

同行专家业内评价意见书编号: 20240854245

附件1

浙江工程师学院（浙江大学工程师学院） 同行专家业内评价意见书

姓名: _____ 许晓扬

学号: _____ 22160175

申报工程师职称专业类别（领域）: _____ 电子信息

浙江工程师学院（浙江大学工程师学院）制

2024年04月01日

一、个人申报

（一）基本情况【围绕《浙江工程师学院（浙江大学工程师学院）工程类专业学位研究生工程师职称评审参考指标》，结合该专业类别(领域)工程师职称评审相关标准，举例说明】

1、对本专业基础理论知识和专业技术知识掌握情况

在深度学习领域，我具备扎实的基础知识和专业技术能力。我对于自然语言处理（NLP）领域的深度学习方法有着深入的了解，包括词嵌入、循环神经网络（RNN）、长短期记忆网络（LSTM）、注意力机制等常用技术。我能够灵活运用这些技术解决翻译或生成等任务。我对图神经网络（GNN）也有一定的了解，可以利用图神经网络方法对材料进行建模和下游预测。我也将通过不断关注领域内的最新进展，努力跟进和应用最新的模型和算法。

另外，在模型架构搜索方面也有一定的研究和实践经验。了解到模型架构搜索是一项复杂而具有挑战性的任务，旨在自动化地发现最优的神经网络结构。通过阅读文献，我熟悉常见的搜索方法，结合对自然语言生成和对化学分子的序列化方法的了解，我能设计基于模块和序列化方法的模型架构搜索新方法。

此外，我在材料的机器学习算法、扩散模型以及材料设计的生成模型方面也有一定的实践经验和知识掌握。在材料科学领域，我从数据表达和嵌入方法方面对晶体在深度学习领域展开了讨论，例如掌握体素表示法和基于连续坐标的表示法等技术，了解了众多材料属性预测模型。在材料设计方面，我了解到传统生成模型在复杂晶体空间中存在巨大的挑战，了解了生成模型在材料设计的应用。

2、工程实践的经历

在实践中，我主要的目标是将深度学习方法应用于材料科学领域，以解决材料设计与开发中的复杂问题。首先，从开源的大规模数据库收集想要的晶体材料数据集，由于数据质量对于机器学习模型的训练和性能至关重要，因此通过阅读文献了解数据预处理的一些方式，同时使用模拟计算软件对晶体进行结构优化，计算下游需要的属性信息，然后进行特征工程等。

然后，通过阅读了相关的文献和研究成果，尤其是关于材料表示和性质预测方面的内容，复现一些先前的研究方法，加深对机器学习在材料科学中的应用的理理解，从而为接下来的工作奠定基础。通过探索模型建立的思路，选择合适的模型架构和算法，从而更好地捕捉材料性质之间的关联性和共性，提高模型的预测性能。

我们构建的其中一个下游任务为声子力常数预测，这些力常数描述了晶格中不同原子之间的相互作用方式，包括原子的位移导致的弹性势能变化。声子的力常数是描述晶体中原子振动的重要参数，对于理解材料的结构、性质和行为具有重要作用，在材料科学和固体物理学领域具有广泛的应用前景。

总的来说，这些经历不仅拓展了我的专业知识和技能，还为我未来的学术研究和工作奠定了坚实基础。我深刻认识到机器学习技术在材料科学领域的巨大潜力。

3、在实际工作中综合运用所学知识解决复杂工程问题的案例

在当前的材料科学领域，利用深度学习方法进行晶体属性的预测已经成为一项重要的研究任务。特别是在图神经网络等深度学习方法的应用下，能够有效地预测晶体的各种属性，如能带带隙等。然而，尽管这些方法在某些方面表现出色，但在高维属性，尤其是电子结构（包

括能带和态密度)的预测上却表现不佳。

我的任务目标是利用深度学习预测晶体的电子结构,例如能带或者态密度等,从而加速新材料的发现和开发过程。首先,通过复现现有的图神经网络等深度学习方法,应用于电子结构预测,发现结果表现不佳。造成这一问题的主要原因有以下几点,首先,现有模型没有很好地捕捉到高维属性和晶体结构之间的复杂关系,其次,高维属性的建模方法需要进一步优化,以提高预测准确性,最后,我意识到数据集的清洗工作并不充分,例如,在讨论态密度时,应选用非磁性材料或考虑热力学稳定性较高的材料,以确保预测结果的准确性。针对以上问题,我采取了一系列措施。首先,我对现有的深度学习模型进行了优化,引入了注意力机制,同时在训练时候使用Ray tune等工具优化了模型的参数设置,以更好地捕捉高维属性和晶体结构之间的关系。其次,我对高维属性的建模方法进行了改进,结合跳连接和归一化等方法,引入了更复杂的特征提取层,以提高模型的准确性。最后,对数据集进行了进一步的筛选,确保数据集分布更加平衡,从而提高预测结果的可靠性。在优化模型和数据集的过程中,也面临了一些挑战,例如在使用对比学习或训练图神经网络时,由于输入数据相当复杂,需要考虑模型训练收敛问题。这些问题同样可能源于数据集的质量不佳或者模型结构不够复杂,导致模型难以充分学习数据的特征,为了解决这一问题,我们进行了反复的调试和优化工作,调整模型的超参数和结构。经过一系列的讨论和持续优化,设计了一种基于注意力机制的预测晶体电子结构的深度学习模型,这个模型与先前模型相比有更好的预测性能。

在材料科学领域,材料的力常数是非常重要的,因为它直接影响到材料的力学性能以及材料在工程应用中的稳定性。力常数描述了晶格中不同原子之间的相互作用方式,包括原子的位移导致的弹性势能变化,其中,声子的力常数是描述晶体中原子振动的重要参数,对于理解材料的结构、性质和行为具有重要作用,在材料科学和固体物理学领域具有广泛的应用前景。传统上,通过第一性原理来计算材料的力常数,但是这种方法通常计算量大,耗时长,且对计算资源要求高,而且,对于复杂的结构,精确的第一性原理计算往往具有挑战性。因此,考虑使用机器学习方法来构建力常数的预测。首先我们的目标瞄准声子数据集,在经过模拟计算包等一些工具获取每个材料的力常数,我们的第一个难点是如何对力常数这个矩阵进行结合材料等变性的建模,通过阅读等变图神经网络等文献,首先将力常数建模为一个超胞内的边属性,从而构建一个等变的嵌入层。然而这个下游任务依然是相当复杂的,通过大量的文献阅读以及对以往模型的解读和使用,构建了一个端到端的力常数预测的方法。

(二) 取得的业绩(代表作)【限填3项, 须提交证明原件(包括发表的论文、出版的著作、专利证书、获奖证书、科技项目立项文件或合同、企业证明等)供核实, 并提供复印件一份】

1. 公开成果代表作【论文发表、专利成果、软件著作权、标准规范与行业工法制定、著作编写、科技成果获奖、学位论文等】

成果名称	成果类别 [含论文、授权专利(含发明专利申请)、软件著作权、标准、工法、著作、获奖、学位论文等]	发表时间/授权或申请时间等	刊物名称/专利授权或申请号等	本人排名/总人数	备注
基于模块化和序列化自动生成神经网络的方法	授权发明专利	2024年11月16日	专利号: ZL	2/2	

2. 其他代表作【主持或参与的课题研究项目、科技成果应用转化推广、企业技术难题解决方案、自主研发设计的产品或样机、技术报告、设计图纸、软课题研究报告、可行性研究报告、规划设计方案、施工或调试报告、工程实验、技术培训教材、推动行业发展中发挥的作用及取得的经济社会效益等】

(三) 在校期间课程、专业实践训练及学位论文相关情况	
课程成绩情况	按课程学分核算的平均成绩： 86 分
专业实践训练时间及考核情况(具有三年及以上工作经历的不作要求)	累计时间： 1 年(要求1年及以上) 考核成绩： 84 分(要求80分及以上)
本人承诺	
<p>个人声明：本人上述所填资料均为真实有效，如有虚假，愿承担一切责任，特此声明！</p> <p style="text-align: right;">申报人签名： 许晓仰</p>	

浙江大學研究生院

攻讀碩士學位研究生成績表

學號: 22160175	姓名: 許曉揚	性別: 女	學院: 工程師學院	專業: 計算機技術	學制: 2.5年						
畢業時最低應獲: 24.0學分		已獲得: 25.0學分		入學年月: 2021-09	畢業年月: 2024-03						
學位證書號: 1033532024602188		畢業證書號: 103351202402600414		授予學位: 電子信息碩士							
學習時間	課程名稱	備注	學分	成績	課程性質	學習時間	課程名稱	備注	學分	成績	課程性質
2021-2022學年秋學期	數據科學技術與軟件實現		2.0	97	專業學位課	2021-2022學年春學期	自然辯證法概論		1.0	75	公共學位課
2021-2022學年秋學期	知識圖譜導論		2.0	93	專業選修課	2021-2022學年春學期	研究生英語基礎技能		1.0	81	公共學位課
2021-2022學年秋學期	非真實感圖形學		2.0	85	專業選修課	2021-2022學年春學期	研究生英語		2.0	81	公共學位課
2021-2022學年冬學期	中國特色社會主義理論與實踐研究		2.0	86	公共學位課	2021-2022學年春學期	隨機過程		3.0	81	專業選修課
2021-2022學年冬學期	數據分析的概率統計基礎		3.0	97	專業選修課	2021-2022學年夏學期	機器學習與數據挖掘工程		2.0	93	專業學位課
2021-2022學年冬學期	數據工程實踐與案例分析		2.0	95	專業學位課	2021-2022學年春學期	工程倫理		2.0	89	公共學位課
2021-2022學年冬學期	研究生論文寫作指導		1.0	85	專業學位課						

說明: 1. 研究生課程按三種方法計分: 百分制, 兩級制 (通過、不通過), 五級制 (優、良、中、及格、不及格)。

2. 備注中“*”表示重修課程。

學院成績校核章:

成績校核人: 張夢依

打印日期: 2024-04-02

证书号第6694621号



发明专利证书

发明名称：基于模块化和序列化自动生成神经网络的方法

发明人：徐仁军;许晓扬

专利号：ZL 2023 1 1278835.9

专利申请日：2023年10月07日

专利权人：浙江大学

地址：310058 浙江省杭州市西湖区余杭塘路866号

授权公告日：2024年02月09日

授权公告号：CN 117010459 B

国家知识产权局依照中华人民共和国专利法进行审查，决定授予专利权，颁发发明专利证书并在专利登记簿上予以登记。专利权自授权公告之日起生效。专利权期限为二十年，自申请日起算。

专利证书记载专利权登记时的法律状况。专利权的转移、质押、无效、终止、恢复和专利权人的姓名或名称、国籍、地址变更等事项记载在专利登记簿上。



局长
申长雨

申长雨





证书号第6694621号

专利权人应当依照专利法及其实施细则规定缴纳年费。本专利的年费应当在每年10月07日前缴纳。未按照规定缴纳年费的，专利权自应当缴纳年费期满之日起终止。

申请日时本专利记载的申请人、发明人信息如下：

申请人：

浙江大学

发明人：

徐仁军;许晓扬