



赵伟任

Weiren Zhao

- 📅 1999年8月26日
- 📍 日本京都府宇治市
- ☎ (+81) 070-8900-8031
- ☎ (+86) 139-8033-9144
- ✉ chinazwr@outlook.com
- 🔗 ZWR0
- 🌐 当前课题组

核心能力

- ✓ AI for Science
- ✓ 化学信息学
- ✓ 生物信息学
- ✓ 数据分析
- ✓ 深度学习

教育背景

京都大学 (Kyoto Univ.)

2025 – 至今

博士在读 | 信息学

机器学习与代谢模型融合

大连理工大学

2022 – 2025

工学硕士 | 化学工程

GPA: 3.29 / 4.0

青岛科技大学

2018 – 2022

理学学士 | 应用化学

GPA: 3.10 / 4.0

语言能力

- 中文 ●●●●●
- 英语 ●●●○
- 日语 ●●○○○

个人总结

致力于在机器学习与化学和生物数据的交汇处构建桥梁。拥有深厚的化学背景与扎实的深度学习开发经验，擅长运用 PyTorch、GNNs 以及设计 Attention 模型解决复杂的生化系统建模问题。

科研经历

机器学习与代谢模型的融合研究

2025 – 至今

博士课题 / 京都大学 (研究室: Tatsuya Akutsu)

- **InterKcat 模型开发**: 利用 PyTorch 优化先进神经网络架构, 实现酶催化活性的高精度预测。
- **高性能计算**: 基于 CUDA 进行 GPU 并行加速训练蛋白语言模型, 处理大规模生化数据集的训练任务。
- **跨学科解码**: 结合线性代数与统计学工具, 解析复杂生物数据并构建稳健的预测体系。

基于机器学习的催化剂设计与反应预测

2022 – 2025

硕士课题 / 大连理工大学 (导师: Yang Li)

- 计算化学研究
- 溶剂筛选系统
- 自动化数据挖掘

学术成果

- [1] Y. Wang, **W. Zhao**, J. Wang, et al. "Beyond Rapid Nucleation: Unveiling the Role of Solvent-Precursor Interactions in Antisolvent-Free Perovskite Fabrication." *Energy Environ. Sci.*, 2026, DOI: 10.1039/D6EE00170J.
- [2] **W. R. Zhao**, S. Wang, Y. Li. "Designing Buchwald-Hartwig Reaction Graph for Yield Prediction." *The Journal of Organic Chemistry*, 90(37), 12975-12983.
- [3] S. Wang, **W. R. Zhao**, M. Zhou, et al. "Machine Learning for Stability Enhancement in Perovskite Solar Cells: A Pathway to Commercial Viability." *Progress in Photovoltaics: Research and Applications*.
- [4] S. Wang, **W. R. Zhao**, Y. Liu, et al. "Multi-modal Homogeneous Chemical Reaction Performance Prediction with Graph and Chemical Language Information." *Chinese Journal of Chemistry*, 43(11), 1230-1238.
- [5] S. Wang, Y. Liu, **W. R. Zhao**, et al. "Optimizing Model Learning Performance on a Challenging Heck Reaction Yield Data Set." *The Journal of Organic Chemistry*, 90(36), 12768-12777.
- [6] **W. R. Zhao**, Y. Li. "Predicting the Yield of Pd-Catalyzed Buchwald-Hartwig Amination Using Machine Learning with Extended Molecular Fingerprints and Selected Physical Parameters." *ChemistrySelect*, 9(33), e202402529.

专业技能

编程与工具

- Python ●●●●●
- Linux ●●●●●
- R ●●●○

领域知识

- 深度学习 ●●●●●
- 数据统计分析 ●●●●●
- 蛋白语言模型训练 ●●●●○