



2024寒假前沿学科项目  
剑桥大学  
机器学习辅助发现新材料

*Materials Discovery with Machine Learning*  
University of Cambridge

## 关于剑桥大学

# About University of Cambridge



# UNIVERSITY OF CAMBRIDGE



2024QS  
世界大学排名  
**全球第2**

2024THE  
世界大学排名  
**全球第3**

2022CUG材料  
技术专业排名  
**英国第1**

2024QS材料学  
科专业排名  
**全球第2**



- 剑桥大学(University of Cambridge), 坐落于英国剑桥郡, 是一所公立研究型大学, 采用传统学院制。学校是罗素大学集团成员, 全球大学校长论坛成员, 被誉为“金三角名校”和“G5”之一。剑桥大学是英语世界中第二古老的大学。
- 剑桥大学衍育了科技聚集地“硅沼(Silicon Fen)”, 剑桥大学聚集了全英国规模最大、最为重要的科技公司集群, 其推动的创新正在影响世界, 剑桥也正投身于一些当今最引人注目的领域, 包括开发新型生物医药技术、新材料、新能源以及企业管理方式在内的可持续发展科技等。
- 剑桥大学有许多杰出校友, 包括121位诺贝尔奖获得者、4名君王、15名英国首相、至少30位来自爱尔兰、澳大利亚、东南亚、韩国等国家或地区的总统、总理, 更有如牛顿、达尔文、凯恩斯等近现代科学的开创者。剑桥位列2024QS世界大学排名第2, 2024Times世界大学排名第2。
- 本次项目将在剑桥大学Homerton College哈默顿学院举办, 哈默顿学院诞生于1695年, 是剑桥大学规模较大、比较年轻的综合型学院之一。学院具有浓厚的现代、创新的氛围, 每年有500余位本科生、研究生在学院学习。和学院氛围相得益彰的是这里精湛的古典风格建筑群, 红色砖墙的维多利亚风格建筑是整个剑桥最优雅的建筑之一。

## 项目介绍 机器学习辅助发现新材料

# Materials Discovery with Machine Learning

- 材料科学作为当今科学技术创新的关键驱动力之一，举足轻重。而计算机科学大大加速了新材料的设计发现进程，科学家使用计算机来理解和预测新材料的特性，用计算机来解决量子力学的方程，以了解材料的性质，也使用人工智能来辅助发现新材料。
- 本门课程将引领你踏上材料科学与机器学习的科研旅程。学习计算材料学、量子力学及其在材料研究中的应用。探索电子结构、能隙和能量景观对材料性质的塑造作用。挖掘物质中隐藏的潜力。发现数据分析、统计建模和机器学习算法在材料发现中的应用。揭示凝聚态物理的奥秘，包括超导、磁性和拓扑材料等引人入胜的现象。深入研究量子纠缠对材料行为的影响。探索计算建模技术，如高通量模拟、分子动力学和量子力学计算，帮助学生更全面地理解材料学科。
- 在剑桥大学顶尖教授及其教学团队的指导下，运用所学理论知识进行科研实践开启研究项目。探索学科前沿领域，例如新材料发现，材料设计、可再生能源、纳米技术和电子创新。在项目中培养科学创新精神，通过严谨的思辨探索发展批判性思维能力。与同学协作，参与科学讨论，应对材料学科研究中的复杂性。该项目注重学科交叉纵深，在数学基础上，涉足量子力学和统计物理。更将学习当今计算机时代不可或缺的编程技能和数据处理技巧。
- 让我们踏上科学卓越之旅，拓展材料发现领域的知识边界，开启你的科学研究征途。

## 项目优势

### 前沿学科科研实践导向

项目将基于剑桥大学材料科学系的学术资源展开，在科研项目实践中探索如何利用机器学习实现材料性能的突破和发现新材料，如何利用技术革新打造更加高效的材料结构，如何运用计算机数据分析方法改进材料性能。

### 皇家工程院院士领衔顶级师资

剑桥大学在工程学科领域有着享誉世界的学术声誉和科研实力，由剑桥大学材料科学系资深教授、英国皇家工程院院士领衔的教学团队将结合最新的应用案例为学生教授材料科学的前沿工程应用。

### 剑桥大学官方项目认证

学生完成项目考核后将获得由剑桥大学副校长在结业仪式亲自颁发的剑桥大学官方项目证书，项目录取后注册成为剑桥大学学院学生，可使用剑桥大学图书馆等资源。

### 提升新工科学科人才全球胜任力

学生将深度体验剑桥学院制体系，在跨文化交流能力、科研实践能力和全球胜任力方面将得到全面提升。通过独一无二的实操项目和教程和学术界，业界紧密相连，探索材料世界的未来前沿。

## Program Overview

- ◆ The discovery and development of new materials with improved properties are essential for technological progress. In this program, participants will explore the intersection of new materials and machine learning. They will learn about high throughput computation for rapid material screening, structure prediction, data analysis, and the application of machine learning algorithms in materials discovery.
- ◆ Participants will gain insights into how high throughput computation accelerates the discovery process by efficiently narrowing down potential materials. They will also explore computational methods for predicting material structures and properties, as well as techniques for analyzing large materials databases to identify trends and correlations.
- ◆ The program will emphasize the integration of machine learning with materials discovery. Participants will discover how machine learning algorithms can extract valuable patterns and relationships from vast amounts of data, enabling the prediction of material properties and the accelerated discovery of novel materials with tailored characteristics.
- ◆ Through discussions, case studies, and hands-on exercises, participants will gain practical knowledge and understanding of the combined power of new materials and machine learning. They will be equipped to contribute to advancements in various industries by leveraging these innovative approaches in their future endeavors

课程大纲  
Academic  
Syllabus

#交叉学科 #材料科学 #生物化学 #未来能源  
#前沿应用 #纳米技术 #药物发现 #低碳减碳

Objectives

- ◆ - To gain an overview of computational materials science
- ◆ - To learn the basics of density functional theory
- ◆ - To learn the basics of machine learning applied to materials science
- ◆ - To gain an understanding of superconductors
- ◆ - To gain an understanding of photovoltaics
- ◆ - To gain an understanding of batteries
- ◆ - To practice software development applied to materials science

Syllabus

- ◆ - Introduction to quantum mechanics
- ◆ - Schrödinger equation, energy quantization, hydrogen atom
- ◆ - Introduction to materials science
- ◆ - Materials discovery, materials as a driver to technological development
- ◆ - Computational materials science
- ◆ - Density functional theory
- ◆ - Materials discovery
- ◆ - Example I: superconductors
- ◆ - Example II: photovoltaics
- ◆ - Machine learning
- ◆ - Data-driven science
- ◆ - Graph neural networks
- ◆ - Example III: batteries

课程大纲  
**Academic  
Syllabus**

**#交叉学科** #材料科学 #生物化学 #未来能源  
**#前沿应用** #纳米技术 #药物发现 #低碳减碳

**Practicals**

- ◆ - Basics of numerical methods: Monte Carlo methods, machine learning
- ◆ - Coding: software development in Python to implement machine learning algorithms for materials science

**Project / Lab experience**

- ◆ Lab demonstrators
- ◆ Problems/examples in quantum mechanics/computational materials science
- ◆ Problems/examples in machine learning for materials
- ◆ Project feedback

## 核心教授 **Faculty Members**



### **Professor Bartomeu Monserrat**

Assistant Professor

Gianna Angelopoulos Lecturer in Computational Materials Science

His research interests are in first principles quantum mechanical calculations of material properties. We work on the development of new methods and their application in areas such as photovoltaics, topology, and high-pressure physics.



### **Prof. David A. Cardwell, FREng**

He is the Pro-Vice-Chancellor for Strategy and Planning. He is Professor of Superconducting Engineering and was previously Head of the Department of Engineering. He was elected to a Fellowship of the Royal Academy of Engineering in 2012 in recognition of his contribution to the development of superconducting materials for engineering applications.

## 项目模块

### Academic 前沿学科

- 20小时专业核心课程，英国皇家工程院院士执教
- 10小时实践课程，剑桥纳米材料科技、TWI Ltd等行业案例
- 诺贝尔奖得主/皇家工程院院士大师课
- 剑桥大学招生官分享剑桥硕士/博士项目申请

### College 剑桥学院生活

- 申请后注册成为剑桥大学学院学生，享有实名学生卡
- 使用包括剑桥大学图书馆等学校资源
- 学院高桌晚宴Formal Dinner感受百年传承

### Industry 产业实践

- 参访罗罗航空发动机工厂/Mini Cooper智能化工厂
- 参访剑桥纳米材料科技研发中心
- 参访英国焊接研究所

### Experience 跨文化体验

- 纯正的英伦文化、剑桥城市历史体验
- 探访伦敦、牛津等著名城市
- 体育竞赛/赛事体验

# 项目计划日程 Program Schedule Template

项目日期：2024年1月21日-2月3日（共2周）

WEEK 1	Sun.	Mon.	Tue.	Wed.	Thr.	Fri.	Sat.
上午	伦敦希思罗机场 接机	早餐	早餐	早餐	早餐	早餐	早餐
		开营仪式	核心课程	核心课程	核心课程	核心课程	伦敦探访
中午	房间入住登记	午餐	午餐	午餐	午餐		
下午	熟悉周边环境	剑桥大学 国王学院参观	学术辅导	学术辅导	学术辅导	学术辅导	
	生活物资采购	剑河乘船					
WEEK 2	Sun.	Mon.	Tue.	Wed.	Thr.	Fri.	Sat.
上午	牛津探访	早餐	早餐	早餐	早餐	早餐	回到国内 项目结束
		核心课程	核心课程	结业汇报	学术讲座	希思罗机场送机	
中午		午餐	午餐	午餐	结业仪式		
下午		学术辅导	小组汇报准备	足球文化体验课	整理行李		
					高桌晚宴		

\*此日程仅作参考示例，不代表最终安排。具体行程将根据剑桥当地情况进行调整，以实际安排为准。

# 项目行程

## DAY 1 国内-剑桥

- 搭乘国际航班到达伦敦，接机老师接到学生并乘坐大巴前往剑桥，安排学生入住。

## DAY 2 剑桥

- 上午：开营仪式&破冰环节

项目负责人以及剑桥教授代表致欢迎词，对同学们进行安全培训，同时各方向负责人对本方向同学进行分组，选出各组组长，各组内部进行破冰游戏，熟悉本组以及本方向同学。

- 下午：文化活动-参观剑桥大学国王学院

国王学院是剑桥大学内最有名的学院之一，成立于1441年，由当时的英国国王亨利六世设立创建，因而得名“国王”学院。国王学院位于剑桥市中心的Cam河上，还拥有很大的后花园，风景优美。著名诗人徐志摩曾就读国王学院，该学院著名校友还有“人工智能之父”艾伦·图灵，“经济学之父”凯恩斯等。



\*此日程仅作参考示例，不代表最终安排。具体行程将根据剑桥当地情况进行调整，以实际安排为准。

# 项目行程

## DAY 3-6 剑桥

- 上午：专业核心课程

同学们每天前往剑桥大学学院教室上课，课程均为剑桥大学学院顶尖教授授课讲解，同学们有机会每天和剑桥大学顶尖教授进行沟通，答疑解惑。

- 下午：学术辅导

助教针对教授授课的内容进行辅导，可帮助同学们更加深入理解教授所授课程内容，并进行实践操作，通过理论与实践进行结合，能够对前沿学科有更进一步的了解。

- 文化活动-剑河乘船

剑河可以说是剑桥的象征，剑河又名康河，徐志摩曾在《再别康桥》中也赞叹了剑河两岸的风光。同学们乘坐游船泛舟河上，可以领略到剑河全长约3/4的景致，游船沿途经过7所学院、著名的数学桥和叹息桥，以及国王学院的教堂，一路怡人的风景都配有专业的讲解，使同学们真正感受一次完整的历史人文和自然之旅。



\*此日程仅作参考示例，不代表最终安排。具体行程将根据剑桥当地情况进行调整，以实际安排为准。

## 项目行程

### DAY 7 伦敦探访

- 伦敦自由行

伦敦是世界上最大的金融中心之一，也是英国的政治中心，是全世界博物馆、图书馆、电影院、戏剧院、体育场馆和五星级酒店数量最多的城市。伦敦的著名景点包括泰晤士河、伦敦塔桥、伦敦眼、大本钟、威斯敏斯特大教堂等，同学们可以自由穿梭在伦敦市区，领略泰晤士河畔美丽的风景。



### DAY8 牛津探访

- 牛津自由行

牛津因是世界一流学府的地位和遍布各地的古迹而闻名，距今有1100多年历史的牛津城是英国皇族和学者的摇篮。剑桥大学常年和牛津大学名列英国大学排行榜TOP2，同学们可以在牛津自由行的一天中充分的感受到两所世界顶尖大学所在城市的不同。



\*此日程仅作参考示例，不代表最终安排。具体行程将根据剑桥当地情况进行调整，以实际安排为准。

# 项目行程

## DAY 9-11 剑桥

- 上午：专业核心课程

同学们每天前往剑桥大学学院教室上课，课程均为剑桥大学学院顶尖教授授课讲解，同学们有机会每天和剑桥大学顶尖教授进行沟通，答疑解惑。

- 下午：结业汇报

每个方向的同学以小组为单位，以Presentation形式选取不同汇报主题来展示两周剑桥学习的成果，并由任课老师点评打分。

- 文化活动-足球文化体验

英格兰是现代足球的缔造者，他们在1888年建立了足球联赛并发展至今。英国每个城市都有一个或多个足球俱乐部，足球是英国文化不可或缺的一部分，许多著名的足球运动员都来自英国，比如贝克汉姆、鲁尼等等。我们也邀请了英国足球教练带领同学们体验这一体育运动，让同学们更深入地参与足球这项运动。



\*此日程仅作参考示例，不代表最终安排。具体行程将根据剑桥当地情况进行调整，以实际安排为准。

# 项目行程

## DAY 12 剑桥

- 上午：大师课&结业仪式

邀请剑桥大学副院长给同学们讲授大师课，并为同学们在现场颁发项目证书，为同学们14天的寒假项目画上圆满的句号。

- 下午：自由活动

- 晚上：文化体验-高桌晚宴

高桌晚宴是从英国剑桥、牛津大学传统的学堂晚餐 (FORMALL HALL)基础上发展而来，是剑桥大学古老学院制社交活动中最为特别和重要的一个环节。同学们需着正装出席，在摇曳的烛火中感受剑桥大学古老的社交晚宴。

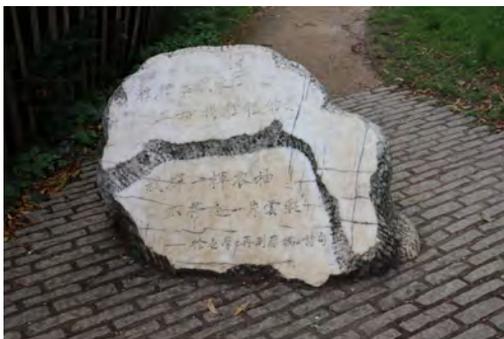
## DAY 13-14 剑桥-国内

- 同学们整理行李，乘坐大巴前往伦敦机场，乘坐国际航班安全抵达国内。



\*此日程仅作参考示例，不代表最终安排。具体行程将根据剑桥当地情况进行调整，以实际安排为准。

## 文化活动 Cultural Activities



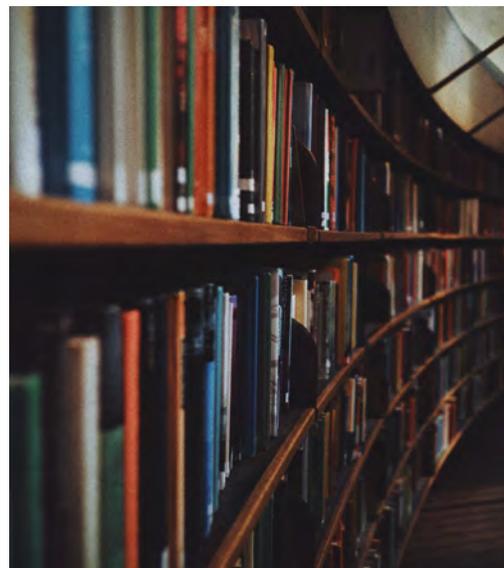
### 国王学院参访

前往剑桥最负盛名的老牌学院——国王学院，探寻徐志摩的脚步，感受剑桥古老的学院气息



### 剑桥大学图书馆体验

注册成为剑桥大学图书馆一员，持有实名注册的图书馆卡，沉浸式体验作为剑桥学子的一天



## 文化活动 Cultural Activities



### 剑河撑船

打卡剑桥最受欢迎的文化活  
动之一剑河撑船，沿岸欣赏  
剑桥风光



### 伦敦游览

游览世界级城市，感受传统  
英伦风情，打卡泰晤士河、  
大本钟等英国地标性建筑



## 文化活动 Cultural Activities



### 牛津游览

探访英语世界上最古老的大学——牛津大学。我们将在牛津大学安排专业的导游，让大家亲身体验和了解牛津和剑桥的不同之处。



### 足球文化体验课

在专业教练指导下学习专业足球技术，与队友们来一场酣畅淋漓的足球比赛。



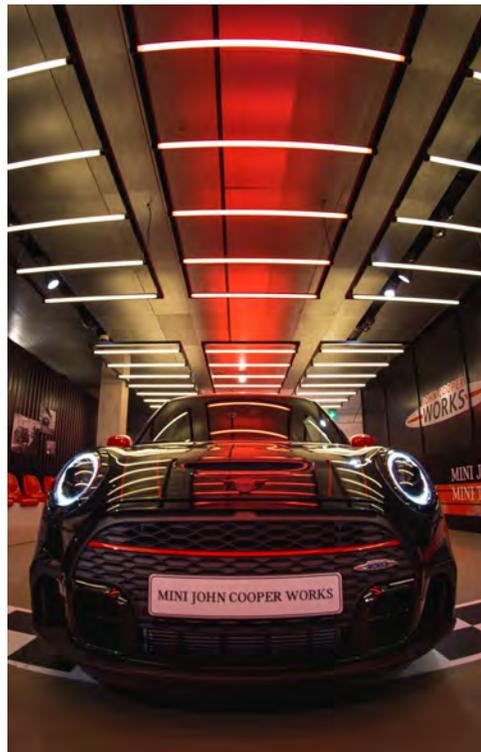
## 文化活动 Cultural Activities

### 高桌晚宴

剑桥大学的正式晚宴（Formal Dinner）是一项传统且隆重的活动，通常在学院的大厅或宴会厅举行。学员们将打卡哈利波特同款学院晚宴，身着正装体验剑桥Formal Dinner，感受严肃又神秘的传统英式餐桌文化。



# 校企参访实践 Organization Visits & Hands-on Labs



## MINI Cooper 牛津智能制造工厂

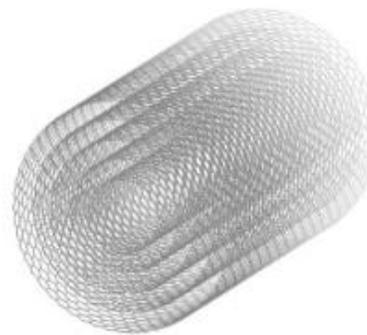
英国最大的智能制造工厂之一，包括多款MINI Cooper车型以及最新的新能源车型都是在此工厂完成设计、生产、下线。工厂大量使用了智能机器人技术，使工厂在降低噪音、减少碳排放等方面有着出色的成绩。学生将参观工厂生产线，并将由企业的工程师介绍全车的制造流程。

具体参访机构将依据课程内容进行调整，以最终行程为准

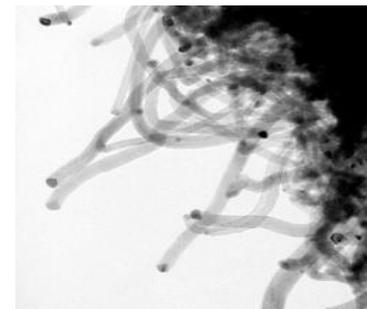
## Cambridge Nanomaterials Technology (CNT) 剑桥纳米材料科技

剑桥纳米材料科技（CNT）是一家专门从事各类应用型纳米材料的公司，长年专注于石墨烯、碳纳米管和纳米复合材料等各类材料的研究与商业化发展规划。

参观剑桥纳米材料科技（CNT）可以让学生了解到纳米材料从合成到实际应用的发展过程。



CAMBRIDGE  
NANOMATERIALS  
TECHNOLOGY LTD



# 校企参访实践 Organization Visits & Hands-on Labs



## TWI Ltd 英国焊接研究所

英国焊接研究所（TWI）是一家世界级研究和技术机构，长年为各行业提供先进的材料科学、工程和制造方面的专业知识。他们从事广泛的材料项目研究，包括先进的连接和焊接技术，无损检测和结构完整性评估等。

参观英国焊接研究所（TWI）可以让学生深入了解到材料科学的工业应用和该领域的最新研究动态。

公司前身是英国焊接研究协会（BWRA），随后成长为世界上最重要的独立技术研究机构之一。公司技术能力包括焊接、连接技术、材料、表面工程、检测及结构完整性管理，业务涉及科技创新、技术转让及工程问题解决方案等



## 项目费用明细

项目费用	费用明细	
3600英镑/人	<ul style="list-style-type: none"><li>• 学费：包括教授教学、助教教学、学习资料、教学场地等费用</li><li>• 注册费：项目方申请系统内的注册以及项目申请服务费用</li></ul>	<ul style="list-style-type: none"><li>• 住宿：在国外项目期间的住宿</li><li>• 餐饮：课程日的早餐、午餐，正式晚宴</li><li>• 文化活动：组织文化活动相关的费用</li><li>• 机构参访：组织机构参访相关的费用</li><li>• 交通：国外城市间的交通费用、接送机费用</li><li>• 保险：国际旅行人身意外保险</li><li>• 签证服务：签证咨询及申请支持服务</li><li>• 项目管理服务：项目咨询、管理及支持服务（中英文）</li><li>• Wi-Fi使用费用：部分场所的Wi-Fi使用费用</li></ul>

\*项目费用未包含国际机票旅费、向签证中心缴纳的签证申请费、在剑桥当地的交通费用以及其他个人花费。

### 项目申请条件：

- 1.满足学校国际交流派出要求；
- 2.具备材料学、计算机课程的学习基础，各项目专业基础课程要求详询Cindy老师；
- 3.具备一定的学术英语能力

### 项目申请链接



### 项目咨询Cindy老师

