

浙江大学国家级大学生创新创业训练项目  
申报书

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	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
是否依托学校科教协同基地项目： 否			

浙江大学本科生院教务处

## 填写说明

一、申报书要按照要求，逐项认真填写，填写内容必须实事求是，表达明确、严谨，首页只填负责人，“项目编号”一栏不填。

二、格式要求：申报书中各项内容以Word文档格式填写，表格中的字体为小四号楷体，行距为最小值20磅；表格空间不足的，可以扩展或另附纸张。

## 一、项目简介

项目概况	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					
	所属一级学科		计算机科学技术					
	项目性质		应用基础研究					
	项目来源		自主立题					
	申请经费		12000.0					
	起止时间		2022-03-01 至 2023-05-31					
项目状况		研发状态						
项目申报人	姓名	贺旭鸿	性别	男	出生年月		入学年月	2021
	学号	3210115462			联系电话	15712127977	电子信箱	xuhong.21@intl.zju.edu.cn
	院系专业	浙江大学伊利诺伊大学厄巴纳香槟校区联合学院、Computer Engineering						
项目组主要成员	姓名	联系电话		院系专业		年级	具体分工	
	敖煜毅	13544260152		浙江大学伊利诺伊大学厄巴纳香槟校区联合学院、Computer Engineering		2021		
	吴宇星	13989484033		浙江大学伊利诺伊大学厄巴纳香槟校区联合学院、Electrical ENG & Automation		2021		
项目指导老师	姓名	联系电话		所在单位		职务/职称	主要研究方向	
	王高昂	17361853945				研究员	计算机视觉	
	王伟烈	15757316216				副教授		
	近三年成果：国家级_1_等奖_2_项，省部级_0_等奖_0_项							
	近三年科研经费_0_万元，年均_0_万元							

项目主要内容简介	运用深度学习算法搭建材料物理模型架构，解决偏微分方程，以预测材料性质的重要参数、变化过程、以及新材料的预见。
项目负责人参与科研情况	无
项目组成员参与科研情况	无

二、项目背景、目的及意义

(简要说明项目背景、意义和实施必要性, 研究现状和发展动态, 不超过1100字)

机器学习是一种实现人工智能的重要方法, 它是基于数据集来建立数学物理模型、进行研究推理的新兴方法。主要通过搭建神经网络, 对大数据进行处理、整合与学习, 并且可以使其在多种领域得到发展和应用。在材料科学领域, 多种参数存在, 而各个参数之间的联系主要在于偏微分方程的解析。偏微分方程关注的是物体性质的变化过程, 通常存在于物理模型或者化学模型中, 往往难以求解, 因此需要大量离散数据进行数值求解, 这也就需要最善于解决复杂问题的机器学习与神经网络, 将深度学习应用于物理模型。近些年出现的残差网络 (Resnet) 等将神经网络的层数不断加深, 非常适合于对于物理模型或偏微分方程的求解。目前, 华盛顿大学、GoogleAI等团队在今年对于神经网络解决偏微分方程提出了基本的想法与思路, 充分展示了该学科交叉领域的前景十分光明。本次科研的目的是通过训练出一个独特的神经网络架构达到一个通解模型的概念。这个模型使得我们能够对材料受到某些条件的影响而出现性质变化进行预测; 或是当一种新型材料问世时, 我们仅需通过一定的实验数据, 就能快速较为精确地获得其多个重要参数, 为其进一步的优化改进做参考, 甚至模拟或生成出新型材料。同时优化算法, 进一步降低现实数据中噪音对模型的影响, 优化模型的抗噪音能力。意义: 机器学习可以在各个学科有效识别大型高维数据集中的模式, 快速提取有用信息, 高精度和高效率地处理实验数据, 从而发现隐藏规律。它非常适合材料预测与规律发现, 并且可以加速预测材料特性的过程, 减少传统研究中手动调节模型参数的情况。机器学习模型能检测试验信号中难以发现的细节特征, 从一次实验数据中提取多个参数。强大的预测性能和相对较低的计算成本, 会使机器学习在材料领域收获成果。

三、项目研究方案

(包括项目的主要内容、计划目标和拟解决的问题，思路方法、组织实施及进度安排，不超过1200字)

拟解决问题： 根据某种物理模型输入和输出数据，运用机器学习模型求解物理模型中未知参数，并且能够对材料的性能参数进行预测。 主要内容： 通过运用最新的深度学习神经网络解偏微分方程算法，以及物理神经网络（PINN）处理材料领域的物理模型的优势。相较于传统研究方法，神经网络快速高效处理数据的特性，同时能够准确强劲地进行材料的特征提取。基于人工神经网络的机器学习模型已经被开发出来，以高精度和高效率地处理实验数据。此外，机器学习模型能够检测实验信号的细微特征，因此通过ML数据处理，可以从一次测量中同时提取多个参数。在了解各个参数重要程度之后，我们可以通过此拟合模型预测材料性能，并且大胆地对新型材料做出假设与预见。在此过程中可能会运用到残差网络（ResNet）、离散化数值学习等方法，对材料的性质的参数做出拟合。 思路方法： 初步思路：机器学习在解决回归问题的优势适合应用于本实验研究。开发机器学习模型，以相应输入和输出数据建立数据库。在训练中优化模型参数，调整训练模型，获得最小代价函数，缩小目标值与实际输出间的误差。在建立机器学习模型后，通过测试集评估其性能。若未达到目标，则微调模型参数。反复训练、评估和调整参数，直至生成理想的模型。值得注意的是，此方法是通过大量的离散数据值与偏微分方程进行对应，不断逼近偏微分方程的参数值，从而获得与偏微分方程最近似的数值解。 初步进度安排： 3-6月：基础知识巩固以及初步神经网络搭建 6-8月：进行材料相关物理模型的学习、广泛阅读论文 9月以后：进一步搭建神经网络训练数据集，优化模型

#### 四、项目研究条件及创新之处

(已有研究基础, 包含与项目有关的研究积累、已取得的成绩和已具备的条件, 尚缺少的条件及解决办法, 项目优势和风险, 以及项目创新点等, 不超500字)

研究条件: 1.多篇论文涉及深度学习(DNN)解偏微分方程、机器学习模型在物理材料模型中的应用, 为在物理模型研究中提供可借鉴对象。2.学习神经网络开源代码。3.材料实验数据以及模拟输入输出设备。4.残差网络(ResNet)等算法的支持。尚缺少的条件: 1.该交叉领域学术成果相对较少, 可能缺少启发性。2.当前存在的应用于物理模型各种神经网络都有明显的缺陷所在, 需要不断解决。项目优势以及创新之处: 传统研究中多需要手动调节参数直至理论模型与实际拟合。并且过去深度学习研究模式多针对特定案例, 缺乏灵活性。本实验研究希望探究更具有普适性的机器学习模型, 应用于多种材料研究, 并由此对新型材料进行预测。同时深度学习在解偏微分方程领域初露锋芒, 其在解材料领域的物理模型运用方面仍然是一片蓝海。

## 五、项目预期成果

(包括知识产权成果, 如论文成果、获奖成果、评议鉴定成果、推广成果、论著成果、专利成果、研制产品、开发软件, 与毕设、学科竞赛等其他学习环节结合情况, 或其他成果等, 以及经济效益、社会效益等, 不超130字)

我们将致力于建立有效实用的神经网络模型, 争取将项目所学内容和所学成果转化为学术论文。同时我们希望所搭建的模型能够运用于实际, 达到学科交叉融合的目的, 让机器学习覆盖的领域更加宽广。预期成果包含以下方面: 1. 建立适用于多种材料的机器学习模型, 可根据该模型的输入和输出求解 2. 发表学术论文

## 六、项目财务预算

(包括经费预算及经费支出明细等)

专用材料费 1,000 元;  
印刷费与资料费 1,000 元;  
交通与差旅费 3,000 元;  
出版费 7,000 元;  
邮寄费 0 元;  
评审费 300 元。



七、项目组承诺

承诺书

以上所填内容真实可靠，本项目组承诺：该项目立项后，将严格遵守有关规定、遵守本申报书和预算表中规定的条款和内容，保证按计划进度完成项目任务。

项目组全体成员（签字）： 贺旭鸿 敖煜毅 吴宇星

年    月    日

八、指导老师意见

指导老师（签字）：

年    月    日

九、院（系）专家组意见

同意

专家组组长（签字）：

年    月    日

十、学校审核意见

同意

(盖章)：

年    月    日