

徐龙

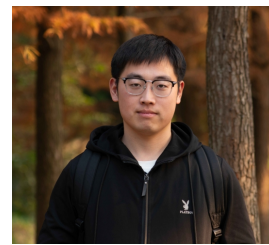
出生年月：2001 年 8 月

籍贯：河南省南阳市

联系电话：+86 191-9591-5485

个人邮箱：xulong0826@outlook.com

个人主页：xulong0826.github.io



教育背景

硕士，南宁师范大学，计算机科学与技术

2023.09 – 2026.06

导师：彭昱忠教授 研究方向：人工智能辅助药物设计 AIDD

本科，南宁师范大学，软件工程

2019.09 – 2023.06

研究兴趣

- 基于靶标结构的药物设计 SBDD，从头分子生成，多模态的分子表征学习

个人技能

- CET-6(449)，网络规划设计师（软考高级），校级三等学业奖学金（2024、2025）
- 基于 web 的药物相互作用可视化分析平台（软件著作权）
- 熟练掌握 Python、PyTorch 和主流深度学习方法（如图神经网络、变分自编码器和扩散模型）
- 熟悉 RDKit、OpenBabel 和 PyMOL 等分子建模与分析工具

已完成工作-第一作者

- *MCoD: An Enhanced Bayesian Updating Framework with Multi-Scale Information Bottleneck and Cooperative Attention for Structure-Based Drug Design** ([预印版](#)|[代码](#))

蛋白质-配体相互作用捕捉：1) 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。2) 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: Reward-Guided Monte Carlo Sampling with Uncertainty for De Novo Molecular Generation** (第七届国际计算智能最新进展会议 NTCI2025 EI 会议 |[代码](#))

1) 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。2) 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。

- *EFGGen: An end-to-end Expert-Guided Fragment-level Framework for De Novo Molecular Generation** (基于 RUMC 改进，写论文中 |[代码](#))

1) 片段级双循环优化：外层维护奖励池（Reward Buffer），优先保留独特且高价值样本以构建成功样本记忆库；内层训练轻量专家网络（Expert Network），基于奖励池样本快速自适应学习并对新生成片段进行初筛，形成奖励池 ↔ 专家的正反馈循环。2) 专家混合表征与快速筛选：专家以化学指纹与生成器池化表征的混合向量为输入，兼顾经验规则与可学习表征，作为低成本代理在昂贵性质评估前过滤候选，从而提高采样效率并倾向生成类药性分子。

- *DMMRL: Disentangled Multi-Modal Representation Learning via Variational Autoencoders for Molecular Property Prediction** (第十四届全国生物信息学与系统生物学学术大会墙报交流 CCBSB2025 转投期刊中 |[代码](#))

1) 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。

* 为硕士课题：基于深度学习的从头分子设计

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墙报交流（CCBSB2025）、第二十届生物信息学研究与应用国际研讨会分会场汇报（ISBRA2024）等