



附表 1

完成人合作关系说明

本项目由本人何朝政牵头，联合郑锦洲、肖秦琨、付玲三位核心成员，依托西安工业大学科研平台与西安慧算智能科技有限公司、陕西千软汇信息技术有限公司、重庆慧算新材料技术有限公司产业化资源，自 2021 年 12 月至 2023 年 7 月开展深度合作，共同攻克了 CBD-GM 智能材料设计云平台的关键技术难题。我们的合作贯穿算法研发、软件工程、应用推广全链条，形成了紧密互补的产学研协作体系。

一、合作背景与分工

本人与肖秦琨（算法协同）：肖秦琨作为西安工业大学团队成员，与我共同主导核心算法攻关。他深度参与基于 Transformer 的蛋白质二级结构预测模型开发，优化多类不平衡数据训练流程，使罕见结构识别精度提升 17%；同时协作完善自然参数网络原子化能预测方法，在 QM7 数据集实现 42 倍效率突破。我们每周召开算法研讨会，确保多目标优化框架与 AI 预测模块的无缝集成。

本人与郑锦洲（工程化落地）：郑锦洲负责将理论算法转化为用户友好型平台。他带领团队开发“卡片化操作引擎”，将传统软件中分散的百余参数重构为 36 项标准化功能卡片，使参数配置时间缩短 66%；并设计自动化工作流程系统，实现建模→优化→AI 预测的全流程智能化。我们通过联合调试超算集群接口，确保千原子级材料计算的稳定运行。

本人与付玲（跨领域应用拓展）：付玲聚焦生物计算模块的技术转化。她基于团队开发的蛋白质预测算法，协助吉林大学、陕西师范大学等用户实现药物靶点高效筛选；同时推动平台在生物医用材料设计中的应用，例如通过跨学科协作优化植入材料的生物相容性参数。

成员间交叉协作：郑锦洲与肖秦琨协作优化算法部署：郑提供的蛋白质预测模型由肖集成至平台生物计算模块，实现“预测-验证”闭环；付玲与郑锦洲联合开发生物医药案例：付玲的生物数据与郑的算法结合，支撑抗肿瘤药物设计场景落地。

二、合作成果

发明专利：一种基于多步骤深度学习模型的材料结构预测方法及装置

专利号：ZL202410347520.3

发明专利：一种多类不平衡蛋白质二级结构预测方法和系统

专利号：ZL202311804115.1

发明专利：基于图卷积神经网络生成模型的晶体结构优化应用方法

专利号：ZL202510229046.9

发明专利：基于混合势能深度学习模型的晶体结构预测方法及系统

专利号：ZL202510362400.5

发明专利：基于机器学习和目标优化的稳定晶体结构预测方法及系统



陕西省科学技术奖励工作办公室

专利号: ZL202311343525.0

上述合作关系真实、持续且具有实质性贡献,所有合作成果知识产权清晰,
无争议。

第一完成人签名: 何朝政



完成人合作关系情况汇总表

序号	合作方式	合作者/项目排名	合作起始时间	合作完成时间	合作成果	证明材料
1	共同知识产权	何朝政/1	2021.12.1	2023.7.1	一种基于多步骤深度学习模型的材料结构预测方法及装置	必备附件-1
2	共同知识产权	郑锦洲/2	2021.12.1	2023.7.1	一种基于多步骤深度学习模型的材料结构预测方法及装置	必备附件-1
3	共同知识产权	肖秦琨/3	2021.12.1	2023.7.1	一种多类不平衡蛋白质二级结构预测方法和系统	必备附件-1
4	共同知识产权	付玲/4	2021.12.1	2023.7.1	一种多类不平衡蛋白质二级结构预测方法和系统	必备附件-1

承诺：本人作为项目第一完成人，对本项目完成人合作关系及上述内容的真实性负责，特此声明。

第一完成人签名：何朝政