电容器容量随循环次数的衰减规律。El Mejdoubi等人^[53]则针对温度与电压耦合老化条件下的超级电容器RUL预测进行了系统研究。Kötz等人^[54]通过恒载加速老化实验表征了电化学双电层电容器的失效模式。这些工作为超级电容器退化建模提供了实验与理论基础，但受限于模型参数的简化假设，其对复杂实际工况的预测能力仍有待提升。上述物理模型方法在可解释性方面具有不可替代的价值，但参数标定繁复、计算成本高昂等固有局限，促使研究人员将更多注意力投向数据驱动方法的探索。

2.1.3 传统机器学习方法

物理模型的构建需要丰富的领域知识与繁复的参数标定过程，而传统机器学习方法则采用数据驱动的方式，直接从历史数据中学习输入特征与目标

变量之间的映射关系，一定程度上规避了先验知识依赖。传统机器学习方法的性能高度依赖于输入特征的质量。研究者通常从充放电曲线中提取多维健康因子作为模型输入，包括：恒流充电时间、电压平台持续时间、差分电压曲线特征等^[51]。这些特征可从不同侧面反映器件的老化状态，为模型学习提供信息丰富的输入内容。

基于上述数据驱动框架，研究人员在超级电容器寿命预测领域展开了由浅入深的探索。作为该领域的早期系统性工作，Ren等人^[49]基于88只商用超级电容器（产生约88万个充放电循环）系统探索了数据驱动的循环寿命预测方法。该研究采用“方法递进”策略：从基于单一特征线性回归过渡到引入主成分分析（PCA），最终采用ANN模型以5个精选特征实现了10.9%的F-error。该研究不仅指出超级电容器循环寿命数据的变异系数远大于锂电池，提出的衰减曲线参数化策略以及F-error评价指标还为后续超级电容器寿命预测提供了方法论基础。集成学习与高级回归算法逐渐展现出显著优势。集成学习方法结合多个基础机器学习模型来共同完成任务，从而得到一个比单个模型更强大、更准确的“强学习器”的机器学习模型。Gillani等人^[55]针对电动汽车超级电容器体系，采用复合ML组合架构，在多工况老化数据集上实现了优于传统神经网络的预测性能。支持向量机（SVM）及其回归形式利用核函数将输入空间映射至高维特征空间，可有效处理非线性回归问题。高斯过程回归则提供了概率预测框架，不仅输出估计结果，还能量化预测的不确定性，该特性对于安全关键应用场景具有重要价值。

然而传统机器学习方法的主要局限在于：依赖人工设计的健康因子，特征提取过程高度依赖领域专家经验；此类方法难以直接处理原始时间序列数据，对长程依赖关系的捕捉能力有限。这些局限推动了深度学习方法的发展。

2.1.4 深度学习的方法

深度学习可直接从原始时间序列数据中自动学习层次化特征表示，规避了人工特征工程的繁复过程。近年来，以循环神经网络与注意力机制为代表的序列建模架构在健康状态与剩余使用寿命预测领域取得快速进展。Qi等人^[56]梳理了超级电容器寿命预测中常见的数据驱动方法，包括传统统计方

法、机器学习方法和深度学习方法，并在此基础上构建了VMD-SSA-BiLSTM混合预测模型。该研究通过与BiLSTM和VMD-BiLSTM的对比，验证了信号分解与参数优化相结合的深度学习方法在不同温度和电压工况下具有更高的预测精度和更强的鲁棒性。在储能SOH预测领域，随机森林等集成方法因其可解释性强、抗过拟合等特点，常被用作提供稳定预测的主流基准^[60]。针对超级电容器的特定需求，Padmanabhan等人^[61]开发了可解释的CDTCN-GRU混合模型。该架构采用因果扩张时间卷积网络提取多尺度时序特征，结合门控循环单元（GRU）网络建模退化趋势，在超级电容器剩余使用寿命预测任务上具备良好的泛化能力与可解释性。

在序列建模架构方面，长短期记忆网络（long short-term memory, LSTM）通过门控机制显著缓解了标准循环神经网络的梯度消失问题，能够捕捉长程时序依赖。GRU在保持LSTM建模能力的同时简化了网络结构，计算效率更高。Singh等人^[62]提出的OptiCNN-SLSTM混合模型将卷积神经网络与堆叠LSTM相结合，并引入SHAP技术揭示了不同输入特征对预测结果的贡献权重，这一方法论可直接迁移至超级电容器研究。Mohanty等人^[63]采用时序退化感知Transformer实现了荷电状态与健康状态的联合估计。Fan等人^[64]提出的多专家融合框架，采用多个Transformer编码器作为专家模块，借助动态加权方案分配权重，实现了对多工况数据的自适应建模。Zhang等人发表的BatLiNet模型^[65]通过电池间注意力模块从多个电池的老化轨迹中学习共享退化模式，具备优异的跨域泛化能力，这一跨单元学习机制对超级电容器模组的健康管理具有直接借鉴价值。

就超级电容器而言，上述深度学习方法的迁移面临两方面挑战。其一，超级电容器的循环寿命通常达数十万次，产生的时序数据规模远超锂电池，对LSTM的长程记忆能力与Transformer的二次复杂度均构成压力；其二，超级电容器的退化曲线以“早期快速衰减→后期趋缓”为特征，而锂电池模型中针对“膝点”设计的特征提取策略难以直接复用，需发展适配反向退化曲线的注意力权重分配机制与特征工程方案。上述瓶颈驱动了新一代序列建模架构的探索。

2.1.5 新兴方法论范式

状态空间模型的复兴、生成式预训练范式的引入以及物理信息神经网络的深化应用，共同标志着SOH与RUL预测方法论进入新的发展阶段。

Mamba模型作为选择性状态空间模型的代表，引入输入依赖的选择机制，在维持线性计算复杂度的同时实现了与Transformer可比的序列建模能力。Olalde-Verano等人^[62]提出的SambaMixer模型首次将Mamba架构系统应用于锂电池健康状态预测，在预测精度上与Transformer持平而计算效率显著提升。Wang等人^[63]进一步提出Mamba-MoE模型，将状态空间模型与混合专家架构相结合，有效应对了多工况数据的异质性挑战。大语言模型的成功激发了生成式预训练策略在科学领域的应用探索。Hu等人^[64]首次将生成式预训练Transformer引入电池退化预测，以历史充放电序列为输入，以自回归方式预测未来的容量演化轨迹。该方法的核心创新在于预训练-微调的两阶段学习策略：模型首先在大规模多源电池数据上预训练学习退化过程的通用表示，随后在目标数据集上进行少样本微调实现快速领域适配。

物理信息神经网络（physics-informed neural networks, PINN）在损失函数中显式嵌入物理约束（如微分方程残差、守恒律、边界条件），实现物理先验与数据驱动深度融合。Salem等人^[65]将物理信息神经网络与强化学习相结合，用于锂电池健康状态估计，采用强化学习代理动态调整物理约束的权重。Qaadani等人^[66]进一步引入因果推理机制，可区分相关性与因果性，并明确讨论了物理信息神经网络方法向超级电容器与燃料电池体系的扩展潜力。Che等人^[67]提出的机理引导残差学习框架以电化学模型预测为基线、神经网络学习残差，在全寿命周期监控任务上达到了当前最优性能。在超级电容器领域，Qaadani等人^[66]明确提出了PINN向超级电容器与燃料电池体系扩展的路线图，为后续研究提供了方向性指引。然而，超级电容器退化过程中电极表面钝化与电解液分解对双电层结构的动态影响，尚无精确数学描述，这一物理建模瓶颈制约了PINN在超级电容器退化预测中的实际应用。

2.2 系统级状态估算与能量管理

前述单体层面的健康管理为系统级运维奠定了方法论基础，然而实际应用场景中的技术挑战远超

单体分析的复杂度。在电动汽车、微电网及储能电站等大规模部署中，储能系统常由数百乃至上千个单体通过串并联拓扑构成，单体间的性能差异、热管理不均及电气耦合效应使得系统级状态估算与故障诊断呈

现出多尺度、强耦合的本质特征。系统级智能运维的通用架构如图6所示，其核心在于将单体退化轨迹的局部信息融合为系统健康状态的全局画像，在保障安全边界的前提下实现能量调度的最优化。

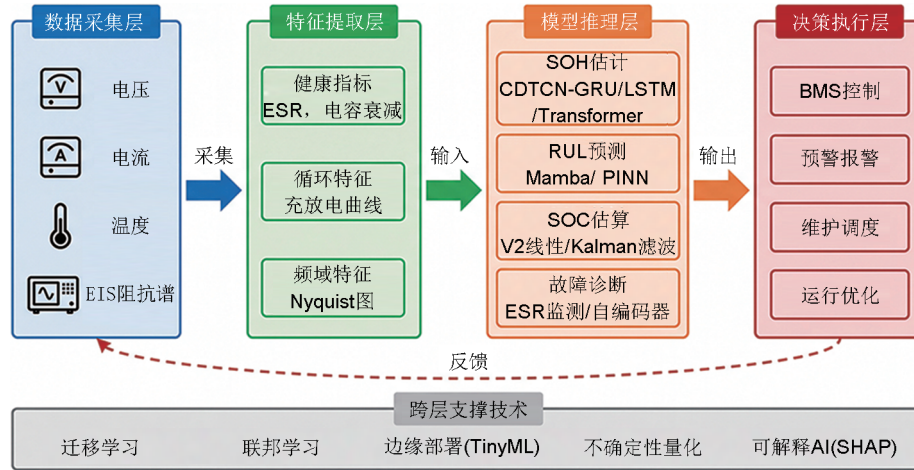


图6 系统级智能运维架构
Fig. 6 System-level intelligent operation and maintenance architecture

荷电状态（SOC）估算是系统级能量管理的基石。SOC表征器件当前可用能量相对于满充状态的比例，直接决定了功率分配策略的合理性与能量调度的精准度。准确的SOC估算不仅可避免过压运行与深度放电对单体寿命的损害，更是实现多单体协同控制、动态负载均衡及预测性维护的前提条件。

超级电容器的SOC估算比锂电池简单得多。双电层电容器的储能与端电压的平方呈强相关关系 $(E = \frac{1}{2}CV^2)$ ，这一线性特性规避了锂电池中因开路电压平台而导致的SOC-OCV映射模糊问题。随着老化加剧或温度偏离常温，电解液老化与自放电效应使得纯电压换算的可靠性下降，数据驱动方法可有效补偿这些非理想因素。

卡尔曼滤波及其变体是SOC估算领域发展最早、应用最广的经典方法^[61]。该方法将器件的状态空间模型（如等效电路模型）与测量信息相结合，经由递推估计实现状态的最优融合。扩展卡尔曼滤波（EKF）通过一阶泰勒展开处理非线性系统，无迹卡尔曼滤波（UKF）则采用sigma点采样策略，在保持计算效率的同时提升了非线性系统的估计精度。这些滤波方法自2000年代初期即被广泛应用于电池管理系统，技术成熟度高，至今仍是工业界

的主流方案。然而卡尔曼滤波方法的性能高度依赖于状态空间模型的精度与过程噪声协方差的准确设定。当器件老化致使实际容量偏离标称值时，模型参数随之失配，估计精度可能显著下降。这一局限促使研究人员将更多注意力投向数据驱动方法的探索。

随着数据驱动范式的兴起，机器学习与深度学习逐步成为SOC估算的重要技术路径。早期研究采用支持向量回归、随机森林等传统机器学习方法，从充放电特征中学习SOC映射关系。深度学习方法则进一步规避了人工特征工程的需求，可直接从电压、电流、温度等传感器原始测量值中学习SOC的非线性映射。LSTM、GRU等循环网络架构因其对时序数据的天然适配性，已成为SOC估算主流方法。除此之外SOC与SOH存在内在关联：器件老化导致可用容量下降，进而影响SOC的准确评估；反之，准确的SOC信息有助于识别老化征兆、提升SOH估计精度。Mohanty等人^[60]提出的联邦学习联合估计框架，采用时序退化感知Transformer同时预测SOC与SOH。模型先通过共享的特征提取器捕捉器件状态的统一表示，再由专用的预测头分别输出SOC与SOH估计。这种多任务学习设计可利用任务间的互补信息，实现整体性能的协同提升。

2.3 故障诊断与异常检测

储能系统在运行过程中可能遭遇多种故障模式，包括连接异常（接触电阻增大、焊点脱落）、单体失效（内部短路、容量骤降）以及传感器故障（信号漂移、通信中断）。及时准确的故障诊断对于保障系统安全运行至关重要。

模型约束深度学习将物理模型约束嵌入神经网络训练过程，提升故障诊断的可解释性与鲁棒性^[67]。Cao 等人^[68]在 *Nature Communications* 发表的工作，针对随机工况下的在线故障诊断挑战，提出了模型约束深度学习框架。这一方法以电化学模型的预测残差作为异常指示器，利用神经网络学习正常运行状态下的残差分布，进而将异常工况识别问题转化为分布外检测问题。当物理模型不可用或过于复杂时，纯数据驱动的异常检测方法提供了可行的替代方案。自编码器依据重建误差识别异常：正常样本的重建误差较小，而异常样本因偏离训练分布导致重建误差显著增大，从而触发异常告警。这一机制仅需正常运行数据即可训练，特别适用于故障样本稀缺的场景。变分自编码器与生成对抗网络等生成模型进一步提升了异常检测的敏感性与特异性，借助对正常数据潜在分布的学习来识别偏离分布的异常模式，支撑了早期故障预警的实现。Liu 等人^[69]提出的多模态 SOH 评估框架通过融合电压、电流、温度等多维传感信息构建健康状态画像，为多源信息融合诊断提供了技术范例。

2.4 算法泛化与工程落地挑战

2.4.1 迁移学习与联邦学习

实际应用中，完整寿命周期数据的获取成本高昂，而不同批次、不同工况下的器件退化行为又呈现显著差异。迁移学习与联邦学习方法的引入，为数据稀缺与隐私保护难题提供了可行的解决方案。

迁移学习通过在源域数据上预训练模型、在目标域进行少样本微调，实现跨器件、跨工况的知识迁移。Liu 等人^[70]提出的基于快充片段的联邦迁移学习框架可仅利用充电阶段的部分数据实现跨批次健康状态估计，显著降低了数据采集成本。联邦学习允许多个参与方在不共享原始数据的前提下协作训练模型，有效应对数据隐私与数据孤岛问题。Zhu 等人^[71]提出的动态加权联邦学习框架以动态加权聚合策略分配各参与方的模型权重，有效缓解了非独立同分布数据带来的性能退化。Mohanty 等

人^[69]则将联邦学习与时序退化感知 Transformer 相结合，实现了 SOC 与 SOH 的联合估计。迁移学习与联邦学习的引入使 SOH 与 RUL 预测从单一数据来源、集中式训练转向多源协作与隐私保护，为智能运维提供了新的技术路径。

目前上述迁移学习与联邦学习方法在超级电容器领域的应用研究尚属空白。考虑到超级电容器退化机理与锂电池的本质差异（静电吸附 vs 嵌入反应），源域为锂电池、目标域为超级电容器的跨器件迁移面临特征空间不匹配的挑战。如何设计适配两类器件退化模式差异的域自适应策略，仍需进一步研究。

2.4.2 边缘部署与不确定性量化

将上述状态估算与故障诊断模型部署至嵌入式管理系统，是实现智能化运维的关键环节。边缘计算将推理任务部署于终端侧，通过知识蒸馏、网络剪枝、参数量化等模型压缩技术应对计算资源与存储空间的严格约束。TinyML 进一步将机器学习能力拓展至微瓦级功耗的微控制器平台。Wang 等人^[72]在 *Nature Communications* 发表的工作展示了实时人工智能在固态电池中的应用，印证了边缘 AI 部署的技术可行性。

与边缘部署同样重要的是模型输出的可信度保障。深度学习模型的“黑箱”特性影响预测可靠性，不确定性量化与可解释 AI 技术可解决这一问题^[62]。贝叶斯神经网络通过对网络权重赋予概率分布，可同时输出预测均值与不确定性估计。在可解释性方面，前述 SHAP 与注意力可视化等技术同样适用于系统层面的状态估算模型，可量化各输入特征对 SOC/故障诊断预测的贡献权重，帮助理解模型决策逻辑。

3 结语

本综述围绕“材料研发-器件管理”的双阶段框架，系统梳理了人工智能技术在超级电容器领域的应用现状与发展前景。在材料研发端，图神经网络与扩散模型、自回归架构等生成式模型的快速演进，推动了超级电容器材料从高通量虚拟筛选向目标导向的“逆向设计”范式转变。结合 SHAP 等可解释机器学习方法，研究者已初步构建起“预测-合成-验证-反馈”的闭环迭代研发模式。在器件运维阶段，从 LSTM、Transformer 到 Mamba 的序列

建模架构演进，极大丰富了器件健康状态评估与剩余使用寿命预测的技术手段。此外，物理信息神经网络以及联邦学习、迁移学习的引入，不仅提升了模型在复杂工况下的泛化能力，更为解决储能领域的数据稀缺与隐私保护难题开辟了有效路径。

然而，上述进展并未根本改变超级电容器数据驱动研究所面临的结构性短板。最突出的问题在于数据基础薄弱：目前公开的超级电容器循环寿命数据集规模仍远小于锂电池领域，且不同实验室间测试条件的差异使文献数据难以直接整合。与此相关的是，锂电池领域积累的方法论成果无法直接迁移应用。而SHAP所提供的相关性解耦与严格物理因果推理之间的鸿沟，也体现出现有可解释方法的局限性。

这些挑战同时也勾勒出了未来工作的优先方向。在数据与方法层面，亟需建设涵盖多材料体系与多工况条件的统一超级电容器数据库；同时，丰富描述符体系，并探索结合因果推理的机器学习框架，是突破现有构效关系认知瓶颈的关键。在工程与部署层面，深度整合自主实验平台以弥合“理论计算与实际合成”的断层，以及推进模型轻量化与边缘计算的结合、强化预测不确定性的量化保障，会成为打通“材料创制-器件服役”全生命周期管理的关键环节。随着数据基础设施的筑牢与算法生态的持续演进，人工智能有望从单纯的辅助分析工具，真正升维成引领超级电容器技术迭代的核心基础设施，从能量密度提升这一核心目标审视，人工智能已展现出从材料端驱动比电容与电化学窗口协同提升、到器件端实现全生命周期能量输出最优化的全链条赋能潜力。这将为下一代高性能储能系统的规模化应用提供最坚实的技术底座。

参考文献

- [1] LIU Y Y, SHEARING P R, HE G J, et al. Supercapacitors: History, theory, emerging technologies, and applications[M]//Advances in Sustainable Energy. Cham: Springer International Publishing, 2021: 417-449. DOI:10.1007/978-3-030-74406-9_15.
- [2] AUGUSTYN V, SIMON P, DUNN B. Pseudocapacitive oxide materials for high-rate electrochemical energy storage[J]. Energy & Environmental Science, 2014, 7(5): 1597-1614.
- [3] VAHIDMOHAMMADI A, ROSEN J, GOGOTSI Y. The world of two-dimensional carbides and nitrides (MXenes) [J]. Science, 2021, 372(6547): eabf1581. DOI:10.1126/science.abf1581.
- [4] LI C, YUE Q Y, GAO Y, et al. Toward rational design of carbon-based electrodes for high-performance supercapacitors[J]. ACS Applied Materials & Interfaces, 2025, 17(17): 24675-24700.
- [5] KRESS T, LIU X Y, FORSE A C. Pore network tortuosity controls fast charging in supercapacitors[J]. Nature Materials, 2026, 25(3): 440-446. DOI:10.1038/s41563-025-02404-6.
- [6] NOH J, DOAN H A, JOB H, et al. An integrated high-throughput robotic platform and active learning approach for accelerated discovery of optimal electrolyte formulations[J]. Nature Communications, 2024, 15: 2757. DOI: 10.1038/s41467-024-47070-5.
- [7] ZHAO C X, LU X Y, TU H Y, et al. Research on specific capacitance prediction of biomass carbon-based supercapacitors based on machine learning[J]. Journal of Energy Storage, 2024, 97: 112974. DOI:10.1016/j.est.2024.112974.
- [8] SAWANT V, DESHMUKH R, AWATI C. Machine learning techniques for prediction of capacitance and remaining useful life of supercapacitors: A comprehensive review[J]. Journal of Energy Chemistry, 2023, 77: 438-451. DOI:10.1016/j.jechem.2022.11.012.
- [9] WANG Z X, WU T Z, ZENG L, et al. Machine learning relationships between nanoporous structures and electrochemical performance in MOF supercapacitors[J]. Advanced Materials, 2025, 37(15): 2500943. DOI: 10.1002/adma.202500943.
- [10] JAIN A, ONG S P, HAUTIER G, et al. Commentary: The Materials Project: A materials genome approach to accelerating materials innovation[J]. APL Materials, 2013, 1: 011002. DOI: 10.1063/1.4812323.
- [11] CURTAROLO S, SETYAWAN W, HART G L W, et al. AFLOW: An automatic framework for high-throughput materials discovery[J]. Computational Materials Science, 2012, 58: 218-226. DOI: 10.1016/j.commatsci.2012.02.005.
- [12] SAAL J E, KIRKLIN S, AYKOL M, et al. Materials design and discovery with high-throughput density functional theory: The open quantum materials database (OQMD) [J]. JOM, 2013, 65(11): 1501-1509. DOI:10.1007/s11837-013-0755-4.
- [13] CHOUDHARY K, GARRITY K F, REID A C E, et al. The joint automated repository for various integrated simulations (JARVIS) for data-driven materials design[J]. npj Computational Materials, 2020, 6: 173. DOI:10.1038/s41524-020-00440-1.
- [14] JAIN A, HAUTIER G, ONG S P, et al. Formation enthalpies by mixing GGA and GGA+U calculations[J]. Physical Review B, 2011, 84(4): 045115. DOI:10.1103/physrevb.84.045115.
- [15] WILKINSON M D, DUMONTIER M, AALBERSBERG I J, et al. The FAIR Guiding Principles for scientific data management and stewardship[J]. Scientific Data, 2016, 3: 160018. DOI: 10.1038/sdata.2016.18.
- [16] ANDERSEN C W, ARMIENTO R, BLOKHIN E, et al. OPTIMADE, an API for exchanging materials data[J]. Scientific Data, 2021, 8: 217. DOI:10.1038/s41597-021-00974-z.
- [17] ROSEN A S, IYER S M, RAY D, et al. Machine learning the quantum-chemical properties of metal-organic frameworks for accelerated materials discovery[J]. Matter, 2021, 4(5): 1578-1597. DOI:10.1016/j.matt.2021.02.015.
- [18] MERLET C, PÉAN C, ROTENBERG B, et al. Simulating supercapacitors: Can we model electrodes as constant charge surfaces?[J]. The Journal of Physical Chemistry Letters, 2013, 4

- (2): 264-268.
- [19] WARD L, DUNN A, FAGHANINIA A, et al. Matminer: An open source toolkit for materials data mining[J]. *Computational Materials Science*, 2018, 152: 60-69. DOI:10.1016/j.commatsci.2018.05.018.
- [20] BARTÓK A P, KONDOR R, CSÁNYI G. On representing chemical environments[J]. *Physical Review B*, 2013, 87(18): 184115. DOI:10.1103/physrevb.87.184115.
- [21] TAWFIK W Z, MOHAMMAD S N, RAHOUMA K H, et al. An artificial neural network model for capacitance prediction of porous carbon-based supercapacitor electrodes[J]. *Journal of Energy Storage*, 2023, 73: 108830. DOI:10.1016/j.est.2023.108830.
- [22] XIE T, GROSSMAN J C. Crystal graph convolutional neural networks for an accurate and interpretable prediction of material properties[J]. *Physical Review Letters*, 2018, 120(14): 145301. DOI:10.1103/physrevlett.120.145301.
- [23] GAO Y C, CHEN X, YUAN Y H, et al. Accelerating battery innovation: AI-powered molecular discovery[J]. *Chemical Society Reviews*, 2025, 54(21): 9630-9684.
- [24] GAO Y C, YAO N, CHEN X, et al. Data-driven insight into the reductive stability of ion-solvent complexes in lithium battery electrolytes[J]. *Journal of the American Chemical Society*, 2023, 145(43): 23764-23770. DOI:10.1021/jacs.3c08346.
- [25] HUANG H, HU Y T, HOU Y J, et al. Delocalized electrolyte design enables 600 Wh kg⁻¹ lithium metal pouch cells[J]. *Nature*, 2025, 644(8077): 660-667. DOI:10.1038/s41586-025-09382-4.
- [26] CHEN C, YE W K, ZUO Y X, et al. Graph networks as a universal machine learning framework for molecules and crystals[J]. *Chemistry of Materials*, 2019, 31(9): 3564-3572. DOI:10.1021/acs.chemmater.9b01294.
- [27] CHEN C, ONG S P. A universal graph deep learning interatomic potential for the periodic table[J]. *Nature Computational Science*, 2022, 2(11): 718-728. DOI:10.1038/s43588-022-00349-3.
- [28] DENG B W, ZHONG P C, JUN K, et al. CHGNet as a pretrained universal neural network potential for charge-informed atomistic modelling[J]. *Nature Machine Intelligence*, 2023, 5(9): 1031-1041. DOI:10.1038/s42256-023-00716-3.
- [29] BATZNER S, MUSAELIAN A, SUN L X, et al. E(3)-equivariant graph neural networks for data-efficient and accurate interatomic potentials[J]. *Nature Communications*, 2022, 13: 2453. DOI:10.1038/s41467-022-29939-5.
- [30] BATATIA I, CSANYI G, KOVACS D P, et al. MACE: Higher order equivariant message passing neural networks for fast and accurate force fields[C]//*Advances in Neural Information Processing Systems 35*. November 28-December 9, 2022. New Orleans, Louisiana, USA. Neural Information Processing Systems Foundation, Inc. (NeurIPS), 2022: 11423-11436. DOI:10.52202/068431-0830.
- [31] LIAO Y L, WOOD B, DAS A, et al. EquiformerV2: Improved equivariant transformer for scaling to higher-degree representations[EB/OL]. 2023: arXiv: 2306.12059. <https://arxiv.org/abs/2306.12059>
- [32] MERCHANT A, BATZNER S, SCHOENHOLZ S S, et al. Scaling deep learning for materials discovery[J]. *Nature*, 2023, 624(7990): 80-85. DOI:10.1038/s41586-023-06735-9.
- [33] YANG H, HU C X, ZHOU Y C, et al. MatterSim: A deep learning atomistic model across elements, temperatures and pressures [EB/OL]. 2024: arXiv: 2405.04967. <https://arxiv.org/abs/2405.04967>
- [34] SZYMANSKI N J, BARTEL C J. Computationally guided synthesis of battery materials[J]. *ACS Energy Letters*, 2024, 9(6): 2902-2911. DOI:10.1021/acscenergylett.4c00821.
- [35] GUPTA V, CHOUDHARY K, DECOST B, et al. Structure-aware graph neural network based deep transfer learning framework for enhanced predictive analytics on diverse materials datasets[J]. *NPJ Computational Materials*, 2024, 10: 1. DOI:10.1038/s41524-023-01185-3.
- [36] SZYMANSKI N J, RENDY B, FEI Y X, et al. An autonomous laboratory for the accelerated synthesis of inorganic materials[J]. *Nature*, 2023, 624(7990): 86-91. DOI:10.1038/s41586-023-06734-w.
- [37] WANG T, PAN R T, MARTINS M L, et al. Machine-learning-assisted material discovery of oxygen-rich highly porous carbon active materials for aqueous supercapacitors[J]. *Nature Communications*, 2023, 14: 4607. DOI:10.1038/s41467-023-40282-1.
- [38] CHEN S, WU G B, JIANG H B, et al. External Li supply reshapes Li deficiency and lifetime limit of batteries[J]. *Nature*, 2025, 638(8051): 676-683. DOI:10.1038/s41586-024-08465-y.
- [39] ZHENG Z L, CHEN S, WU G B, et al. Boron-centered organic salts enabling Na-ion supply and interfacial protection for Na-ion batteries[J]. *Angewandte Chemie International Edition*, 2025, 64(48): e202517997. DOI:10.1002/anie.202517997.
- [40] KANG Z Y, WANG S F, WU G B, et al. Nitrogen-centered organic salts enable stable lithium-ion supply for high-energy-density batteries[J]. *Journal of the American Chemical Society*, 2025, 147(34): 30591-30598. DOI:10.1021/jacs.5c09300.
- [41] MANOHARAN A, CHONG J J, CHOONG Z J, et al. Optimizing lithium-ion battery manufacturing with digitalization and AI-driven frameworks[J]. *The International Journal of Advanced Manufacturing Technology*, 2026, 142(1): 1-37. DOI:10.1007/s00170-025-17129-8.
- [42] LU X Y, ZHAO C X, TU H Y, et al. Research on prediction of energy density and power density of biomass carbon-based supercapacitors based on machine learning[J]. *Sustainable Materials and Technologies*, 2025, 44: e01309. DOI:10.1016/j.susmat.2025.e01309.
- [43] SINGH S, OBERLE M, SCHEL D, et al. Digital twin in the battery industry[M]//*Digital Twins, Simulation, and the Metaverse*. Cham: Springer Nature Switzerland, 2024: 363-393. DOI:10.1007/978-3-031-69107-2_15.
- [44] ZENI C, PINSLER R, ZÜGNER D, et al. A generative model for inorganic materials design[J]. *Nature*, 2025, 639(8055): 624-632. DOI:10.1038/s41586-025-08628-5.
- [45] CAO Z D, LUO X S, LV J, et al. Space group informed transformer for crystalline materials generation[J]. *Science Bulletin*, 2025, 70(21): 3522-3533. DOI:10.1016/j.scib.2025.09.035.
- [46] ANTUNES L M, BUTLER K T, GRAU-CRESPO R. Crystal structure generation with autoregressive large language modeling [J]. *Nature Communications*, 2024, 15: 10570. DOI:10.1038/

- s41467-024-54639-7.
- [47] YANG S, CHO K, MERCHANT A, et al. Scalable diffusion for materials generation[C/OL]//The Twelfth International Conference on Learning Representations, ICLR 2024. Vienna, Austria: OpenReview, 2024.
- [48] VETTER J, NOVÁK P, WAGNER M R, et al. Ageing mechanisms in lithium-ion batteries[J]. *Journal of Power Sources*, 2005, 147(1/2): 269-281. DOI:10.1016/j.jpowsour.2005.01.006.
- [49] REN J H, LIN X R, LIU J Y, et al. Engineering early prediction of supercapacitors' cycle life using neural networks[J]. *Materials Today Energy*, 2020, 18: 100537. DOI: 10.1016/j.mtener. 2020. 100537.
- [50] BARRÉ A, DEGUILHEM B, GROLLEAU S, et al. A review on lithium-ion battery ageing mechanisms and estimations for automotive applications[J]. *Journal of Power Sources*, 2013, 241: 680-689. DOI:10.1016/j.jpowsour.2013.05.040.
- [51] PLETT G L. Extended Kalman filtering for battery management systems of LiPB-based HEV battery packs Part 1. Background[J]. *Journal of Power Sources*, 2004, 134(2): 252-261. DOI:10.1016/j.jpowsour.2004.02.031.
- [52] UNO M, TANAKA K. Accelerated charge-discharge cycling test and cycle life prediction model for supercapacitors in alternative battery applications[J]. *IEEE Transactions on Industrial Electronics*, 2012, 59(12): 4704-4712. DOI: 10.1109/TIE. 2011. 2182018.
- [53] EL MEJDOUBI A, CHAOUI H, SABOR J, et al. Remaining useful life prognosis of supercapacitors under temperature and voltage aging conditions[J]. *IEEE Transactions on Industrial Electronics*, 2018, 65(5): 4357-4367. DOI:10.1109/TIE.2017.2767550.
- [54] KÖTZ R, RUCH P W, CERICOLA D. Aging and failure mode of electrochemical double layer capacitors during accelerated constant load tests[J]. *Journal of Power Sources*, 2010, 195(3): 923-928. DOI:10.1016/j.jpowsour.2009.08.045.
- [55] GILLANI S W, SHAHID K, GULZAR M M, et al. Remaining useful life prediction of super-capacitors in electric vehicles using neural networks[J]. *Arabian Journal for Science and Engineering*, 2024, 49(5): 7327-7340. DOI:10.1007/s13369-024-08766-4.
- [56] QI G H, MA N, WANG K. Predicting the remaining useful life of supercapacitors under different operating conditions[J]. *Energies*, 2024, 17(11): DOI:10.3390/en17112585.
- [57] ANANTHA P N K, PRATIHASTA A K, TANWAR N, et al. Interpretable hybrid CDTCN-GRU model for supercapacitor life prediction[J]. *IEEE Sensors Journal*, 2025, 25(14): 26970-26978. DOI:10.1109/JSEN.2025.3573331.
- [58] SINGH A, SINGH S, KAMBOJ R K, et al. Explainable OptiCNN-SLSTM hybrid model for enhanced lithium-ion battery state of health prediction[J]. *Scientific Reports*, 2025, 15: 44364. DOI: 10.1038/s41598-025-28091-6.
- [59] MOHANTY P K, JENA P, PRASAD PADHY N. Federated learning with a temporal-degradation-aware transformer for robust joint SOC and SOH estimation in electric vehicle batteries [J]. *IEEE Transactions on Transportation Electrification*, 2026, 12 (2): 3663-3678. DOI:10.1109/TTE.2025.3646926.
- [60] FAN Q Y, HE G X, RUAN D W, et al. Multi-expert fusion for state-of-health estimation of lithium-ion batteries[J]. *Scientific Reports*, 2025, 15: 42058. DOI:10.1038/s41598-025-26163-1.
- [61] ZHANG H, LI Y Q, ZHENG S, et al. Battery lifetime prediction across diverse ageing conditions with inter-cell deep learning[J]. *Nature Machine Intelligence*, 2025, 7(2): 270-277. DOI: 10.1038/s42256-024-00972-x.
- [62] OLALDE-VERANO J I, KIRCH S, PÉREZ-MOLINA C, et al. SambaMixer: State of health prediction of Li-ion batteries using mamba state space models[J]. *IEEE Access*, 2025, 13: 2313-2327. DOI:10.1109/ACCESS.2024.3524321.
- [63] WANG F Y, BAO M H, RU Q. An enhanced prognostication of lithium-ion batteries degradation trajectory and remaining useful life based on Mamba-MoE model[J]. *Ionics*, 2025, 31(10): 10615-10630. DOI:10.1007/s11581-025-06607-4.
- [64] HU J C, FU P Y, WEI Z B, et al. Early prediction of lithium-ion battery degradation with a generative pre-trained transformer[J]. *Nature Communications*, 2026, 17: 126. DOI: 10.1038/s41467-025-66819-0.
- [65] SALEM N M, MOHAMED A. Physics-informed hybrid reinforcement learning for estimating lithium-ion battery state of health[J]. *Scientific Reports*, 2025, 15: 43819. DOI: 10.1038/s41598-025-30602-4.
- [66] QAADAN S, ALSHARE A, ALAZRAI R, et al. Causal physics-infused hybrid learning (CPIHL) framework for next-gen battery health forecasting[J]. *IEEE Access*, 2025, 13: 61728-61739. DOI: 10.1109/ACCESS.2025.3556314.
- [67] CHE Y H, ZHENG Y S, RHYU J, et al. Mechanistically guided residual learning for battery state monitoring throughout life[J]. *Nature Communications*, 2026, 17: 855. DOI: 10.1038/s41467-025-67565-z.
- [68] CAO R, ZHANG Z J, SHI R W, et al. Model-constrained deep learning for online fault diagnosis in Li-ion batteries over stochastic conditions[J]. *Nature Communications*, 2025, 16: 1651. DOI:10.1038/s41467-025-56832-8.
- [69] LIU H A, LI C, HU X S, et al. Multi-modal framework for battery state of health evaluation using open-source electric vehicle data [J]. *Nature Communications*, 2025, 16: 1137. DOI: 10.1038/s41467-025-56485-7.
- [70] LIU Y P, AHMED M, FENG J T, et al. A federated transfer learning framework for lithium-ion battery state of health estimation based on fast-charging segments[J]. *IEEE Transactions on Transportation Electrification*, 2025, 11(6): 12887-12897. DOI: 10.1109/TTE.2025.3594553.
- [71] ZHU R, PENG W W, YE Z S, et al. Collaborative prognostics of lithium-ion batteries using federated learning with dynamic weighting and attention mechanism[J]. *IEEE Transactions on Industrial Electronics*, 2025, 72(1): 980-991. DOI: 10.1109/TIE.2024.3387115.
- [72] WANG M Y, WU Y F, CAO Y C, et al. Real-time artificial intelligence for solid-state lithium metal batteries[J]. *Nature Communications*, 2025, 16: 11160. DOI: 10.1038/s41467-025-66079-y.