

□ 13812688705 | ■ leoxc1571@163.com | ★ leoxc1571.github.io | 回 leoxc1571



教育经历

南京信息工程大学-应用统计学(本科)

江苏南京

2017年9月-2021年6月

浙江杭州

2021年9月-2024年1月

浙江工商大学-理学统计学(硕士)

以第一作者发表JCR-02论文一篇(深度强化学习)和JCR-01(CCF-B)论文一篇(图神经网络推荐系统)

技能

Python, PyTorch, PyG, DGL, Tensorflow, Git, Linux, SQL, 町区

外语 CET4 (597) , CET6 (597)

实习经历

之江实验室-图计算研究中心

图算法工程师 2022年7月-至今

智能计算计算医药(大规模图预训练,分子性质预测,Diffusion-based分子生成)

负责OGB-LSC NeurIPS22竞赛,构建模型实现超大规模分子图性质学习,取得全球第11名,参与OGB-DDI榜单打榜,取得榜单第一名;

- 复现、部署大规模图预训练模型及分子构象生成模型;
- 负责Diffusion-based生成模型研究,撰写Diffusion-based图生成领域综述;
- 创造性提出基于全局注意力的E(n)等变图网络,结合原子自身性质与分子间相互作用,实现时下最优的3D分子学习性能。同时将此图 网络与Diffusion模型结合,实现时下最优的3D分子生成性能,相关文章正在撰写中。

项目经历

基于图对比学习的公平的标签感知推荐系统

论文

2022年5月-2022年12月

- 基于GNN和对比学习范式,构建TAGCL模型进一步提升基于标签感知的个性化推荐性能,同时显著提升推荐结果的公平性;分别构建<用户-标签>和<标签-商品>的子图,通过添加经过softmax归一化的随机扰动进行表征增强,用于建立对比学习任务;
- 分别基于交叉熵损失,基于Tag负采样的二部图损失和改进知识图谱算法TransT,构建目标函数,分别用于推动生成更公平的推荐和提 升二部图之间的一致性;
- 实验显示模型推荐精度较标签感知推荐领域的SOTA模型至少提升5%,同时在歧视性较强的数据集上显著提升结果的公平性;
- 文章发表于期刊Information Sciences (JCR Q1(TOP) & CCF-B)。

OGB-LSC NeurlPS 2022

音寒

队长 对超大规模分子数据(超300W)进行表针学习,预测目标分子能量隙;

- 构建HFAGNN模型,运用Hybrid模块,学习原子自身化学性质,同时运用Bessel方程提取2元组与3元组间的原子3D信息,将分子2D拓扑 信息与3D结构信息结合,在满足三维空间等变性的同时实现对分子性质的高效学习;
- 使用多卡并行实现高效运算,在较小规模参数量的情况下取得榜单第11名。

基于扩散模型的3D分子生成

论文(撰写中) 2022年11月-至今

2022年8月-2022年11月

负责人 基于扩散生成模型,构建去噪扩散概率模型,生成创新且有效的3D分子结构;

- 将扩散模型自身特点与原子间相互作用力本质相结合,构建出既能学习不同原子化学特性,又能学习任意原子间的相互作用强弱的全局 注意力机制,构建创新的等变图网络作为去噪过程的内核;
- 改进原有采样策略,引导模型在生成大分子过程中做出更多探索,提升生成分子的创新性。

电商用户商品价值评估与基于图神经网络的个性化推荐系统

全国统计专业研究生案例大赛

组长

2022年2月-2022年3月

- 基于真实电商数据,实现商品从盈利能力、畅销水平和退货率等方面的价值评估,同时基于价值对用户群体进行有效划分,最后对用户 进行个性化推荐。
- 通过PCA降维与K-Means++聚类,实现对商品从盈利能力,畅销水平和退货率等多个维度的有效划分。 运用改进RFM模型,对用户特征做特征交叉,实现对用户从消费能力,下单频率和退货水平等多维度的有效划分。
- 基于LightGCN模型,创新性的提出了WideGCN模型,实现对基于商品和用户的16维特征这一旁信息的有效利用。推荐性能较SOTA模型有 2%到5%的提升。
- 该项目获全国三等奖

荣誉奖励

2018.5 **2018年全国大学生英语竞赛 (NECCS)**

2019.5 南京信息工程大学第十三届数学建模竞赛

2021.10 华为杯第十八届全国研究生数学建模竞赛

2022.8 第五届全国统计专业研究生案例大赛

2022.11 浙江工商大学研究生学业奖学金

全国一等奖

三等奖

全国三等奖 全国三等奖

一等奖