

## 课题组

机器学习与推理(LARS)课题组隶属于<u>清华大学电子工程系</u>,依托<u>清华电子系城市科学与计算研究中心</u>, 开展机器学习(特别是知识引导的图学习方法)方向的研究工作,致力从理论和方法层面解决生物医药网 络、城市网络等应用中学习、推理、仿真和预测等关键科学问题。

# 合作导师

姚权铭(个人主页: <a href="https://lars-group.github.io/index.html">https://lars-group.github.io/index.html</a>) 目前是清华大学电子工程系助理教授,国家高层次青年人才计划入选者。于香港科技大学计算机系取得博士学位,后于第四范式担任首席研究员,创建和领导机器学习研究团队。主要研究方向为机器学习与AI4Science,特别是知识引导的图学习方法。发表顶级论文80余篇,包括Nature Computational Science / Nature Communication / JMLR / IEEE TPAMI / ICML / NeurIPS / ICLR等,总被引近万次。其中抗噪标签算法"Co-teaching"是鲁棒学习领域的里程碑;小样本学习综述是ACM Computing Surveys近五年来最高被引论文;自动化图学习系列方法(TPAMI 2023等)蝉联Open Graph Benchmark榜单第一名;基于医药网络解决新药物互反应的工作刊载于Nature子刊。

长期担任机器学习会议ICML、NeurIPS和ICLR领域主席,旗舰期刊Neural Network和Machine Learning编委。 荣获国内外诸多知名奖项,包括国际神经网络学会早期成就奖、香港科学会优秀青年科学家、吴文俊人工智能学会优秀青年奖、Google全球博士奖等,同时入选全球华人AI青年学者榜(机器学习方向25认)、福布斯30Under30精英榜与全球Top 2%科学家。最后,受邀在AAAI 2024大会上做"结构化数据的类脑学习方法"的早期成就报告。

### 近期代表性工作

- [1]. **Quanming Yao**, Zhenqian Shen, Yaqing Wang\*, Dejing Dou. Property-Aware Relation Networks for Few-Shot Molecular Property Prediction. IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence (**TPAMI**). 2024
- [2]. Haiquan Qiu, Yongqi Zhang, Yong Li, **Quanming Yao\***. Understanding Expressivity of GNN in Rule Learning. International Conference on Learning Representations (**ICLR**). 2024
- [3]. Yongqi Zhang, **Quanming Yao\***, Ling Yue, Xian Wu, Ziheng Zhang, Zhenxi Lin, Yefeng Zheng. Emerging Drug Interaction Prediction Enabled by Flow-based Graph Neural Network with Biomedical Network. **Nature Computational Science**. 2023.
- [4]. Yongqi Zhang, **Quanming Yao\***, James T. Kwok. Bilinear Scoring Function Search for Knowledge Graph Learning. IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence (**TPAMI**). 2023.
- [5]. **Quanming Yao**, Yaqing Wang, Bo Han, James T. Kwok. Efficient Low-rank Tensor Learning with Nonconvex Regularization. Journal of Machine Learning Research (**JMLR**). 2022.
- [6]. Huan Zhao, Quanming Yao, Weiwei Tu. Search to aggregate neighborhood for graph neural network. International Conference on Data Engineering (ICDE). 2021
- [7]. Yaqing Wang, **Quanming Yao\***, James T. Kwok, Lionel Ni. Generalizing from a Few Examples: A Survey on Few-Shot Learning. ACM computing surveys (**CSUR**). 2020.

#### 研究方向

主要研究方向是知识引导的图学习方法,面向图学习中的挑战和难题,尝试寻找突破口。

• 挑战和难题:机器学习经历了从手动特征、浅层模型到深度网络、达模型这一发展过程,严重依赖暴力 扩大数据和模型规模以追求学习效果,由于图数据的离散性和图的交互特征,这一研究路径并不适合图 学习。如何突破现有路径依赖,实现下一代图学习技术?



- 突破口:知识引导,挖掘图数据中蕴含的**知识(符号逻辑**和**物理规律)**,将问题由复杂的数据空间映射 到规整的知识空间,进而通过知识的组合泛化实现高效用学习。
- 研究路线:
  - 以知识的归纳性概括模型架构,设计异质图学习建模搜索方法,改善模型迁移能力;
  - 以知识的延展性转换参数空间,设计小样本分子性质预测算法,提升样本利用效率;
  - 以知识的逻辑性诠释预测结果,设计基于逻辑子图的解释性框架,揭示模型推理过程。
- 相关技术:
  - Automated Machine Learning, Graph Neural Network, Knowledge Graph, Meta Learning, Few-shot Learning, In-context Learning, Neural Architecture Search

## 招生信息

- 全日制博士
  - 学习周期: 4-5年
  - 名额限制:国内直博或普博名额1位/年,留学生名额1位/年
- 全日制硕士
  - 学习周期: 2年
  - 名额限制:
    - ▶ 工程硕士名额 1位/年, 留学生名额1位/年
    - ▶ Tsinghua-JHU双硕士名额1位/年(具体参考链接): JHU-BME, Tsinghua

### 招聘岗位

需求如下(和清华大学签订工作合同)。

- 博士后1位(具体请参考链接): https://www.ee.tsinghua.edu.cn/rczp/bshzp.htm
  - 符合清华大学博士后申请条件;
  - 对前沿技术探索有浓厚的兴趣,有很强的分析问题、解决问题能力,可以独立完成科研工作;
  - 优秀的自驱力(self-motivation)和毅力;
  - 具备良好的学术交流能力,在相关领域发表过高水平学术论文经验;
  - 对研究工作充满热情,具备良好的团队合作精神,协助指导课题组成员。
- 研究工程师1~2位
  - 本科及以上学历, 计算机、数学、电子信息大类专业背景:
  - 一年以上机器学习研发经验,具备良好的编程能力,熟练使用至少一种机器学习框架 (TensorFlow、PyTorch等);
  - 对研究工作充满热情,具备良好的团队合作精神;
  - 有论文发表者优先。



# 申请方式

请申请人将个人简历(含教育背景、论文列表、实习经历等)、成绩单(本科生)、代表性论文或项目发送 到邮箱(邮件标题请标明"应聘岗位+姓名"): gyaoaa@mail.tsinghua.edu.cn

如果通过简历初筛,会安排面试,面试需要准备PPT包括:

- 个人背景与申请动机
- 选择 1-2 个研究经历/成果详细分析,体现自己的逻辑性和创新性
- 结合自己的优劣势谈谈自己对学习和工作的规划和想法
- 请结合课题组背景准备,整体面试1小时,PPT 演讲时间大约30min

## 常见问题

- 1. 我已经本科/硕士毕业了,想申请本组博士硕士?
  - a) 本科生需要有保送研究生名额或参加考研,硕士生可以考虑申请普博(每年9月参加系里面试)
- 2. 我想申请境外顶级学府,请问研究工程师岗位可以参与学术研究吗?
  - a) 可以,课题组研究工程师主要任务是学术相关研究,且会从课题组得到充足的学术指导;
  - b) 课题组成员有较好的申请境外高校成功经历,包括 EPFL, UCLA, Maryland, HKUST, NTU 等(详情参见 https://lars-group.github.io/pages/group.html)。