



面向世界科技前沿, 面向国家重大需求, 面向国民经济主战场, 率先实现科学技术跨越发展,
率先建成国家创新人才高地, 率先建成国家高水平科技智库, 率先建设国际一流科研机构。

——中国科学院办院方针



官方微博



官方微信

首页 组织机构 科学研究 人才教育 学部与院士 资源条件 科学普及 党建与创新文化 信息公开 专题

搜索

首页 > 科研进展

物理所等利用机器学习方法预测材料性能获进展

文章来源: 物理研究所 发布时间: 2017-07-20 【字号: 小 中 大】

我要分享

近二十年来, 机器学习方法的发展为我们的生活带来许多便利。智能网络搜索、语音识别, 乃至无人超市、无人驾驶汽车等, 依托于机器学习方法的新事物正迅速地在生活中普及。Alpha Go的横空出世更让世界惊叹于人工智能的潜在价值。在科研领域, 大数据的理念正在改变着科研人员对未知世界的探索方式。美国在2011年提出了材料基因组计划(Materials Genome Initiative), 以期加快材料的研发过程。我国怀柔科学城的发展规划中, “材料基因组研究平台”项目已全面开工建设。高通量实验+高性能计算+深度数据分析的研究方式已经成为时代发展的趋势。

在非晶合金研究领域, 如何设计并开发出具有良好玻璃形成能力的合金, 是一个具有重要产业价值的科学问题。过去非晶合金材料新体系的探索主要依据经验性判据的指导, 由于其准确性与通用性的限制, 非晶新材料的研发速度非常缓慢。如何提高材料设计的效率, 寻找具有更优性能的材料, 是非晶材料领域非常具有挑战性的问题。

最近, 中国科学院物理研究所/北京凝聚态物理国家实验室(筹)汪卫华研究组博士研究生孙奕韬在研究员汪卫华、白海洋及中国人民大学物理系教授李茂枝的指导下, 使用机器学习的方法, 对二元合金的玻璃形成能力进行了系统分析, 建立了合金成分与性能之间的关联, 并对可能的新材料进行了预测。研究过程中使用了支持向量机(Support Vector Machine)这种方法(图1), 通过构建多维空间, 并在这个多维空间内对数据进行分割, 从而建立输入参量与输出参量之间的关联。该研究方法可通过不断选择新的参数对模型进行重复训练, 探讨了合金的不同性质对其玻璃形成能力的影响(图2)。研究发现, 参量 T_{liq} (表征合金过冷能力的参量)与合金的玻璃形成能力有最为显著的关联, 而且使用参量 T_{liq} 与 T_{fic} (表征合金热稳定性)作为输入参数, 可以得到具有最佳预测效率的模型。通过对最佳模型的分析, 发现已知的具有良好玻璃形成能力的二元合金, 其分布与模型的预测值具有很好的一致性(图3)。使用这个模型, 可以对未知的合金成分进行预测, 这样由深度数据分析指导设计的实验, 可以极大地缩短非晶合金材料的研发周期(图4)。该工作作为使用新的工具对经典问题进行分析的一种尝试, 得到了初步成果。这表明, 机器学习的方法在非晶材料设计与研发领域具有重要的应用前景。采用更全面、完善的数据库, 运用更深入的人工智能算法, 机器学习方法能够为非晶等领域科研人员提供更精准的信息, 进一步加速材料的研发过程。

这项研究结果最近发表在*J. Phys. Chem. Lett.* 8, 3434 (2017)上。该项研究工作得到国家自然科学基金项目(51571209, 51461165101)、科技部“973”项目(2015CB856800)和中科院前沿科学关键研究项目(QYZDY-SSW-JSC017)的支持。

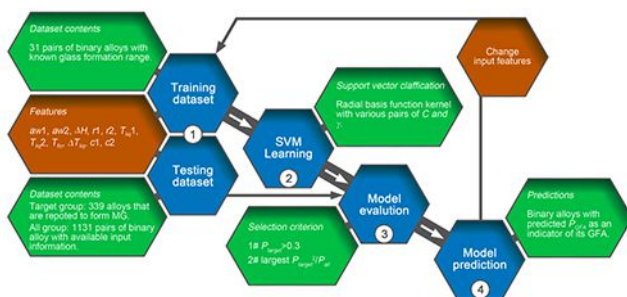


图1. 支持向量机方法的基本过程, 包括四个主要部分: 数据库的建立, 模型的训练, 模型的评估, 以及最优模型的预测。

热点新闻

中科院党组重温习近平总书记重...

中科院党组学习贯彻习近平总书记对中央...
中科院召开巡视整改“回头看”工作部署会
中科院2018年第2季度两类亮点工作筛选结...
白春礼会见香港特别行政区行政长官林郑...
中科院党组2018年夏季扩大会议召开

视频推荐



【新闻联播】“率先行动”
计划 领跑科技体制改革



【东方卫视】上海光源, 给
科学家“双慧眼”

专题推荐

