

浙江大学

2019大学生科研训练计划申报书

项目编号：
号：

项目名称： 基于机器学习的新型材料热导率预测的应用基础研究

项目负责人： 陆淏凡 学 号： 3170111640

院
(系)： 国际联合学院

联系电话： 15381116147 电子邮件： haofan.17@intl.zju.edu.cn

指导教师： Ong Wee Liat 职 称：

申报级别： 创新训练、 科技创新、 校级SRTP

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 | 基于机器学习的新型材料热导率预测的应用基础研究 | | | | | | | |
| | 所属一级学科 | 能源科学技术 | | | | | | | |
| | 项目性质 | <input type="checkbox"/> 基础研究 <input checked="" type="checkbox"/> 应用基础研究 | | | | | | | |
| | 项目来源 | <input type="checkbox"/> 自主立项 <input checked="" type="checkbox"/> 教师指导选题 <input type="checkbox"/> 社会企业事业 | | | | | | | |
| | 申请经费 | 8000 | | | | | | | |
| | 起止时间 | 2019-05-01至2020-04-30 | | | | | | | |
| 项目状况 | <input checked="" type="checkbox"/> 研发阶段 <input type="checkbox"/> 中试阶段 <input type="checkbox"/> 批量（规模）生产 （选项打√） | | | | | | | | |
| 项目申报人 | 姓名 | 陆淏凡 | 性别 | | 出生年月 | | 入学年月 | 2017 | |
| | 学号 | 3170111640 | | | 联系电话 | 15381116147 | | 电子信箱 | haofan.17@intl.zju.edu.cn |
| | 院系专业 | 国际联合学院、电气工程及其自动化 | | | | | | | |
| 项目组主要成员 | 姓名 | 联系电话 | | | 院系专业 | | 年级 | 具体分工 | |
| | 李树人 | 15031069821 | | | 国际联合学院、电气工程及其自动化 | | 2017 | | |
| | 李树人 | 15031069821 | | | 浙江大学伊利诺伊大学厄巴纳香槟校区联合学院、电气工程及其自动化（海宁国际校区） | | 2017 | | |
| | 喻意 | 13527726316 | | | 国际联合学院、电气工程及其自动化 | | 2017 | | |
| | 喻意 | 13527726316 | | | 浙江大学伊利诺伊大学厄巴纳香槟校区联合学院、电气工程及其自动化（海宁国际校区） | | 2017 | | |
| 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 | |
| | Ong Wee Liat | 15757316216 | | | | | | | |
| | 近三年成果：国家级_0_等奖 _0_项，省部级_0_等奖_0_项 | | | | | | | | |

近三年科研经费_96_万元，年均 _32_万元

| | |
|-------------|--|
| 项目主要内容简介 | <p>采用机器学习的方法对新型纳米复合材料的热导率进行可靠的预测，并对国内当今构建的热力学特性的数据库做出贡献。首先我们将通过收集以及阅读相关文献的方式了解当前该方向上的科研进度以及已有的相关成果。之后，我们将通过已有的数据集以及对已知公式进行运算的方法获取大量可靠数据。用几个简单易测的数据训练的模型，预测材料的热导率。后期将通过比较不同材料的热导率及其他特性来发现导致两种材料区别的原因。最终得到一个可以快速预测出可靠热导率结果的机器学习模型。</p> |
| 项目负责人参与科研情况 | <p>陆溟凡：曾参与暑期实验室实习，参加2019年伦敦帝国理工学院人工智能创新项目。参加“捷创驱动杯”大学生创业创新大赛获三等奖。</p> |
| 项目组成员参与科研情况 | <p>李树人：EE专业在读大二学生，有过暑期实习经历，对编程语言以及机器学习有一定的了解。 喻意：EE专业在读大二学生，有过半年跟教授研究半导体热电材料特性的经历。</p> |

二、项目背景、目的及意义

| |
|---|
| <p>(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)</p> <p>1. 项目背景、意义和实施必要性:</p> <p>现阶段在材料热导率方面的研究已经有了很大的进展，并有软件可以用不同的参数和原理（如分子动力学、第一性原理）模拟及计算特定条件下的材料热导率。但这些以原子的电子相互作用为出发点的算法耗费的计算时间较长，在一个月的时间和数十个超算机下，只能模拟出很有限的数据，难以有效地利用来研究多样化的复杂纳米材料。另一方面，有大量的文献以实验测量结果拟合出各种各样的纳米复合材料的热导率计算公式，但公式纷繁复杂，不统一。机器学习伴随神经网络的发展和成熟逐渐成为研究者们所推崇的寻找各因素和结果之间潜在关系的重要工具。当今国内外的热物理研究者正在构建一套完备的热力学特性的数据库，以供研究者们能很快地将一些显性较为容易测量的物理量对应到测量较为困难的物理量。而热导率就属于测量较为困难的物理量。</p> <p>通过已有的数据集以及对已知公式进行运算的方法获取大量可靠数据，应用机器学习的方法训练热导率的数据模型，可以整合众多复杂的热导率公式，训练出一个能为复杂纳米复合材料快速并可靠地预测热导率的机器学习模型。同时通过这个模型，某些可能因素之间还未被发现潜在的关系也可能通过数据集得出，配合实验分析和第一性原理计算有机会能推出未被发现的公式或者无量纲常数，进而通过物理角度解析关系的成因。研究者在拿到一个新型材料或者未知材料的其他物理特性值后，可以通过机器学习模型快速得到其热导率，相反也可以通过热导率的值反推这个材料的其他特性，从而了解材料内的原子和电子所产生的物理和化学机理。</p> <p>2. 研究现状:</p> <p>现阶段虽然在热导率方面的研究有了很大的进展，提出了各种公式，模拟模型，机器学习也开始在该领域被人们应用在热导率的预测上，例如对离子化液体的热导率预测。但还较少人进行较为完备的数据整理，整理各类各种物理材料如纳米复合材料的热导率与各种其他物理特性的数据集。</p> <p>3. 发展动态:</p> <p>训练出来的机器学习模型可以被用在各种需要预测热导率的地方，还有可能通过这个模型找到未被发现的关系或公式。这个机器学习模型还有可能对未来前沿研究者们构建庞大的热力学特性的数据库有些许贡献。</p> |
|---|

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）

1. 项目主要内容

本项目采用机器学习的方法对新型材料的热导率进行预测。我们将通过已有的数据集以及对已知公式进行运算的方法获取大量可靠数据。通过支持向量机, 卷积神经网络等多种机器学习模型进行训练, 以简单易测的数据预测材料的热导率。后期将配合第一性原理计算分析并提出对热导率有较大影响的无量纲常数, 进而通过物理角度解析关系的成因。

2. 计划目标

得到一种可以快速预测材料导热率的机器学习模型, 以整合众多复杂的纳米复合材料的热导率公式。尝试统一该多样化的热导率公式, 发现材料结构与热导率潜在的关系, 分析并提出对热导率有较大影响的无量纲常数, 进而通过物理角度解析关系的成因。

3. 拟解决的问题

目前热导率研究所采用的方法是针对不同材料的组织情况（材料颗粒形状, 接触特性等）应用不同的公式及方法进行运算。这种方法需要材料方面的专业知识和大量复杂的计算。而通过机器学习算法, 使用训练好的模型, 有可能降低运算难度, 提高效率, 节约成本。

4. 思路方法

使用Tensorflow的深度神经网络模型, 构建输入: 材料的易测特性（密度、温度等）及输出: 材料的热导率之间的对应关系。

5. 组织实施及进度安排

第一阶段: 搜集数据资料

数据资料的获取方法有两种: 1. 搜索已有数据库, 并进行整理。2. 通过对已知公式输入不同的参数组合进行运算, 获取材料特性参数和材料热导率的对应数据集。小组成员学习机器学习基础理论及材料科学相关知识。

第二阶段: 模型训练

采用多种模型进行训练, 通过比较预测与实际结果的偏差值, 选取相对最优的模型作为最终模型, 或对已有模型进行优化改进, 以达到符合实际应用标准的预测值。

第三阶段: 新型材料热导率的预测

通过第二阶段获得的模型, 输入不同的参数组合得出机器学习模型的预测结果。若与实际所测量的结果相吻合, 则可证明机器学习方法在材料的热导率预测方面是有效地。

第四阶段: 成果分析与评估

根据以上阶段的模型并配合第一性原理计算（从导师另一个研究获得）, 探究不同因素对材料导热性质的影响。分析结果尝试从物理学角度解释导致这一现象的原因并进行深入探究。

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)

1. 已有研究基础

外部条件:

1) 多种可供机器进行学习的热导率计算方法。

2) 众多材料的热导率相关数据。

3) 许多开源的机器学习相关模型。

自身条件:

1) 指导老师从事材料热导率的研究, 有丰富的经验。

2) 团队成员都有实验室实习经历, 且有材料学, 机器学习等多方面的研究经历。

2. 尚缺少的条件

1) 最前沿的相关知识。

2) 可供学习的相关数据不够充足。

3. 解决办法

1) 阅读整理相关文献, 了解相关科研成果。

2) 通过将不同参数组合输入公式获取大量可靠的数据。

4. 项目优势

1) 相关方面的研究还较为基础, 有很大的成果期望。

2) 最终的成果会对相关研究的继续开展做出一定的贡献。

5. 项目创新点

1) 采用近年来新兴的机器学习方法来对热导率进行预测, 可以对未来的新型材料性质预测带来相当的便利。

2) 通过比较相似材料的特性来发现导致其特性差异的原因。

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)

1. 论文。

2. 可以对热导率进行预测的机器学习模型, 并统一现有多数不同的计算公式。

3. 研究报告。

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 4800.0 元;

印刷费与资料费2000.0 元;

交通与差旅费 200.0 元;

出版费 1000.0 元;

邮寄费 0.0 元;

评审费待确定。国创为300, 省创 200 元。校级200元, 院级自筹

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）： 陆淏凡 李树人 李树人 喻意 喻意

年 月 日

八、指导老师意见

本研究针对新型纳米复合材料中的热传输特性进行分析，并探索统一有效介质公式和国内当今构建的热力学特性的数据库做出贡献。 如果成功，它可以替换当前所使用的不同有效介质模型。对于这些学生来说，这将是一次很好的培训。他们将获得新技能并为科学和未来的科研职业道路上做出积极贡献。由于团队已具备应用机器学习的经验，因此成功率较高。

指导老师（签字）： Ong Wee Liat

年 月 日

九、院（系）专家组意见

专家组组长（签字）：

年 月 日

十、学校审核意见

（盖章）：

年 月 日