

孙钰乔

北京航空航天大学 | 生物与医学工程学院 | 本科生
邮箱: 2501632816@qq.com 电话: 15315578131



一. 教育背景

北京航空航天大学 生物与医学工程学院
本科 | 生物医学工程相关方向
2023.09 — 至今

本科前六学期平均成绩: **91.48**

GPA 排名: **专业第 10**

具备生物医学、工程技术、数学建模、人工智能与计算药物设计等交叉学科基础

主要优势课程:

基础物理学 (2): **100**; 数值计算方法: **100**; 线性代数: **99**; 复变函数与积分变换: **99**; 数学物理方程: **98**

二. 专业能力

计算与编程能力:

熟悉 Python 编程, 具备数据整理、自动化爬虫、机器学习建模、深度学习模型调用与科研代码复现能力; 能够根据研究任务完成数据清洗、特征提取、模型训练与结果分析。

生物医药 AI 能力:

参与多肽药物 ADMET 预测与优化、多肽结构-活性关系建模、抗菌肽功能预测与结构 motif 解释等课题, 熟悉治疗性肽数据构建、功能标签整理、序列/结构特征分析与模型验证流程。

分子模拟与结构分析能力:

了解多肽三维结构建模、分子对接与分子动力学模拟流程, 参与使用 HPEPDOCK 进行多肽-蛋白对接, 并开展 MD 模拟及结果分析。

医工交叉基础:

具备较扎实的数学、物理、信号系统、程序设计与生物医学工程基础, 能够在生物医学问题中结合计算方法进行分析与建模。

三. 科研经历

1. 基于深度强化学习的多肽药物 ADMET 智能优化系统

指导老师：卢磊 | 参与时间：大三上至今

多肽药物具有高靶向性和良好生物活性，但在实际研发过程中常受到吸收、分布、代谢、排泄和毒性等 ADMET 性质限制。本项目面向多肽药物早期研发中的“评估-设计-优化”问题，尝试构建基于深度学习与强化学习的多肽 ADMET 智能优化系统，以提升候选多肽的成药性筛选与结构优化效率。

本人工作：

- ①负责从多个公开数据库和相关网站中整理多肽药物及其 ADMET 相关数据，完成数据检索、清洗、标准化与结构化汇总。
- ②根据数据来源特点编写 Python 爬虫脚本，实现部分多肽序列、功能标签及性质数据的自动化获取，提高数据整理效率。
- ③参与后续多肽优化流程，围绕候选多肽的序列改造、性质预测和结构验证开展分析。
- ④使用 HPEPDOCK 等工具进行多肽-蛋白分子对接，辅助评估候选多肽与靶标蛋白的结合情况。
- ⑤参与分子动力学模拟流程，对优化后的多肽结构稳定性和结合行为进行进一步验证。

项目收获：

通过该项目，系统训练了我在生物医药数据整理、自动化数据获取、计算药物设计、分子对接和分子动力学模拟方面的能力，也让我更加熟悉 AI 方法在多肽药物研发中的应用流程。

2. PSAR：以功能为中心的治疗性肽“结构-活性”图谱与精确重编程

指导老师：卢磊 | 参与时间：大三上至今

治疗性肽具有良好的生物活性和结构可设计性，但其功能往往受到序列组成、空间构象、原子级相互作用模式以及副作用风险的共同影响。传统序列相似性分析难以直接解释“结构如何决定功能”，也难以实现面向目标功能的精确重编程。本

项目围绕治疗性肽的结构-活性关系, 尝试构建以功能为中心的 PSAR 分析框架, 实现从多肽序列、结构 motif 到功能活性的可解释建模。

项目内容:

以治疗性肽的功能预测与结构解释为核心, 结合蛋白质语言模型、几何深度学习和可解释模型分析方法, 建立多肽功能与结构特征之间的联系。

利用 ESM 等蛋白质语言模型提取多肽序列表示, 并结合稀疏特征分析方法, 探索与抗菌、溶血等功能相关的序列语义特征。

基于 ScanNet 等结构可解释模型思想, 对多肽三维结构中的残基级和原子级 motif 进行分析, 寻找与特定功能相关的局部空间模式。

围绕抗菌活性、溶血风险等功能标签, 构建结构-活性图谱, 为后续多肽功能优化和副作用规避提供依据。

本人工作:

①参与多肽功能数据与标签体系整理, 关注抗菌、溶血等治疗性肽相关功能标签的定义、筛选和交叉分析。

②参与 ESM 表征、SAE 特征提取和多肽功能相关特征整理, 协助构建面向多肽功能解释的特征表。

③参与 ScanNet 相关模型的复现与结果分析, 理解原子级、残基级结构 motif 的提取逻辑, 并对特定 filter 的高激活结构片段进行统计和解释。

④对抗菌肽结构 motif、中心原子类型、邻域残基组合等结果进行整理, 辅助分析模型学习到的结构-功能规律。

⑤参与候选多肽的结构建模、对接和模拟验证工作, 为功能重编程结果提供结构层面的解释依据。

项目收获:

该项目进一步提升了我对“序列—结构—功能”关系的理解, 使我能够从数据、模型和结构三个层面分析治疗性肽功能机制, 也训练了我将生物学问题转化为计算建模任务的能力。

四. 竞赛与获奖经历

学业与奖学金

冯如书院 2024 年本科生校级学习优秀奖学金一等奖

学院学习优秀奖学金

2024—2025 学年社会实践优秀奖学金二等奖

社会实践二等奖

学科竞赛一等奖

科创竞赛一等奖

学科竞赛与科研竞赛

全国部分地区大学生物理竞赛第 40 届二等奖

北航物理竞赛二等奖

美国大学生数学建模竞赛 H 奖

首都“挑战者”杯“青聚 AI”专项赛二等奖，第一作者

学科竞赛一等奖

科创竞赛一等奖

社会实践与综合荣誉

北京航空航天大学 2024 暑期社会实践优秀团队二等奖

北京航空航天大学 2025 暑期社会实践优秀团队二等奖

2024 年度北京航空航天大学医工交叉学科群优秀个人

2024—2025 学年社会实践优秀奖学金二等奖

自我评价

本人具有扎实的数理基础和生物医学工程交叉背景，平均成绩 **91.48**，专业排名前列；同时具备较好的 **Python** 编程、数据处理、模型复现和科研分析能力。科研方向聚焦于 **AI+生物医药**，尤其关注多肽药物设计、**ADMET** 优化、结构-活性关系建模和分子模拟验证。未来希望在企业研发场景中，将生物医学知识、人工智能方法和工程实践能力结合起来，参与具有实际应用价值的医药研发、智能算法或医工交叉产品开发工作。