

浙江大学 2021 级大学生创新创业训练计划项目

结题报告

项目编号 202210335146

项目名称 基于神经网络算法，预测材料
性质以及解决物理模型偏微分方程

项目负责人 贺旭鸿

院(系)、年级、专业 浙江大学伊利诺伊大学厄巴纳
香槟校区联合学院 电子与计算机工程专业 大二

联系电话 15712127977

电子邮件 xuhong.21@intl.zju.edu.cn

结题日期 2023.5.10

项目类别：创新训练项目 ☒ 创业训练项目 ☐ 创业实践项目 ☐

校级SRTP项目 ☐ 院级SRTP项目 ☐ 科研实践项目 ☐

本科生院制表

承 诺 书

- 1、本结题报告中所填写的各栏目内容真实、准确。
- 2、提供验收的技术文件和资料真实、可靠，技术（或理论）成果事实存在。
- 3、提供验收的实物（样品）与所提供鉴定的技术文件和资料一致，并事实存在。
- 4、本项目的知识产权或商业秘密明晰完整，未剽窃他人成果、未侵犯他人的知识产权或商业秘密。
- 5、若发生与上述承诺相违背的事实，由本项目组承担全部法律责任。

项目组全体成员（签名）：

年 月 日

一、项目信息

项目名称		基于神经网络算法，预测材料性质以及解决物理模型偏微分方程				
立项经费		12000		结题时间	2023.5.10	
项目 负 责 人	学号	姓名	年级	所在学院（系）、专业	联系电话	电子信箱
	32101154 62	贺旭鸿	大二	浙江大学伊利诺伊大学厄巴纳 香槟校区联合学院、Computer Engineering	15712127977	xuhong.21@intl.zju.edu.cn
参 与 成 员	32101154 39	敖煜毅	大二	浙江大学伊利诺伊大学厄巴纳 香槟校区联合学院、Computer Engineering	13544260152	yuyi.21@intl.zju.edu.cn
	32101109 61	吴宇星	大二	浙江大学伊利诺伊大学厄巴纳 香槟校区联合学院、Electrical ENG & Automation	13989484033	yuxingw.21@intl.zju.edu.cn
指 导 教 师	姓 名	职 称	所 在 学 院（系）		联 系 电 话	电子信箱
	王高昂	研究员	浙江大学伊利诺伊大学厄巴纳 香槟校区联合学院		17361853945	gaoangwang@intl.zju.edu.cn

二、项目主要内容

成果简介 (不少于 500 字)

本项目主要运用机器学习中的神经网络算法探索大数据对于预测未知材料性质的可行性。我们已完成如下成果：

1、关于模型搭建：由于原物理模型函数代码与神经网络需要使用的 `pytorch` 的 `tensor` 类型不同，导致梯度出现问题，网络参数无法更新。我们完成了对原物理模型代码的改写与复现，使其适配于 `pytorch` 神经网络算法。

2、关于参数拟合：对于 `TDTR` 模型给定的一组已知参数以及两个未知参数。通过对神经网络模型的训练，我们已经能够拟合出未知参数的精确数值。在这一过程中，我们主要学习并调整了如下方面：（1）`normalization` 处理数据数量级的差距（2）优化器尝试更换（3）函数本身误差（4）网络复杂度问题

3、关于实际问题：考虑到实践中可能存在需要多参数拟合，并且可能频率等变量存在噪声的情况，我们对类似这样的实际问题开始探索。

我们首先探讨了多参数拟合的可能性：对于确定材料的多参数拟合，理论上是可行的，不过需要进一步增加网络复杂度；对于不定材料的参数拟合：理论可行，但是需要多个网络的计算才可完成。对于多参数拟合的问题，我们达成的是理论成果。

对于噪声问题，我们将噪声作为神经网络的一个输出，并对其进行惩罚以缩小其数值并输出，目前对于较小的正态分布的情况，我们已经可以输出较为精确的数值。

三、项目实施情况总结（1500 字左右）

项目研究创新点与学术价值

利用神经网络解决材料领域物理模型求参数和微分方程求解的问题

在物理材料领域内，如何准确求出物理模型所涉及的参数是一个重要的问题。而当前存在的拟合方法又有出现拟合不精准、拟合结果在引入噪声时偏差过大的问题。本项目引入深度学习模型，从而高效率、准确地发现海量数据的相互关联性与特征，提取有效信息。本项目创新地在材料科学领域的参数拟合问题中引入神经网络，优化了传统拟合方法拟合误差大、噪声影响大的问题，能够精确地得到材料模型中多个参数的数值，大大提高从事 TDTR 模型的研究者的工作效率。

本项目在解决物理模型参数拟合问题后，同样的思路可以运用于微分方程求解的问题（物理领域的另一重要应用）。因此，搭建一个能精准求解且具有普遍性深度学习模型是非常有意义的。这样的神经网络模型能够极大提高研究者的求解偏微分方程的效率。

项目执行过程与实施情况

在项目立案时，本小组确定了严密的研究计划并且有条不紊地根据计划执行。

本项目的首要目标是复现材料科学领域一篇关于使用神经网络对时域反射实验拟合表现的论文。本科研小组首先构建了相关物理理论模型，使得一组参数输入（freq 频率，未知性质参数）能够得到理论输出（对应 phase 值）。接着，我们通过研究学习，自行独立搭建了一个适配应用于数值计算的神经网络。在训练过程，我们将多组 freq 和 phase 作为训练集，将未知参数预测值模型输出，对神经网络进行训练。我们不断增加网络深度，提高网络的泛化性与准确性。至此，本小组基本达到对论文神经网络的复现。给定一组 TDTR 模型的输入与输出，我们能精确地求解出未知参数的数值。在第二阶段，本小组确立了提高模型抗噪性的目标。在此阶段，我们在王高昂教授的指导下，优化了模型学习率函数，尝试提高模型普适性，之前面对某些训练数据梯度下降问题出现频次大大降低。此外，我们还提高了模型的抗噪性。我们在神经网络误差计算步骤加入了误差参数的惩罚项，将误差作为输出，直接将误差与预测参数分离，达到了更好的拟合效果，提高模型抗噪性。

成果应用与推广及社会效益

首先，我们小组最终训练的神经网络表现出对 TDTR 这类可以进行物理建模的材料热学实验拟合能力较强，对部分材料参数的具有很好的预测能力。可针对性地对某个材料的某个参数，进行快速低成本精准预测，从而大大缩减了所需实验的时间成本和金钱成本。较于传统的材料热力学实验，TDTR 领域研究者一次实验中只需测量三层叠加材料的热导率或某一单层的参数，就可通过预先训练已有材料参数的神经网络，极快速的预测出叠加材料在不同温度下的热导率其他单层材料在整体中体现的热学性质。此次项目实验的成功也是对神经网络的大数据拟合能力能运用到材料领域的一次尝试证明，对于材料领域未来的研究方向提供了一条跨领域结合的可能的方向。

研究存在的不足或欠缺，尚需深入研究的问题等。

受神经网络训练方式和已有知识的限制，我们组最终的神经网络泛化能力欠增强，对于不同材料需要进行不同的预训练，意味着可预测材料需要有一定的已有实验数据的要求。在此基础上，可进行精准预测的材料参数较为有限。对于部分对实验结果 phase 影响极为敏感的参数加上噪音训练，偏差较大，容易欠拟合。最后，我们对于更多材料层数的叠加材料属性预测实验进行设想。如果训练神经网络拟合预测的能力可以推广到对四层甚至更多层叠加材料的热学性质预测，那么可能对未来材料领域带来变革性的影响。

四、项目实现经济效益和知识产权情况

经济效益	年产值（万元）		年利税（万元）	
知识产权	著作类			
	科技论文（篇）		科技著作（种）	
	专利类			
	专利申请受理（件）		发明专利数（件）	
	其他类（实物、模型、设计、网站等）			
获奖情况	国家级奖项	省级奖项	市级奖项	校级奖项

五、项目成果统计

完成论文登记表（具体资料附页）

主要作者	论文名称	刊物名称、年、卷、期、页或论文集名称、出版社、页	论文被引用情况或三大索引收录情况	论文类别（打√）				
				国外重要刊物	国内重要刊物	学术会议论文		其他刊物
						国外	国内	

完成论著及其它成果登记表（具体资料附页）

获奖成果名称	主要完成者	授奖单位	奖励名称		等级	日期
专利名称	申请人或专利权人	发明人	申请号或授权号	专利国别	申请日	授权日
论著名称	主要作者	出版时间	字数（万字）	出版社		
推广成果名称	应用单位		社会效益			
评议、鉴定成果名称	评议、鉴定单位		评议、鉴定日期			

六、项目经费使用情况

项 目	金 额（元）	备 注
一、经费收入	12000	
1、学校支助经费	12000	
2、自筹经费		
3、其他		
二、经费支出		
1、专用材料费		
2、交通与差旅费		
3、印刷与资料费		
4、邮寄费		
5、出版/文献/信息传播/知识产权事务费		
6、其他		

三、经费总计		
--------	--	--

七、指导老师意见

<div>指导老师签名:</div> <div>年 月 日</div>

八、学院（系）验收意见

<div>(验收成绩：优秀、良好、中级、及格、不及格五级评定)</div> <div>(盖章)</div> <div>年 月 日</div>
--

九、学校验收意见

<div>(盖章)</div> <div>年 月 日</div>
