**清华大学第三十八届“挑战杯”课外学术科技作品竞赛**

作品申报书

**【作品名称】** **机器学习辅助高性能金属材料氢脆机理研究——基于多尺度计算模拟**

**【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、武逸飞、王宇祺、郭庭温、孙熙凯**

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 | |
| 武逸飞 | 材84 | | 2018012076 | 18800159276 | | wuyf18@mails.tsinghua.edu.cn | |
| 王宇祺 | 材84 | | 2018012067 | 18801126110 | | yq-wang18@mails.tsinghua.edu.cn | |
| 郭庭温 | 材84 | | 2018012065 | 13051578070 | | gtw18@mails.tsinghua.edu.cn | |
| 孙熙凯 | 材84 | | 2018012075 | 15116981066 | | sxk18@mails.tsinghua.edn.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 | |
| 武逸飞 | 材84 | | 2018012076 | 18800159276 | | wuyf18@mails.tsinghua.edu.cn | |
| 王宇祺 | 材84 | | 2018012067 | 18801126110 | | yq-wang18@mails.tsinghua.edu.cn | |
| 郭庭温 | 材84 | | 2018012065 | 13051578070 | | gtw18@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 | (此处填写作品曾经参与比赛及获奖情况)  注：若作品曾经参与过往届挑战杯的评审，还需填写《往届作品改进参赛资格审查表》。 | | | | | | | |
| 项目来源  或  创作意图 | 氢脆问题自20世纪40年代被发现以来，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。但是这些描述氢脆的理论都有其适用范围和对象，缺乏一种统一的描述。而从本质上来讲，氢脆现象是由于氢与金属产生交互作用而引起的。所以基于第一性原理的数值模拟的计算方法对于研究氢与金属基体交互作用的微观机理而言是一种有效可行的手段。  就本课题的定位而言，则主要是通过研究对材料本身性质不同而导致的对于氢脆响应的不同，注重研究结构与性质的关系。研究的主要方法是利用开源LAMMPS分子动力学软件结合 Python 二次开发实现对材料氢脆现象与材料中氢的扩散和偏聚过程的模拟，并采用机器学习算法对结果进行模型拟合，找出一定规律。 | | | | | | | |
| 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，计算模拟数据，整合起来形成具有一定规模的数据库；在数据库中，根据材料的某些属性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。 | | | | | | | |