

本科生毕业论文

|  |  |
| --- | --- |
| 题目： | **基于图神经网络的蛋白质**  **主链结构优化** |
|  | **Optimization of Protein Backbone Structure Through Graph Neural Network** |

|  |  |
| --- | --- |
| 姓 名： | 王宇哲 |
| 学 号： | 1800011828 |
| 院 系： | 化学与分子工程学院 |
| 专 业： | 化学 |
| 指导教师： | 来鲁华 教授 张长胜 副研究员 |

二〇二二 年 六 月

版权声明

任何收存和保管本论文各种版本的单位和个人，未经本论文作者同意，不得将本论文转借他人，亦不得随意复制、抄录、拍照或以任何方式传播。否则，引起有碍作者著作权之问题，将可能承担法律责任。

**摘 要**

中文摘要300−500字。简要说明论文的研究背景、目的、研究方法、结果和主要结论。语言精炼准确。

**关键词：**在摘要**下方**另起一行，给出关键词（3−5个），关键词之间用逗号分开，最后一个关键词后不打标点符号。

关键词：关键词1，关键词2，关键词3……

**ABSTRACT**

[This is for abstract]

英文摘要1000−2000词，需按英文的行文方式写明论文的研究背景、目的、研究方法、结果和主要结论，不应当是中文摘要的简单翻译。

关键词应与中文对应，各词字首字母大写

KEY WORDS: [Keyword 1, Keyword 2, Keyword 3, ……]

**目 录**

[第一章 引言 1](#_Toc103263066)

[1.1 等变图神经网络 1](#_Toc103263067)

[1.2 等变图神经网络 1](#_Toc103263068)

[第二章 材料与方法 2](#_Toc103263069)

[2.1 [此处键入二级标题，四号字] 2](#_Toc103263070)

[2.1.1 [此处键入三级标题，小四号字] 2](#_Toc103263071)

[2.2 [此处键入二级标题，四号字] 2](#_Toc103263072)

[2.2.1 [此处键入三级标题，小四号字] 2](#_Toc103263073)

[第三章 结果与讨论 3](#_Toc103263074)

[3.1 [此处键入二级标题，四号字] 3](#_Toc103263075)

[3.1.1 [此处键入三级标题，小四号字] 3](#_Toc103263076)

[3.2 [此处键入二级标题] 3](#_Toc103263077)

[3.2.1 [此处键入三级标题] 3](#_Toc103263078)

[第四章 结论与展望 4](#_Toc103263079)

[参考文献 5](#_Toc103263080)

[附录 A 6](#_Toc103263081)

[致谢 7](#_Toc103263082)

[北京大学学位论文原创性声明和使用授权说明 8](#_Toc103263083)

右侧对应页码根据论文情况更新，此句应在定稿后删除。模板文件中的红色字均可在定稿后删除。

# 第一章 引言

蛋白质

## 1.1 蛋白质

## 1.2 等变图神经网络

# 第二章 材料与方法

## 2.1 [此处键入二级标题，四号字]

### 2.1.1 [此处键入三级标题，小四号字]

[开始正文（中文用宋体，英文用Times New Roman；建议小四号字，五号字也可以）。]

全文应使用相同的标题序列，且同级别的标题应使用相同的字体、字号。

论文中图表、附注、参考文献、公式一律采用阿拉伯数字连续（或分章）且按先后顺序编号。

表序及表名置于表的上方；图序及图名置于图的下方；论文中的公式编号应用括弧括起写在右边行末。

注释：可采用脚注或尾注的方式，按照本学科国内外通行的范式，逐一注明本文引用或参考、借用的资料数据出处及他人的研究成果和观点，严禁抄袭剽窃。

## 2.2 [此处键入二级标题，四号字]

### 2.2.1 [此处键入三级标题，小四号字]

[开始正文（中文用宋体，英文用Times New Roman；建议小四号字，五号字也可以）。]

图表示例

表标题在表上方；图标题在图下方。图表序号分章设置，如图2.15表示第二章第15幅图。

一般居中，如果超过两行，则两端对齐。图表标题都采用五号字。

表2.5 室外细菌气溶胶香农-维纳指数（*H*）和均匀性指数（*E*）

|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
|  | **Stage 1 (>7.1 μm)** | | | | **Stage 2 (4.8−7.1 μm)** | | | | **Stage 3 (3.2−4.7 μm)** | | | |
| Con | Low | Medium | High | Con | Low | Medium | High | Con | Low | Medium | High |
| ***H*** | **2.52** | 2.58 | 2.57 | ***2.24*** | **2.48** | 2.21 | 2.21 | ***2.36*** | **2.66** | 2.65 | 2.64 | ***2.53*** |
| ***E*** | 0.87 | 0.88 | 0.93 | 0.85 | 0.9 | 0.86 | 0.86 | 0.85 | 0.9 | 0.9 | 0.85 | 0.88 |



图2.15 全球NAT-CO2-2007清单与PKU-CO2-2007比较的空间示意图

# 第三章 结果与讨论

## 3.1 [此处键入二级标题，四号字]

### 3.1.1 [此处键入三级标题，小四号字]

[此处键入正文（建议小四号，五号也可以）]

## 3.2 [此处键入二级标题]

### 3.2.1 [此处键入三级标题]

[此处键入正文（建议小四号，五号也可以）]

# 第四章 结论与展望

[此处键入正文，建议小四号，五号也可以]

必须有结论，建议给出展望。

此章题目和序号可变；根据论文具体情况安排和编序。

论文结论要明确、精炼、完整、准确，突出自己的创造性成果或新见解。应严格区分本人的研究成果与他人的科研成果的界限。建议结合自己的研究，就课题的进一步工作和未来设想给出分析和展望。

# 参考文献

参考文献是毕业论文不可缺少的组成部分，也是作者对他人知识产权的承认和尊重。参考文献的引用应符合规范，引用的资料具有权威性，并对毕业论文有直接的参考价值。参考文件编号次序应与其在文中出现的次序相同，从1开始。使用五号字，中文用宋体，英文用Times New Roman。

**[具体格式要求]：**

文献是期刊时，一般书写格式为：作者1，作者2（按要求列出），“篇名”，期刊名（英文用斜体，中文正常），**卷**（期，可选；**粗体**）：页码，**年**（**粗体**）

文献是图书时，一般书写格式为：作者，《书名》，版次，出版单位，出版地（中英文次序不同），**年**（页码，可选）

作者不多于10位须全部给出，多于10位的列出前10位作者后，中文加等，英文加et al., 具体格式参考引用示例。

英文采用英文标点；中文文献采用中文标点。

宋体状态下的英文不美观。统一文献字体时，先选择字体为“宋体”，然后再选择“Times New Roman”。

引用示例如下：

[1] B. Bochu, J. Chenevas, J. C. Joubert and M. Marezio, “High pressure synthesis and crystal structure of a new series of perovskite-like compounds CMn7O12 (C = Na, Ca, Cd, Sr, La, Nd)”, *J. Solid State Chem*., **11:** 88−93, **1974**

[2] F. A. Carey, R. J. Sundberg, *Advanced Organic Chemistry*, 5th ed., Springer, Boston, **2007** (p. 253，opitional)

[3] 段东红，孙彦平，“直接硼氢化物燃料电池（DBFC）阳极材料及反应机理”，化学进展，**22：**1720−1728, **2010**

[4] 傅献彩，沈文霞，姚天扬，侯文华，《物理化学》（第5版），北京，高等教育出版社，**2005**（35−37页，页码为可选项，不要求，若需要可给出）

# 附录 A

附录A.1：[此处键入附录名称，小四号字]

[此处键入附录正文，五号字]

附录是指不适合放在正文中但又直接反映研究工作和成果的资料，如公式的推演、程序的编写、实验数据及其他对正文必要补充的内容等。

# 致谢

[此处键入致谢正文]

简述自己通过做毕业论文所获得的体会，并对指导教师以及相关人员致谢。致谢的文字简洁真诚，为论文工作划上的圆满句号。

# 北京大学学位论文原创性声明和使用授权说明

**原创性声明**

本人郑重声明：所呈交的学位论文，是本人在导师的指导下，独立进行研究工作所取得的成果。除文中已经注明引用的内容外，本论文不含任何其他个人或集体已经发表或撰写过的作品或成果。对本文的研究做出重要贡献的个人和集体，均已在文中以明确方式标明。本声明的法律结果由本人承担。

论文作者签名：

日期： 年 月 日

**学位论文使用授权说明**

本人完全了解北京大学关于收集、保存、使用学位论文的规定，即：

* 按照学校要求提交学位论文的印刷本和电子版本；
* 学校有权保存学位论文的印刷本和电子版，并提供目录检索与阅览服务，在校园网上提供服务；
* 学校可以采用影印、缩印、数字化或其它复制手段保存论文；

论文作者签名： 导师签名：

日期： 年 月 日