# 朱河勤 博士

zhuheqin1@gmail.com +86 153 5141 6199
heqin-zhu.github.io heqin-zhu 0000-0001-9469-950X Google Scholar

## 研究方向

我的研究聚焦于 AI for Biology，通过开发多模态基础模型和自我改进的人工智能系统，理解生物分子的结构、功能及相互作用，并推动分子设计与人工智能驱动的药物发现，具体包括以下方向：

- **多模态生物基础模型**：结构引导的 RNA 基础模型：structRFM [R8]（Nature）。
- **分子设计与药物发现**：RNA 和 DNA 适配体设计：NACraft [R10]。
- **分子相互作用与评分**：RNA–化合物相互作用预测与结合位点定位：ReTIF [R11]（bioRxiv）。
- **结构与功能预测**：RNA 二级结构预测：BPfold [R6]（Nature Communications）、NCfold [R9]（ICLR 2026）；IRES 识别：IRESeek [R7]。
- **递归自我改进**：面向异构任务持续研究的自我进化科研智能体：ADMET-EvO [C9]（arXiv）。

此前，我主要研究面向**医学图像分析**的通用模型：领域适应：GU2Net [R1, R2]（MICCAI 2021, BMEF）、DATR [R4]；小样本学习：UOD [R5]（MICCAI 2023）。

## 教育工作经历

**香港中文大学（CUHK）**
博士后，计算机科学与工程学系（CSE） 11/2026 – 现在
- 合作导师：王平安教授（Prof. Pheng Ann Heng）

**中国科学技术大学（USTC）**
博士，生物医学工程 09/2023 – 06/2026
- 导师：周少华教授（Prof. Shaohua Kevin Zhou）

**中国科学院计算技术研究所（ICT）与中国科学院大学（UCAS）**
硕士，计算机科学与技术 09/2020 – 06/2023
- 导师：周少华教授（Prof. Shaohua Kevin Zhou）

**中国科学技术大学（USTC）**
学士，计算机科学与技术 09/2016 – 06/2020
- 华夏计算机科技英才班

## Selected Publications

R=Representative, C=Collaborative

# denotes co-first author and * denotes co-corresponding author. For full list, please refer to Google Scholar.

**Representative Papers**

**[R11]** Ao Chang#, **Heqin Zhu**#, Haobin Chen, Chenxi Wang, Xin Wang, Xiaoyu Zeng, Yilin Ding, Peng Xiong*, and S. Kevin Zhou*. ”ReTIF: Granularity-Aware Multitask Interaction Routing for RNA-Compound Interaction Prediction and Binding-Site Localization.” bioRxiv (2026). (Preprint). [bioRxiv]

**[R10]** **Heqin Zhu**, Jiaqi Wang, Weibo Zhao, YuZhi Xu, Huang Su, Jianmin Wang, Qinghan Wang, Yuntao Yu, Ziyi You, Gang Du, Pheng Ann Heng*, Liqin Zhang*, and Odin Zhang*. ”NACraft: Programmatic nucleic-acid aptamer design via all-atom structure-model feedback” (Preprint). [bioRxiv; Code]

**[R9]** **Heqin Zhu**#, Ruifeng Li#, Ao Chang, Mingqian Li, Hongyang Chen*, Peng Xiong*, and S. Kevin Zhou*. ”Toward Accurate RNA Non-Canonical Structure Prediction: The NC-Bench Benchmark and the NCfold Framework.” (ICLR 2026). [bioRxiv; Code]

**[R8]** **Heqin Zhu**, Ruifeng Li, Ao Chang, Haobin Chen, Feng Zhang, Fenghe Tang, Tong Ye, Xin Li, Yunjie Gu, Peng Xiong*, and S. Kevin Zhou*. ”An open structure-guided RNA foundation model for generalizable prediction.” (Nature). [Nature; bioRxiv; Code]

**[R7]** Feng Zhang#, **Heqin Zhu**#, Jiayin Gao, Jie Hu, Ke Chen, Shaohua Kevin Zhou*, and Peng Xiong*. ”IRESeek: structure-informed deep learning method for accurate identification of internal ribosome entry sites in circular RNAs.” NAR Genomics and Bioinformatics 7, no. 4 (2025): lqaf210. (NAR Genomics and Bioinformatics). [Paper;Code]

**[R6]** **Heqin Zhu**, Fenghe Tang, Quan Quan, Ke Chen, Peng Xiong*, and S. Kevin Zhou*. "Deep generalizable prediction of RNA secondary structure via base pair motif energy." Nature Communications 16, (2025): 5856. (Nat. Commun., 2025). [Paper; Code]

**[R5]** **Heqin Zhu**, Quan Quan, Qingsong Yao, Zaiyi Liu, and S. Kevin Zhou. "Uod: Universal one-shot detection of anatomical landmarks." In International Conference on Medical Image Computing and Computer-Assisted Intervention, pp. 24-34. Cham: Springer Nature Switzerland, 2023. (MICCAI 2023). [Paper; Code]

**[R4]** **Heqin Zhu**, Qingsong Yao, and S. Kevin Zhou. "Datr: Domain-adaptive transformer for multi-domain landmark detection." arxiv preprint arxiv:2203.06433 (2022). (Preprint). [Paper; Code]

**[R3]** **Heqin Zhu**, Xu Sun, Yuexiang Li, Kai Ma, S. Kevin Zhou*, and Yefeng Zheng*. "DFTR: Depth-supervised fusion transformer for salient object detection." arxiv preprint arxiv:2203.06429 (2022). (Preprint). [Paper; Code]

**[R2]** **Heqin Zhu**, Qingsong Yao, Li Xiao, and S. Kevin Zhou. "Learning to Localize Cross-Anatomy Landmarks in X-Ray Images with a Universal Model." BME Frontiers 2022 (2022): 9765095. (BMEF 2022). [Paper; Code]

**[R1]** **Heqin Zhu**, Qingsong Yao, Li xiao, and S. Kevin Zhou. "You only learn once: Universal anatomical landmark detection." In Medical Image Computing and Computer Assisted Intervention, pp. 85-95. Springer International Publishing, 2021. (MICCAI 2021). [Paper; Code]

**Collaborative Papers**

**[C9]** Yiling Zhou#, Yilin Wang#, Jianmin Wang, **Heqin Zhu**, Zirui Wang, Chang-yu Hiesh, Kejun Ying, Jiaqi Wang*, Yuzhi Xu*, Tingjun Hou*, and Odin Zhang*. "ADMET-EvO: a self-evolving scientific agent for sustained research across heterogeneous tasks." arXiv preprint arXiv:2609.10121 (2026). (Preprint). [Paper]

**[C8]** Fenghe Tang, Chengqi Dong, Wenxin Ma, Zikang Xu, **Heqin Zhu**, Zihang Jiang, Rongsheng Wang, Yuhao Wang, Chenxu Wu, and Shaohua Kevin Zhou. "U-Bench: A Comprehensive Understanding of U-Net through 100-Variant Benchmarking." In Advances in Neural Information Processing Systems (NeurIPS), 2026. (NeurIPS 2026). [Paper]

**[C7]** Quan Quan#, Qingsong Yao#, **Heqin Zhu**, and S. Kevin Zhou. "IGU-Aug: Information-guided unsupervised augmentation and pixel-wise contrastive learning for medical image analysis." IEEE Transactions on Medical Imaging (2024). (TMI 2024).

**[C6]** Quan Quan#, Qingsong Yao#, **Heqin Zhu**, Qiyuan Wang, and S. Kevin Zhou. "Which images to label for few-shot medical image analysis?." Medical Image Analysis 96 (2024): 103200. (MIA 2024).

**[C5]** Huang Zhen#, Han Li#, Shitong Shao, **Heqin Zhu**, Huijie Hu, Zhiwei Cheng, Jianji Wang, and S. Kevin Zhou. "PELE scores: pelvic X-ray landmark detection with pelvis extraction and enhancement." International Journal of Computer Assisted Radiology and Surgery 19, no. 5 (2024): 939-950. (IJCARS 2024).

**[C4]** Xinyi Wang, Zikang Xu, **Heqin Zhu**, Qingsong Yao, Yiyong Sun, and S. Kevin Zhou. "SIX-Net: Spatial-Context Information miX-up for Electrode Landmark Detection." In International Conference on Medical Image Computing and Computer-Assisted Intervention, pp. 338-348. Cham: Springer Nature Switzerland, 2024. (MICCAI 2024).

**[C3]** Fenghe Tang, Ronghao Xu, Qingsong Yao, Xueming Fu, Quan Quan, **Heqin Zhu**, Zaiyi Liu, and S. Kevin Zhou. "Hyspark: Hybrid sparse masking for large scale medical image pre-training." In International Conference on Medical Image Computing and Computer-Assisted Intervention, pp. 330-340. Cham: Springer Nature Switzerland, 2024. (MICCAI 2024).

**[C2]** Pengbo Liu, Hu Han, Yuanqi Du, **Heqin Zhu**, Yinhao Li, Feng Gu et al. "Deep learning to segment pelvic bones: large-scale CT datasets and baseline models." International Journal of Computer Assisted Radiology and Surgery 16 (2021): 749-756. (IJCARS 2021).

**[C1]** Yuanyuan Lyu, Haofu Liao, **Heqin Zhu**, and S. Kevin Zhou. "A 3 DSegNet: anatomy-aware artifact disentanglement and segmentation network for unpaired segmentation, artifact reduction, and modality translation." In International Conference on Information Processing in Medical Imaging, pp. 360-372. Cham: Springer International Publishing, 2021. (IPMI 2021).

## 代表性研究项目

**NACraft：结构引导的核酸适配体设计** [R10] 08/2026

- **开发负责人**；构建免训练框架，通过结构模型反馈优化与 NA-MPNN 序列精修，实现 RNA/DNA 适配体的从头设计、相似性引导设计和靶标选择性设计。
- 在五个蛋白质靶标上取得 **0.63–0.88** 的 AF3 ipTM 最高值；**69.44%** 的成对候选序列更倾向于 EGFR 而非 HER2；在 **10/11** 个 NA-12 靶标和 **17/20** 种治疗相关靶标与序列长度组合上优于 ODesign。

**structRFM：结构引导的 RNA 基础模型** [R8] Nature

- **第一作者**；主导数据构建、模型开发、评测与开源发布，基于 **2100 万对 RNA 序列–结构数据**，结合多源结构注释（MUSES）与结构引导掩码语言建模（SgMLM）开展预训练。
- 在多个 RNA 结构与功能基准测试中取得最优结果，并在零样本同源性分类任务中排名**前四**。

**BPfold：融合热力学先验的 RNA 结构预测** [R6] Nature Communications 07/2025

- **第一作者**；主导方法研发与可复现软件发布，融合碱基对基序能量先验、碱基对注意力与物理约束结构优化。
- 在 bpRNA-TS0 上相较 SPOT-RNA 将 F1 和 INF 提升**约 5%**；在 Rfam12.3–14.10 中**来自训练中未见家族的 10,791 条 RNA** 上取得最佳的 **F1=0.689**。

## 开源软件与资源

**NACraft** GitHub — RNA/DNA 适配体从头设计、相似性引导设计与靶标选择性设计。

**structRFM** GitHub — 用于 RNA 结构与功能预测的开放基础模型。

**BPfold** GitHub — 融合热力学先验的可泛化 RNA 二级结构预测工具。

**中国科大课程资源** GitHub — **负责人及维护者**（2019 – 至今）；整理课程笔记、试题、代码及学习资料；16.2K GitHub stars。

## 荣誉与奖励

**中国科学院院长优秀奖**，中国科学院 2026

**安徽省优秀毕业生（博士，2026 届）**，安徽省 2026

优秀毕业生（博士，2026 届），中国科学技术大学 2026

优秀学术报告奖（10 人中第 1 名），中国科学技术大学第七届工程类研究生学术论坛 2026

**博士研究生国家奖学金**，中华人民共和国教育部 2025

口头报告二等奖，第三届全国生物分子结构预测与模拟学术会议 2025

苏州工业园区奖学金，中国科学技术大学 2025

三好学生，中国科学院大学、中国科学院计算技术研究所 2023

研究生学业奖学金，中国科学院大学、中国科学院计算技术研究所及中国科学技术大学 2020 – 2025

优秀学生奖，中国科学技术大学 2018 – 2019

化研所英才奖，中国科学技术大学 2017

## 实习经历

**腾讯 JARVIS 实验室**，研究实习生 中国深圳 07/2021 – 11/2021

- 开发了用于显著目标检测的深度监督特征融合 Transformer [R3]。

## 学术报告与交流

**默沙东研发中国创新合作中心（MCICC）** 06/15/2026 线上

用于 RNA 建模与基础模型的多模态人工智能 PDF

**中国科学技术大学第七届工程类研究生学术论坛暨“德创 • 精尖创新”博士生学术论坛** 06/13/2026 中国合肥

用于结构与功能预测的结构引导 RNA 基础模型 PDF
优秀学术报告奖（10 人中第 1 名）

**中国科学技术大学《数字医疗技术与应用》课程** 12/2025
中国苏州

用于 RNA 建模与基础模型的多模态人工智能 PDF

**第三届全国生物分子结构预测与模拟学术会议** 05/2025
中国长春

基于碱基对基序能量的可泛化 RNA 二级结构深度预测 PDF
优秀学术报告奖（12 人中第 2 名）

## 教学与学生指导

**教学经历**

**助教**：《生物分子结构建模》，中国科学技术大学 2024
**助教**：《电子信息开放实践》，中国科学技术大学 2023

**学生指导**

**Ao Chang**（博士生）：基于 Mamba 的 RNA 语言模型预训练 2025 – 2026
**Haobin Chen**（硕士生）：lncRNA 文献知识检索智能体 2025 – 2026
**Duofan Tu**（硕士生）：临床诊断医疗智能体 2024 – 2026
**Feng Zhang**（硕士生）：环状 RNA 的 IRES 识别（IRESeek） 2024 – 2026
**Xiaoqian Zhou**（硕士生）：混合注意力医学图像标志点检测 2022 – 2024
**Zhen Huang**（硕士生）：骨盆 X 射线标志点检测（PELE scores） 2021 – 2023

## 学术服务

- **学术审稿人**：NeurIPS、ICLR、MICCAI、TCSVT
- **志愿服务**
  - 医学增强现实暑期学校（苏州，2024）
  - 独墅湖医学影像计算研讨会（苏州，2023）

## 技术技能

**研究方法**：基础模型、多模态学习、大语言模型、扩散模型
**编程与工具**：Python、PyTorch、C++、Git、LaTeX、Matplotlib

## 推荐人

**周少华（Shaohua Kevin Zhou）** — 博士导师 skevinzhou@ustc.edu.cn
中国科学技术大学，教授

**熊鹏（Peng Xiong）** — 博士联合导师 xiongxp@ustc.edu.cn
中国科学技术大学，教授

**王平安（Pheng Ann Heng）** — 博士后合作导师 pheng@cse.cuhk.edu.hk
香港中文大学，教授

**申万祥（Wanxiang Shen）** — 合作者 shenwx25@zju.edu.cn
浙江大学，教授