



学术报告

题目: 贝叶斯优化方法在材料探索和设计中的应用
报告人: 侯柱锋 副研究员 中科院福建物质结构研究所
时间: 2019年11月15日 (周五) 下午3:30
地点: 固体所新材料楼520会议室

报告摘要: 以机器学习为辅助的新手段在加速探索和设计具有特定目标物性的材料等方面日益展现出强大的预测性和高效性。贝叶斯优化方法一种基于机器学习算法而无需计算梯度的全局优化方法，它不仅在机器学习模型的调参方面有广泛的应用，而且逐渐被引入材料研究领域应用于功能性材料搜索和设计、晶体结构搜索和预测、物理模型参数优化和实验条件设计等方面。该报告将介绍贝叶斯优化算法的基本框架和相关程序，随后将展示该算法在加速材料的原子结构、热电材料的化学成分设计以及辅助过渡金属氮化物薄膜制备实验参数的优化等方面的成功应用。

报告人简介: 侯柱锋于2004年厦门大学物理系获得博士学位。2004年-2006在复旦大学物理系博士后流动站进行博士后阶段的研究工作。随后在Atomistix公司亚太分公司（新加坡）工作。2008年10月至2019年3月期间先后工作于日本的北陆先端科学技术大学院大学、东京工业大学和日本国立物质材料研究机构。2019年4月入职于中国科学院福建物质结构研究所。长期开展材料物性（包括锂离子电池材料的储锂、半导体材料缺陷性质和碳基材料的氧化还原反应催化等）的第一性原理计算研究工作。目前工作重点是利用高通量计算和机器学习等新手法开展新型功能性材料的探索和研究工作。

