

徐 璦

机器学习 · 数据挖掘

☎ 13812688705 | ✉ leoxc1571@163.com | 🏠 leoxc1571.github.io | 📧 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

浙江工商大学-理学统计学（硕士）

以第一作者发表中科院二区/JCR Q1论文一篇（深度强化学习）和中科院一区/CCF-B

论文一篇（图神经网络推荐系统），另有两篇投稿至TKDE及AAAI-24。

2021年9月-2024年1月

技能

技能 Python, PyTorch, PyG, DGL, Tensorflow, Git, Linux, SQL, \LaTeX
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

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）

2022年7月-至今

- 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

第一作者

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“A fairness-aware graph contrastive learning recommender framework for social tagging systems”发表于期刊INFORMATION SCIENCES（中科院一区(TOP) & CCF-B）。

几何辅助的3D分子图扩散生成

论文(投稿至AAAI-24)

第一作者

2022年11月-至今

- 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；
- 文章“Geometric-facilitated denoising diffusion model for 3D molecule generation”投稿至人工智能顶会（CCF-A）AAAI-24。

扩散模型图生成综述

论文(投稿至TKDE)

共同第一作者 & 实际撰稿人

2023年2月-至今

- 系统性总结时下最先进的扩散生成模型在图生成任务上的应用；
- 系统性阐述主流扩散模型范式，同时阐述并比较扩散图生成在计算化学，动作生成等领域的应用；
- 讨论扩散模型在图生成任务中面临的不足与挑战，并对未来的研究方向提出展望。
- 文章“Diffusion-based graph generative methods”投稿至数据挖掘顶刊 IEEE TRANSACTIONS ON KNOWLEDGE AND DATA ENGINEERING（中科院一区 / CCF-A）。

OGB-LSC NeurIPS 2022

竞赛

队长

2022年8月-2022年11月

- 对超大规模分子数据(超300W)进行表征学习，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。

基于深度强化学习的微分追逃策略研究

论文

第一作者

2021年9月-2022年2月

- 对微分追逃博弈问题构建运动学方程，分别对追逃和逃逸策略进行运动学求解。
- 运用DQN和DDPG深度强化学习算法，实现了智能体的自动逃逸。
- 对Reward进行改进，进一步提升DQN模型训练智能体的逃逸成功率。
- 该文章“Pursuit and Evasion Strategy of a Differential Game Based on Deep Reinforcement Learning”发表于Frontiers in Bioengineering and Biotechnology（中科院二区 / JCR Q1）。

基于轻量化图结构的标签感知推荐系统

第二作者

- 为解决标签感知推荐系统中标签的模糊性和冗余性，构建TFGCF模型以实现对标签信息背后蕴含的隐式反馈的充分提取，模型较SOTA提升至少5%；
- 针对<用户-标签-商品>三元组分别基于<用户-标签>和<标签-商品>构建轻量化图结构。运用GCN进行信息传递和表征聚合，同时根据改进的知识图谱算法TransRT提升标签信息的利用效率；
- 文章“LFGCF: Light Folksonomy Graph Collaborative Filtering for Tag-aware Recommendation”投稿至Expert systems with applications（中科院一区(TOP)）。

2022年3月-2022年5月

论文

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

组长

- 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

2022年2月-2022年3月

全国统计专业研究生案例大赛

空间抗干扰UWB定位算法

组长

- 构建方程实现分别基于3锚点和4锚点的空间UWB定位算法，实现较好的抗干扰性能。
- 利用SVM实现测量数据受干扰情况的准确判别。
- 利用上述定位算法与卡尔曼滤波实现物体在三维空间内的轨迹追踪。
- 获得第18届华为杯全国研究生数学建模竞赛三等奖。

2021年10月

全国研究生数学建模竞赛

荣誉奖励

2018.5	2018年全国大学生英语竞赛（NECCS）	全国一等奖
2019.5	南京信息工程大学第十三届数学建模竞赛	三等奖
2021.10	华为杯第十八届全国研究生数学建模竞赛	全国三等奖
2022.8	第五届全国统计专业研究生案例大赛	全国三等奖
2022.11	浙江工商大学研究生学业奖学金	一等奖
2023.6	泰迪杯数据挖掘竞赛	三等奖