

陈昊天

联系电话: 1580122**** | 邮箱: ti355****@126.com

户口: 北京市海淀区 | 家庭住址: 北京市海淀区****园7号楼



教育经历

北京信息科技大学	计算机科学与技术	硕士 (学硕)	2023.09 – 2026.07
<ul style="list-style-type: none">荣誉/奖项: 2023~2024 年获得学业奖学金; 2024~2025 年获得学业奖学金论文 1 Chen H, Liu X. Hybridizing expert descriptors and learned embeddings yields transferable element representations[J]. Nature Communications (已送审, 投稿日期 2026 年 2 月 15 日) (SCI 一区 Top)论文 2 陈昊天, 杨涛, 刘晓彤. 化学分子的隐藏空间嵌入方法原理和应用[J]. 化学进展, 2025, 37(10): 1456-1478. (SCI 二区)论文 3 Yang T, Zhang J, Chen H, et al. Data-Driven Deciphering Structure–Mössbauer Spectroscopy Relationships in Iron-Based Compounds[J]. The Journal of Physical Chemistry Letters, 2026, 17(7): 2111-2117. (SCI 二区 Top)论文 4 Wang Y, Liu X, Chen H, et al. Exploring lightweight language models for materials informatics with AlchemBERT[J]. Cell Reports Physical Science, 2025, 6(8). (SCI 二区)论文 5 Wang Z, Liu X, Chen H, et al. Exploring multi-fidelity data in materials science: Challenges, applications, and optimized learning strategies[J]. Applied Sciences, 2023, 13(24): 13176. (SCI 四区)论文 6 陈昊天, 刘晓彤, 陈冰洋. 基于 Alpha-Beta 剪枝的三维空间四子棋系统[J]. 软件导刊, 2025, 24(08):137-144. (CCF C)软著 化学元素序列排序算法及评价软件 V1.0 登记号: 2024SR0664976第二届世界科学智能大赛物质科学赛道——催化反应产率预测 初赛 25/575 名 复赛 19/42 名			
北京信息科技大学	计算机科学与技术	本科	2018.09 – 2022.07
<ul style="list-style-type: none">荣誉/奖项: 2018~2019 年获得学习优秀奖奖学金; 校级大学生创新创业项目			
北京市东城区第一七一中学、第二十五中学		中学	2012.09 – 2018.06

项目/竞赛经历

参与项目 1: 国家自然科学基金项目 (No. 22203008)

- 开展不同嵌入方法对材料结构信息表征能力的研究。研究不同维度、不同方法元素嵌入表示在机器学习过程中对模型预测性能的影响, 结合不同模型和嵌入方法提供通用元素嵌入表示。采用 CGCNN 和 MEGNet 模型在 Matbench 不同材料结构数据集进行多比例的人类知识和数据驱动嵌入组合, 根据元素嵌入间距离构建元素嵌入, 在多个组分任务中提升 Crabnet 预测性能 (论文 1 审稿中)。

参与项目 2: 国家自然科学基金项目 (No. 22272009)

- 负责整理 AI4Science 发展过程中的不同材料嵌入表示方法、模态, 及晶体和分子预测模型关于元素、键特征的使用 (论文 2)。

参与项目 3: 相場模拟计算程序文档编写和测试服务 (横向项目, 甲方: 北京科技大学)

- 负责相場模拟计算程序的测试与文档编写, 编写测试用例及静态测试、单元测试及代码覆盖率分析, 确保软件质量和功能的准确性。

参与竞赛: 第二届世界科学智能大赛物质科学赛道——催化反应产率预测

- 转化分子 SMILES 为 Morgan、Mol2vec 等嵌入表示, 结合树模型、随机森林进行机器学习回归预测。利用机器学习或深度学习算法, 分析药物合成中催化反应的实验数据, 建立产率预测模型提高反应条件筛选效率、优化催化反应体系。

其他荣誉/证书

- 大学英语六级 (CET-6)
- 半程马拉松中国田径协会大众二级选手等级证书, 最好成绩 1:39:47