

马 威

地址：南京市浦口区文德东路15号 手机：18855488178 邮箱：mawei8178@foxmail.com

擅长于：CADD/AIDD/药物发现一体化平台构建/AI大模型应用/数字化平台建设



教育背景

2014.09—2018.06	安徽理工大学	药学	理学学士
2018.09—2021.06	华东理工大学	药学	药学硕士（AIDD 方向）

实习经历

2019.09—2020.09	北京英飞智药科技有限公司	CADD研究员
-----------------	--------------	---------

实习期间承担项目

2019.09-2019.10	KinomeX 激酶谱神经网络预测模型开发及部署	项目负责人
2019.10-2019.11	CASF 对接程序打分函数评价及多蛋白交叉对接评价	项目负责人
2020.04-2020.09	AI + 虚拟筛选的应用项目研究（MLDDM）— 毕业课题 虚拟筛选结合机器学习模型，产生用于虚拟筛选的机器学习模型，在效果上能达到虚拟筛选等同的效果，速度相对于传统的虚拟筛选提升 120 倍以上 ；	项目负责人/执行人
2020.04-2021.03	GPCR 靶标的同源建模、MD模拟及模型质量验证分析（毕业课题） 针对GPCR 进行同源建模、分子动力学优化构象、模型验证及质量评价、基于结构进行SAR 分析、VS；	项目负责人/执行人

工作经历

2021.07—至今	南京药石科技股份有限公司	AI 人工智能研究员
------------	--------------	------------

工作期间承担项目

主要职责	1.负责AIDD（AI-driven drug discovery）药物研发，包括活性和选择性小分子药物的发现及优化、性质筛选、虚拟筛选、基于片段和化学反应的分子生成； 2.参与计算模拟一站式平台的前端开发，优化用户体验，提高药物研发的计算效率与降低计算工具使用门槛； 3.应用大模型进行项目文档的自动翻译、文献文本数据提取与建库，提升文献分析和数据管理的自动化水平； 4.负责数字化监控管理平台的搭建与应用（如：贵金属催化剂流转周期监控平台） 工作期间参与的具体项目包括但不限于以下：	
2021.07-2021.09	打分函数工具库构建 构建用于虚拟筛选的多套打分函数用于提升虚拟筛选性能（ 相比Schrodinger命中率提升3倍以上 ）；	项目负责人/执行人
2021.09-2021.10	KinomeScan模型性能优化 收集来自ChEMBL、Davis、SARfari、Papyrus、Metz 等六个数据库记录的激酶活性数据； 对收集到的化合物活性数据建立MultiTasks 激酶谱活性预测模型； 模型相比较于先前的AI 模型有较大的预测性能提升；	项目负责人/执行人
2021.10-2021.11	GROMACS 分子动力学模型自动化（Auto_MD）模型开发 对 Gromacs 分子动力学程序进行自动化运行（一键式在线提交）； 满足批量计算分子MD 的需求；	项目负责人/执行人
2021.12-2022.01	多程序一致性筛选方法开发（Cons_Screening） 构建多个对接程序一致性筛选方法（任意对接程序个数）； 自动化实现多个程序一致性排序和结合模式的化合物输出； 提升虚拟筛选的筛选性能，显著降低虚拟筛选的假阳性率；	项目负责人/执行人

2021.12-2022.01	基于已有活性分子 3D 结构的虚拟筛选方法开发 基于已有活性分子的 3D 构象进行虚拟筛选，以实现骨架跃迁的项目需求；	项目负责人/执行人
2022.09-2022.10	自动化FEP 流程开发 (Auto_FEP) 对 FEP 流程进行自动化，降低FEP 计算的门槛； 满足批量化计算小分子的FEP 性质的需求；	项目负责人/执行人
2022.10-2022.11	自动化MMPBSA 流程开发 (Auto_MMPBSA) 对 MMPBSA 流程进行自动化，降低MMPBSA 计算的门槛；	项目负责人/执行人
2022.03-2022.12	一站式先导化合物筛选服务网页搭建 集合多种虚拟筛选方法； 自动化一键式提交小分子-蛋白复合物分子动力学模拟； 一站式选择性化合物筛选模块； 可实现超高通量、多靶标、选择性化合物的精准发现； 已有相关应用案例验证；	项目负责人/执行人
2022.08-2022.10	CDK项目活性和选择性分子发现（一站式筛选平台验证） 发现高活性和选择性 CDK 激酶靶标 Hits； 推荐分子平均命中率：>50% (8/14)； 活性最好的分子达到单nM抑制水平； 针对其他CDK亚型选择性近100倍；	项目负责人/执行人
2023.02-2023.07	高质量激酶活性富集化合物子库构建 基于已开发模型和分子砌块构建与已知激酶活性化合物空间分布相似的高质量子集； 具有活性富集的同时具有潜在优良的理化性质（ADMET）；	项目负责人/执行人
2023.05-2023.07	高质量类FDA化合物子库构建 基于已开发模型和分子砌块构建与FDA批准上市化合物空间分布相似的高质量子集； 具有优异的理化性质和安全性，同时具有潜在疾病靶标活性富集	项目负责人/执行人
2024.03-2024.05	基于AI的视觉识别高通量酶筛选工具开发 基于AI视觉识别技术开发满足超高通量的可替代湿实验检测的酶催化效率检测方法； 相比于湿实验检测 效率提升超5000倍，检测成本降低95% ；	项目负责人
2024.05-2024.10	贵金属生产-回收闭环数据管理系统构建 基于数据分析和网页开发技术构建集团贵金属催化剂生产-回收闭环管理系统； 数据分析 效率提升超3000倍 ，辅助合理制订年度生产预算，降低生产成本；	项目负责人
2024.10-至今	基于AI大模型的专业本地化翻译工具开发 基于大语言模型开发具有化学专业性的中英翻译工具，用于项目报告的自动化翻译和生成	项目负责人
2024.10-至今	计算机辅助化学工艺模拟平台构建与应用 搭建与应用计算机辅助化学工艺模拟计算平台；集成现代计算技术与化学工程知识的先进工具， 旨在为生产研究人员提供设计、分析和优化化学工艺流程的计算模拟工具，降低试错成本；	项目负责人

能力&技能

1. 熟练应用 python 脚本语言/Linux 操作系统/R 语言：编写代码完成文本处理、数据分析绘图、实现程序自动化处理；
2. 熟练应用python及常用框架如tensorflow/pytorch进行机器学习模型训练；
3. 熟练应用各种对接/虚拟筛选/药物设计软件：Schrodinger / Autodock / Vina / rDock / ACNN / DOCK6 / Smina / Glide / LeDock / FRED / Modeller 及对接程序的脚本自动化流程及机器学习打分函数模型；
4. 掌握药物靶标发现的常规套路、方法及常用工具、分子信息学常用网站、蛋白同源建模、虚拟筛选、靶标可药性评估等；
5. 熟练使用分子绘图及可视化软件：VMD/PyMol/ChemDraw/ADTools/Avogadro/Chimera；
6. 熟练使用分子信息学处理软件：Rdkit/openbabel/openeye/oddt/BioPython 等；
7. 熟练使用相关数据分析软件：Origin/Matplotlib/Pandas/Numpy/R 语言绘图等；
8. 熟练使用分子动力学软件GROMACS/AMBER 及结果分析；
9. 熟悉构建GPCR蛋白体系分子动力学模拟体系；
10. 熟练使用FEP 相关程序计算小分子的绝对结合自由能（ABFE）；
11. 数据处理与分析：擅长大规模文献数据处理、数据库管理、数据清洗与可视化；
12. 基于Django/Flask等框架进行网页功能开发；
13. 擅长于活性小分子发现的筛选工具和筛选平台的搭建和应用；
14. 优秀的项目调研和信息收集整理能力/科研论文写作与发表；
15. 良好的：语言交流能力、人际关系处理、英文文献阅读、项目信息收集能力；

获得成果

DL-DockVS (共一) : [Exploration on learning molecular docking with deep learning models](#)

—*Journal of Quantitative Biology*(2023/09)

KinomePro-DL (一作) : [The Development and Application of KinomePro-DL: A Deep Learning Based Online Small Molecule Kinome Selectivity Profiling Prediction Platform](#) (KinomePro-DL预测平台)

—*JCIM*(2024/09)

专 利 (参与) : 一种分子设计和结构优化方法、系统、装置及存储介质

— 2023/12

Cross_Docking(专利) : 多个程序投票一致性筛选算法, 一致性筛选分子并评价结合构象合理性;

—*Preparing for submission*

学业相关: 连续四年获得学业奖学金(本科)、校级优秀毕业生(本科)、连续三年获得学业奖学金(硕士)

其他

自我评价: 假舆马者, 非利足也, 而致千里; 假舟楫者, 非能水也, 而绝江河; 君子生非异也, 善假于物也。

积极上进, 勤奋求实, 不服输, 不放弃。

具备将AI与实际药物研发应用场景结合, 推动技术落地的能力。

乐于AIDD、CADD。

兴趣爱好: 烹饪、乒乓球、羽毛球、骑行、音乐、吉他、游戏、climbing;