

北京科技大学

研究生选题报告及文献总结评审表

学院	国家材料服役安全科学中心	系（所）		专业	材料科学与工程
研究生姓名	赵朝阳	学号	B20170427	导师姓名及职称	金莹 研究员
学位级别	<input checked="" type="checkbox"/> 硕士； <input type="checkbox"/> 博士	入学年月	2017 年 09 月	选题报告日期	17 年 07 月 20 日
拟定论文题目	利用机器学习构建材料成分-结构-性能关系模型				
阅读文献数量	中文 15 篇；外文 26 篇		论文是否保密		<input type="checkbox"/> 是； <input checked="" type="checkbox"/> 否
<p>选题报告内容摘要，特别是拟研究的主要内容和拟解决的关键问题或创新点：</p> <p>材料基因组技术是近年来兴起的研究新理念和方 法，其实质是通过融合高通量材料计算设计、高通量材料实验和材料数据库三大组成要素构建材料设计研发的协同创新网络，加速新材料从发现到应用的全过程。因为高通量材料实验产生海量的实验数据，传统的人工实验数据分析难以满足当今科研对质量和效率的要求。机器学习能通过在数据自身中寻找解决问题的“答案”，能帮助科研人员高效地辨识、分析海量的实验数据。</p> <p>构建相图的传统方法是每次获取单个样品的合成与表征，这种成本较高、费时较长且不系统。组合材料芯片技术、组合材料库的高通量合成与快速表征结合机器学习的相关算法对于加速材料筛选和优化显示出巨大的潜力。</p> <p>在金属遭受的腐蚀中，大气腐蚀是最普遍和严重的。研究碳钢在大气环境中的腐蚀性能，了解腐蚀特性和规律，对于合理选用材料并提供相应的防腐蚀措施具有重要意义。机器学习中的神经网络模型在合理选择网络结构和参数的情况下具备模拟复杂模型的能力，可作为碳钢大气腐蚀的预测模型。</p> <p>不锈钢由于具备良好的物理、化学性能，它的生产和应用在深度和广度上不断发展和扩大。在不锈钢构件的腐蚀失效分析中，焊接接头所受到的腐蚀是整个构件腐蚀当中最严重的。因此深入研究焊接接头的耐蚀性能对不锈钢构件的安全使用和寿命评估起着相当重要的作用。但是不锈钢焊接接头的区域一般较小，有限的实验区域必然会限制实验数据的体量。机器学习中的深度强化学习往往能充分适应小样本的数据，并提供较理想的预测模型。</p> <p><b>研究内容：</b>通过层次聚类快速构建 Fe-Cr-Ni 成分相图</p> <p><b>创新点：</b>对 XRD 数据采用去噪处理，避免遗漏材料在 XRD 曲线中的特征峰；采用自适应的策略解决 XRD 曲线峰位偏移的问题，减少人工干预影响；在材料 XRD 曲线的相似度计算中引入成分信息。</p> <p><b>研究内容：</b>利用多种神经网络预测碳钢的大气腐蚀</p> <p><b>创新点：</b>收集得到的腐蚀数据量较大；腐蚀预测模型（径向基函数神经网络，深度神经网络）较为新颖；</p>					

注：①本表一式二份，A4 纸正反面打印，复印件及书面选题报告交学院留存，原件于报告结束 10 日内交学院，由学院交研究生院培养管理办公室。

②博士生选题报告与中期报告的时间间隔一般不得少于 6 至 9 个月。

③硕士生选题报告与论文答辩的时间间隔一般不得少于 9 个月。

④涉密论文必须在开题时进行保密论文申请，把保密申请书（保卫处下载）交研究生院学位办公室。

<div>(接上页)</div> <div>研究内容：利用深度强化学习建立不锈钢焊接接头成分、硬度与腐蚀性能的关系模型</div> <div>创新点：利用焊接接头的成分、结构信息预测其腐蚀性能的模型较少；深度强化学习对线性/非线性的模型都具备强大的表征能力，因技术出现在近几年，目前较少在材料研究领域中出现应用，值得尝试；</div>					
<div>评审小组主要成员</div> <div>(参加博士生选题评审不得少于2名)</div> <div>(参加硕士生选题评审不得少于3名)</div>	姓 名	职称/学位	现从事专业及学术专长	(出席者) 签名	备注
	陆永浩	研究员/博士	材料学		组长
	王海成	副教授/博士	材料学		成员
	文磊	副研究员/博士	材料学		成员
<div>评审意见 (必要时可选多项):</div> <div><input type="checkbox"/> (正常) 通过 (或成绩 <input type="text"/> (百分制));</div> <div><input type="checkbox"/> 年 月 日前通过全部课程考试; <input type="checkbox"/> 建议终止学业 (请在以下具体说明);</div> <div><input type="checkbox"/> 年 月 日前重做开题报告; <input type="checkbox"/> 其它 (请具体说明):</div> <div>评审组长签名: 年 月 日</div>					
<div>系(所)意见: (请对照培养方案认真审核)</div> <div>主任(所长)签名: 年 月 日</div>			<div>学院意见:</div> <div>主管院长签名: 学院公章 年 月 日</div>		

注：①评审小组成员应该是具有副教授以上职称或博士学位者。