

个人简历

应聘岗位：CADD 研究员/AIDD 算法研发/计算药物研发工程师

基本信息

姓名：陈园杰
年龄：26 岁

电子邮箱：chenyuanjie1763@163.com
联系方式：15703739382



教育背景

2023.09-2026.07

上海药物研究所&河南大学 联合培养

药物设计学 硕士

相关课程：计算机辅助药物设计、药理学、天然药物化学、中药分子鉴定、生物信息学

研究方向：计算机辅助药物设计 (CADD)、人工智能药物研发 (AIDD)、中药计算药理学

2019.09-2023.07

河南中医药大学

中药学 学士

科研经历

项目一：CHIKV 病毒靶点抑制剂虚拟筛选与结构优化 (CADD 完整管线)

- 靶点建模与高通量虚拟筛选：基于 chikv 病毒蛋白三维晶体结构搭建靶点模型，使用 Schrödinger Glide、AutoDock Vina 开展分子对接，定位蛋白底物结合口袋与关键氨基酸残基，完成高通量虚拟筛选获得高活性候选分子
- 动力学模拟与构象分析：搭建 GROMACS 分子动力学模拟体系，完成轨迹聚类。基于模拟蛋白构象进行蛋白-小分子作用模式分析，依据残基相互作用特征提出分子结构优化方案，形成结构计算-相互作用分析-结构优化闭环研发流程
- 自动化计算流程搭建：基于 Linux 集群提交批量模拟任务，编写 Shell 自动化脚本实现轨迹提取、对接等操作，大幅降低人工分析成本

项目二：多源数据融合深度学习中药寒热药性预测模型 (AIDD/GNN 深度学习)

- 标准化数据库构建：清洗 ETCM 等多源数据库，构建包含 4.8 万+化合物标注数据集，完成批量特征工程与分子描述符提取
- 可解释 GCN 模型搭建：基于 PyTorch 搭建带注意力机制的图卷积神经网络分类模型，实现分子结构-中药关联可解释性分析；模型预测准确率 76.19%，高于传统机器学习基线模型

专业技能

- CADD 药物计算工具 (分子模拟/虚拟筛选)：精通 Schrödinger Suite (Glide、Maestro、Prime)、AutoDock Vina 分子对接；熟练 GROMACS 分子动力学模拟；熟练 PyMOL 生物大分子可视化；完整掌握靶点同源建模、结合口袋预测、关键残基相互作用解析、先导化合物结构优化流程；熟练 ChemDraw、Chem3D 分子绘图
- AIDD、AI 蛋白结构预测与深度学习：掌握 AlphaFold3 基础原理与推理参数设置，完成无晶体靶点蛋白结构预测；独立完成 ProteinMPNN 环境部署调试，理解序列设计核心逻辑，可基于靶点口袋实现氨基酸优化、多肽序列反向设计
- 编程、数据与系统：熟练 Python 数据分析 (Pandas、NumPy、Scikit-learn)；熟悉 PyTorch 深度学习框架；熟悉 Linux 操作系统、Shell 脚本编写；具备生物数据库挖掘、分子特征工程能力
- 具备英文文献、软件文档阅读能力 (CET-6)