

## 1. 图神经网络预测蛋白质功能和相互作用

AlphaFold 2 是几何机器学习领域的重要成果，也是结构生物学领域的范式转变。20 世纪 70 年代，诺贝尔化学奖得主 Christian Anfinsen 提出了预测蛋白质三维折叠结构的可能性。这是一项非常困难的计算任务，是结构生物学领域的「圣杯」。2021 年，DeepMind 的 AlphaFold 2 打破了该问题之前的记录，取得了让领域专家们信服的准确率，并得到了广泛的应用。AlphaFold 2 的核心正是一个基于等变注意力机制的几何架构。

## 2. 图神经网络应用于异常检测

给定一些高维的时间序列数据（例如，传感器数据），我们应该如何检测异常事件。更具挑战的是，我们如何以一种能够捕获复杂的传感器之间的关系来完成这项任务，并且检测和解释和这些关系不同的异常。目前的深度学习方法使得在高维数据集上的异常检测任务效果有了很大的提升。但是，目前的方法并没有学习变量之间存在的关系。使用图神经网络（GNN）并且结合注意力权重可以提供一种可解释的异常检测。

## 3. 图神经网络应用于计算机视觉

近年来，卷积神经网络（CNN）在计算机视觉（CV）中取得了巨大成功。然而，这些方法中的大多数缺乏对视觉数据之间关系的细粒度分析（例如，关系视觉区域、相邻视频帧）。例如，图像可以表示为空间图，而图像中的区域通常在空间和语义上是相关的。类似地，视频可以表示为时空图，其中图中的每个节点代表视频中的一个感兴趣区域，并且边缘捕获这些区域之间的关系。这些边可以描述关系并捕获视觉数据中节点之间的相互依赖关系。这种细粒度的依赖关系至关重要感知、理解和推理视觉数据。因此，可以自然地利用图神经网络从这些图中提取模式，以促进相应的计算机视觉任务。

## 4. 图神经网络应用于 NLP

很多真实世界的应用场景需要处理包含着元素间丰富关系信息的图形式的数据。在例如物理系统建模、化学分子功能预测等领域中，数据都拥有显式的图结构；而在另一些例如文本的非结构数据中，如何从数据中抽取推理并利用如句法树等结构信息，也是相关领域中重要的研究方向。图神经网络可以通过节点间的信息传递（message passing）有效地捕捉结构信息。自该概念提出以来，图神经网络技术已经在自然语言处理、数据挖掘等多个领域得到了广泛的应用。本报告将重点介绍图神经网络技术在自然语言处理领域的前沿应用。

## 5. 图神经网络应用于求解组合优化问题

组合优化（combinatorial optimization, CO）问题的求解是金融、物流、能源、生命科学和硬件设计中的关键。这些问题大多是用图表示的。因此，上个世纪的大量研究都集中在更有效地解决 CO 问题的算法上；然而，机器学习驱动的现代计算革命为解决此类问题的方法提供了一种引人瞩目的新方式。谷歌大脑团队使用 GNN 优化了新硬件（如 Google 的 TPU）芯片块的功耗、面积和性能。计算机芯片可以理解为由内存和逻辑部件组成的图，每个图均由其部件的坐标和类型表示。确定每个组件的位置，同时遵守密度和布线拥塞的限制，这是一个费力的过程，但仍然是电气工程师的工作重点。谷歌大脑团队利用 GNN 模型与策略和收益强化学习（RL）功能相结合，生成优化的电路芯片布局，甚至优于手工设计的硬件布局。