科学家在材料属性预测方面取得新进展

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/25468.html

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

科学家在材料属性预测方面取得新进展。中山大学物理学院教授李华山/王彪团队创建的机器学习模型成功实现了材料对称性的智能识别和多属性准确预测。近日，相关成果发表于《自然-通讯》。

基于统计机制的机器学习（ML）方法最近被广泛应用于物理、材料等研究中，以实现准确的性能预测和逆向设计。由于晶体对称性是凝聚态系统的基本属性，针对对称性的感知与识别对于准确预测材料电学性质和微观响应至关重要。

然而，由于卷积神经网络在感知对称性方面的固有缺陷，现有的ML算法仍然很难感知空间群中全部对称性变换。即使晶体对称性被隐式地包含在由图模型生成的材料表征中，空间特征仍会由于卷积操作而缺失对于旋转、反射、螺旋轴与滑移面等复杂变换的检测。因此，准确识别晶体对称性并强化属性预测是突破当前ML算法缺陷并增强可解释性与泛化性的关键。

针对以上问题，研究人员开发了一种名为基于对称性增强的等变性网络（SEN）的新型ML模型来克服上述挑战，通过构建基于胶囊网络的变分自编码器识别任意对称性变换空间模式，并构建材料的化学环境以学习原子相互作用和晶体系统的空间特征。他们通过定量分析和可解释性研究表明，基于团簇-性质映射的SEN模型可以准确地感知晶体对称性，把对称性信息转换为团簇间的等价性和相似性信息，并通过减少有效特征空间强化预测性能。

据介绍，SEN模型解决了常规ML方法在高对称空间群中表现不佳的问题，在预测带隙和形成能时，平均绝对误差（MAE）分别为0.18 eV和0.018 eV /atom。

上述工作得到国家自然科学基金重点和面上项目、广东省珠江人才计划等项目的支持，同时也受到中山大学物理学院、广东省磁电物性分析与器件重点实验室、中子科学与技术中心的大力支持。（来源：中国科学报 朱汉斌）

相关论文信息：https://doi.org/10.1038/s41467-023-40756-2

作者：李华山等 来源：《自然—通讯》

更多 科学进展 请访问 https://www.iikx.com/news/progress/

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，爱科学iikx.com转发