

«საზრიანი ჰანსის» ეფექტი გამოთვლით ბიოქიმიაში

გიორგი რუხაია

ილია ვეკუას სახელობის გამოყენებითი მათემატიკის ინსტიტუტი
ივანე ჯავახიშვილის სახელობის თბილისის სახელმწიფო უნივერსიტეტი

ერთობლივი ნაშრომი ანა ნუსხელაძესა და ვასუ სუნკარასთან

დღესდღეობით ფართოდაა გავრცელებული ღრმა სწავლების (Deep Learning) მეთოდების გამოყენება სხვადასხვა პრაქტიკული გამოთვლითი ამოცანის გადასაჭრელად. თუმცა, ამ მეთოდების სწორი და ნაყოფიერი გამოყენებისათვის არსებითია მონაცემთა ბუნებისა და შერჩეული ალგორითმების შესაბამისობა. ძირითადად, ეს პროცესი წარმატებით სრულდება, თუმცა არსებობს საინტერესო გამონაკლისებიც. ეს მოხსენება შეეხება გამოთვლითი ბიოქიმიის ერთ-ერთ აქტუალურ ამოცანას, რომელიც ცილებისა და ლიგანდების (მცირე ქიმიური მოლეკულები, ძირითადად — მედიკამენტები) ბმის სიძლიერის პროგნოზირებას გულისხმობს. ამ მიმართულებითაც ღრმა სწავლების მეთოდებით არაერთი შთამბეჭდავი შედეგი მიღწეულა, თუმცა ასევე დაფიქსირებულა მოდელის მიერ მკვლევრების შეცდომაში შეყვანის პრეცედენტებიც. მოხსენება მიმოიხილავს ამ მიღწევებსა და ფარულ პრობლემებს, ერთი კონკრეტული მეთოდის მაგალითზე.

A Clever Hans Effect in Computational Biochemistry

Giorgi Rukhaia

Ilia Vekua Institute of Applied Mathematics
Ivane Javakhishvili Tbilisi State University,

Joint work with Ana Nuskheladze and Vasu Sunkara

Deep learning methods are widely used today to solve various practical computational problems. However, the correct and effective application of these methods fundamentally relies on the alignment between the nature of the data and the chosen algorithms. While this is generally achieved successfully, there are interesting exceptions. This presentation addresses a prominent challenge in computational biochemistry: predicting the binding affinity between proteins and ligands (small chemical molecules, primarily drugs). Although deep learning methods have achieved numerous impressive results in this domain, there have also been instances where models have systematically misled researchers. This talk will review both these achievements and the underlying hidden problems, using one specific method as a case study.