

个人简历



基本信息



刘翯齐



13016986120



xj1hq0096@gmail.com



<https://github.com/metaphorme>

Blog <https://diazepam.cc>



教育背景

中国药科大学 硕士在读

2025年9月 - 2028年6月 (预计)

专业: 医药大数据与人工智能

研究方向: 基于预训练大模型的mRNA全长序列设计, AI驱动的mRNA关键功能元件发现, 基于具备长程感知能力的注意力图神经网络的大分子力场构建。

中国药科大学 本科

2020年9月 - 2024年6月

专业: 药学(基础药理学理科基地)

主修课程: 药物化学, 计算机辅助药物设计, 数理统计, 药理学, 药物代谢动力学, 物理化学等。



专业技能

- 语言技能: CET-6, 普通话水平测试 (二级甲等)。
- 计算机技能:
 - Python语言 (全国计算机等级二级, 具备数据处理、网络编程、PyTorch及CUDA相关开发经验);
 - SPSS数据分析;
 - C++语言 (具备Arduino嵌入式、LibTorch开发经验);
 - Rust语言 (具备使用Rust编写Python扩展开发经验);
 - Docker、Singularity、Podman等容器化技术的应用与软件映像制作;
 - Linux使用与开发经验 (9年)。



科研/实习经历

- 基于纯人工智能框架的分子动力学模拟方法初探 (毕业设计) 2023年11月 - 2024年5月
指导教师: 中南大学湘雅药学院 王文宣老师
开发基于图神经网络直接预测原子坐标和速度的神经网络模型VAS, 并基于C++初步实现动力学软件。模型精度接近GFN2-xTB力场, 较xTB计算速度提升3倍。设计新型图神经网络训练方法较PyG基准得到2.4倍加速。
- 理性设计NCS酶以催化合成四氢异喹啉衍生物 (省级大创, 第二负责人) 2022年12月 - 2023年11月
指导教师: 中国药科大学药学院 林爱俊老师、中国药科大学生物药物学院 李家璜老师
开发融合残差网络和图卷积网络的神经网络模型RetKcat, 用于预测酶对底物的Kcat, 实现高通量筛选高价值NCS酶突变位点。获iDEC国际定向进化大赛 (2023) 科学贡献奖、最佳软件奖和最佳算法奖。
- 香港大学暑期项目 2023年8月
学习精准医疗在香港医疗保健中的应用与团队协作管理经验。
- 基于跨域小样本分类的甲状腺超声图像识别模型 (主持人) 2023年4月 - 2023年6月
指导教师: 中国药科大学药学院 林克江老师、李宣仪老师
负责数据处理、模型训练, 设计基于Docker的容器化部署方案与基于HAProxy的负载均衡系统, 获江苏省大学生生物医学工程创新设计竞赛 (2023) 特等奖及命题组第一名。



开源项目

- AutoDock-Vina-Docker & Rosetta2Go: 为AutoDock Vina、Rosetta及相关工具提供的容器化解决方案 (Docker/Singularity), 获全球多个课题组采用, 总下载量7500余次。
- 基于LXD容器的GPU资源自动调度管理平台: 面向多用户多GPU集群的容器化管理与调度平台, 集成GPU监控、资源隔离与高效调度, 以友好界面降低共享集群的使用与运维成本, 并在课题组长期稳定应用。
- Cookie-Cats: 基于ESP8266 SoC的校园网智能认证终端, 相较传统方案兼容性更高、无需特殊设备支持、BOM成本降低88.76%、适配多所高校, 具备数据加密、OTA升级等增强功能。
- ezcheck: 使用Rust开发的高性能文件完整性校验工具, 入选x-cmd软件仓库, 总下载量8000余次。
- webVPN_mitm: 发现并报告网瑞达WebVPN系统的任意数据流传输漏洞, 获评2023年度校园网络安全卫士。