

余家骏

 jiajunyu@zju.edu.cn  +86 13031180113  [Google Scholar](#)  上海, 中国

个人总结

浙江大学与上海创智学院联合培养二年级博士生，研究方向为 AI for Science、大语言模型（LLMs）与图神经网络（GNNs）。近期聚焦 LLM Agent、科学创意生成、分子优化、虚拟筛选、分子性质预测、结构预测与蛋白质-蛋白质相互作用（PPI）预测等问题。具备扎实的大规模数据工程与模型训练经验：从零构建 TB 级数据集，并在数十亿级数据上完成训练与评测。

工作经历

- 上海人工智能实验室 生命科学大模型实习生 2025.02 – 2025.09
 - 设计基于 AlphaFold3 的蛋白-蛋白相互作用（PPI）粗筛+精筛流程，并在湿实验验证中取得 4/10 的成功案例。
 - 参与 Intern Discovery 平台开发，推动 8 个 Agent 上线。
- 蚂蚁集团 / 支付宝（上海） 算法实习生 2024.08 – 2024.12
 - 面向员工智能助手场景，微调 Llama3.1、Qwen2.5、GLM4、DeepSeek 等 LLM，用于问答抽取并成功上线（落影），并中稿 SIGIR2026。
 - 设计基于实体抽取的 RAG 算法，提升多任务问答抽取场景下的表现，中稿 ACL2025。
- 香港中文大学（深圳） / 深圳大数据研究院 研究实习生 2023.06 – 2023.12
 - 从核方法视角优化分子性质预测中的 Readout 函数，中稿 IJCAI2024。
- 快手科技有限公司（北京） 算法实习生 2021.03 – 2021.09
 - 负责视频检索多模态算法的数据采集与维护。
 - 基于图像检索自建新闻类短视频生成流水线，构建 1 亿张中文图片对与 500 万视频文本对。
 - 参与 TRECVID 2021 视频检索赛道，团队获第 2 名。

教育背景

- 浙江大学 & 上海创智学院 人工智能博士（Ph.D.） 2024.09 – 2028.03
导师：[王海帅研究员](#)与[康玉副教授](#)。
- 中国农业大学 计算机科学与技术硕士（M.Sc.） 2021.09 – 2024.06

两次获得国家奖学金（前 0.2%）。

中国农业大学

计算机科学与技术学士（B.Sc.）

2017.08 – 2021.05

作为队长获 2020 年 MCM/ICM Finalist（校史首例）。

论文发表

*, + 分别表示共同第一作者与通讯作者：

[P1] Jiajun Yu, Zhihao Wu, Yizhen Zheng, Shirui Pan, Jiajun Bu, Haishuai Wang+. “Is Sequence Generation Optimal for Molecular Editing? A Graph-based MoE Alternative.” (**KDD Oral**, CORE A*), 2026.

[P2] Jiajun Yu*, Linghan Zheng*, Hui Liu+, Xiaojun Lin, Jiayuan Dong, Yue Sheng, Gang Shi, Zhiwei Liu, Hongwei Chen, Haishuai Wang+. “Code-Based English Models Surprising Performance on Chinese QA Pair Extraction Task.” (**SIGIR 2026**, CORE A*) 2026

[P3] Jiajun Yu, Weifan Mao, Kaipeng Zeng, Kejia Bian, Zhuo Wang, Kun Li, Haishuai Wang. “PRISM: Entropy-Guided Multi-View Exploration for Scientific Idea Generation.” **EMNLP 2026** Main, 2026.

[P4] Jiajun Yu, Kun Li, Zhihao Wu, Weifan Mao, Yizhen Zheng, Haishuai Wang. “SkillMol: Skill-Conditioned Action Editing for Molecular Optimization.” **EMNLP 2026** Findings, 2026.

[P5] Jiajun Yu, Zhihao Wu, Jielong Lu, Tianyue Wang, Haishuai Wang+. “A Centrality-based Graph Learning Framework.” **IJCAI 2025** (CORE A*), 2025. [论文链接](#)

[P6] Jiajun Yu, Zhihao Wu, Jinyu Cai, Adele Lu Jia+, Jicong Fan+. “Kernel Readout for Graph Neural Networks.” **IJCAI 2024** (CORE A*), 2024. [论文链接](#)

[P7] Jiajun Yu, Adele Lu Jia+. “User donations in online social game streaming: The case of paid subscription in twitch.tv.” **The Web Conference 2022** (CORE A*), 2022. [论文链接](#)

[P8] Jiajun Yu*, Yizhen Zheng*, Huan Yee Koh*, Shirui Pan, Haishuai Wang+. “Collaborative expert LLMs guided multi-objective molecular optimization.” arXiv (Preprint), 2025. [论文链接](#)

[P9] Jiajun Yu, Adele Lu Jia+. “MLGAL: Multi-level Label Graph Adaptive Learning for node clustering in the attributed graph.” **Knowledge-Based Systems** (Q1, IF~7.6), 2023. [论文链接](#)

[P10] Jiajun Yu, Adele Lu Jia+. “AGCL: Adaptive Graph Contrastive Learning for graph representation learning.” **Neurocomputing** (Q1, IF~6.5), 2024. [论文链接](#)

[P11] Jiajun Yu, Zhihao Wu, Jielong Lu, Qianqian Shen, Lele Fu, Haishuai Wang+. “Retrieval-Augmented Graph Neural Networks for Hard Graph Classification.” (Information Fusion (Under Review)), 2026.

[P12] Tianyun Zhang*, **Jiajun Yu***, Shang Lou*, Yaozhen Liang, Yue Liang, Zhekai Li, Haishuai Wang+, Shanshan Pei+, Ning Shen+. “Systematic discovery of single-cell protein networks in cancer with Shusi.” (**Cell Under Review**), 2025. [论文链接](#)

[P13] Mingxia Zhao*, **Jiajun Yu***, Suiyuan Zhang, Adele Lu Jia+. “Relation-aware multiplex heterogeneous graph neural network.” **Knowledge-Based Systems** (IF ~7.6, Q1) (2025). [论文链接](#)

[P14] Muyang Cao, **Jiajun Yu**, Xin Du, Gang Pan, Wei Wang. “MetricEmbedding: Accelerate Metric Nearness by Tropical Inner Product.” **ICML** (CORE A*), 2025. [论文链接](#)

[P15] Zhihao Wu, Jielong Lu, **Jiajun Yu**, Sheng Zhou, Yueyang Pi, Haishuai Wang+. “Divide and Conquer: Coordinating Multiplex Mixture of Graph Learners to Handle Multi-Omics Analysis.” **IJCAI** (CORE A*), 2025. [论文链接](#)

[P16] Jielong Lu, Zhihao Wu, **Jiajun Yu**, Qianqian Shen, Jiajun Bu, Haishuai Wang. "Where Views Meet Curves: Virtual Anchors for Hyperbolic Multi-View Graph Diffusion." ACM MM (CORE A*), 2025.

[P17] Jielong Lu, Zhihao Wu, **Jiajun Yu**, Jiajun Bu, Haishuai Wang+. "Multi-Omics Analysis for Cancer Subtype Inference via Unrolling Graph Smoothness Priors." International Joint Conferences on Artificial Intelligence (IJCAI, CORE A*) (2025). [论文链接](#)

[P18] Yaozhen Liang, Xiao Liu, **Jiajun Yu**, Zhouhua Fang, Qunsheng Zou, Linghan Zheng, Yong Li, Zhiwei Liu, Haishuai Wang+. "EXPLAIN: Enhancing Retrieval-Augmented Generation with Entity Summary." ACL (CORE A*), 2025. [论文链接](#)

[P19] Yunhao Zhang, Shaonan Wang, Xinyi Dong, **Jiajun Yu**, Chengqing Zong+. "Navigating Brain Language Representations: A Comparative Analysis of Neural Language Models and Psychologically Plausible Models." The Cognitive Science Society, (CogSci CORE A), 2024. [论文链接](#)

[P20] Yunhao Zhang, **Jiajun Yu**, Xinyi Dong, Ping Zhong+. "Multi-task support vector machine with pinball loss." Engineering Applications of Artificial Intelligence (IF ~8.0, Q1) (2021). [论文链接](#)

荣誉与奖项

- 2025 年中国科协青年科技人才培养工程（博士生专项）。
- Stanford RNA 3D Folding Competition 2025 铜奖（89/1489）。
- 国家奖学金（2022、2023）。
- 中国农业大学优秀学生奖（2022、2023）。
- 研究生一等奖学金（2022、2023）。
- 2020 美国大学生数学建模竞赛（MCM/ICM）Finalist。
- 2019 民生杯数学建模竞赛一等奖。
- 2019 全国大学生数学建模竞赛（北京赛区）一等奖。
- 2019 MCM/ICM Honorable Mention。

学术服务

审稿人：KDD2025-2026, WWW 2025-2026, AAAI 2026, ICML 2024 - 2026, IJCAI 2025-2026, ICLR 2025 - 2026, NeurIPS 2024 - 2026, ACM MM 2024 - 2026, Pattern Recognition, Neural Networks, Knowledge-Based Systems, Neurocomputing。