**清华大学第三十九届“挑战杯”课外学术科技作品竞赛**

作品申报书

**【作品名称】 基于KDE方法的晶界性质机器学习预测模型**

**【一作所在院系】 材料学院**

**（团体作者写所在团体）**

**【所有申报者姓名】**

**（所有作者） 张锦程、钱治行、慎庸仲、顾书扬**

作品类型（限选一项）：

☑1自然科学类学术论文

□2哲学社会科学类社会调查报告和学术论文

□3科技发明制作

学科类型（限选一项）：

□1信息技术

□2机械控制

□3环保建设

□4能源化工

□5基础科学

□6人文社科

☑7交叉学科

|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| 第一作者 | 姓名 | | 张锦程 | | 学号 | | | 2018012082 | | |
| 班级 | | 材84 | | 文化程度 | | | 本科生 | | |
| 住址 | | 紫六#430A | | 手机 | | | 13487980301 | | |
| 电子邮箱 | | jincheng18@mails.tsinghua.edu.cn | | | | | | | |
| 是否申报交叉学科专场？（请务必仔细阅读相关规定） | | | | | | | | 是 | | |
| 是否申报团体作者专场？（请务必仔细阅读相关规定） | | | | | | | | 否 | | |
| 所在团体（如申报团体专场） | | | |  | | | | | | |
| 其他作者基本情况  （包括第一作者在内的作者总数不超过6人，团体作者只填写一位作者作为联系人） | 姓 名 | | 班 级 | | 学 号 | | 手 机 | | 邮 箱 | |
| 张锦程 | | 材84 | | 2018012082 | | 13487980301 | | jincheng18@mails.tsinghua.edu.cn | |
| 钱治行 | | 材84 | | 2018012115 | | 18348321362 | | qzx18@mails.tsinghua.edu.cn | |
| 慎庸仲 | | 材62 | | 2016080081 | | 13051303979 | | shenyz16@mails.tsinghua.edu.cn | |
| 顾书扬 | | 材84 | | 2018012195 | | 15311373980 | | gu-sy18@mails.tsinghua.edu.cn | |
|  | |  | |  | |  | |  | |
| 是否参加SRT挑战杯专项？（若是，填写下面的作者信息） | | | | | | | | | | 是 |
| 其他作者基本情况（包括第一作者在内的作者总数不超过4人） | 姓名 | | 班级 | | 学号 | 手机 | | | 邮箱 | |
| 张锦程 | | 材84 | | 2018012082 | 13487980301 | | | jincheng18@mails.tsinghua.edu.cn | |
| 钱治行 | | 材84 | | 2018012115 | 18348321362 | | | qzx18@mails.tsinghua.edu.cn | |
| 慎庸仲 | | 材62 | | 2016080081 | 13051303979 | | | shenyz16@mails.tsinghua.edu.cn | |
| 顾书扬 | | 材84 | | 2018012195 | 15311373980 | | | gu-sy18@mails.tsinghua.edu.cn | |
| 指导教师 | 姓名 | 陈浩 | | | 职称 | 副教授 | | | | |
| 院系 | 材料学院 | | | 教职工号 |  | | | | |
| 电话 |  | | | 邮箱 | hao.chen@mail.tsinghua.edu.cn | | | | |
| 二级学科 | (二级学科的代码及中文均需填写，原则上填写不少于2个二级学科)  080501材料物理与化学  070103概率论与数理统计 | | | | | | | | | |
| 作品参赛历史 | 清华大学第三十九届“挑战杯”学生课外学术科技作品竞赛三等奖 | | | | | | | | | |
| 项目来源  或  创作意图 | 晶界作为材料中广泛存在的重要缺陷，它的结构和行为很大程度上决定了多晶材料的物理、化学和力学性能。一个多世纪以来，晶界结构和行为的研究一直是材料科学的一个研究焦点。  近年来，关于晶界结构研究的实验手段已经有了长足的进步：传统的透射电子显微技术（TEM）已经将材料研究推进到亚埃尺度。而日前发展出的电子层析三维重构技术（Electron Tomography）可以通过三维成像直接从纳米，甚至原子尺度解析材料的三维结构。这为晶界结构的定量精确分析奠定了基础。  有了结构测定的精确手段，我们便可以构想出一种可以由材料的微观结构预测其性质的手段——即所谓的 PSP 模型。它一方面可由材料的微观结构的描述子预测材料性质，另一方面可由所需的结构或性质反推需要的工艺参数（对晶界而言指它的倾角θ和重位点阵Σ等）；  而让我们开展此项研究的另一动机来源于 DFT 计算的复杂性：直接由结构来预测材料中晶界的性质，能避免复杂的第一性原理（或者说密度泛函DFT）计算，能大量节省开发新材料的成本  为了检验本研究思路的有效性，我们尝试将该方法用于解决金属中的氢脆问题：氢脆问题自19世纪末被发现以来，一直是严重威胁金属材料使用安全的一个重大问题。就氢脆问题而言，高强度金属材料往往对其敏感程度更高，因而限制了其在一般环境条件下的使用；近年来随着氢能源的兴起，如何制造一种能在高强氢分压下保持结构强度的材料，也成为一种紧迫的需求。  针对氢脆问题人们提出了多种机制，包括氢致位错发射理论、氢致局部塑形变形理论、氢致微裂缝聚合理论、氢压理论、弱键理论、氢降低表面能理论、氢致相变理论等其他理论。晶界在氢脆的产生过程中扮演重要作用，也有研究证实，针对性地改变金属材料中的晶界种类可以使得金属对 HE 的敏感性大大降低，设计出低 HE 敏感性的材料。  我们想要探究哪些晶界能降低金属的 HE 敏感性，而这需要我们对金属中晶界-氢的相互作用（以偏聚能表征）有更多的了解；而借助数据科学和分子动力学技术的最新技术，我们有希望从原子尺度提取信息，构建多尺度模型，作出合适的预测。 | | | | | | | | | |
| 作品  创新点 | 传统开发新材料的过程，都采用的试错法，实验步骤繁琐，研发周期长，浪费资源。随着计算机的发展，许多诸如第一性原理计算、相场模拟、有限元分析等手段随之出现，用以进行材料的结构以及性能方面的计算，但是往往计算量大，费用大。而超算技术介入材料科学带来的巨大信息使得结合材料数据库、数值模拟数据和机器学习方法驱动材料发现和材料设计并预测材料性能成为可能。  为了解决传统试错法、数值模拟法周期长、成本高问题，可以将所有的实验数据整合起来形成具有一定规模的数据库，或者从原子尺度的分子动力学模拟出发，通过适当的信息提取，构建多尺度模型；在这些数据库中，根据材料的某些属性或者微观结构可以建立机器学习模型，便可快速对材料的性能进行预测，甚至是设计新材料，解决相关问题。 | | | | | | | | | |
| 指导教师意见 | 氢脆是金属材料领域最具挑战性科学问题之一，具有重要的科学与工程意义。该课题拟结合传统的计算材料学与新兴的机器学习方法来研究氢脆机制，具有很高的创新性，有望提高人们对氢脆机理的认识。 | | | | | | | | | |