arXiv:2302.02055v2 [cs.LG] 6 Oct 2023

隐式几何与相互作用嵌入提升小样本分子属性预测

Christopher Fifty[⋆, 1], **Joseph M. Paggi**[⋆, 1],
Ehsan Amid[2],**Jure Leskovec**[1],**Ron Dror**[1]共同贡献[⋆]
斯坦福大学[1],GoogleBrain[2],
fifty@cs.stanford.com

摘要

小样本学习是分子性质预测的一种很有前景的方法，因为监督数据通常非常有限。然而，许多重要的分子性质取决于复杂的分子特征——例如分子可能采取的各种三维几何构型，或能够形成的化学相互作用类型——这些特征并未在特征空间中明确编码，必须依据少量数据加以近似。学习这些特征可能颇具挑战，尤其对于旨在快速适应新任务的小样本学习算法而言。在本研究中，我们开发了能够编码复杂分子特征的分子嵌入，以提升小样本分子属性预测的性能。我们利用大量合成数据（即分子对接计算的结果），并采用多任务学习范式来构建嵌入空间。在多个分子性质预测基准测试上，从嵌入空间进行训练显著提升了多任务学习、MAML 和原型网络的小样本学习性能。我们的代码可在此处获取：https://github.com/cfifty/IGNITE。

1 引言

与计算机视觉和自然语言处理中的常见应用形成鲜明对比的是，许多重要的分子性质预测任务可用的监督数据寥寥无几 [2, 36]。确定分子（例如候选药物）的生物学效应，通常需要经过漫长的细胞培养过程，随后还要使用专用设备进行多步骤测定 [22]。某些性质（如毒性）甚至可能需要通过动物研究才能有效测量 [26]。这些检测方法和研究的通量有限，而且合成待测分子往往成本高昂 [6]。因此，用于测定分子性质的监督数据集通常只包含约10个或100个数据点，因此需要小样本学习算法来应对标注数据稀缺的问题 [31]。

小样本学习算法专为低数据量范式而设计，但这些方法在分子性质预测方面的效果，例如预测分子的毒性或其与特定蛋白质的结合亲和力，会受到分子相互作用固有复杂性的限制 [9, 12]。分子表示为由原子构成的连通图，每个原子都有自己的特征向量，但这一特征空间无法直接编码复杂的分子特征，例如分子可能采用的各种三维几何构型，或分子在每种构型下能够形成的化学相互作用类型 [40]。这些特征对于分子的真实属性至关重要，也决定了分子如何与其他分子相互作用，包括蛋白质、酶、生物靶标和非靶标 [5]。

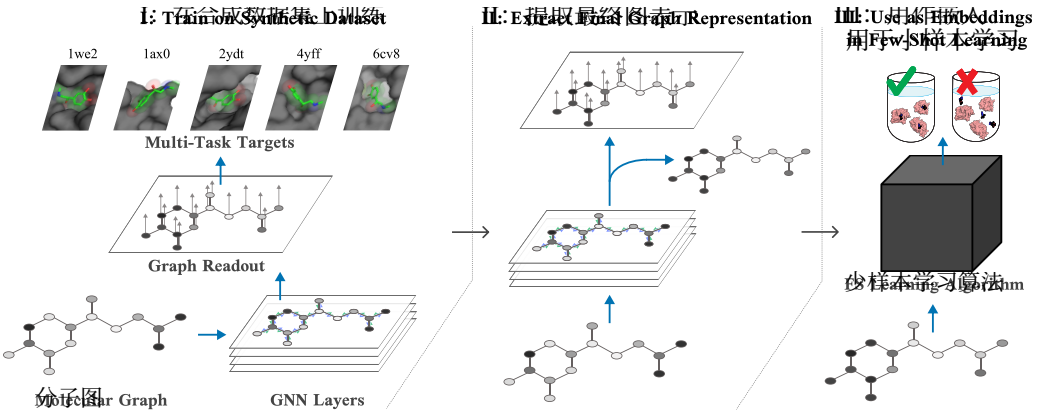

图 1：IGNITE 嵌入的端到端开发范式：IGNITE 嵌入：（I）训练一个多任务 GNN，将小分子映射到由基于物理的对接所确定的结合能（千卡/摩尔）；这些结合能取决于该小分子与蛋白质靶标之间的相互作用。（II）提取读出前图表示。（III）对于小样本学习算法，用学习得到的分子嵌入替换默认特征空间。多任务靶标 1we2、1ax0、2ydt、4yff 和 6cv8 是蛋白质数据库代码，代表我们实际数据集中 2,034 个靶标中的 5 个。

虽然可以从特征空间中学习编码这些属性的分子表示，但这样做会给学习过程增添一层复杂性。小样本学习算法的学习动态本已相当复杂，有时甚至不稳定 [3] ——因此，对于现有算法而言，训练模型既具备快速适应新任务的能力，又能近似复杂的分子-靶标相互作用，可能十分困难，甚至是不可能的。

在这项工作中，我们开发了能够编码复杂分子特征的分子嵌入，以改进小样本分子属性预测。我们首先整理了一个大规模合成数据集，用于测量1,000种分子与每一种1,000种不同蛋白质的结合情况，从而在该数据集的建模目标中隐式编码分子可能呈现的各种三维几何构型，以及可能形成的化学相互作用。随后，我们采用多任务学习方案训练一个 MPNN——使用单个模型预测所有分子与靶标之间的相互作用——以学习能够泛化到所有任务的单一分子表示。最后，我们提取多任务 MPNN 最后一层学得的表示，作为分子嵌入，并用它初始化其他小样本学习算法在下游分子属性预测任务中的特征空间。这一方法如 [15]图示图 1。由于该方法能够捕捉分子的隐含特性，我们将其称为**隐**式**几何**与**相**互**作**用**嵌**入（IGNITE（IGNITE）。

总而言之，我们的主要贡献是开发了分子嵌入，它能够隐式编码分子可能采用的各种三维几何构型以及能够形成的化学相互作用类型，就如同词嵌入编码词语潜在的含义和用法一样。我们在第 4节中的分析表明，这些特征已编码到嵌入空间中，因此具有相似属性的分子彼此接近，而具有不同属性的分子彼此远离。此外，在 FS-Mol 和 MoleculeNet 分子性质预测基准套件上，针对从毒性到抑制 HIV 复制等不同性质的预测，我们发现IGNITE 几乎普遍提升了多任务、MAML 和原型网络小样本学习算法的性能。这一提升相当显著，因为它无需进行超参数调优，仅通过修改小样本学习方法所作用的输入空间即可实现。

2 相关工作

人们投入了大量精力，以应对在小规模分子性质预测数据集上训练小样本学习模型所面临的挑战。我们将这些工作分为两类。第一类致力于为自监督预训练开发新的训练目标，第二类则侧重于将理想的领域特定归纳偏置融入学习过程。

自监督训练方法通常旨在不借助标注数据，学习小分子的基础表示。许多技术会对原子、子图或结构基序层级进行掩蔽和重建 [1, 17, 24, 28],，而另一些方法则开始将空间信息纳入分子图，以预测原子间距离 [11, 19, 23, 42]。还有一些方法采用了

对比学习的思想：创建分子图的增强视图，然后学习图表示，使同一分子的不同视图之间的相似度最大化，同时使不同分子的视图之间的相似度最小化 [16, 37, 41, 43]。然而，Sun 等人 [32] 发现，自监督预训练往往带来的收益微乎其微，并指出，归因于自监督方法的大部分提升，可能源自对下游任务进行广泛的超参数调优，而非预训练策略本身。

另一种思路是为小样本学习方法加入适用于分子机器学习的归纳偏置。Wang 等人 [35] 提出利用分子关系图来提升小样本学习的性能。Schimunek 等人 [29] 通过查询现代 Hopfield 网络，将分子的表示替换为与之关联的上下文分子的表示，从而将上下文编码到分子表示中；Chen 等人 [8] 则利用自适应核拟合框架增强分子元学习。最后，Stanley 等人 [31] 将多任务学习等传统小样本学习基线 [7], 、模型无关元学习 [13], 和原型网络 [30]应用于稳健的小样本分子性质预测基准测试。第5 节的研究结果表明，我们的方法可能与这些方法互为补充：它只需将这些方法所依赖的特征空间转换为嵌入空间，使其能够感知复杂的分子特征，例如三维几何结构和化学相互作用。

3 IGNITE：隐式几何与相互作用嵌入

虽然小样本学习算法是为低数据量范式而设计的，但分子相互作用固有的复杂性可能会限制这些方法的有效性。我们希望通过改变其运行所依赖的特征空间来提升性能，从而隐式编码分子可能采用的各种三维几何构型，以及分子在这些构型中可能形成的化学相互作用。挑战在于学习一种能够编码这些信息的嵌入表示。

合成数据生成。 我们可以通过在大量依赖三维分子几何结构和化学相互作用的数据上进行预训练，来学习这样的嵌入表示。原则上，这些数据可以是在实验室中收集的实验测量数据，用于量化小分子与蛋白质的结合情况。然而在实践中，关于分子-蛋白质结合能的实验数据在数量和质量上都有限。此外，这些数据中的测量结果来自各种各样的检测方法，从基于荧光的功能筛选到核磁共振实验。无论是对药物化学家还是小样本学习范式而言，比较不同检测方法所得的测量结果都可能很困难。

相反，我们采用计算“对接”方法来生成能够编码复杂分子特征的合成数据。具体而言，我们使用基于物理的对接程序 Glide [14]，以整理出一个大规模合成数据集，用于测量1，000种分子分别与1，000种不同蛋白质的结合情况。使用此类合成数据有两大优势。首先，我们可以根据需要生成任意数量的训练数据。其次，这种方法克服了比较不同检测类型之间实验测量数据的困难。

给定靶蛋白的三维结构和小分子的化学图，对接方法可以估算二者之间的结合能。对接以两种关键方式模拟了真实结合能的产生过程。首先，对接会考察蛋白质-小分子复合物的多种潜在几何构象，包括对小分子潜在内部三维几何构象进行采样，最终预测结果与所发现的最有利构象相关。其次，利用受物理启发的评分函数评估每种潜在构象的有利程度，该函数量化分子几何构象的互补性以及关键化学相互作用的存在情况。我们认为，利用分子对接生成的足量合成数据进行预训练，能够将决定分子相互作用的分子属性编码到模型学习到的表征中。为学习这些表征，我们采用多任务学习。

多任务学习范式。 合成数据集自然形成了一种多任务学习范式，其中每种蛋白质都代表一个独立的任务。具体而言，对于每个蛋白质靶标，我们将小分子输入映射为其结合能（千卡/摩尔），该结合能由分子对接确定。随后，我们在数据集中的数千个蛋白质靶标上重复这一过程，从而构建一个多任务学习系统；该系统使用单个深度学习模型来预测小分子与数据集中任意一种蛋白质的结合方式。

关于模型本身，我们使用一个 10 层 MPNN [15]，并结合 PNA [10]，其图读出由逐元素最大值、学习得到的多头加权和以及学习得到的多头加权均值组成。MPNN 的每一层都采用预归一化 [39] Transformer 式 [34] 残差结构，并使用 ReZero 重加权 [4]，采用文中所述的向量形式 [33]。此外，消息传递后使用一个 BOOM 层 [25] 作为第二个残差连接。随后，将读出后的分子表示输入一个由所有任务共享的浅层多层感知机，再通过任务专属的线性投影来预测结合能。

我们的优化方案采用包含 100 个步骤的线性预热调度和 Adam [21]优化器。目标函数是最小化模型预测值与自由能测量值之间的均方误差。我们将合成数据集随机划分为 80% 的训练集和 20% 的验证集，并在验证数据集上采用窗口大小为 10 个周期的提前停止。训练共进行 100 个周期，并将提前停止过程中表现最佳的模型检查点保存到磁盘。

在小样本学习中的应用。许多用于分子性质预测的小样本学习算法都基于由原子级特征向量构成的连通图。原子级特征向量通常包含元素类型、原子电荷、质量、化合价等的独热编码。借助 IGNITE，我们只需将小样本学习算法所使用的特征空间从默认的特征表示（使用元素类型、原子电荷等的独热编码）改为通过预测结合能，在合成数据集上学习到的读出前原子表示。

总而言之，IGNITE 在大规模合成数据集上预训练多任务模型，使其在建模目标中隐式编码复杂的分子特征——例如分子可能采用的各种三维几何构型，以及可能形成的化学相互作用。随后，它导出最终 MPNN 层的输出表示——由原子级学习到的嵌入构成的连通图——以初始化小样本学习算法的特征空间。这一方法如图 1所示，而我们在第 5 节中的实证结果表明，该方法能够显著提升小样本学习的性能。

4 IGNITE 分析

虽然我们的 MPNN 模型可能拟合了对接数据，但尚不清楚相关的生物物理知识是否确实编码进了学习得到的 IGNITE 嵌入中。回答这个问题正是我们分析的重点。

4.1 分子空间分析

我们的分析首先探究各种分子空间，以及分子空间结构如何隐式地定义该空间内分子之间的相似性概念。我们介绍 3 种衡量分子间距离的方法：基于对接、基于嵌入和基于指纹。随后，我们利用分子间距离这一相似性的替代指标，量化分子对接隐式捕获的分子特征是否编码进了 IGNITE 嵌入空间。我们采用 Kendall Tau 度量 [20]对这一效应进行客观量化。

基于对接的距离。 基于物理的分子对接软件隐式地编码了小分子之间的相似性概念。例如，可以将“相似”的小分子定义为在许多不同蛋白质靶标上表现出相似结合能的小分子；这类分子通常会采取相似的三维构象，并与同一靶标形成相似的化学相互作用。我们将对接所定义的两个分子 m_1, m_2 之间的隐式相似性量化为其在所有靶标上的对接能相对差异：

$$d(m_1, m_2) = \sum_{t \in \text{targets}} \frac{|t(m_1) - t(m_2)|}{\max_m\{t(m)\} - \min_m\{t(m)\}} . \tag{1}$$

我们计算结合能的相对差异，而非绝对差异，因为不同靶标的结合能范围各不相同；我们希望避免对范围较大的靶标赋予比范围较小的靶标更多的权重。

基于嵌入的距离。接下来，我们定义分子之间在IGNITE嵌入空间中的距离。我们的 MPNN 嵌入模型使用一种组合图读出，由逐元素最大值、学习得到的加权和以及学习得到的加权平均值组成。对每个原子上的

IGNITE 嵌入应用池化操作将输出用于预测与该目标相关的结合能的向量中的一个分量。因此，我们选择最简单的操作——逐元素最大池化——来说明嵌入空间中任意两个分子之间的距离。

令 m_1，m_2 为两个分子，它们在嵌入空间中由逐原子学习得到的特征矩阵和邻接矩阵参数化：$m_1^{(e)} = (\mathrm{V}_1^{(e)}, \mathrm{E}_1^{(e)})$。我们将 ρ 定义为对图中所有节点沿嵌入维度进行最大池化的操作。

$$\text{For atom embeddings } \mathcal{V}^{(e)} = \begin{bmatrix} v_{1,1} & \dots & v_{1,d} \\ \dots & & \\ v_{n,1} & \dots & v_{n,d} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{n\times d},$$

$$\rho(\mathcal{V}^{(e)}) \in \mathbb{R}^d, \text{ where } [\rho(\mathcal{V}^{(e)})]_j = \max_i v_{ij}.$$

现在，我们可以将嵌入空间中两个分子之间的距离定义为它们逐元素最大值之差的 l_2 范数：

$$d_\rho(m_1, m_2) = \|\rho(\mathcal{V}_1) - \rho(\mathcal{V}_2)\|_2 \tag{2}$$

也可以将公式 2应用于作为模型输入的初始特征空间：

$$m_1^{(f)} = (\mathcal{V}_1^{(f)}, \mathcal{E}_1^{(f)})$$

模型的特征空间就是分子的初始数值表示。机器学习模型通常将原子级特征空间定义为数值向量，用于编码原子的元素类型、原子电荷、原子质量、化合价和/或其他原子级量。

基于指纹的距离。衡量两个分子之间距离的第三种指标是它们的扩展连接指纹（ECFP）之间的 Tanimoto 距离 d_τ。ECFP 是一个二进制字符串，用于表示给定分子中是否存在多种二维化学子结构中的每一种。这种 Tanimoto 距离是学术界和工业界最常用的分子相似性度量之一 [27]，其定义为一对分子共有的化学子结构数量除以任一分子中存在的化学子结构总数。较高的值表示一对分子具有相同的组成部分，但不一定意味着这些部分以相同的方式相互连接，或在三维空间中的位置相似。

Kendall Tau 度量。 虽然可以定义各种指标来确定分子空间中分子之间的距离，但比较不同分子空间之间的距离则更为复杂。我们可以将两对分子之间的距离抽象为一种排序：根据所有分子与单个锚定分子之间的距离进行排名。通过对一个分子空间中所有分子与锚定分子的相似性进行排名，我们可以量化其他分子空间相对于同一锚定分子所产生的排序有多相似或不同。

我们采用 Kendall Tau 秩距离 [20]，（也称为冒泡排序距离）来量化一种分子相似性排序与公式 1 所导出的公式 1基于对接的排序之间的相似程度。Kendall Tau 秩距离定义如下：

$$K_d(\tau_1, \tau_2) = |(i,j) : i < j, \{[\tau_1(i) \wedge \tau_2(i) > \tau_2(j)] \vee [\tau_1(i) > \tau_1(j) \wedge \tau_2(i) < \tau_2(j)]\}|$$

其中 τ_1 (i) 和 τ_2 (i) 分别表示根据排序 i 和 τ_1 以及 τ_2得出的分子的排名。直观而言，Kendall Tau 统计了通过冒泡排序将 IGNITE 嵌入空间、特征空间或 ECFP 空间中的排序转换为对接空间中的排序所需的交换次数。对于同一锚定分子，两个分子空间之间的 Kendall Tau 秩距离越小，它们在与该锚定分子相关的分子空间结构意义上就越“相似”。

研究结果。 一种朴素的 Kendall Tau 分析会比较(32,547 ×32,547)空间的乘积空间，并将合成数据集中每个唯一分子作为锚定分子，与所有其他分子进行比较。由于这种比较会超出我们的计算资源，我们改为随机抽取 100 个锚定分子，以比较各种分子空间所产生的相对排序与

公式 1 中基于对接的距离所产生的排序公式 1。这项分析近似衡量各种分子空间与基于对接的空间有多“相似”；该空间直接编码分子可能采用的各种三维几何构型，以及分子能够形成的化学相互作用。

我们的发现总结于表 1 ，结果表明，按照IGNITE嵌入空间中的距离对分子进行排序，与按照对接空间中的距离所产生的排序最为相似。要使 ECFP 空间中的分子排序与对接排序一致，平均需要比4.5 百万次更多的交换次数。类似地，与IGNITE 嵌入空间相比，特征空间需要额外进行77 百万次交换，才能将其结构重新排序，使之与对接空间相匹配。IGNITE表 1 中的 “ 随机 ” 项表 1 代表随机构建的分子空间，可作为比较的参考值。

表 1：肯德尔 τ 分析。分数为随机选取的 100 个小分子的平均值。交换次数表示使用肯德尔 τ 将某一排序转换为基于对接的排序所需的平均交换次数。归一化肯德尔 τ 为交换次数除以排序中的分子数量。

分子空间	交换次数（↓）	归一化肯德尔 τ（↓）
对接	0	0
IGNITE	2.96×10^7	0.386
特征	3.73×10^7	0.488
ECFP	3.28×10^7	0.429
随机	3.83×10^7	0.50

4.2 可视化示例

作为定量分析的补充，我们对两种二维化学结构不同、但已知在与生物靶标结合时会呈现相似三维构象的小分子进行定性分析。我们选取 CHEMBL200234 和左异丙肾上腺素作为小分子，并将β_1-肾上腺素能受体（B1AR）作为蛋白质靶标。尽管这两种分子的化学结构截然不同，如图 2所示，但通过考察它们各自与 B1AR 结合的实验测定结构可以发现，它们具有相似的三维构象，并与目标形成相似的化学相互作用（例如氢键）。

鉴于这两个分子的化学结构迥异，我们原本会认为，它们在 ECFP 空间中的 Tanimoto 距离会表明二者相似度较低；但 IGNITE 是否学到了这两个分子共有的复杂分子特征?

为了严谨地回答这个问题，我们随机抽取 100，000 个小分子，并根据它们与 CHEMBL200234 以及左异丙肾上腺素的距离，对全部 100，002 个小分子（随机抽取的 100，000 个分子 + CHEMBL200234 和左异丙肾上腺素）进行排序。然后，我们分别提取左异丙肾上腺素在 CHEMBL200234 的排序列表中的索引，以及 CHEMBL200234 在左异丙肾上腺素的排序列表中的索引，并计算二者的平均值，以确定综合得分。

按照 Tanimoto 距离，CHEMBL200234 将左异丙肾上腺素排在第 50，204 位，而左异丙肾上腺素将 CHEMBL200234 排在第 67，119位。相比之下，按照 IGNITE 嵌入距离，CHEMBL200234 将左异丙肾上腺素排在第 31，650 位，而左异丙肾上腺素将 CHEMBL200234 排在第34，551位。这个例子（见 图 2）表明，即使化学结构不同的分子，在 IGNITE 嵌入空间中也可能彼此相对接近。结合第 4.1 节的结果，这一发现支持了这样一种假设：通过在结合能上进行预训练而学得的分子嵌入，会隐式编码复杂的分子特征。

5 实验与讨论

我们的目标是确定 IGNITE 是否能提升分子性质预测中的小样本学习性能。我们的分析基于两种条件，这些条件反映了学术界和工业界常见的限制：现有模型可能能够高效运行，但用于实现新方法并对其进行调优的人力和计算能力有限：

- **模型无关**：IGNITE 应适用于多种架构和学习算法，并在其中发挥作用。

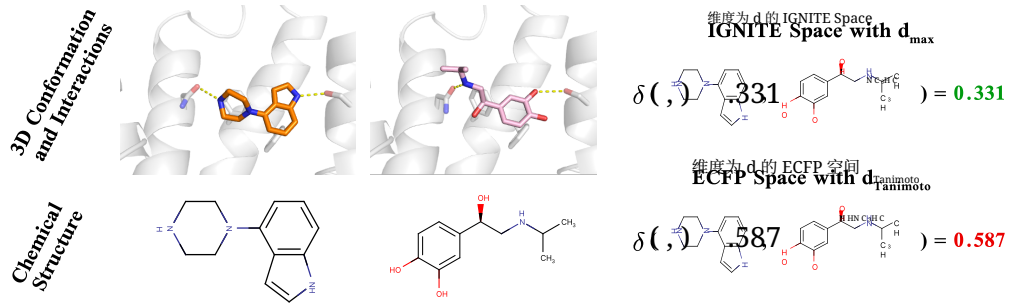

图 2：虽然这两个分子的二维结构截然不同，但它们可以采取相似的三维构象，并与靶蛋白形成相似的相互作用。图中展示了这些分子与β_1-肾上腺素能受体形成复合物时的结构，黄色虚线表示氢键。这些分子在嵌入空间中的距离相对较近，在随机选取的一组分子中处于第33百分位；相比之下，使用 ECFP 空间中的 Tanimoto系数衡量时，则处于第58百分位。

- **最小修改**：将初始特征空间替换为IGNITE嵌入空间，无需进行大量修改或超参数调优即可发挥作用。

在实验评估中，我们选择了 FS-Mol [31], ，这是一个小样本学习基准测试，旨在反映药物发现中所用数据集的规模和范围，以及 3 个来自 MoleculeNet [38]基准套件的数据集。

FS-Mol 简介。FS-Mol 是一个小样本分子属性预测基准测试，用于衡量小分子与蛋白质靶标的相互作用。该数据集涵盖 5，120 种蛋白质和 233，786 种不同的小分子。平均而言，每种蛋白质有 94 条小分子测量记录；该基准测试旨在预测这些小分子是否会抑制蛋白质靶标。

该基准测试采用了一种独特的指标， Δ精确率-召回率曲线下面积（AUPRC），即相对于随机猜测基线的精确率-召回率曲线下面积（AUPRC）的变化幅度。FS-Mol 中许多蛋白质靶标的标签分布高度不平衡；大多数小分子不会抑制特定的蛋白质靶标。在这种情况下，衡量 AUPRC 的相对变化通常比衡量其绝对值更有意义，这样标签分布均衡的靶标就不会掩盖标签分布高度不平衡的靶标在性能上的提升（或下降）。

FS-Mol实验设置。 Stanley 等人 [31] 为该基准测试提出了多个小样本学习基线。我们选取其中表现最好的三个：多任务预训练后进行单任务微调（MT） [7],模型无关元学习（MAML） [13], 以及原型网络（PROTO） [30]。我们的目标是确定，仅通过修改这些方法所使用的分子特征，能否提升其性能。

这组基线符合我们的“模型无关”标准，因为多任务学习、MAML 和 PROTO 的学习范式各不相同。例如，多任务学习构建适用于所有任务的分子表示，MAML 学习可快速适配的表示，而 PROTO 则利用学习到的表示中的距离概念（而非内积）来预测分子的标签。尽管这些基线彼此不同，但它们都使用线性变换，将输入特征空间转换为模型的隐藏维度表示空间。我们只需将这一初始隐藏维度表示空间替换为 IGNITE嵌入空间。此项改动实际上简化了小样本学习算法：移除初始嵌入层，从而降低计算复杂度和运行时间复杂度。

遵循“最小修改”标准，我们不会针对使用 IGNITE 嵌入的小样本学习方法进行任何额外的超参数调优。我们直接采用 Stanley 等人针对每个基线模型找到的超参数。 [31] 我们在小样本学习方法前加上IGNITE-，以表明该模型使用了 IGNITE 嵌入。

FS-Mol 结果。 表 2表明，IGNITE 嵌入显著提升了多任务学习在靶标抑制预测上的表现，且在较小的支持集大小划分中提升最为明显。这一结果很可能是因为IGNITE 能够编码与测试集中的蛋白质靶标相关的复杂分子特征，而多任务学习难以将这些特征纳入其学习到的表征

表 2：FS-Mol 测试集划分中 157 个靶标的 FS-Mol 分类性能。我们报告平均值 ΔAUPRC，以及 10 次使用不同随机种子的训练运行所得的标准误。多任务学习和 MAML 的性能数据引自 [31]。PROTO 的重新评估仅使用图级特征。

方法	支持集大小				
	16	32	64	128	256
MT	0.112 ± 0.005	0.144 ± 0.006	0.177 ± 0.008	0.223 ± 0.008	0.237 ± 0.018
IGNITE-多任务学习	0.157 ± 0.007	0.191 ± 0.008	0.221 ± 0.008	0.259 ± 0.009	0.281 ± 0.020
% 变化	**Δ40.2%**	**Δ32.6%**	**Δ24.9%**	**Δ16.1%**	**Δ18.6%**
MAML	0.160 ± 0.008	0.167 ± 0.008	0.173 ± 0.008	0.192 ± 0.009	0.186 ± 0.019
IGNITE-MAML	0.164 ± 0.008	0.173 ± 0.008	0.183 ± 0.008	0.204 ± 0.008	0.193 ± 0.018
% 变化	**Δ2.5%**	**Δ3.6%**	**Δ5.8%**	**Δ6.3%**	**Δ3.8%**
PROTO	0.185 ± 0.008	0.224 ± 0.009	0.256 ± 0.009	0.290 ± 0.009	0.263 ± 0.018
IGNITE-PROTO	0.195 ± 0.008	0.232 ± 0.009	0.263 ± 0.009	0.297 ± 0.009	0.283 ± 0.019
% 变化	**Δ5.4%**	**Δ3.6%**	**Δ2.7%**	**Δ2.4%**	**Δ7.6%**

表 3：MoleculeNet基准套件中 BACE 分类数据集的结果。我们报告平均精确率-召回率曲线下面积，以及基于不同随机种子的 10 次训练运行计算的标准误。

方法	支持集大小				
	16	32	64	128	256
MT	0.547 ± 0.064	0.600 ± 0.063	0.652 ± 0.051	0.696 ± 0.037	0.738 ± 0.028
IGNITE-多任务学习	0.574 ± 0.08	0.674 ± 0.039	0.719 ± 0.025	0.739 ± 0.037	0.784 ± 0.014
变化百分比	**Δ4.9%**	**Δ12.3%**	**Δ10.3%**	**Δ6.2%**	**Δ6.2%**
MAML	0.510 ± 0.026	0.508 ± 0.035	0.548 ± 0.065	0.568 ± 0.075	0.649 ± 0.016
IGNITE-MAML	0.620 ± 0.027	0.633 ± 0.031	0.643 ± 0.043	0.668 ± 0.037	0.685 ± 0.041
% 变化	**Δ21.6%**	**Δ24.6%**	**Δ17.3%**	**Δ17.6%**	**Δ5.5%**

仅使用 16 个训练样本即可实现这一效果。随着支持集大小增加，性能提升幅度有所减小，但在 256 时有所回升。Stanley 等人也观察到了这一现象 [31]，其原因是测试集中实际包含至少 256 个样本、可用于评估 256 大小支持集划分的蛋白质靶标很少。

我们还分析了IGNITE——一种基于多任务学习范式开发的方法——是否也能提升其他小样本学习算法（如原型网络或 MAML）的性能。由于各学习算法所依赖的归纳偏置差异很大，这一设想颇具挑战。出乎意料的是，我们在表 2 中的发现表明，在所有支持集划分下，PROTO 和 MAML 的性能均得到稳定提升。通过采用一种与下游小样本学习算法相契合的方法来学习 IGNITE 嵌入，或许能够进一步提升 PROTO 和 MAML 的性能。我们将这一探索留待未来工作。

MoleculeNet 描述与设置。MoleculeNet [38] 是一个涵盖多种不同分子性质的基准套件。虽然每个数据集都可以独立使用，但我们通过在规模更大的 FS-Mol 基准测试上进行元训练、从 MoleculeNet 数据集中采样一个支持集，并将该数据集中其余所有样本指定为查询集，从而将其调整为小样本学习设置。由于 FS-Mol 是一个二元预测基准测试，我们仅选取 MoleculeNet 基准测试中的二元预测任务，并选择 BACE、HIV 和 TOX21 进行实验分析。BACE 用于测量小分子是否会抑制人体 β–分泌酶-1。它包含单个任务，涉及 1,522 个小分子的测量数据。Tox21 用于测量小分子对多个不同生物靶标（如核受体和应激通路）的毒性。我们剔除了类别不平衡严重的靶标，最终数据集包含 4 个靶标的 7,831 项毒性测量数据。HIV 用于测量小分子是否会抑制 HIV 复制。它由单个任务构成，涵盖 41,127 个小分子。该数据集极度不平衡，而 MT 和 MAML 都要求每个类别至少包含两个样本——一个用于训练，另一个用于在支持集上微调时提前停止——因此我们无法在较小的支持集大小下评估 HIV。

由于模型是在 FS-Mol 上进行预训练的，我们采用与先前评估相同的微调超参数和方法；未对 IGNITE 进行额外的超参数调优。不过，与我们在 FS-Mol 上的分析不同，我们报告精确率-召回率曲线下面积（AUPRC），即精确率-召回率曲线下的面积，

表 4：Tox21 分类在 4 个靶标上的表现，这些靶标用于测量小分子在特定生物通路或核受体中的毒性。我们报告 10 次采用不同随机种子的训练运行所得精确率-召回率曲线下面积的平均值及标准误。

方法	支持集大小				
	16	32	64	128	256
MT	0.120 ± 0.006	0.140 ± 0.013	0.155 ± 0.015	0.166 ± 0.019	0.198 ± 0.025
IGNITE-多任务学习	0.150 ± 0.017	0.148 ± 0.017	0.173 ± 0.019	0.194 ± 0.031	0.242 ± 0.034
变化百分比	**Δ25.1%**	**Δ5.9%**	**Δ11.7%**	**Δ16.6%**	**Δ22.8%**
MAML	0.131 ± 0.009	0.130 ± 0.009	0.131 ± 0.009	0.131 ± 0.010	0.134 ± 0.008
IGNITE-MAML	0.124 ± 0.009	0.134 ± 0.010	0.136 ± 0.011	0.142 ± 0.012	0.163 ± 0.020
% 变化	**−Δ5.2%**	**Δ3.1%**	**Δ3.8%**	**Δ8.2%**	**Δ21.7%**

以使我们的评估与 MoleculeNet 基准测试保持一致 [38]。此外，由于实现方面的挑战，我们不再评估 PROTO，而是专注于多任务学习和 MAML。

MoleculeNet 结果。我们在 Molecu- leNet 数据集上的结果反映了我们在 FS-Mol 上的发现：IGNITE 似乎几乎总能提升小样本学习的性能。首先，在衡量对 β-secretase-1 酶抑制作用的 BACE 分类数据集上，我们发现，使用 IGNITE 嵌入增强 MT 和 MAML，可显著提升各种支持集大小下的性能。我们的发现总结于表 3。不过，与我们在 FS-Mol 上的发现不同，这次 MAML 获益最大，在支持集大小为 32 时，精确率-召回率曲线下面积提高了近 25%。

表 5：Molecu- leNet 基准套件中 HIV 数据集上的结果。我们报告了在 10 次采用不同随机种子的训练运行中计算得到的平均精确率-召回率曲线下面积及其标准误。

方法	支持集大小	
	128	256
MT	0.062 ± 0.035	0.078 ± 0.033
IGNITE-多任务学习	0.066 ± 0.029	0.087 ± 0.035
变化百分比	**Δ6.5%**	**Δ11.5%**
MAML	0.053 ± 0.015	0.060 ± 0.023
IGNITE-MAML	0.070 ± 0.021	0.068 ± 0.016
% 变化	**Δ32.1%**	**Δ13.3%**

Tox 21 评估中也呈现出类似结果测量小分子的毒性。如表 4所示，除 MAML 在16 的支持集大小下外，MT 和 MAML 在所有支持集划分上的性能均有所提升。鉴于在最小支持集大小下性能有所下降，而在其他所有支持集划分下性能均有提升，我们认为这一结果可能是异常值，由于在微调时采样支持集样本点所用的随机种子特别不利所致。较小的支持集划分对采样更为敏感，训练样本的选择会对模型预测产生过大的影响。

HIV 基准测试用于衡量小分子是否会抑制 HIV 复制，这进一步支持了我们先前的发现：如IGNITE 所示，表 5显示，IGNITE 显著提升了 MT 和 MAML 的精确率-召回率曲线下面积。鉴于该数据集的标签极度不平衡，因此尤其具有挑战性。由于 MT 和 MAML 要求支持集中每个类别至少包含两个样本，我们无法在较小的支持集划分下评估该数据集。不过，这种设置实际上非常贴近现实中的药物发现情形：极少有分子表现出所需的特性。尤其令人振奋的是，IGNITE似乎能够提升小样本学习方法在这类数据分布上的性能。

6 结论

在这项工作中，我们开发了分子嵌入，用于编码复杂的分子特征——例如分子可能采用的各种三维几何构型，或其能够形成的化学相互作用类型——以提升小样本学习算法在分子性质预测中的表现。我们对 IGNITE 嵌入空间的分析表明，这些特征实际上由嵌入编码。此外，我们对4 个分子性质预测基准测试进行了实证分析，涉及的性质范围从对蛋白质靶标的抑制作用到小分子的毒性。结果表明，IGNITE几乎总能提升 3 种流行但迥异的小样本学习算法的表现。此外，将IGNITE整合到小样本学习算法中只需进行最小修改，无需额外的超参数调优。

我们希望未来的工作能够进一步改进我们的方法。可能的改进方向包括利用生成式扩散模型的最新进展来替代基于物理原理的分子对接，或扩大规模，使用更多合成数据和表达能力更强的架构。

致谢与资金披露

我们衷心感谢 DARPA（项目编号：HR00112190039（TAMI）、N660011924033（MCS））、ARO（项目编号：W911NF-16-1-0342（MURI）、W911NF-16-1-0171（DURIP））、NSF（项目编号：OAC-1835598（CINES）、OAC-1934578（HDR）、CCF-1918940（Expeditions））、NIH（项目编号：3U54HG010426-04S1（HuBMAP））、斯坦福数据科学倡议、吴蔡神经科学研究所、Amazon、Docomo、GSK、Hitachi、Intel、JPMorganChase、Juniper Networks、KDDI、NEC 和 Toshiba 的支持。

内容完全由作者负责，不一定代表资助机构的官方观点。

参考文献

[1] Walid Ahmad、Elana Simon、Seyone Chithrananda、Gabriel Grand 和 Bharath Ramsundar。Chemberta-2：迈向化学基础模型。*arXiv*预印本 *arXiv:2209.01712*，2022。[2] Han Altae-Tran、Bharath Ramsundar、Aneesh S Pappu 和 Vijay Pande。利用单样本学习开展低数据药物发现。*ACS central science*，3(4)，2017。[3] Antreas Antoniou、Harri Edwards 和 Amos Storkey。如何训练你的 MAML。收录于第七届国际学习表征会议，2019。[4] Thomas Bachlechner、Bodhisattwa Prasad Majumder、Henry Mao、Gary Cottrell 和 Julian McAuley。ReZero：你所需要的一切——大深度下的快速收敛。收录于人工智能中的不确定性。PMLR，2021。[5] Caterina Bissantz、Bernd Kuhn 和 Martin Stahl。药物化学家分子相互作用指南。*Journal of medicinal chemistry*，53(14)，2010。[6] David C Blakemore、Luis Castro、Ian Churcher、David C Rees、Andrew W Thomas、David M Wilson 和 Anthony Wood。有机合成为药物发现带来转型机遇。*Nature chemistry*，10(4)，2018。[7] Rich Caruana。多任务学习。*Machine learning*，28(1)，1997。[8] Wenlin Chen、Austin Tripp 和 José Miguel Hernández-Lobato。通过隐式微分进行自适应高斯过程的元学习特征表示。*arXiv*预印本 *arXiv:2205.02708*，2022。[9] Kangway V Chuang、Laura M Gunsalus 和 Michael J Keiser。面向药物化学的分子表示学习：简述。*Journal of Medicinal Chemistry*，63(16)，2020。[10] Gabriele Corso、Luca Cavalleri、Dominique Beaini、Pietro Liò 和 Petar Veli˘ckovi´c。图网络的主邻域聚合。神经信息处理系统进展，33，2020。[11] Xiaomin Fang、Lihang Liu、Jieqiong Lei、Donglong He、Shanzhuo Zhang、Jingbo Zhou、Fan Wang、Hua Wu 和 Haifeng Wang。ChemRL-GEM：用于属性预测的几何增强分子表示学习。*arXiv*预印本 *arXiv:2106.06130*，2021。[12] Evan N Feinberg、Elizabeth Joshi、Vijay S Pande 和 Alan C Cheng。通过多任务深度特征化提升 ADMET预测。*Journal of medicinal chemistry*，63(16)，2020。[13] Chelsea Finn、Pieter Abbeel 和 Sergey Levine。用于深度网络快速适应的模型无关元学习。收录于国际机器学习会议。PMLR，2017。[14] Richard A Friesner、Jay L Banks、Robert B Murphy、Thomas A Halgren、Jasna J Klicic、Daniel T Mainz、Matthew P Repasky、Eric H Knoll、Mee Shelley、Jason K Perry 等。Glide：一种快速、精确的对接与评分新方法。1. 方法与对接精度评估。*Journal of medicinal chemistry*，47(7)，2004。

[15] Justin Gilmer、Samuel S Schoenholz、Patrick F Riley、Oriol Vinyals 和 George E Dahl。用于量子化学的神经消息传递。收录于国际机器学习会议。PMLR，2017。[16] Kaveh Hassani 和 Amir Hosein Khasahmadi。图上的对比式多视图表示学习。收录于国际机器学习会议。PMLR，2020。[17] W Hu、B Liu、J Gomes、M Zitnik、P Liang、V Pande 和 J Leskovec。图神经网络预训练策略。收录于国际学习表征会议（ICLR），2020。[18] Matthew P. Jacobson、Richard A. Friesner、Zhexin Xiang 和 Barry Honig。晶体环境在决定蛋白质侧链构象中的作用。《分子生物学杂志》，320(3)，2002。ISSN 0022-2836。doi: 10.1016/S0022-2836(02)00470-9。URL http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0022283602004709。[19] Rui Jiao、Jiaqi Han、Wenbing Huang、Yu Rong 和 Yang Liu。面向三维分子图的能量驱动等变预训练。收录于AAAI人工智能会议论文集，第37卷，2023。[20] Maurice G Kendall。《n维几何》。Courier Corporation，2004。[21] DP Kingma。Adam：一种随机优化方法。收录于国际学习表征会议，2014。[22] Olga Maria Lage、María C Ramos、Rita Calisto、Eduarda Almeida、Vitor Vasconcelos 和 Francisca Vicente。针对特定人类疾病的药物发现现行筛选方法。《海洋药物》，16(8)，2018。[23] Shuangli Li、Jingbo Zhou、Tong Xu、Dejing Dou 和 Hui Xiong。GeomGCL：用于分子性质预测的几何图对比学习。收录于AAAI人工智能会议论文集，第36卷，2022。[24] Łukasz Maziarka、Tomasz Danel、Sławomir Mucha、Krzysztof Rataj、Jacek Tabor 和 Stanisław Jastrz.ebski。分子注意力变换器。arXiv预印本 arXiv:2002.08264，2020。[25] Stephen Merity。单头注意力循环神经网络：停止只用你的头脑思考。arXiv预印本 arXiv:1911.11423，2019。[26] S Parasuraman。毒理学筛选。《药理学与药物治疗学杂志》，2(2)，2011。[27] David Rogers 和 Mathew Hahn。扩展连接指纹。《化学信息与建模杂志》，50(5)，2010。[28] Yu Rong、Yatao Bian、Tingyang Xu、Weiyang Xie、Ying Wei、Wenbing Huang 和 Junzhou Huang。面向大规模分子数据的自监督图变换器。神经信息处理系统进展，33，2020。[29] Johannes Schimunek、Philipp Seidl、Lukas Friedrich、Daniel Kuhn、Friedrich Rippmann、Sepp Hochreiter 和 Günter Klambauer。上下文增强的分子表示有助于小样本药物发现。收录于第十一届国际学习表征会议，2022。[30] Jake Snell、Kevin Swersky 和 Richard Zemel。面向小样本学习的原型网络。神经信息处理系统进展，30，2017。[31] Megan Stanley、John F Bronskill、Krzysztof Maziarz、Hubert Misztela、Jessica Lanini、Marwin Segler、Nadine Schneider 和 Marc Brockschmidt。FS-Mol：分子小样本学习数据集。收录于第三十五届神经信息处理系统会议数据集与基准测试专题（第二轮），2021。[32] Ruoxi Sun、Hanjun Dai 和 Adams Wei Yu。图神经网络预训练是否有助于分子表示？神经信息处理系统进展，35，2022。

[33] Hugo Touvron、Matthieu Cord、Alexandre Sablayrolles、Gabriel Synnaeve 和 Hervé Jégou。深入探索图像变换器。载于*IEEE/CVF*国际计算机视觉会议论文集，2021 年。[34] Ashish Vaswani、Noam Shazeer、Niki Parmar、Jakob Uszkoreit、Llion Jones、Aidan N Gomez、Łukasz Kaiser 和 Illia Polosukhin。注意力即所需。神经信息处理系统进展，第 30 卷，2017 年。[35] Yaqing Wang、Abulikemu Abuduweili、Quanming Yao 和 Dejing Dou。用于小样本分子属性预测的属性感知关系网络。神经信息处理系统进展，第 34 卷，2021 年。[36] Michael J Waring、John Arrowsmith、Andrew R Leach、Paul D Leeson、Sam Mandrell、Robert M Owen、Garry Pairaudeau、William D Pennie、Stephen D Pickett、Jibo Wang 等。对四家大型制药公司候选药物淘汰情况的分析。《自然评论：药物发现》，14(7)，2015 年。[37] Lirong Wu、Haitao Lin、Cheng Tan、Zhangyang Gao 和 Stan Z Li。图的自监督学习：对比式、生成式还是预测式。*IEEE*知识与数据工程汇刊，2021 年。[38] Zhenqin Wu、Bharath Ramsundar、Evan N Feinberg、Joseph Gomes、Caleb Geniesse、Aneesh S Pappu、Karl Leswing 和 Vijay Pande。MoleculeNet：分子机器学习基准测试。《化学科学》，9(2)，2018 年。[39] Ruibin Xiong、Yunchang Yang、Di He、Kai Zheng、Shuxin Zheng、Chen Xing、Huishuai Zhang、Yanyan Lan、Liwei Wang 和 Tieyan Liu。论变换器架构中的层归一化。载于国际机器学习会议。PMLR，2020 年。[40] Kevin Yang、Kyle Swanson、Wengong Jin、Connor Coley、Philipp Eiden、Hua Gao、Angel Guzman-Perez、Timothy Hopper、Brian Kelley、Miriam Mathea 等。分析用于属性预测的学习型分子表征。《化学信息与建模杂志》，59(8)，2019 年。[41] Yuning You、Tianlong Chen、Yongduo Sui、Ting Chen、Zhangyang Wang 和 Yang Shen。利用增强进行图对比学习。神经信息处理系统进展，第 33 卷，2020 年。[42] Sheheryar Zaidi、Michael Schaarschmidt、James Martens、Hyunjik Kim、Yee Whye Teh、Alvaro Sanchez-Gonzalez、Peter Battaglia、Razvan Pascanu 和 Jonathan Godwin。通过去噪进行分子属性预测预训练。*arXiv* 预印本 *arXiv:2206.00133*，2022 年。[43] Yanqiao Zhu、Yichen Xu、Feng Yu、Qiang Liu、Shu Wu 和 Liang Wang。利用自适应增强进行图对比学习。载于*2021* 年 *Web*会议论文集，2021 年。

附录

A GLIDE 协议

为生成合成数据，我们使用了基于物理的对接方法 GLIDE [14]（Schrödinger 2022-2 版：Maestro，Schrödinger, LLC，纽约，NY，2022 年）。运行 GLIDE 可分为三个步骤：准备小分子、准备蛋白质结构，以及将准备好的小分子对接到准备好的蛋白质结构中。

为了准备一组待对接的小分子，我们从 ChEMBL 中选取了 32，547 个小分子。需要特别指出的是，我们仅使用 ChEMBL 提供小分子示例；我们提取了 SMILES 字符串，完全没有使用注释活性。随后，我们使用 Schrodinger ligprep 工具枚举相关的互变异构状态（例如质子化状态），并在 SMILES 字符串未指定的情况下，枚举最多 32 种立体异构体。
为了准备一组蛋白质结构，我们从 PDBBind 数据库中选取了 1，601 个结构。我们使用 Schrodinger prepwizard 添加氢原子、选择互变异构状态，并使用默认参数[18]进行约束最小化（重原子与起始坐标的偏差在 0.3Å 以内）。PDBBind 中注释的小分子用于确定对接位点的中心，但除此之外未以任何方式使用。
使用 GLIDE 的 SP 模式和默认参数进行对接。对于给定的小分子–蛋白质对，其对接评分定义为该小分子的任一互变异构状态所获得的最佳评分，并计入选择不利互变异构状态的惩罚项。因此，IGNITE除了编码分子的潜在三维几何构型和化学相互作用外，还可能隐式表示其潜在的互变异构状态。我们尝试对所有小分子–蛋白质对进行对接计算，但在某些情况下，对接未能产生合理的构象，或任务因其他原因失败，因此未考虑这些配对。

B 实验设计

我们补充介绍了 IGNITE 的训练细节。虽然这些说明对部分读者可能很有价值，但我们建议有意复现研究结果或基于我们的框架开展工作的读者直接查看代码。我们的代码已随补充材料发布，可从 OpenReview 下载；然而，由于合成数据在磁盘上占用 77 GB，我们无法上传（或提供链接）数据集，否则会破坏匿名性。

B.1 补充训练细节

我们的架构对共享参数采用 5e-5 的学习率，对任务特定参数采用 1e-4 的学习率。对于共享参数和任务特定参数的学习率，我们均使用 100 步的线性预热调度器（从 0 开始，逐步升至指定学习率）。训练过程还采用 Adam [21]默认的 PyTorch 参数，并使用大小为 256 的批次，每批包含 256 个分子。关于 IGNITE 多任务

表 6：基准比较。

数据集	# 任务	# 化合物
FS-Mol 测试集	157	27520
BACE	1	1522
Tox21	4	7831
HIV	1	41127

训练范式，图读出的输出会经过一个隐藏维度为 512 的共享多层感知机，然后针对每个目标使用一个维度为 $[512 \times 1]$ 的任务特定投影层。表 6 比较了我们用于评估的各个基准测试中的小分子总数以及任务数量。我们的实验使用了一块 80 GB 的 Nvidia A100 GPU，模型在 GPU 上大约占用10 GB 内存。

C FS-Mol 的补充实验结果

为进一步深入了解第 5 节中的 FS-Mol 实证结果，我们按目标逐一展示 FS-Mol 测试集中前 50 个靶标在支持集大小为 16、32、64、128，

和 256 时的结果。表 7 展示了多任务学习基线的这些结果，表 8 展示了原型网络基线的这些结果，而表 9 展示了 MAML 基线的结果。高亮值表示在给定支持集大小下，该目标对应的最高结果。

T表 7：在 FS-Mol 测试集的前 50 个任务上测量 Δ精确率-召回率曲线下面积的多任务结果。

任务 ID	16 (IGNITE-多任务学习)	32 (IGNITE-多任务学习)	64 (IGNITE-多任务学习)	128 (IGNITE-多任务学习)	256 (IGNITE)	16 (多任务学习)	32 (多任务学习)	64 (多任务学习)	128 (多任务学习)	256 (多任务学习)
1006005	**0.57 ± 0.05**	**0.62 ± 0.04**	**0.63 ± 0.05**	**0.62 ± 0.05**	nan	0.54 ± 0.03	0.54 ± 0.03	0.55 ± 0.03	0.56 ± 0.06	nan
1066254	**0.71 ± 0.07**	**0.73 ± 0.06**	**0.81 ± 0.06**	0.83 ± 0.10	nan	0.65 ± 0.05	0.64 ± 0.09	0.77 ± 0.07	**0.86 ± 0.11**	nan
1119333	**0.69 ± 0.08**	**0.73 ± 0.05**	**0.78 ± 0.03**	**0.82 ± 0.03**	**0.85 ± 0.02**	0.69 ± 0.07	0.72 ± 0.05	0.76 ± 0.02	0.79 ± 0.04	0.84 ± 0.04
1243967	0.62 ± 0.08	**0.72 ± 0.09**	**0.74 ± 0.05**	**0.80 ± 0.05**	nan	**0.63 ± 0.07**	0.66 ± 0.05	0.71 ± 0.04	0.76 ± 0.05	nan
1243970	**0.66 ± 0.06**	**0.70 ± 0.04**	**0.75 ± 0.05**	**0.77 ± 0.04**	nan	0.63 ± 0.06	0.65 ± 0.04	0.70 ± 0.02	0.75 ± 0.05	nan
1613777	0.52 ± 0.03	0.53 ± 0.04	**0.55 ± 0.02**	**0.57 ± 0.03**	**0.59 ± 0.02**	**0.52 ± 0.04**	**0.53 ± 0.02**	0.54 ± 0.02	0.57 ± 0.02	0.59 ± 0.02
1613800	0.42 ± 0.02	**0.43 ± 0.03**	**0.43 ± 0.02**	0.45 ± 0.02	0.47 ± 0.02	**0.42 ± 0.03**	0.42 ± 0.01	**0.43 ± 0.03**	**0.45 ± 0.02**	**0.47 ± 0.01**
1613898	0.53 ± 0.03	0.54 ± 0.06	0.56 ± 0.04	0.60 ± 0.07	nan	**0.55 ± 0.04**	**0.54 ± 0.06**	**0.58 ± 0.04**	**0.61 ± 0.08**	nan
1613907	**0.62 ± 0.06**	**0.62 ± 0.08**	0.63 ± 0.08	0.66 ± 0.14	nan	0.60 ± 0.05	**0.62 ± 0.07**	**0.67 ± 0.06**	**0.70 ± 0.15**	nan
1613926	**0.67 ± 0.07**	**0.69 ± 0.06**	**0.74 ± 0.06**	**0.85 ± 0.14**	nan	0.61 ± 0.04	0.60 ± 0.06	0.69 ± 0.06	0.73 ± 0.19	nan
1613949	**0.47 ± 0.08**	**0.46 ± 0.06**	**0.54 ± 0.04**	**0.62 ± 0.12**	nan	0.45 ± 0.06	0.45 ± 0.06	0.52 ± 0.06	0.56 ± 0.12	nan
1614027	**0.54 ± 0.03**	**0.56 ± 0.04**	**0.60 ± 0.03**	**0.66 ± 0.02**	**0.69 ± 0.03**	0.53 ± 0.03	**0.56 ± 0.04**	0.59 ± 0.03	0.63 ± 0.02	0.66 ± 0.02
1614153	**0.36 ± 0.01**	**0.38 ± 0.03**	**0.38 ± 0.03**	**0.40 ± 0.02**	**0.40 ± 0.02**	0.36 ± 0.02	0.37 ± 0.03	0.37 ± 0.02	0.38 ± 0.03	0.39 ± 0.01
1614292	**0.37 ± 0.03**	**0.37 ± 0.02**	**0.38 ± 0.02**	**0.38 ± 0.02**	**0.39 ± 0.01**	0.36 ± 0.02	0.37 ± 0.01	0.38 ± 0.02	0.38 ± 0.01	0.38 ± 0.02
1614423	**0.66 ± 0.12**	**0.68 ± 0.10**	**0.72 ± 0.05**	**0.77 ± 0.04**	**0.82 ± 0.02**	0.52 ± 0.05	0.54 ± 0.05	0.59 ± 0.05	0.67 ± 0.04	0.74 ± 0.04
1614433	**0.45 ± 0.04**	0.47 ± 0.06	**0.48 ± 0.04**	**0.50 ± 0.02**	**0.55 ± 0.04**	0.45 ± 0.04	**0.47 ± 0.05**	0.47 ± 0.04	0.49 ± 0.03	0.53 ± 0.04
1614466	**0.47 ± 0.04**	**0.48 ± 0.05**	**0.49 ± 0.03**	**0.49 ± 0.05**	**0.50 ± 0.03**	0.46 ± 0.05	0.47 ± 0.05	0.47 ± 0.04	0.48 ± 0.04	0.48 ± 0.02
1614503	**0.47 ± 0.08**	**0.48 ± 0.09**	**0.52 ± 0.05**	**0.73 ± 0.21**	nan	0.44 ± 0.05	0.44 ± 0.06	0.48 ± 0.08	0.66 ± 0.22	nan
1614508	0.74 ± 0.10	**0.85 ± 0.02**	0.87 ± 0.02	0.90 ± 0.04	nan	**0.76 ± 0.07**	**0.85 ± 0.04**	**0.87 ± 0.03**	**0.91 ± 0.05**	nan
1614522	**0.58 ± 0.04**	**0.61 ± 0.04**	**0.62 ± 0.03**	**0.66 ± 0.01**	**0.66 ± 0.03**	0.54 ± 0.04	0.55 ± 0.02	0.56 ± 0.02	0.58 ± 0.03	0.60 ± 0.02
1737951	**0.64 ± 0.10**	**0.67 ± 0.06**	**0.79 ± 0.05**	**0.85 ± 0.08**	nan	0.55 ± 0.06	0.60 ± 0.08	0.63 ± 0.05	0.72 ± 0.07	nan
1738079	0.50 ± 0.02	0.50 ± 0.04	0.49 ± 0.03	0.48 ± 0.03	nan	**0.52 ± 0.04**	**0.52 ± 0.04**	**0.53 ± 0.03**	**0.56 ± 0.05**	nan
1738362	0.50 ± 0.10	0.46 ± 0.08	0.59 ± 0.09	0.75 ± 0.20	nan	**0.52 ± 0.07**	**0.56 ± 0.11**	**0.62 ± 0.05**	**0.84 ± 0.14**	nan
1738395	**0.51 ± 0.04**	**0.49 ± 0.05**	**0.50 ± 0.04**	**0.54 ± 0.04**	nan	0.49 ± 0.04	0.48 ± 0.03	0.50 ± 0.05	0.51 ± 0.05	nan
1738485	**0.56 ± 0.02**	0.55 ± 0.03	**0.58 ± 0.06**	0.59 ± 0.04	0.65 ± 0.06	0.54 ± 0.04	**0.56 ± 0.03**	0.58 ± 0.04	**0.60 ± 0.06**	**0.68 ± 0.06**
1738502	**0.47 ± 0.06**	**0.50 ± 0.06**	**0.53 ± 0.05**	**0.53 ± 0.03**	**0.58 ± 0.03**	0.37 ± 0.03	0.39 ± 0.02	0.42 ± 0.03	0.45 ± 0.02	0.49 ± 0.04
1738573	0.51 ± 0.02	0.52 ± 0.03	**0.54 ± 0.03**	**0.55 ± 0.02**	**0.57 ± 0.01**	**0.52 ± 0.02**	**0.53 ± 0.01**	0.53 ± 0.01	0.54 ± 0.01	0.56 ± 0.02
1738579	**0.58 ± 0.05**	**0.59 ± 0.05**	**0.59 ± 0.04**	**0.67 ± 0.04**	nan	0.52 ± 0.03	0.54 ± 0.04	0.56 ± 0.03	0.62 ± 0.04	nan
1738633	**0.59 ± 0.06**	**0.68 ± 0.04**	**0.71 ± 0.06**	0.70 ± 0.08	nan	0.57 ± 0.05	0.60 ± 0.08	0.60 ± 0.05	**0.71 ± 0.10**	nan
1794324	0.52 ± 0.04	**0.54 ± 0.03**	0.55 ± 0.03	0.57 ± 0.01	**0.60 ± 0.01**	**0.53 ± 0.03**	0.54 ± 0.03	**0.56 ± 0.03**	**0.58 ± 0.02**	0.60 ± 0.02
1794504	**0.72 ± 0.06**	**0.75 ± 0.05**	**0.81 ± 0.04**	0.85 ± 0.24	nan	0.67 ± 0.04	0.67 ± 0.06	0.73 ± 0.05	**0.90 ± 0.21**	nan
1794519	0.69 ± 0.08	**0.73 ± 0.05**	0.79 ± 0.02	**0.81 ± 0.05**	nan	**0.70 ± 0.06**	0.72 ± 0.05	**0.80 ± 0.03**	0.77 ± 0.07	nan
1794557	**0.52 ± 0.04**	**0.53 ± 0.03**	**0.56 ± 0.04**	**0.58 ± 0.04**	**0.60 ± 0.02**	0.51 ± 0.03	0.53 ± 0.02	0.53 ± 0.03	0.53 ± 0.01	0.54 ± 0.03
1963701	**0.54 ± 0.03**	0.54 ± 0.02	**0.58 ± 0.04**	**0.61 ± 0.04**	**0.65 ± 0.03**	0.53 ± 0.03	**0.54 ± 0.04**	0.56 ± 0.03	0.58 ± 0.03	0.63 ± 0.03
1963705	**0.67 ± 0.09**	**0.75 ± 0.05**	**0.78 ± 0.03**	**0.82 ± 0.03**	**0.84 ± 0.02**	0.65 ± 0.07	0.70 ± 0.06	0.73 ± 0.04	0.78 ± 0.03	0.82 ± 0.02
1963715	**0.61 ± 0.05**	**0.59 ± 0.08**	**0.68 ± 0.04**	**0.72 ± 0.04**	**0.75 ± 0.02**	0.50 ± 0.06	0.50 ± 0.06	0.56 ± 0.04	0.60 ± 0.03	0.65 ± 0.03
1963721	**0.45 ± 0.08**	**0.48 ± 0.08**	**0.55 ± 0.06**	**0.57 ± 0.07**	**0.71 ± 0.09**	0.38 ± 0.05	0.42 ± 0.04	0.44 ± 0.03	0.50 ± 0.05	0.61 ± 0.08
1963723	**0.70 ± 0.10**	**0.75 ± 0.09**	**0.80 ± 0.03**	**0.84 ± 0.02**	**0.86 ± 0.02**	0.61 ± 0.05	0.69 ± 0.05	0.74 ± 0.04	0.78 ± 0.03	0.81 ± 0.02
1963731	**0.74 ± 0.06**	**0.79 ± 0.03**	**0.82 ± 0.02**	**0.87 ± 0.02**	**0.89 ± 0.02**	0.63 ± 0.08	0.70 ± 0.04	0.75 ± 0.02	0.79 ± 0.03	0.82 ± 0.02
1963741	**0.60 ± 0.05**	**0.65 ± 0.05**	**0.70 ± 0.04**	**0.75 ± 0.03**	**0.78 ± 0.02**	0.51 ± 0.08	0.57 ± 0.06	0.59 ± 0.05	0.64 ± 0.04	0.71 ± 0.03
1963756	**0.63 ± 0.09**	**0.75 ± 0.04**	**0.77 ± 0.03**	**0.80 ± 0.02**	**0.83 ± 0.02**	0.57 ± 0.07	0.67 ± 0.05	0.69 ± 0.06	0.75 ± 0.02	0.79 ± 0.02
1963773	**0.59 ± 0.06**	**0.61 ± 0.07**	**0.65 ± 0.04**	**0.69 ± 0.03**	**0.72 ± 0.02**	0.54 ± 0.06	0.57 ± 0.06	0.61 ± 0.05	0.65 ± 0.03	0.70 ± 0.03
1963799	**0.58 ± 0.07**	**0.64 ± 0.04**	**0.68 ± 0.04**	**0.71 ± 0.03**	**0.74 ± 0.04**	0.48 ± 0.06	0.55 ± 0.05	0.58 ± 0.07	0.63 ± 0.05	0.68 ± 0.07
1963810	**0.78 ± 0.06**	**0.81 ± 0.05**	**0.85 ± 0.02**	**0.86 ± 0.02**	**0.88 ± 0.01**	0.67 ± 0.06	0.73 ± 0.05	0.76 ± 0.06	0.80 ± 0.04	0.84 ± 0.02
1963818	**0.71 ± 0.05**	**0.74 ± 0.04**	**0.78 ± 0.03**	**0.80 ± 0.03**	**0.82 ± 0.02**	0.66 ± 0.07	0.68 ± 0.06	0.72 ± 0.03	0.76 ± 0.03	0.79 ± 0.02
1963819	**0.61 ± 0.07**	**0.67 ± 0.06**	**0.73 ± 0.06**	**0.77 ± 0.05**	**0.82 ± 0.01**	0.48 ± 0.05	0.56 ± 0.07	0.60 ± 0.08	0.68 ± 0.06	0.77 ± 0.02
1963824	**0.59 ± 0.05**	**0.66 ± 0.05**	**0.70 ± 0.03**	**0.74 ± 0.03**	**0.77 ± 0.05**	0.54 ± 0.04	0.59 ± 0.05	0.64 ± 0.04	0.64 ± 0.04	0.69 ± 0.03
1963825	**0.62 ± 0.06**	**0.69 ± 0.04**	**0.70 ± 0.05**	**0.75 ± 0.05**	**0.81 ± 0.04**	0.57 ± 0.04	0.61 ± 0.04	0.64 ± 0.04	0.65 ± 0.04	0.69 ± 0.03
1963827	**0.74 ± 0.09**	**0.78 ± 0.06**	**0.84 ± 0.03**	**0.86 ± 0.01**	**0.88 ± 0.02**	0.71 ± 0.06	0.72 ± 0.08	0.79 ± 0.05	0.82 ± 0.02	0.84 ± 0.02
1963831	**0.61 ± 0.10**	**0.69 ± 0.07**	**0.76 ± 0.02**	**0.78 ± 0.04**	**0.81 ± 0.05**	0.55 ± 0.11	0.61 ± 0.07	0.69 ± 0.06	0.74 ± 0.05	0.77 ± 0.04
1963838	**0.56 ± 0.04**	**0.57 ± 0.05**	**0.59 ± 0.06**	**0.67 ± 0.05**	nan	0.54 ± 0.05	0.55 ± 0.04	0.58 ± 0.04	0.62 ± 0.06	nan

表 8：PROTO 在 FS-Mo 测试集前 50 个任务上测得的 Δ精确率-召回率曲线下面积 1.

任务 ID	16 (IGNITE-PROTO)	32 (IGNITE-PROTO)	64 (IGNITE-PROTO)	128 (IGNITE-PROTO)	256 (IGNITE-PROTO)	16 (PROTO)	32 (PROTO)	64 (PROTO)	128 (PROTO)	256 (PROTO)
1006005	**0.61 ± 0.05**	**0.63 ± 0.04**	**0.66 ± 0.04**	**0.69 ± 0.06**	nan	0.56 ± 0.06	0.61 ± 0.05	0.65 ± 0.03	0.66 ± 0.07	nan
1066254	**0.72 ± 0.07**	0.77 ± 0.06	**0.84 ± 0.04**	**0.87 ± 0.10**	nan	0.71 ± 0.08	**0.78 ± 0.06**	0.82 ± 0.06	0.85 ± 0.08	nan
1119333	**0.73 ± 0.05**	**0.74 ± 0.06**	**0.78 ± 0.03**	**0.82 ± 0.02**	**0.84 ± 0.04**	0.71 ± 0.06	0.72 ± 0.04	**0.78 ± 0.03**	0.81 ± 0.02	0.83 ± 0.04
1243967	**0.78 ± 0.03**	**0.81 ± 0.04**	**0.83 ± 0.03**	**0.84 ± 0.03**	nan	0.73 ± 0.05	0.76 ± 0.04	0.80 ± 0.03	0.81 ± 0.03	nan
1243970	**0.75 ± 0.05**	**0.79 ± 0.04**	**0.81 ± 0.03**	**0.85 ± 0.03**	nan	0.71 ± 0.07	0.74 ± 0.04	0.81 ± 0.03	0.82 ± 0.05	nan
1613777	0.52 ± 0.02	**0.54 ± 0.03**	0.56 ± 0.03	0.59 ± 0.02	0.61 ± 0.02	**0.52 ± 0.04**	0.54 ± 0.04	**0.57 ± 0.03**	**0.60 ± 0.04**	**0.62 ± 0.03**
1613800	**0.42 ± 0.02**	**0.44 ± 0.02**	**0.46 ± 0.02**	**0.48 ± 0.02**	**0.50 ± 0.01**	0.41 ± 0.03	0.43 ± 0.03	0.45 ± 0.02	0.46 ± 0.02	0.48 ± 0.02
1613898	0.52 ± 0.02	0.55 ± 0.04	0.54 ± 0.04	**0.61 ± 0.07**	nan	**0.55 ± 0.04**	**0.55 ± 0.05**	**0.55 ± 0.03**	0.57 ± 0.08	nan
1613907	**0.56 ± 0.04**	0.58 ± 0.04	0.63 ± 0.04	0.64 ± 0.14	nan	0.55 ± 0.06	**0.62 ± 0.06**	**0.66 ± 0.07**	**0.68 ± 0.10**	nan
1613926	**0.70 ± 0.04**	**0.74 ± 0.06**	**0.77 ± 0.04**	**0.88 ± 0.12**	nan	0.65 ± 0.08	0.70 ± 0.06	0.76 ± 0.04	0.86 ± 0.15	nan
1613949	**0.57 ± 0.08**	**0.63 ± 0.05**	**0.67 ± 0.06**	**0.67 ± 0.10**	nan	0.53 ± 0.05	0.57 ± 0.04	0.58 ± 0.05	0.63 ± 0.10	nan
1614027	0.53 ± 0.02	**0.57 ± 0.02**	0.60 ± 0.03	0.64 ± 0.02	**0.67 ± 0.02**	**0.55 ± 0.02**	0.57 ± 0.04	**0.61 ± 0.04**	**0.64 ± 0.02**	0.67 ± 0.02
1614153	**0.35 ± 0.02**	0.37 ± 0.01	0.36 ± 0.02	0.39 ± 0.01	**0.41 ± 0.01**	0.34 ± 0.03	**0.37 ± 0.02**	**0.37 ± 0.02**	**0.39 ± 0.01**	**0.41 ± 0.01**
1614292	**0.36 ± 0.02**	0.38 ± 0.03	0.39 ± 0.02	0.40 ± 0.02	0.41 ± 0.02	**0.36 ± 0.02**	**0.39 ± 0.02**	**0.41 ± 0.02**	**0.42 ± 0.03**	**0.44 ± 0.02**
1614423	**0.68 ± 0.06**	**0.72 ± 0.04**	**0.76 ± 0.02**	**0.78 ± 0.02**	**0.79 ± 0.04**	0.54 ± 0.07	0.58 ± 0.05	0.67 ± 0.04	0.73 ± 0.02	0.77 ± 0.02
1614433	**0.49 ± 0.04**	**0.50 ± 0.04**	**0.51 ± 0.03**	**0.53 ± 0.02**	0.54 ± 0.02	0.46 ± 0.04	0.48 ± 0.02	0.48 ± 0.03	0.52 ± 0.03	**0.54 ± 0.04**
1614466	0.47 ± 0.03	0.48 ± 0.04	0.49 ± 0.01	0.51 ± 0.03	0.53 ± 0.03	**0.48 ± 0.05**	**0.53 ± 0.05**	**0.53 ± 0.04**	**0.57 ± 0.02**	**0.58 ± 0.01**
1614503	**0.49 ± 0.03**	0.51 ± 0.07	0.56 ± 0.06	0.70 ± 0.22	nan	0.49 ± 0.07	**0.55 ± 0.05**	**0.59 ± 0.02**	**0.76 ± 0.22**	nan
1614508	0.84 ± 0.02	0.85 ± 0.03	0.86 ± 0.03	**0.89 ± 0.04**	nan	**0.86 ± 0.02**	**0.86 ± 0.02**	**0.87 ± 0.02**	0.88 ± 0.04	nan
1614522	**0.58 ± 0.04**	**0.61 ± 0.03**	0.60 ± 0.03	**0.64 ± 0.02**	0.67 ± 0.03	**0.58 ± 0.03**	0.60 ± 0.03	**0.61 ± 0.03**	**0.64 ± 0.02**	**0.67 ± 0.02**
1737951	**0.65 ± 0.08**	**0.71 ± 0.06**	**0.76 ± 0.04**	**0.80 ± 0.06**	nan	0.63 ± 0.06	0.67 ± 0.05	0.71 ± 0.04	0.75 ± 0.07	nan
1738079	0.49 ± 0.03	0.49 ± 0.03	0.50 ± 0.04	0.49 ± 0.04	nan	**0.49 ± 0.02**	**0.49 ± 0.03**	**0.50 ± 0.03**	**0.54 ± 0.06**	nan
1738362	0.46 ± 0.06	0.55 ± 0.08	0.59 ± 0.06	0.64 ± 0.22	nan	**0.49 ± 0.10**	**0.56 ± 0.09**	**0.65 ± 0.05**	**0.82 ± 0.17**	nan
1738395	0.53 ± 0.05	0.51 ± 0.04	0.52 ± 0.03	0.57 ± 0.04	nan	**0.53 ± 0.04**	**0.53 ± 0.04**	**0.54 ± 0.05**	**0.58 ± 0.06**	nan
1738485	0.54 ± 0.04	0.57 ± 0.04	0.58 ± 0.05	**0.63 ± 0.04**	**0.69 ± 0.05**	**0.58 ± 0.03**	**0.59 ± 0.03**	**0.61 ± 0.04**	0.62 ± 0.03	0.64 ± 0.07
1738502	0.41 ± 0.07	0.44 ± 0.05	0.47 ± 0.04	0.49 ± 0.03	**0.53 ± 0.03**	**0.42 ± 0.07**	**0.45 ± 0.05**	**0.48 ± 0.03**	**0.49 ± 0.02**	0.52 ± 0.02
1738573	0.52 ± 0.03	**0.53 ± 0.03**	**0.54 ± 0.02**	**0.56 ± 0.02**	**0.57 ± 0.02**	**0.53 ± 0.02**	0.52 ± 0.02	0.53 ± 0.02	0.55 ± 0.01	0.55 ± 0.01
1738579	0.52 ± 0.04	0.55 ± 0.05	0.58 ± 0.02	**0.65 ± 0.06**	nan	**0.55 ± 0.06**	**0.59 ± 0.03**	**0.59 ± 0.03**	0.64 ± 0.04	nan
1738633	0.56 ± 0.04	0.58 ± 0.04	**0.59 ± 0.05**	**0.63 ± 0.08**	nan	**0.56 ± 0.05**	**0.59 ± 0.05**	0.59 ± 0.04	0.62 ± 0.13	nan
1794324	0.50 ± 0.03	0.51 ± 0.03	0.53 ± 0.03	0.57 ± 0.02	0.60 ± 0.02	**0.53 ± 0.03**	**0.54 ± 0.02**	**0.56 ± 0.03**	**0.59 ± 0.02**	**0.62 ± 0.02**
1794504	**0.70 ± 0.06**	**0.72 ± 0.05**	**0.80 ± 0.06**	**0.95 ± 0.16**	nan	0.59 ± 0.05	0.64 ± 0.05	0.72 ± 0.09	**0.95 ± 0.16**	nan
1794519	0.65 ± 0.08	0.72 ± 0.06	0.78 ± 0.04	**0.85 ± 0.05**	nan	**0.73 ± 0.06**	**0.78 ± 0.03**	**0.81 ± 0.02**	0.79 ± 0.04	nan
1794557	**0.54 ± 0.02**	**0.54 ± 0.02**	**0.55 ± 0.02**	**0.57 ± 0.03**	**0.60 ± 0.02**	0.52 ± 0.02	0.53 ± 0.02	0.53 ± 0.03	0.54 ± 0.03	0.56 ± 0.02
1963701	**0.58 ± 0.05**	**0.59 ± 0.06**	**0.62 ± 0.03**	**0.67 ± 0.02**	**0.69 ± 0.02**	0.56 ± 0.04	0.58 ± 0.05	0.60 ± 0.04	0.62 ± 0.03	0.66 ± 0.02
1963705	**0.74 ± 0.06**	**0.77 ± 0.04**	**0.81 ± 0.02**	**0.83 ± 0.01**	**0.84 ± 0.01**	0.71 ± 0.05	0.74 ± 0.03	0.78 ± 0.03	0.80 ± 0.02	0.81 ± 0.02
1963715	**0.63 ± 0.10**	**0.68 ± 0.05**	**0.72 ± 0.03**	**0.76 ± 0.02**	**0.78 ± 0.02**	0.57 ± 0.07	0.61 ± 0.03	0.65 ± 0.03	0.69 ± 0.02	0.72 ± 0.02
1963721	**0.47 ± 0.07**	**0.52 ± 0.04**	**0.54 ± 0.04**	**0.58 ± 0.04**	**0.63 ± 0.08**	0.45 ± 0.06	0.47 ± 0.04	0.51 ± 0.04	0.53 ± 0.03	0.61 ± 0.10
1963723	**0.77 ± 0.05**	**0.80 ± 0.04**	**0.84 ± 0.01**	**0.86 ± 0.01**	**0.87 ± 0.01**	0.72 ± 0.08	0.79 ± 0.03	0.81 ± 0.01	0.83 ± 0.01	0.85 ± 0.01
1963731	0.79 ± 0.06	**0.84 ± 0.02**	**0.87 ± 0.02**	**0.89 ± 0.01**	**0.90 ± 0.01**	**0.80 ± 0.05**	0.83 ± 0.02	0.86 ± 0.01	0.87 ± 0.01	0.88 ± 0.01
1963741	**0.64 ± 0.06**	**0.70 ± 0.04**	**0.74 ± 0.02**	**0.76 ± 0.02**	**0.78 ± 0.02**	0.59 ± 0.03	0.63 ± 0.04	0.68 ± 0.04	0.71 ± 0.02	0.73 ± 0.02
1963756	**0.74 ± 0.06**	**0.77 ± 0.03**	**0.79 ± 0.02**	**0.82 ± 0.01**	**0.84 ± 0.01**	0.63 ± 0.06	0.68 ± 0.04	0.73 ± 0.02	0.76 ± 0.02	0.77 ± 0.03
1963773	**0.62 ± 0.09**	0.64 ± 0.06	**0.69 ± 0.04**	0.72 ± 0.03	**0.75 ± 0.01**	0.61 ± 0.07	**0.65 ± 0.06**	0.69 ± 0.04	**0.73 ± 0.02**	0.74 ± 0.03
1963799	**0.65 ± 0.07**	**0.67 ± 0.05**	**0.69 ± 0.02**	**0.74 ± 0.02**	**0.76 ± 0.03**	0.56 ± 0.07	0.63 ± 0.04	0.67 ± 0.03	0.69 ± 0.02	0.72 ± 0.05
1963810	**0.80 ± 0.04**	**0.83 ± 0.03**	**0.86 ± 0.01**	**0.86 ± 0.01**	**0.88 ± 0.01**	0.76 ± 0.06	0.79 ± 0.04	0.82 ± 0.02	0.85 ± 0.01	0.87 ± 0.01
1963818	**0.71 ± 0.06**	**0.75 ± 0.05**	0.78 ± 0.03	**0.82 ± 0.02**	**0.84 ± 0.02**	**0.71 ± 0.03**	0.73 ± 0.04	**0.78 ± 0.02**	0.81 ± 0.01	0.82 ± 0.01
1963819	**0.65 ± 0.08**	0.68 ± 0.06	**0.74 ± 0.03**	0.78 ± 0.03	0.81 ± 0.02	0.62 ± 0.12	**0.70 ± 0.05**	0.73 ± 0.05	**0.79 ± 0.02**	**0.81 ± 0.02**
1963824	**0.60 ± 0.06**	**0.63 ± 0.04**	**0.67 ± 0.05**	**0.72 ± 0.04**	**0.75 ± 0.03**	0.52 ± 0.04	0.54 ± 0.03	0.57 ± 0.03	0.61 ± 0.03	0.62 ± 0.06
1963825	**0.66 ± 0.06**	**0.70 ± 0.05**	**0.72 ± 0.03**	**0.74 ± 0.02**	**0.78 ± 0.04**	0.62 ± 0.07	0.68 ± 0.03	0.71 ± 0.04	0.73 ± 0.02	0.77 ± 0.03
1963827	**0.78 ± 0.06**	**0.81 ± 0.03**	**0.86 ± 0.02**	**0.88 ± 0.00**	**0.88 ± 0.01**	0.77 ± 0.04	0.80 ± 0.04	0.84 ± 0.02	0.86 ± 0.01	0.87 ± 0.01
1963831	**0.62 ± 0.10**	0.69 ± 0.07	0.74 ± 0.03	0.77 ± 0.03	0.78 ± 0.05	0.61 ± 0.08	**0.69 ± 0.05**	**0.76 ± 0.03**	**0.78 ± 0.02**	**0.79 ± 0.06**
1963838	0.52 ± 0.03	0.55 ± 0.02	0.58 ± 0.03	0.60 ± 0.03	nan	**0.55 ± 0.03**	**0.57 ± 0.05**	**0.61 ± 0.04**	**0.64 ± 0.03**	nan

表 9：在 FS-Mol 测试集的前 50 个任务上测量 MAML 的精确率-召回率曲线下面积。

任务 ID	16（IGNITE-MAML）	32（IGNITE-MAML）	64（IGNITE-MAML）	128（IGNITE-MAML）	256（IGNITE-MAML）	16（MAML）	32（MAML）	64（MAML）	128（MAML）	256（MAML）
1006005	0.47 ± 0.03	0.49 ± 0.05	0.49 ± 0.04	0.54 ± 0.06	nan	**0.49 ± 0.02**	**0.51 ± 0.04**	**0.52 ± 0.03**	**0.56 ± 0.05**	nan
1066254	**0.58 ± 0.07**	**0.61 ± 0.05**	**0.65 ± 0.07**	**0.65 ± 0.13**	nan	0.56 ± 0.07	0.58 ± 0.04	0.59 ± 0.07	0.63 ± 0.15	nan
1119333	**0.73 ± 0.03**	**0.74 ± 0.03**	**0.77 ± 0.04**	**0.76 ± 0.05**	**0.77 ± 0.06**	0.70 ± 0.03	0.72 ± 0.04	0.74 ± 0.05	0.72 ± 0.02	0.74 ± 0.05
1243967	0.72 ± 0.03	**0.76 ± 0.03**	**0.75 ± 0.04**	**0.77 ± 0.04**	nan	**0.72 ± 0.05**	0.75 ± 0.01	0.74 ± 0.04	0.76 ± 0.04	nan
1243970	0.70 ± 0.04	0.71 ± 0.01	0.70 ± 0.02	**0.71 ± 0.03**	nan	**0.71 ± 0.03**	**0.72 ± 0.03**	**0.72 ± 0.03**	0.68 ± 0.03	nan
1613777	**0.53 ± 0.01**	**0.53 ± 0.01**	**0.53 ± 0.01**	**0.54 ± 0.02**	**0.54 ± 0.02**	0.50 ± 0.01	0.51 ± 0.01	0.51 ± 0.01	0.53 ± 0.02	0.53 ± 0.02
1613800	**0.40 ± 0.00**	**0.40 ± 0.01**	**0.41 ± 0.01**	**0.42 ± 0.01**	**0.42 ± 0.01**	**0.40 ± 0.01**	0.40 ± 0.01	0.40 ± 0.01	0.41 ± 0.01	0.41 ± 0.01
1613898	0.56 ± 0.02	0.55 ± 0.04	**0.58 ± 0.04**	**0.57 ± 0.08**	nan	**0.57 ± 0.02**	**0.56 ± 0.03**	0.56 ± 0.03	0.56 ± 0.04	nan
1613907	**0.54 ± 0.03**	**0.55 ± 0.04**	**0.54 ± 0.06**	**0.55 ± 0.07**	nan	0.53 ± 0.03	0.51 ± 0.02	0.53 ± 0.05	0.55 ± 0.13	nan
1613926	**0.67 ± 0.04**	**0.65 ± 0.06**	**0.71 ± 0.06**	**0.78 ± 0.20**	nan	0.57 ± 0.09	0.59 ± 0.10	0.65 ± 0.12	0.77 ± 0.12	nan
1613949	0.46 ± 0.04	0.47 ± 0.04	0.47 ± 0.05	**0.45 ± 0.10**	nan	**0.48 ± 0.03**	**0.48 ± 0.04**	**0.48 ± 0.06**	0.43 ± 0.09	nan
1614027	0.51 ± 0.02	0.52 ± 0.02	**0.54 ± 0.02**	**0.57 ± 0.03**	**0.60 ± 0.02**	**0.52 ± 0.01**	**0.52 ± 0.01**	0.53 ± 0.03	0.54 ± 0.03	0.58 ± 0.04
1614153	0.33 ± 0.01	0.34 ± 0.01	0.33 ± 0.01	0.34 ± 0.01	0.34 ± 0.01	**0.33 ± 0.01**	**0.34 ± 0.01**	**0.34 ± 0.01**	**0.35 ± 0.01**	**0.36 ± 0.01**
1614292	**0.35 ± 0.02**	**0.36 ± 0.02**	**0.37 ± 0.02**	**0.37 ± 0.02**	**0.39 ± 0.01**	0.35 ± 0.01	0.35 ± 0.01	0.35 ± 0.01	0.35 ± 0.01	0.35 ± 0.01
1614423	0.44 ± 0.07	**0.52 ± 0.10**	**0.64 ± 0.03**	**0.69 ± 0.05**	**0.71 ± 0.04**	**0.45 ± 0.05**	0.47 ± 0.07	0.51 ± 0.07	0.60 ± 0.07	0.68 ± 0.02
1614433	**0.46 ± 0.02**	0.46 ± 0.02	**0.47 ± 0.02**	**0.49 ± 0.03**	**0.52 ± 0.04**	0.44 ± 0.01	**0.46 ± 0.03**	0.47 ± 0.03	0.48 ± 0.04	0.49 ± 0.04
1614466	0.46 ± 0.01	0.46 ± 0.02	0.47 ± 0.02	0.47 ± 0.02	0.51 ± 0.03	**0.47 ± 0.01**	**0.48 ± 0.02**	**0.49 ± 0.02**	**0.49 ± 0.02**	**0.51 ± 0.03**
1614503	0.35 ± 0.04	**0.36 ± 0.06**	0.37 ± 0.04	0.56 ± 0.24	nan	**0.37 ± 0.02**	0.36 ± 0.03	**0.38 ± 0.04**	**0.57 ± 0.20**	nan
1614508	**0.70 ± 0.12**	0.77 ± 0.13	**0.80 ± 0.05**	0.82 ± 0.09	nan	0.66 ± 0.08	**0.79 ± 0.07**	0.77 ± 0.09	**0.83 ± 0.09**	nan
1614522	**0.52 ± 0.05**	**0.53 ± 0.03**	**0.54 ± 0.06**	**0.61 ± 0.02**	**0.62 ± 0.02**	0.50 ± 0.03	0.52 ± 0.02	0.52 ± 0.04	0.56 ± 0.03	0.58 ± 0.03
1737951	0.49 ± 0.09	0.46 ± 0.07	**0.61 ± 0.03**	**0.67 ± 0.06**	nan	**0.57 ± 0.04**	**0.57 ± 0.03**	0.58 ± 0.04	0.58 ± 0.07	nan
1738079	0.48 ± 0.01	0.47 ± 0.01	0.47 ± 0.02	0.49 ± 0.04	nan	**0.52 ± 0.01**	**0.51 ± 0.01**	**0.51 ± 0.03**	**0.52 ± 0.03**	nan
1738362	0.31 ± 0.03	0.34 ± 0.05	0.34 ± 0.07	**0.64 ± 0.23**	nan	**0.37 ± 0.01**	**0.38 ± 0.03**	**0.40 ± 0.04**	0.46 ± 0.19	nan
1738395	0.49 ± 0.03	**0.50 ± 0.03**	**0.49 ± 0.03**	0.50 ± 0.05	nan	**0.50 ± 0.03**	0.48 ± 0.03	0.48 ± 0.03	**0.50 ± 0.05**	nan
1738485	**0.49 ± 0.01**	**0.51 ± 0.02**	**0.52 ± 0.04**	**0.54 ± 0.04**	**0.55 ± 0.06**	0.49 ± 0.01	0.49 ± 0.01	0.48 ± 0.01	0.50 ± 0.06	0.54 ± 0.06
1738502	0.39 ± 0.01	0.40 ± 0.02	0.40 ± 0.02	**0.43 ± 0.04**	**0.43 ± 0.04**	**0.41 ± 0.01**	**0.42 ± 0.02**	**0.41 ± 0.02**	0.41 ± 0.02	0.41 ± 0.02
1738573	0.51 ± 0.02	0.50 ± 0.01	0.51 ± 0.02	**0.52 ± 0.02**	**0.53 ± 0.02**	**0.52 ± 0.01**	**0.51 ± 0.01**	**0.52 ± 0.01**	0.52 ± 0.01	0.52 ± 0.01
1738579	**0.54 ± 0.03**	**0.56 ± 0.02**	**0.56 ± 0.03**	**0.60 ± 0.05**	nan	0.53 ± 0.03	0.55 ± 0.03	0.55 ± 0.04	0.58 ± 0.04	nan
1738633	0.55 ± 0.04	0.56 ± 0.04	0.60 ± 0.04	0.57 ± 0.09	nan	**0.59 ± 0.02**	**0.60 ± 0.02**	**0.60 ± 0.04**	**0.63 ± 0.12**	nan
1794324	**0.52 ± 0.02**	**0.52 ± 0.01**	**0.52 ± 0.01**	**0.53 ± 0.02**	**0.54 ± 0.02**	0.51 ± 0.00	0.51 ± 0.01	0.52 ± 0.01	0.52 ± 0.01	0.53 ± 0.01
1794504	**0.68 ± 0.01**	**0.70 ± 0.04**	**0.71 ± 0.04**	**0.85 ± 0.24**	nan	0.65 ± 0.05	0.66 ± 0.05	0.71 ± 0.04	**0.85 ± 0.24**	nan
1794519	0.64 ± 0.05	**0.66 ± 0.07**	**0.69 ± 0.08**	**0.73 ± 0.13**	nan	**0.64 ± 0.07**	0.62 ± 0.05	0.65 ± 0.07	0.71 ± 0.11	nan
1794557	0.53 ± 0.02	0.54 ± 0.01	0.54 ± 0.02	0.53 ± 0.02	0.53 ± 0.01	**0.55 ± 0.01**	**0.55 ± 0.01**	**0.55 ± 0.01**	**0.55 ± 0.01**	**0.55 ± 0.01**
1963701	**0.60 ± 0.01**	**0.59 ± 0.02**	**0.59 ± 0.02**	**0.60 ± 0.01**	**0.60 ± 0.02**	0.60 ± 0.01	0.59 ± 0.01	**0.59 ± 0.01**	0.59 ± 0.01	0.59 ± 0.02
1963705	0.71 ± 0.03	0.70 ± 0.02	0.72 ± 0.01	0.72 ± 0.01	0.71 ± 0.02	**0.77 ± 0.01**	**0.77 ± 0.02**	**0.77 ± 0.01**	**0.77 ± 0.03**	**0.76 ± 0.04**
1963715	**0.63 ± 0.00**	**0.62 ± 0.03**	0.63 ± 0.01	0.64 ± 0.01	0.64 ± 0.02	0.63 ± 0.01	0.61 ± 0.04	**0.64 ± 0.01**	**0.64 ± 0.01**	**0.64 ± 0.02**
1963721	0.50 ± 0.02	0.50 ± 0.02	0.50 ± 0.02	**0.51 ± 0.04**	**0.55 ± 0.07**	**0.52 ± 0.02**	**0.51 ± 0.01**	**0.52 ± 0.01**	0.51 ± 0.03	0.54 ± 0.09
1963723	0.72 ± 0.03	0.73 ± 0.01	0.73 ± 0.01	0.74 ± 0.02	0.75 ± 0.02	**0.72 ± 0.03**	**0.74 ± 0.02**	**0.74 ± 0.01**	**0.75 ± 0.02**	**0.77 ± 0.02**
1963731	0.70 ± 0.02	0.70 ± 0.01	0.70 ± 0.02	0.76 ± 0.06	0.76 ± 0.05	**0.71 ± 0.03**	**0.74 ± 0.02**	**0.74 ± 0.02**	**0.76 ± 0.02**	**0.79 ± 0.03**
1963741	**0.65 ± 0.02**	**0.66 ± 0.00**	**0.66 ± 0.01**	**0.67 ± 0.01**	**0.67 ± 0.01**	0.65 ± 0.01	0.65 ± 0.01	0.66 ± 0.01	0.65 ± 0.01	0.65 ± 0.01
1963756	**0.76 ± 0.05**	**0.75 ± 0.04**	**0.76 ± 0.04**	**0.77 ± 0.02**	**0.77 ± 0.01**	0.71 ± 0.02	0.72 ± 0.03	0.70 ± 0.04	0.72 ± 0.02	0.72 ± 0.03
1963773	0.60 ± 0.01	0.59 ± 0.04	0.60 ± 0.03	0.60 ± 0.02	0.60 ± 0.02	**0.62 ± 0.02**	**0.63 ± 0.02**	**0.63 ± 0.02**	**0.64 ± 0.03**	**0.63 ± 0.02**
1963799	0.63 ± 0.01	0.62 ± 0.01	0.61 ± 0.03	0.61 ± 0.02	0.60 ± 0.05	**0.64 ± 0.02**	**0.66 ± 0.01**	**0.66 ± 0.02**	**0.67 ± 0.03**	**0.67 ± 0.07**
1963810	**0.78 ± 0.01**	**0.77 ± 0.02**	**0.78 ± 0.01**	**0.78 ± 0.01**	**0.78 ± 0.01**	0.77 ± 0.01	0.75 ± 0.03	0.76 ± 0.02	0.76 ± 0.02	0.78 ± 0.02
1963818	**0.71 ± 0.02**	**0.72 ± 0.01**	0.72 ± 0.03	**0.73 ± 0.02**	**0.73 ± 0.03**	0.70 ± 0.04	0.72 ± 0.01	**0.72 ± 0.03**	0.72 ± 0.03	0.73 ± 0.03
1963819	0.59 ± 0.04	0.61 ± 0.03	0.59 ± 0.01	0.61 ± 0.03	0.61 ± 0.03	**0.60 ± 0.02**	**0.61 ± 0.03**	**0.62 ± 0.03**	**0.63 ± 0.04**	**0.63 ± 0.03**
1963824	**0.62 ± 0.04**	0.63 ± 0.02	**0.65 ± 0.04**	**0.65 ± 0.04**	**0.69 ± 0.05**	0.62 ± 0.03	**0.64 ± 0.04**	0.64 ± 0.04	0.63 ± 0.03	0.63 ± 0.04
1963825	0.73 ± 0.01	0.72 ± 0.02	0.73 ± 0.01	0.74 ± 0.02	0.75 ± 0.04	**0.77 ± 0.02**	**0.77 ± 0.02**	**0.79 ± 0.02**	**0.79 ± 0.03**	**0.80 ± 0.04**
1963827	0.78 ± 0.03	**0.80 ± 0.01**	**0.80 ± 0.03**	**0.79 ± 0.02**	**0.80 ± 0.02**	**0.78 ± 0.01**	0.76 ± 0.04	0.76 ± 0.03	0.77 ± 0.01	0.76 ± 0.02
1963831	**0.69 ± 0.01**	**0.69 ± 0.02**	0.69 ± 0.01	0.69 ± 0.02	0.68 ± 0.06	0.68 ± 0.02	0.68 ± 0.02	**0.70 ± 0.02**	**0.71 ± 0.03**	**0.72 ± 0.05**
1963838	0.49 ± 0.01	0.49 ± 0.01	0.51 ± 0.04	**0.55 ± 0.03**	nan	**0.54 ± 0.02**	**0.53 ± 0.01**	**0.55 ± 0.02**	0.52 ± 0.04	nan