附件1

中国地质大学（武汉）第三十六届学生科技论文

报告会参赛项目推荐表

|  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| **项目****负责人****信息** | **姓名** | 黄恩泽 | **性别** | 男 | **学段** | 硕士 |
| **培养单位** | 计算机学院 | **专业** | 电子信息 | **学号** | 1202521684 |
| **联系方式** | 13677200043 | **合作者** | 刘伟豪 | | |
| **指导****老师****信息** | **姓名** | 李辉 | **职称** | 教授 | **联系方式** | 13707171388 |
| **姓名** | 杨鸣 | **职称** | 副教授 | **联系方式** | 15072329329 |
| **参赛类型** | □地球科学类 □环境化学类 □工程技术类☑信息科学类 □人文社科类 | | | | | |
| **参赛题目** | 基于蛋白质口袋超图的靶向分子生成 | | | | | |
| **项目简介** | 本项目针对现有 AI 辅助药物设计中，生成分子与靶点蛋白质结合度低、难以捕捉蛋白质口袋高阶结构关系的问题，提出基于蛋白质口袋超图的靶向分子生成模型（PHy2Mol）。项目先构建蛋白质口袋超图：以氨基酸为节点，提取其类型、二级结构及空间特征作为属性，计算氨基酸中心碳原子欧式距离，将距离＜5Å 的多个氨基酸用超边连接；再通过超图神经网络（HGNN）实现 “节点 - 超边 - 节点” 的特征传播，结合 Set2Set 池化获取蛋白质口袋全局结构特征。同时，以 GPT 为基础构建条件分子生成器，用 SMILES 编码分子特征，通过门控交叉注意力机制融合两类特征，约束分子生成。项目以 ChEMBL 数据集预训练，在 CrossDocked、PDBbind 数据集验证，生成分子的平均对接结合能（Vina Score）、高质量结合能分子占比（High Affinity）等指标优于 LiGAN、PMDM 等模型，计算效率显著提升，为靶向分子生成提供有效方案 | | | | | |
| **本人原**  **创说明** | 本人承诺所呈交的参赛项目是在导师指导下进行的研究工作及取得的研究成果，并首次用于参加校级科技论文报告会。据我查证，除了文中特别加以标注和致谢的地方外，论文（专利）中不包含其他人已经发表或撰写过的研究成果，也不包含教育机构的学位或证书等用过的材料，不存在侵权、抄袭等行为，若由此导致的一切后果均由本人自行承担。此外，项目合作者均已同意本项目参与此次比赛。  作者签名：  年 月 日 | | | | | |
| **指导老师推荐意见** | 同意推荐  签 名：  年 月 日 | | | | | |
| **学院（培养单位）评审结果** | **等奖** 签 章： 年 月 日 | | | | | |

## 注：（1）所有推荐参加校级科技论文报告会（研究生为院级答辩成绩前8%，本科生为院答辩成绩前15%）的项目；授予校级奖项（院级答辩成绩前30%）的项目均须提交此表电子版及签章版至学院（培养单位），单位汇总后统一提交至指定邮箱。

## （2）类型包括地球科学类、环境化学类、工程技术类、信息科学类及人文社科类，请慎重填选，并以此作为会场分类的依据，若某些类别会场项目数量过少则酌情考虑合并。