

李双利

手机：(+86) 18756932998 · 邮箱：ls1997@mail.ustc.edu.cn

Google Scholar：[主页链接](#) · 个人主页：[agave233.github.io](#)



个人概述

中国科学技术大学计算机科学与技术专业在读博士研究生，导师熊辉教授，研究方向为数据挖掘、空间图学习、AI4Science 和大模型应用。博士期间主要探索图数据结构在多维几何空间下的表征学习和建模，并且赋能下游应用，包括化学、生物、地理信息等科学研究领域，以及智能医药研发、城市计算和商业智能等工业界应用，同时研究大语言模型和智能体技术在地图场景、知识图谱信息抽取等领域的应用。研究成果发表在 KDD、TKDE、AAAI 和 SIGIR 等会议和期刊，博士在读期间共发表 **11 篇论文 (CCF-A 类 9 篇, CCF-B 类 2 篇)**，其中第一作者 CCF-A 类论文 **5 篇** (包括 **3 篇 KDD**、**1 篇 TKDE** 和 **1 篇 AAAI**，累计被引用次数 400+，发表在 KDD'21 的工作被评为 KDD21 最有影响力的论文之一 (12/393)。曾获国家奖学金、百度奖学金全球 **20 强** 等奖项，在 CCF 大数据与计算智能大赛中获得第 **1 名**。

教育背景

中国科学技术大学 (博士研究生)	2019 - 至今
<ul style="list-style-type: none">计算机科学与技术学院，大数据分析与应用安徽省重点实验室研究方向：几何深度学习、数据挖掘、图神经网络、AI4Science、大模型应用导师：熊辉 教授	
中国科学技术大学 (本科)	2015 - 2019
<ul style="list-style-type: none">计算机科学与技术学院 (计算机英才班)	

实习经历

百度研究院-商业智能实验室 (研究实习生，导师：周景博)	2020.7 - 2024.5
<ul style="list-style-type: none">AI+ 智能城市：针对城市场景的区域 POI 进行空间演化图学习，赋能时空知识图谱和城市商业规划AI+ 智能医药：设计几何图学习框架对分子和蛋白质数据进行建模，应用于分子性质预测和药物发现AI+ 信息抽取：研究大语言模型 (LLMs) 和智能体 (Agent) 在地图场景、结构化关系图谱的自动化抽取	
科大讯飞-核心研发平台 (大数据工程师)	2018.9 - 2019.1
<ul style="list-style-type: none">针对教育领域的自然语言处理任务，优化 Bert 模型，在线上取得较好效果	

发表论文

- Shuangli Li**, Jingbo Zhou, Tong Xu, Liang Huang, Fan Wang, Haoyi Xiong, Weili Huang, Dejing Dou, Hui Xiong. GIANT: Protein-Ligand Binding Affinity Prediction via Geometry-aware Interactive Graph Neural Network, IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering (TKDE), 2023. (CCF-A 类期刊, 被评为 2024 年 5 月份出版的 TKDE 精选封面论文 (Featured Article))
- Shuangli Li**, Jingbo Zhou, Ji Liu, Tong Xu, Enhong Chen, Hui Xiong. Multi-Temporal Relationship Inference in Urban Areas, In Proceedings of the 29th ACM SIGKDD Conference on Knowledge Discovery and Data Mining (KDD'23), Long Beach, pp. 1316-1327, 2023. (CCF-A 类国际会议)
- Shuangli Li**, Jingbo Zhou, Tong Xu, Dejing Dou, Hui Xiong. GeomGCL: Geometric Graph Contrastive Learning for Molecular Property Prediction, In Proceedings of the 36th AAAI Conference on Artificial Intelligence (AAAI'22), Online, pp. 4541-4549, 2022. (CCF-A 类国际会议)
- Shuangli Li**, Jingbo Zhou, Tong Xu, Liang Huang, Fan Wang, Haoyi Xiong, Weili Huang, Dejing Dou, Hui Xiong. Structure-aware Interactive Graph Neural Networks for the Prediction of Protein-Ligand Binding

Affinity, In Proceedings of the 27th ACM SIGKDD Conference on Knowledge Discovery and Data Mining (KDD'21), Online, pp. 975-985. 2021. (CCF-A 类国际会议, 被评为 **KDD21** 最有影响力的论文之一)

5. **Shuangli Li**, Jingbo Zhou, Tong Xu, Hao Liu, Xinjiang Lu, Hui Xiong. Competitive Analysis for Points of Interest. In Proceedings of the 26th ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining (KDD'20), Online, pp. 1265-1274. 2020. (CCF-A 类国际会议)
6. Rui Zha, Le Zhang, **Shuangli Li**, Jingbo Zhou, Tong Xu, Hui Xiong, Enhong Chen. Scaling up Multivariate Time Series Pre-Training with Decoupled Spatial-Temporal Representations. In Proceedings of IEEE International Conference on Data Engineering (ICDE'24), 2024. (CCF-A 类国际会议)
7. Shengzhe Zhang, Liyi Chen, Chao Wang, **Shuangli Li**, Hui Xiong. Temporal Graph Contrastive Learning for Sequential Recommendation. In Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence (AAAI'24), 2024. (CCF-A 类国际会议)
8. Jingbo Zhou, Tao Huang, **Shuangli Li**, Renjun Hu, Yanchi Liu, Yanjie Fu, Hui Xiong. Competitive Relationship Prediction for Points of Interest: A Neural Graphlet Based Approach. IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering (IEEE TKDE), 2021. (CCF-A 类期刊)
9. Hui Luo, Jingbo Zhou, Zhifeng Bao, **Shuangli Li**, J. Shane Culpepper, Haochao Ying, Hao Liu, Hui Xiong. Spatial object recommendation with hints: When spatial granularity matters. In Proceedings of the 43rd International ACM SIGIR Conference on Research and Development in Information Retrieval (SIGIR'20), pp. 781-790. 2020. (CCF-A 类国际会议)
10. Yuhan Ye, Jingbo Zhou, **Shuangli Li**, Congxi Xiao, Haochao Ying, Hui Xiong. Hierarchical Cross-level Graph Contrastive Learning for Drug-Drug Interaction Prediction. In Proceedings of 29th International Conference on Database Systems for Advanced Applications (DASFAA'24), 2024. (CCF-B 类国际会议)
11. Yuhan Ye, Jingbo Zhou, **Shuangli Li**, Congxi Xiao, Haochao Ying, Hui Xiong. Hierarchical Structure-aware Graph Prompting for Drug-Drug Interaction Prediction. In The European Conference on Machine Learning and Principles and Practice of Knowledge Discovery in Databases (PKDD'24), 2024. (CCF-B 类国际会议)

代表性奖项与荣誉

百度奖学金全球前 20 强	2023
SIGKDD 学生旅行奖	2023
环球数码科技奖学金	2022
飞桨开发者技术专家 (PPDE)	2022
百度研究院优秀实习生	2021
元庆奖学金	2021
国家奖学金	2020
CCF 大数据与计算智能大赛 (BDCl) 冠军	2020
中国科学技术大学 优秀毕业生	2019

研究与项目经历

面向城市图谱构建的空间演化图学习框架 (AI+ 智能城市)

- 城市计算 | 图学习 | 时空知识图谱 | AI for GIS
- 针对城市中的大规模地理关系网络, 在二维空间坐标下提出空间自适应图神经网络和空间演化图神经网络框架对地理网络进行二维关联性和空间分布建模, 高效准确地对时空知识图谱进行推理补全。
- 相关工作被 CCF-A 类数据挖掘国际会议 KDD'20 和 KDD'23 接收, 后续工作基于图预训练和图提示学习进行拓展, 提升模型的效率和推理能力, 当前工作已投稿至 TKDE 期刊。
- 研究成果作为核心模型集成到百度的开源时空大数据平台 [PaddleSpatial](#), 可以应用到城市规划等场景, 构建的城市时空图谱上线到百度户外广告投放平台聚屏 (例如宜家因此增加了 60 万广告预算)。

面向分子性质预测的几何图对比学习框架 (AI+ 智能医药)

- 自监督学习 | 图学习 | 分子药物发现 | AI for Chemistry
- 针对化学分子图难以有效融合学习和对齐多维空间尺度图结构的问题，研究二维和三维结构下的分子图的拓扑信息和空间结构信息，以多维数据驱动的方式设计融合两种空间是图的几何图自监督对比学习框架，并在具有代表性的分子性质预测任务上进行应用验证取得了 SOTA 效果。
- 相关工作被 CCF-A 类人工智能国际会议 AAAI'22 接收，并被作为基线模型之一，引用量近 100。
- 研究成果作为应用方案集成到 PaddleHelix 开源项目，为药物研发提供准确的小分子性质预测工具。

面向亲和力预测的三维几何交互图学习框架 (AI+ 智能医药)

- 三维图建模 | 图学习 | 药物发现 | AI for Bio
- 针对生物大分子在三维空间中几何特性和交互性，提出基于极坐标和球坐标系对蛋白质-配体复合空间进行双图交互建模，融合距离、仰角和二面角等空间几何特征，设计的几何消息传递网络可以有效学习空间交互结构，并在具有代表性的蛋白质和配体亲和性预测任务上取得了 SOTA 效果。
- 相关工作被 CCF-A 类数据挖掘国际会议 KDD'21 和 CCF-A 类期刊 TKDE 接收，并被评为 KDD21 最有影响力的论文之一、TKDE 封面精选论文 (Featured Article)，引用量 150+。
- 研究成果作为核心技术之一上线到工业界生物计算平台 PaddleHelix 官方平台进行商用。官网地址：<https://paddlehelix.baidu.com/technique#SIGN>

面向区域人群密度预测的时序预测框架 (AI+ 智能城市)

- 城市计算 | 流量预测 | 统计学习 | AI for GIS
- 针对城市区域的人群密度流量的周期性和空间依赖性，提出了基于统计规则和机器学习相结合的模型框架，并融合城市区域空间关联性建模，对疫情期间未来的人群密度进行准确预测。
- 相关工作提交至 2020 年大数据与计算智能大赛的人群密度预测赛道，在 1600+ 队伍中取得第一名。

面向地图问答场景的大语言模型微调和优化项目 (AI+ 信息抽取)

- 大语言模型 | 地图问答 | RLHF
- 针对地图问答场景下的 POI 地点匹配检索问题，基于 Bloom 大语言模型设计多轮 prompt 对话策略，LLM 首先通过用户 Query 生成用于召回 POI 地点的 API，在返回 POI 后结合设计 prompt 结合地图检索结果生成最终回答。模型基于 trlx 框架进行 SFT 训练，并训练 Reward Model 结合 RLHF 进行优化。
- 项目模型部分上线到百度地图 APP 提升用户问答系统的效果。

基于大语言模型和多智能体的弱监督学习关系抽取框架 (AI+ 信息抽取)

- 大语言模型 | LLM Agent | 知识图谱 | 规则挖掘
- 针对 LLM 直接进行关系抽取和知识图谱构建所存在的效率问题，提出了多个 LLM 智能体协同的语言规则挖掘框架。方法首先微调 Llama 对训练文本进行提示关键词抽取，然后基于 LLM 智能体结合提示关键词生成正则表达式规则，最后使用 DPO 算法融合规则排序反馈机制进行框架的优化训练。
- 提出框架在人物关系、金融关系等多个任务上效果显著提升，相关工作准备论文撰写并投稿至 ARR。

代表性专利

已公开专利 11 项，授权 3 项

1. 李双利; 周景博; 徐童; 熊辉, 兴趣点竞争关系确定方法、装置、设备和介质, 2020.11.27, CN112000763A.
2. 李双利; 周景博; 徐童; 等, 用于训练确定分子结合力的预测模型的方法和装置, 2021.8.10, CN113241126A.
3. 李双利; 周景博; 徐童; 等, 信息处理的方法和装置、装置、设备和介质, 2021.8.20, CN113284565A.
4. 李双利; 周景博; 徐童; 等, 一种分子性质预测方法、装置及电子设备, 2022.2.17, CN114446413B.