

清华大学学位论文 L^AT_EX 模板

使用示例文档 v7.4.0

(申请清华大学数学系学士学位论文)

培 养 单 位 : 数学科学系

学 科 : 数学与应用数学

研 究 生 : 郭 骏 宇

指 导 教 师 : 包 承 龙 助理教授

二〇二四年一月

An Introduction to L^AT_EX Thesis Template of Tsinghua University v7.4.0

Thesis submitted to
Tsinghua University
in partial fulfillment of the requirement
for the degree of
Bachelor of Science

in
Department of Mathematical Science

by
Guo Junyu

Thesis Supervisor: Professor Bao Chenglong

January, 2024

关于学位论文使用授权的说明

本人完全了解清华大学有关保留、使用学位论文的规定，即：

清华大学拥有在著作权法规定范围内学位论文的使用权，其中包括：（1）已获学位的研究生必须按学校规定提交学位论文，学校可以采用影印、缩印或其他复制手段保存研究生上交的学位论文；（2）为教学和科研目的，学校可以将公开的学位论文作为资料在图书馆、资料室等场所供校内师生阅读，或在校园网上供校内师生浏览部分内容；（3）按照上级教育主管部门督导、抽查等要求，报送相应的学位论文。

本人保证遵守上述规定。

作者签名： _____

导师签名： _____

日 期： _____

日 期： _____

摘 要

论文的摘要是对论文研究内容和成果的高度概括。摘要应对论文所研究的问题及其研究目的进行描述，对研究方法和过程进行简单介绍，对研究成果和所得结论进行概括。摘要应具有独立性和自明性，其内容应包含与论文全文同等量的主要信息。使读者即使不阅读全文，通过摘要就能了解论文的总体内容和主要成果。

论文摘要的书写应力求精确、简明。切忌写成对论文书写内容进行提要的形式，尤其要避免“第 1 章……；第 2 章……；……”这种或类似的陈述方式。

关键词是为了文献标引工作、用以表示全文主要内容信息的单词或术语。关键词不超过 5 个，每个关键词中间用分号分隔。

关键词：关键词 1；关键词 2；关键词 3；关键词 4；关键词 5

Abstract

An abstract of a dissertation is a summary and extraction of research work and contributions. Included in an abstract should be description of research topic and research objective, brief introduction to methodology and research process, and summary of conclusion and contributions of the research. An abstract should be characterized by independence and clarity and carry identical information with the dissertation. It should be such that the general idea and major contributions of the dissertation are conveyed without reading the dissertation.

An abstract should be concise and to the point. It is a misunderstanding to make an abstract an outline of the dissertation and words “the first chapter”, “the second chapter” and the like should be avoided in the abstract.

Keywords are terms used in a dissertation for indexing, reflecting core information of the dissertation. An abstract may contain a maximum of 5 keywords, with semi-colons used in between to separate one another.

Keywords: keyword 1; keyword 2; keyword 3; keyword 4; keyword 5

目 录

摘 要.....	I
Abstract.....	II
目 录.....	III
插图清单.....	IV
附表清单.....	V
符号和缩略语说明.....	VI
第 1 章 研究问题简介	1
1.1 生成式模型	1
1.2 Cryo-EM.....	1
第 2 章 文献回顾	2
2.1 傅立叶切片定理	2
2.2 变分编码器	2
2.3 正则流	2
2.4 扩散模型	2
第 3 章 引用文献的标注	4
3.1 顺序编码制	4
3.2 著者-出版年制	4
附录 A 补充内容	5
致 谢.....	7
声 明.....	8
指导教师评语.....	9
答辩委员会决议书.....	10

插图清单

附表清单

符号和缩略语说明

PI	聚酰亚胺
MPI	聚酰亚胺模型化合物, N-苯基邻苯酰亚胺
PBI	聚苯并咪唑
MPBI	聚苯并咪唑模型化合物, N-苯基苯并咪唑
PY	聚吡咯
PMDA-BDA	均苯四酸二酐与联苯四胺合成的聚吡咯薄膜
MPY	聚吡咯模型化合物
As-PPT	聚苯基不对称三嗪
MAsPPT	聚苯基不对称三嗪单模型化合物, 3,5,6-三苯基-1,2,4-三嗪
DMA sPPT	聚苯基不对称三嗪双模型化合物 (水解实验模型化合物)
S-PPT	聚苯基对称三嗪
MS PPT	聚苯基对称三嗪模型化合物, 2,4,6-三苯基-1,3,5-三嗪
PPQ	聚苯基喹噁啉
MPPQ	聚苯基喹噁啉模型化合物, 3,4-二苯基苯并二嗪
HMPI	聚酰亚胺模型化合物的质子化产物
HMPY	聚吡咯模型化合物的质子化产物
HMPBI	聚苯并咪唑模型化合物的质子化产物
HMA sPPT	聚苯基不对称三嗪模型化合物的质子化产物
HMS PPT	聚苯基对称三嗪模型化合物的质子化产物
HMP PQ	聚苯基喹噁啉模型化合物的质子化产物
PDT	热分解温度
HPLC	高效液相色谱 (High Performance Liquid Chromatography)
HPCE	高效毛细管电泳色谱 (High Performance Capillary electrophoresis)
LC-MS	液相色谱-质谱联用 (Liquid chromatography-Mass Spectrum)
TIC	总离子浓度 (Total Ion Content)
<i>ab initio</i>	基于第一原理的量子化学计算方法, 常称从头算法
DFT	密度泛函理论 (Density Functional Theory)
E_a	化学反应的活化能 (Activation Energy)
ZPE	零点振动能 (Zero Vibration Energy)
PES	势能面 (Potential Energy Surface)
TS	过渡态 (Transition State)

TST	过渡态理论 (Transition State Theory)
ΔG^\ddagger	活化自由能 (Activation Free Energy)
κ	传输系数 (Transmission Coefficient)
IRC	内禀反应坐标 (Intrinsic Reaction Coordinates)
ν_i	虚频 (Imaginary Frequency)
ONIOM	分层算法 (Our own N-layered Integrated molecular Orbital and molecular Mechanics)
SCF	自洽场 (Self-Consistent Field)
SCRF	自洽反应场 (Self-Consistent Reaction Field)

第 1 章 研究问题简介

1.1 生成式模型

1.2 Cryo-EM

第2章 文献回顾

2.1 傅立叶切片定理

2.2 变分编码器

$$\text{ELBO} = \mathbb{E}_{q_\phi(z|x)} \left[\log \left(\frac{p_\theta(z, x)}{q_\phi(z|x)} \right) \right] \quad (2.1)$$

$$\mathcal{L}(\theta, \phi) = \mathbb{E}_{q_\phi(z|x)} [\log p_\theta(x | z)] - \mathcal{D}_{KL} [q_\phi(z | x) \| p(z)] \quad (2.2)$$

2.3 正则流

正则流 (Normalization Flow) 是基于变分编码器的结构基础上提出的 (见 Improving Variational Auto-Encoders using Householder Flow) 用来逼近真实的隐藏变量的先验分布 $p_\theta(z)$ 。首先由样本 x 生成 z_0 的简单分布 (一般设为正态分布, 由 x 生成 z_0 分布的均值和方差)。然后, 对 z_0 进行一系列可逆变换 $f^{(t)}, t = 1, 2, \dots, T$ 。一旦我们选定了转换函数 $f^{(t)}$, 我们可以计算出其雅可比矩阵行列式。根据 VAE 模型的定义, 我们的优化目标转换为如下目标:

$$\ln p(\mathbf{x}) \geq \mathbb{E}_{q(\mathbf{z}^{(0)}|\mathbf{x})} \left[\ln p(\mathbf{x} | \mathbf{z}^{(T)}) + \sum_{t=1}^T \ln \left| \det \frac{\partial \mathbf{f}^{(t)}}{\partial \mathbf{z}^{(t-1)}} \right| \right] - \text{KL} (q(\mathbf{z}^{(0)} | \mathbf{x}) \| p(\mathbf{z}^{(T)})) \quad (2.3)$$

正则流可以用来逼近不同类型的 VAE 模型中的后验分布, 只需要选取合适的转换函数 $f^{(t)}$, 不需要对编码器和解码器的结构进行修改。

2.4 扩散模型

扩散概率模型在图像生成领域已经被证明是有效的生成模型, 但是其缺点在于缺乏低维的有效隐藏变量 z 。然而, VAE 模型通常具有低维有效的隐藏变量, 可以通过结合两者来更加有效地获得对高维数据分布的逼近。

$$q(x_{1:T} | x_0) = \prod_{t=1}^T q(x_t | x_{t-1}) \quad (2.4)$$

$$q(x_t | x_{t-1}) = \mathcal{N}(\sqrt{1 - \beta_t} x_{t-1}, \beta_t I) \quad (2.5)$$

$$q(x_t | x_0) = \mathcal{N}(\sqrt{\bar{\alpha}_t}x_0, (1 - \bar{\alpha}_t)I) \text{ 其中 } \alpha_t = (1 - \beta_t) \text{ 以及 } \bar{\alpha}_t = \prod_t \alpha_t \quad (2.6)$$

正向传播的后验分布同样可以被给出:

$$q(x_{t-1} | x_t, x_0) = \mathcal{N}(\tilde{\mu}_t(x_t, x_0), \tilde{\beta}_t) \quad (2.7)$$

$$\text{其中 } \tilde{\mu}_t(x_t, x_0) = \frac{\sqrt{\bar{\alpha}_{t-1}}\beta_t}{1 - \bar{\alpha}_t}x_0 + \frac{\sqrt{\alpha_t}(1 - \bar{\alpha}_{t-1})}{1 - \bar{\alpha}_t}x_t \quad (2.8)$$

$$\text{以及 } \tilde{\beta}_t = \frac{1 - \bar{\alpha}_{t-1}}{1 - \bar{\alpha}_t}\beta_t \quad (2.9)$$

以上为正向 Markov 过程所满足的条件概率分布性质, 在随机优化问题中为了优化参数需要对逆向传播过程进行建模。逆向传播过程同样可以被参数化, 此处使用高斯转移分布来进行此一阶 Markov 逆向传播过程, 满足如下表达式:

$$p(x_{0:T}) = p(x_T) \prod_{t=1}^T p_\theta(x_{t-1} | x_t) \quad (2.10)$$

$$p_\theta(x_{t-1} | x_t) = \mathcal{N}(\mu_\theta(x_t, t), \Sigma_\theta(x_t, t)) \quad (2.11)$$

选取足够大的 T 值与合适的递减序列 $\{\beta_t\}_{t \geq 1}$, 条件概率分布 $q(x_T | x_0)$ 可以足够接近标准高斯分布。整个概率系统可以通过变分推断来进行端到端的训练, 从而优化参数。逆向传播过程的参数以最大化如下函数从而优化模型参数:

$$\mathbb{E}_q[\underbrace{\mathcal{D}_{KL}(q(x_T | x_0) \| p(x_T))}_{L_T} + \sum_{t>1} \underbrace{\mathcal{D}_{KL}(q(x_{t-1} | x_t, x_0) \| p_\theta(x_{t-1} | x_t))}_{L_{t-1}} - \underbrace{\log p_\theta(x_0 | x_1)}_{L_0}] \quad (2.12)$$

2.5 DDPM: 特殊的扩散模型

2.6 VAE 模型和扩散模型的结合

第3章 引用文献的标注

模板支持 BibTeX 和 BibLaTeX 两种方式处理参考文献。下文主要介绍 BibTeX 配合 natbib 宏包的主要使用方法。

3.1 顺序编码制

在顺序编码制下，默认的 \cite 命令同 \citep 一样，序号置于方括号中，引文页码会放在括号外。统一处引用的连续序号会自动用短横线连接。

```
\cite{zhangkun1994}           ⇒ [?]
\citet{zhangkun1994}          ⇒ ?1
\citep{zhangkun1994}          ⇒ [?]
\cite[42]{zhangkun1994}        ⇒ [?]42
\cite{zhangkun1994,zhukezhen1973} ⇒ [??]
```

也可以取消上标格式，将数字序号作为文字的一部分。建议全文统一使用相同的格式。

```
\cite{zhangkun1994}           ⇒ [?]
\citet{zhangkun1994}          ⇒ ? ]
\citep{zhangkun1994}          ⇒ [?]
\cite[42]{zhangkun1994}        ⇒ [?]42
\cite{zhangkun1994,zhukezhen1973} ⇒ [??]
```

3.2 著者-出版年制

著者-出版年制下的 \cite 跟 \citet 一样。

```
\cite{zhangkun1994}           ⇒?
\citet{zhangkun1994}          ⇒?
\citep{zhangkun1994}          ⇒(?)
\cite[42]{zhangkun1994}        ⇒(?)42
\citep{zhangkun1994,zhukezhen1973} ⇒(??)
```

注意，引文参考文献的每条都要在正文中标注[????????????????????????????????????]。

附录 A 补充内容

附录是与论文内容密切相关、但编入正文又影响整篇论文编排的条理和逻辑性的资料，例如某些重要的数据表格、计算程序、统计表等，是论文主体的补充内容，可根据需要设置。

附录中的图、表、数学表达式、参考文献等另行编序号，与正文分开，一律用阿拉伯数字编码，但在数码前冠以附录的序号，例如“图 A.1”，“表 A.1”，“式 (A.1)”等。

A.1 插图

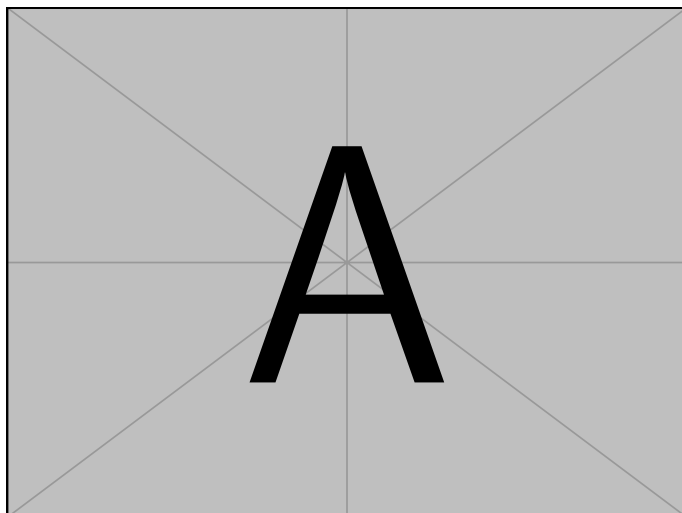


图 A.1 附录中的图片示例

A.2 表格

表 A.1 附录中的表格示例

文件名	描述
thuthesis.dtx	模板的源文件，包括文档和注释
thuthesis.cls	模板文件
thuthesis-*.bst	BibTeX 参考文献表样式文件
thuthesis-*.bbx	BibLaTeX 参考文献表样式文件
thuthesis-*.cbx	BibLaTeX 引用样式文件

A.3 数学表达式

$$\frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma} f = \sum_{k=1}^m n(\gamma; a_k) \mathcal{R}(f; a_k) \quad (\text{A.1})$$

A.4 参考文献

附录中的参考文献示例 ([?] 和[? ? ?])。

致 谢

衷心感谢导师 ××× 教授和物理系 ×× 副教授对本人的精心指导。他们的言传身教将使我终生受益。

在美国麻省理工学院化学系进行九个月的合作研究期间，承蒙 Robert Field 教授热心指导与帮助，不胜感激。

感谢 ××××× 实验室主任 ××× 教授，以及实验室全体老师和同窗们学的热情帮助和支持！

本课题承蒙国家自然科学基金资助，特此致谢。

声 明

本人郑重声明：所呈交的学位论文，是本人在导师指导下，独立进行研究工作所取得的成果。尽我所知，除文中已经注明引用的内容外，本学位论文的研究成果不包含任何他人享有著作权的内容。对本论文所涉及的研究工作做出贡献的其他个人和集体，均已在文中以明确方式标明。

签 名：_____ 日 期：_____

指导教师评语

论文提出了……

答辩委员会决议书

论文提出了……

论文取得的主要创新性成果包括：

1. ……

2. ……

3. ……

论文工作表明作者在 ××××× 具有 ××××× 知识，具有 ×××× 能力，论文 ××××，
答辩 ××××。

答辩委员会表决，（× 票/一致）同意通过论文答辩，并建议授予 ×××（姓名）
×××（门类）学博士/硕士学位。