

个人简历



基本信息



刘鬻齐



13016986120



xjlhq0096@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。