**清华大学第三十九届“挑战杯”学生课外学术科技作品竞赛**

**往届作品改进参赛资格审查表**

|  |  |
| --- | --- |
| 参赛作品名称 | **基于KDE方法的晶界性质机器学习预测模型** |
| 往届作品名称 | （如曾多次参赛，以最近一次参赛名称为准）  机器学习辅助氢脆机理研究——基于多尺度模拟 |
| 参赛历史 | （曾经参与过的挑战杯届数）  第三十八届 |
| **据《清华大学第三十九届挑战杯章程》第三章第十六条，往届参赛作品，需有重大改进和提高，方可参与本届挑战杯评审。** | |
| 作品改进情况 | （请阐述作品和往届参赛时相比，有哪些地方做出了改进）  去年的预测模型主要基于晶界的多面体模型，而经过实践后发现这样的方法所能提取出的信息过少，于是，本届的作品引入了一套基于核密度近似(KDE)的对相关函数(PCF)模型作为信息提取手段，以主成分分析PCA等方法辅助构建机器学习模型，通过这样的方法可有效解决模型泛化能力不足的问题。而且多面体模型等价于偏聚位点信息的一阶近似，而PCF的计算能提取直到截断距离的微观结构信息，因而在理论预测能力上更加完备。 |
| 指导老师签字 | （电子版请勿填写老师姓名） |
| 评审委员会  主任签字 | （电子版请勿填写老师姓名） |