



黄铭

AI for Science/分子模拟

基本信息

姓名	黄铭
学历	博士
毕业院校	德雷塞尔大学
毕业时间	2022

联系方式

手机	18516068771
邮箱	huang.ming11@163.com
个人网站	styxhuang.git.io
Github	github.com/styxhuang

编程技能

Python
分子模拟
机器学习
C++

技术栈

机器学习	PyTorch, TensorFlow, Scikit-learn, Keras
计算化学	RDKit, OpenBabel, GROMACS, LAMMPS, OpenMM
开发工具	Git, Docker, Linux, Slurm

教育经历

- 德雷塞尔大学 2017-2022
化学工程 博士
- 佛罗里达大学 2013-2015
化学工程 硕士
- 华东理工大学 2009-2013
轻化工程 学士

工作经历

- 开发主管, 创腾科技有限公司, 苏州 10/2022 - 至今
 - 主导开发高通量AI与分子模拟平台"MaxFlow", 集成深度学习与传统分子模拟算法
 - 设计并实现分布式计算框架, 支持分子模拟任务并行执行, 大幅提升计算效率
 - 带领7人研发团队, 建立代码审查、持续集成和自动化测试流程, 显著提升开发效率
 - 负责技术文档体系建设, 建立完整的API文档和使用手册, 促进团队协作和客户使用
 - 设计并实现基于Docker的自动化部署方案, 实现一键部署和环境统一管理
 - 作为技术负责人获得4项发明专利, 项目完成度均达到预期目标
- 实验室助理, 密歇根大学, 安娜堡 01/2015-01/2017
 - 开发创新算法用于预测蛋白质-肽段结合自由能, 发表高水平论文
 - 结合不同尺度的分子动力学模拟, 开发算法用来快速预测柔性聚合物链的塌缩状态
 - 指导2名研究生进行算法开发, 动力学模拟和数据分析工作

AI算法项目

- 基于PRIM法的交联网络结构智能构建算法 (2023/4-2023/6)
 - 设计并实现基于PRIM最小生成树算法的交联网络构建方法
 - 集成到MaxFlow平台中, 实现高通量的交联网络的构建
 - 测试对不同机理的交联网络构建效果, 并使用分子模拟计算验证交联网络的性质
- 基于分子模拟与机器学习的环氧树脂性能预测功能开发(2023/6-2023/12)
 - 构建自动化分子模拟流程, 完成从结构构建到性质分析到模型训练的全流程
 - 通过全原子模型模拟获取其交联度、内聚能密度 (CED)、自由体积比、玻璃化转变温度 (Tg) 及模量等关键性能参数
 - 构建包含54种不同环氧树脂配方的分子动力学 (MD) 模拟数据集
 - 基于MD模拟结果, 采用Pearson相关系数分析各组分对目标性能的影响, 发现固化剂对Tg具有显著相关性 (PCC > 0.5), 为模型输入特征筛选提供理论依据
 - 设计并训练神经网络预测模型, 针对CED、模量、Tg分别构建独立模型, 实现高精度预测, 测试集R²值分别达0.986、0.981、0.835
- 将多种分子性质预测模型集成到MaXFlow平台 (2024/3 - 2024/9)
 - 将面向药物小分子的ADMET预测模型集成至MaXFlow平台
 - 设计并实现模型的API接口, 支持与MaXFlow平台的无缝对接以及高通量的计算
 - 将利用图卷积神经网络预测晶体物性模型集成至MaXFlow平台
 - 将利用图卷积神经网络预测聚合物机械性质模型集成至MaXFlow平台
- MaxFlow多模态分子数据库设计与构建 (2024/10-至今)
 - 主导设计MaxFlow平台的核心数据库架构, 支持自动收集计算过程中产生的分子结构、性质、模拟轨迹
 - 参与开发标准化数据处理流程, 并设计数据格式, 确保数据一致性和可追溯性, 支撑下游AI模型训练

计算化学项目

- MaxFlow-MD高通量分子动力学模拟平台建设项目 (2022/1-至今)

- MaxFlow-伞型采样高通量模拟计算项目 (2025/4-2025/8)
- MaxFlow-ATM高通量自由能计算项目 (2024/6-2024/12)
- MaxFlow-FEP高通量自由能计算项目 (2023/10-2023/12)
- 研究不同因素(反应比, 温度和拉伸速率)对乙烯基酯/苯乙烯树脂机械性能的影响 (指导教授: Cameron Abrams)
- 研究时间-温度叠加原理在乙烯基酯/苯乙烯树脂热机械性能的预测中的应用 (指导教授: Cameron Abrams)
- 研究MHC II类等位基因的肽结合亲和力的准确预测 (指导教授: Ronald Larson)
- 预测自吸引半柔性聚合物链的塌缩状态 (指导教授: Ronald Larson)
- 预测微通道中液滴/细胞的横向迁移行为 (指导教授: Ronald Larson)

🏆 发表论文

- [M. Huang](#), C. Abrams, HTPolyNet: 基于GROMACS的网络聚合物分子模拟通用聚合算法, SoftwareX 21, 101303
- [M. Huang](#), N. Alvarez, G. Palmese, C. Abrams, 使用分子动力学模拟和时间-温度叠加原理研究网络拓扑对乙烯基酯/苯乙烯热固性聚合物材料性能的影响, Computational Materials Science 207, 111264
- [M. Huang](#), C. Abrams, "反应活性比对乙烯基酯/苯乙烯热固性树脂中网络拓扑和热机械性能的影响: 分子动力学模拟", Macromolecular Theory and Simulations 28 (6), 1900030
- [M. Huang](#), C. Abrams, 使用全原子分子模拟研究乙烯基酯热固性树脂中相对反应性、网络拓扑和热机械性能的相互关系, 2019 AIChE年会
- [M. Huang](#), W. Huang, F. Wen and R.G. Larson, "使用WHAM分析方法的分子动力学估计肽与MHC II类分子之间的结合自由能", Journal of Computational Chemistry 38 (23), 2007-2019
- W. Huang, [M. Huang](#), Q. Lei, and R.G. Larson. "预测自吸引半柔性聚合物塌缩状态的简单分析模型." Polymers 8, no. 7 (2016): 264.
- R.L. Marson, Y. Huang, [M. Huang](#), T. Fu, R.G. Larson, "使用耗散粒子动力学模拟研究泊肃叶流中液滴的惯性-毛细横流漂移", Soft matter 14 (12), 2267-2280

🏆 发明专利

- 黄铭,2020,交联聚合物空间网状结构模拟生成方法和系统,CN114664390A
- 黄铭,2023,基于分子模拟的交联网状结构模型优化方法和装置,CN116072235A
- 黄铭,2023,基于模拟退火法的交联体系分子模型构建方法和装置,CN116206695A
- 司马鹏, 黄铭,2023,基于prim方法构建单反应交联体的方法和装置,CN116130014A

🏆 资质总结

- 扎实的科学计算背景, 在不同领域(生命, 材料, 流体)有丰富的算法开发经验
- 熟练掌握主流机器学习, 深度学习框架, 在分子性质预测方面有丰富的经验
- 具备数据集构建和设计经验, 主导构建MaXFlow平台的多维度数据集
- 具有从数据处理、特征工程到模型部署的全栈AI开发能力
- 在分子动力学和蛋白质结构预测领域有多篇高水平论文发表
- 熟悉docker容器技术, 熟悉Slurm集群管理
- 良好的编程习惯, 具有大型软件和高通量计算平台的开发经验
- 优秀的团队协作能力, 有带领研发团队完成复杂项目的经验
- 擅长技术文档编写和知识分享, 注重开发流程规范化和工程最佳实践