

# 浙江大学大学生创新创业训练计划 中期检查表

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： 贺旭鸿 学 号： 3210115462

院（系）： 浙江大学伊利诺伊大学厄巴纳香槟校区联合学院

联系电话： 15712127977 电子邮件： xuhong.21@intl.zju.edu.cn

指导教师： 王高昂 职 称： 研究员

浙江大学本科生院教务处

2022-11-10

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		12000.0	起止时间	2022-03-01 至 2023-05-31	
负责人	学号	姓名	所在院系、专业	联系电话	E-mail
	3210115462	贺旭鸿	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
参加成员	3210115439	敖煜毅	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
参加成员	3210110961	吴宇星	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
导师	姓名	王高昂	院系:	职称	研究员
	E-mail	gaoangwang@intl.zju.edu.cn		联系电话	17361853945

### 一、项目研究进展情况（含项目研究已取得阶段性成果和收获）（800字内）

#### （1）项目研究进展情况

研究内容： 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。运用神经网络实现将材料属性相关函数建立成模型，发现材料属性变化之间的规律的目的。对于材料属性的探究本质上是对多参方程进行拟合建模的过程。因此，此研究的另一层意义在于探究神经网络对于解决物理模型偏微分方程的可行性。方法： 本项目以一篇神经网络对时域热反射（TDTR）实验拟合表现的论文做参考上手，以实验将一组控制参数和实验获得的数据作为神经网络的输入，以材料需经过复杂实验获得的待测参数做为期望的输出。我们先用已知材料和实验的物理原理进行模型建立，自制一个数据库来训练神经网络，并测试训练好的网络在拟合其他材料的表现，不断优化参数以达到最好的效果。随后，增加网络的复杂度，测试训练神经网络的泛用性能否在自己编写函数的拟合情况。并后续对实验数据增加噪音，训练网络以达到更强的泛化抗噪能力。进度： 目前已经完成原TDTR函数与神经网络拟合的匹配，同时基本实现TDTR的复现以及对于一些基础函数的拟合，能够拟合单个确定双层材料的参数。下阶段将尝试增强模型的抗噪能力。方法规范： 我们在科研过程中回归神经网络的原理，通过搜寻网络资料和阅读相关论文，不断解决遇到的调参困难。关于神经网络无法降低梯度，以及数据间量级的差异对于神经网络的影响，我们通过添加scale值，增加网络复杂度，更改优化器等方法解决。同时，SRTP的前期我们每周定期参加组会，中期则不定期向教授会报进度并及时交流。我们还通过博客记录的方式，进行了SRTP的过程，有利于我们回顾先前的想法与经验。在编写代码的过程中，我们进行了充分的注释以便后续的阅读和复现。在项目实现的步骤上，以模型的建立以及可实现为首要目标。

#### （2）项目研究已取得阶段性成果和收获

对于TDTR模型给定的一组已知参数以及两个未知参数，根据TDTR模型相关物理性质，我们利用参数和在一定范围内的freq（频率值）来生成对应phase值。我们将freq和phase作为神经网络训练的数据集，模型输出我们对未知参数的预测值，通过梯度下降法，让未知参数逼近真实值，从而达到对未知参数拟合的效果。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，我们能够拟合出未知参数的精确数值。

**二、项目研究存在的主要问题分析及应对思路与措施（500字内）**

一、首先遇到的问题是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，因此梯度出现问题，导致网络无法更新。我们应对的方法是改变数据类型并重写一部分的函数代码，让该模型可以和神经网络适配。那么再经过改写之后发现网络已经可以拟合一些简单的函数（一次函数等），那么也就验证了梯度可以回传，网络可以继续更新。二、解决梯度问题之后，遇到新的问题是发现网络对拟合TDTR函数（较复杂）的效果较差，我们的初步猜测是函数的斜率太小导致当数据取的过于密集时，函数值的变化值太小，不利于网络的拟合，计划用更简单函数模拟TDTR，从简单函数入手（因为TDTR太复杂，算起来太慢）。尝试了部分方法后，发现还是效果不佳。在教授的指导下，最终确定问题可能出在(1)normalization处理数据数量级的差距 (2)优化器可以尝试更换 (3)函数可能本身会有误差（比如数学积分的过程） (4)网络复杂度问题 经过自己在网上学习以及教授的指导后，确定了normalization和网络复杂度是主要问题，经过调整之后网络已经可以拟合单组参数。三、后期的问题：由于当前网络的作用只是拟合一组参数，我们需要的是更普适的模型，因此还要继续寻找解决方法，这也是接下来的主要方向。

**三、项目研究下阶段主要任务及时间进程安排（500字内）**

主要任务：对于我们小组阶段性研究的成果，王高昂教授也对我们提出了建议以及更高的要求。我们小组计划在寒假前完成对以下三个任务的探究与学习。1.目前，我们的神经网络模型仍具有一定的局限性。对于某些训练数据，神经网络的梯度下降不能正常进行，误差在一定值时停止下降。我们计划修改神经网络的学习率从而优化神经网络。我们计划深入学习pytorch官网文档关于学习率的相关内容，修改学习率函数，使学习率在梯度下降的过程中改变，达到理想的效果。2.我们计划优化神经网络模型，并将其用于多参数拟合的任务。当前，我们的神经网络模型着眼于双未知参数的拟合。我们希望通过神经网络模型的优化与修改，设计出更具普适性的神经网络模型。将对两个参数拟合的神经网络推广，解决更普遍的问题。3.在真实实验场景中，噪声干扰是不可避免的问题。本项目利用神经网络模型解决传统材料领域参数拟合的问题，正是希望此方法能够更高的抵抗真实环境中噪声的干扰。我们计划在数据集中引入噪声，在与传统方法的对比中检验在神经网络的拟合效果与优越性。

**四、项目负责人所承担和完成研究内容情况汇报 (100字内)**

1. 负责与导师及时联系与交流。 2. 负责项目整体进度的把握，在组内合理分配任务。 3. 负责监督组员及时完成任务，并从任务中得出问题与收获

**五、项目经费使用情况** (说明购置材料、资料、调研、交通等已开支经费数额) (100字内)

由于还未达到发表论文的阶段，目前经费暂未使用。

**六、指导教师意见** (从研究内容和进展、阶段性成果、存在问题等方面加以评价) (180字内)

已取得初步结果，继续努力！

签名：王高昂

2022-11-18

**七、院（系）评审意见 (100字内)**

同意通过中期检查。

签名盖章

年 月 日