

# 徐龙

个人邮箱: [xulong0826@outlook.com](mailto:xulong0826@outlook.com)

个人主页: [xulong0826.github.io](https://xulong0826.github.io)



## 教育背景

硕士, 南宁师范大学, 计算机科学与技术

2023 – 2026

导师: 彭昱忠教授

本科, 南宁师范大学, 软件工程

2019 – 2023

## 研究兴趣

- 基于结构的药物设计与三维分子生成
- 基于深度学习的分子性质预测、分子对接与构象生成、数据分析

## 技术技能

- CET-6(449), 网络规划设计师 (软考高级), 基于 web 的药物相互作用可视化分析平台 (软件著作)
- 熟练掌握 Python 及 PyTorch, 掌握扩散模型、Transformer、图神经网络等主流机器学习方法
- 熟悉 RDKit、OpenBabel、PyMOL 等分子建模与分析工具

## 已完成项目-第一作者

- MSCoD: 融合多尺度信息瓶颈和协同注意力的增强贝叶斯更新框架, 用于基于结构的药物设计 ([预印版](#)|[代码](#))
  - 开发了多尺度信息瓶颈 (MSIB) 模块, 实现了多抽象层次的语义压缩, 从而高效地提取层次化特征。
  - 提出了多头协同注意力 (MHCA) 机制, 采用不对称的蛋白-配体注意力方式, 能够捕获多样的相互作用类型, 并解决蛋白与配体之间维度不一致的问题。
- RUMC: 基于奖励引导与不确定性感知的蒙特卡洛采样方法, 用于从头分子设计 ([第七届国际计算智能最新进展会议 NTCI2025 EI 会议](#)|[代码](#))
  - 采用奖励引导的采样机制, 并引入去重的经验回放缓冲区, 以优先生成独特且高奖励的分子, 同时通过稳健的奖励归一化实现稳定训练。
  - 利用基于 Monte Carlo Dropout 和上置信界 (UCB) 准则的不确定性感知探索策略, 在分子生成过程中平衡探索与利用。
- DMMRL: 基于变分自编码器的多模态分子表示解耦学习方法, 用于分子性质预测 ([第十四届全国生物信息学与系统生物学学术大会摘要集 CCBSB2025 转投推荐期刊中](#)|[代码](#))
  - 利用变分自编码器将分子表征解耦为共享 (结构相关) 和私有 (模态特异性) 潜在空间, 从而提升了可解释性和预测性能。所提出的变分解耦机制能够有效提取对性质预测最有用的特征, 同时通过正交性和对齐正则化促进统计独立性和跨模态一致性。

## 在研工作

- 全原子的肽分子设计与生成
  - 结构自适应特征融合机制, 针对蛋白结合口袋的空间分布、形状复杂度和化学环境的异质性, 提升模型对复杂界面的泛化能力和精细建模能力

## 专业活动

- 参与学术论坛, 如第十四届全国生物信息学与系统生物学学术大会 (CCBSB2025)、第二十届生物信息学研究与应用国际研讨会 (ISBRA2024) 等