

NOWE STRATEGIE UCZENIA REPREZENTACJI W DEEP LEARNINGU

Uczenie głębokie (ang. “deep learning”, DL) jest poddziedziną uczenia maszynowego, która skupia się na modelowaniu danych z użyciem wysokopoziomowej reprezentacji. Podejście DL polega na automatycznym odkrywaniu reprezentacji o pożądanych właściwościach, dzięki czemu DL zrewolucjonizował wiele dziedzin osiągając lepsze rezultaty niż ludzie, w tym w klasyfikacji obrazów, rozpoznawaniu mowy czy grze w Go.

Tradycyjny sposób nauki systemu uczenia maszynowego polega na podaniu ogromnych ilości danych. Dzięki korelacji etykiety z cechami wejścia, sieć neuronowa uczy się rozróżniać obrazy. W tym momencie można powiedzieć, że proste problemy klasyfikacyjne są rozwiązane z punktu widzenia naukowego. Jednak wiele problemów jest ciągle poza zasięgiem najnowszych metod uczenia maszynowego. W tych badaniach postawiona jest hipoteza, że do ich rozwiązania będą niezbędne nowe sposoby nauki sieci neuronowej. Badania skupiają się na dwóch dziedzinach aplikacji, szczególnie trudnych dla obecnych metod, przetwarzaniu języka naturalnego i odkrywaniu leków.

Odkrywanie leków jest bardzo ważnym problemem dla obecnej nauki. Podczas gdy cena obliczeń spada (znane prawo Moore’a), cena wypuszczenia na rynek leku rośnie (nazywane prawem Erom’a). Jest pokładana wielka nadzieja w metodach uczenia maszynowego w kontekście obecnych problemów w odkrywaniu leków. Metody DL stosowane w chemii często słabo generalizują, tj. ich predykcje na nowych związkach chemicznych (a więc tych najistotniejszych) często są słabe. Istotnym aspektem jest tutaj automatycznie nauczona reprezentacja, w ramach tych badań staram się poprawić jej właściwości

Intuicyjnie, człowiek uczy się zupełnie inaczej niż opisany powyżej sposób nauki sieci neuronowych. W trakcie nauki jesteśmy w ciągłej interakcji ze środowiskiem. W szczególności, często aktywnie dobieramy przykłady i doświadczenia z jakich chcemy się uczyć. Ta intuicja stoi za ideą stosowania metod aktywnego uczenia do nauki reprezentacji, która jest częścią badań przedstawionych w tym wniosku.