

## 硕士学位论文专家评阅意见

评阅意见（包括论文选题的理论意义和应用价值；文献资料的掌握；论文取得的成果及水平；写作规范化、逻辑性等。还须明确指出论文中存在的问题和不足之处。可另附页）

论文题目：神经网络化学模型对水体系的分子动力学模拟研究

作者姓名：齐元

齐元同学将机器学习方法融合进分子动力学模拟，进而提出神经网络化学模型。使用该模型研究了水体系的结构和热力学性质，得到了与实验相一致的结果。

该论文研究目标明确，模型和方法可信，数据详实，分析全面和合理，引文规范，学风严谨，论文语言表达准确、逻辑严密、书写格式及图表规范。

该论文已达到硕士学位论文要求，是一篇优秀的硕士学位论文，建议进行硕士学位论文答辩。

论文总体评价 (请在相应栏内划“√”)	<input checked="" type="checkbox"/> 优秀	<input type="checkbox"/> 良好	<input type="checkbox"/> 中	<input type="checkbox"/> 差
是否同意组织学位论文答辩 (请在相应栏内划“√”)	<input checked="" type="checkbox"/> 同意答辩	<input type="checkbox"/> 修改以后答辩	<input type="checkbox"/> 不同意答辩	

## 硕士学位论文专家评阅意见

评阅意见（包括论文选题的理论意义和应用价值；文献资料的掌握；论文取得的成果及水平；写作规范化、逻辑性等。还须明确指出论文中存在的问题和不足之处。可另附页）

论文题目：神经网络化学模型对水体系的分子动力学模拟研究

作者姓名：齐元

机器学习方法近来在分子模拟领域得到越来越广泛的应用，特别是在分子势能面建模、对接位点等方面。本论文利用机器学习方法，构造了两种水溶液的神经网络模型，并经过与传统可极化模型对比，证实了构建的神经网络模型的有效性。论文的研究成果具有创新性。

该论文理论方法和研究路线合理，结果分析可靠，说明作者在本学科已具有扎实的专理论知识基础，能够应用所学知识解决具体科学问题，具有较强从事科研工作的能力。论文思路清晰，文笔通顺，表述清楚，图式规范，达到了硕士论文水平。

论文总体评价 (请在相应栏内划“√”)	<input checked="" type="checkbox"/> 优秀	<input type="checkbox"/> 良好	<input type="checkbox"/> 中	<input type="checkbox"/> 差
是否同意组织学位论文答辩 (请在相应栏内划“√”)	<input checked="" type="checkbox"/> 同意答辩	<input type="checkbox"/> 修改以后答辩	<input type="checkbox"/> 不同意答辩	

## 硕士学位论文专家评阅意见

评阅意见（包括论文选题的理论意义和应用价值；文献资料的掌握；论文取得的成果及水平；写作规范化、逻辑性等。还须明确指出论文中存在的问题和不足之处。可另附页）

论文题目：神经网络化学模型对水体系的分子动力学模拟研究

作者姓名：齐元

本论文题目为神经网络模型，训练正确的水模型，对含64个水分子的PBC体系进行了研究和验证。结果发现TensorFlow模型取得较好结果。本论文的题目具有一定理论意义，在模型中也具有一定的参考价值。论文撰写规范，图表合理。但论文并未实际的对各个体系来验证结果。表格与结果不符。

论文总体评价  
(请在相应栏内划“√”)

☐ 优秀

☒ 良好

☐ 中

☐ 差

是否同意组织学位论文答辩

☒ 同意答辩

☐ 修改以后答辩

☐ 不同意答辩