

# Title As It Is In the Proceedings

Include Only If Paper Has a Subtitle

Rémy Sun

Département d'informatique  
ENS Rennes

XTRA 2016

# Outline

- 1 Apprentissage profond ?
  - Pourquoi l'apprentissage profond ?
  - Entraînement non-supervisé
  - Architectures standards
  - Application : Protéines
  - Etat de l'art
- 2 Etude réalisée
  - Séquences peptidiques
  - Architectures entraînées
  - Résultats

# Outline

- 1 Apprentissage profond ?
  - Pourquoi l'apprentissage profond ?
  - Entraînement non-supervisé
  - Architectures standards
  - Application : Protéines
  - Etat de l'art
- 2 Etude réalisée
  - Séquences peptidiques
  - Architectures entraînées
  - Résultats

# Outline

- 1 Apprentissage profond ?
  - Pourquoi l'apprentissage profond ?
  - Entraînement non-supervisé
  - Architectures standards
  - Application : Protéines
  - Etat de l'art
- 2 Etude réalisée
  - Séquences peptidiques
  - Architectures entraînées
  - Résultats

# Réseaux neuronaux

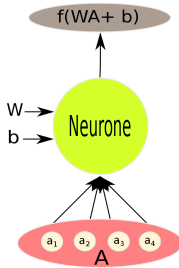
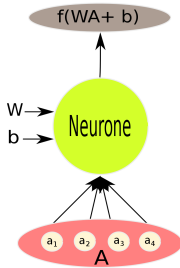


FIGURE – Fonctionnement d'un neurone

- Transformation linéaire  $WA + b$
- Activation non-linéaire  $f$
- Score sur le résultat
- Apprentissage sur  $W$  et  $b$

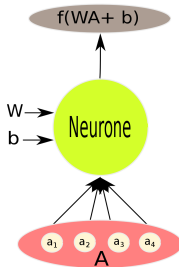
# Réseaux neuronaux



- Transformation linéaire  
 $WA + b$
- Activation non-linéaire  $f$
- Score sur le résultat
- Apprentissage sur  $W$  et  $b$

FIGURE – Fonctionnement d'un neurone

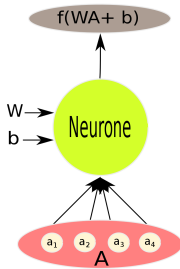
# Réseaux neuronaux



- Transformation linéaire  
 $WA + b$
- Activation non-linéaire  $f$
- Score sur le résultat
- Apprentissage sur  $W$  et  $b$

FIGURE – Fonctionnement d'un neurone

# Réseaux neuronaux

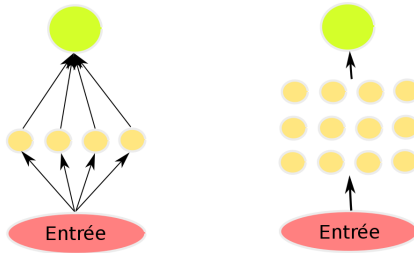


- Transformation linéaire  
 $WA + b$
- Activation non-linéaire  $f$
- Score sur le résultat
- Apprentissage sur  $W$  et  $b$

FIGURE – Fonctionnement d'un neurone



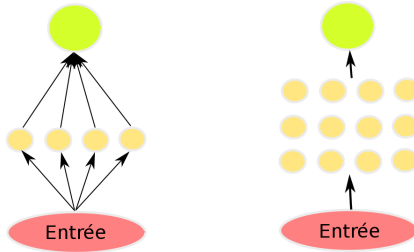
# Réseaux profonds



**FIGURE** – Fonctionnement d'un neurone

- Plusieurs niveaux d'abstraction
- Evanouissement de gradient
- Grands ensembles d'entraînement
- Bons résultats en reconnaissance d'image, langages naturels, ...

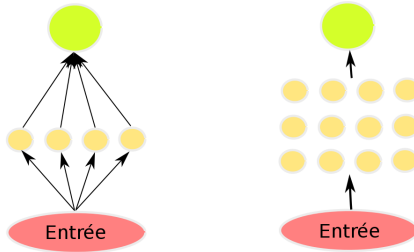
# Réseaux profonds



**FIGURE** – Fonctionnement d'un neurone

- Plusieurs niveaux d'abstraction
- Evanouissement de gradient
- Grands ensembles d'entraînement
- Bons résultats en reconnaissance d'image, langages naturels, ...

# Réseaux profonds



**FIGURE** – Fonctionnement d'un neurone

- Plusieurs niveaux d'abstraction
- Evanouissement de gradient
- Grands ensembles d'entraînement
- Bons résultats en reconnaissance d'image, langages naturels, ...

# Réseaux profonds

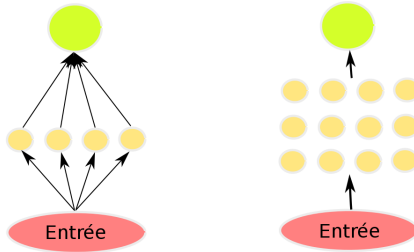


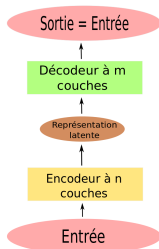
FIGURE – Fonctionnement d'un neurone

- Plusieurs niveaux d'abstraction
- Evanouissement de gradient
- Grands ensembles d'entraînement
- Bons résultats en reconnaissance d'image, langages naturels, ...

# Outline

- 1 Apprentissage profond ?
  - Pourquoi l'apprentissage profond ?
  - **Entraînement non-supervisé**
  - Architectures standards
  - Application : Protéines
  - Etat de l'art
- 2 Etude réalisée
  - Séquences peptidiques
  - Architectures entraînées
  - Résultats

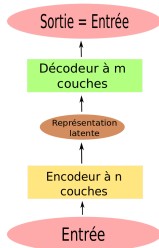
# Fixer une cible de manière autonome



**FIGURE** – Fonctionnement d'un auto-encodeur

- Non supervisé
- Encodage
- Représentation latente
- Décodage
- Eviter d'encoder l'identité
  - Compression
  - Bruitage
  - Régularisation

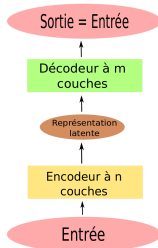
# Fixer une cible de manière autonome



**FIGURE** – Fonctionnement d'un auto-encodeur

- Non supervisé
- Encodage
- Représentation latente
- Décodage
- Eviter d'encoder l'identité
  - Compression
  - Bruitage
  - Régularisation

# Fixer une cible de manière autonome

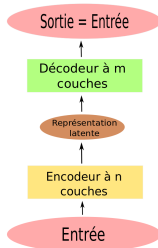


**FIGURE** – Fonctionnement d'un auto-encodeur

- Non supervisé
- Encodage
- Représentation latente
- Décodage
- Eviter d'encoder l'identité
  - Compression
  - Bruitage
  - Régularisation



# Fixer une cible de manière autonome



**FIGURE** – Fonctionnement d'un auto-encodeur

- Non supervisé
- Encodage
- Représentation latente
- Décodage
- Éviter d'encoder l'identité
  - Compression
  - Bruitage
  - Régularisation

# Fixer une cible de manière autonome

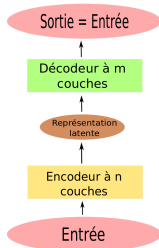


FIGURE – Fonctionnement d'un auto-encodeur

- Non supervisé
- Encodage
- Représentation latente
- Décodage
- Eviter d'encoder l'identité
  - Compression
  - Bruitage
  - Régularisation

# Fixer une cible de manière autonome

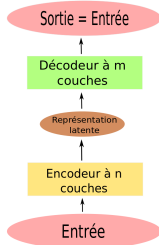


FIGURE – Fonctionnement d'un auto-encodeur

- Non supervisé
- Encodage
- Représentation latente
- Décodage
- Eviter d'encoder l'identité
  - Compression
  - Bruitage
  - Régularisation

# Fixer une cible de manière autonome

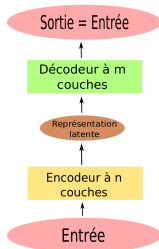


FIGURE – Fonctionnement d'un auto-encodeur

- Non supervisé
- Encodage
- Représentation latente
- Décodage
- Eviter d'encoder l'identité
  - Compression
  - Bruitage
  - Régularisation

# Fixer une cible de manière autonome

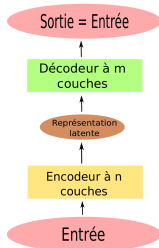


FIGURE – Fonctionnement d'un auto-encodeur

- Non supervisé
- Encodage
- Représentation latente
- Décodage
- Eviter d'encoder l'identité
  - Compression
  - Bruitage
  - Régularisation

# Outline

## 1 Apprentissage profond ?

- Pourquoi l'apprentissage profond ?
- Entraînement non-supervisé
- **Architectures standards**
- Application : Protéines
- Etat de l'art

## 2 Etude réalisée

- Séquences peptidiques
- Architectures entraînées
- Résultats

# Réseaux Convolutionnels : recherche de motif

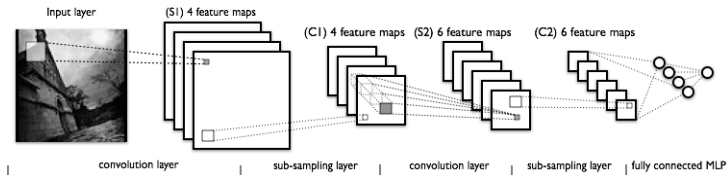


FIGURE – Réseau LeNet5

- Filtres de caractéristiques
- Regroupement
- Permet d'isoler des motifs locaux
- Très utilisé en reconnaissance d'image

# Réseaux Convolutionnels : recherche de motif

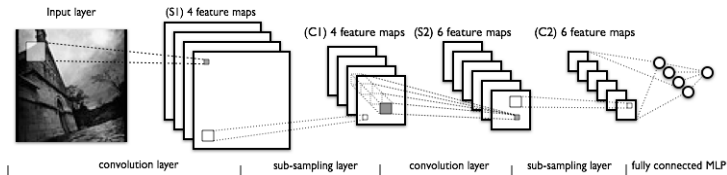


FIGURE – Réseau LeNet5

- Filtres de caractéristiques
- Regroupement
- Permet d'isoler des motifs locaux
- Très utilisé en reconnaissance d'image



# Réseaux Convolutionnels : recherche de motif

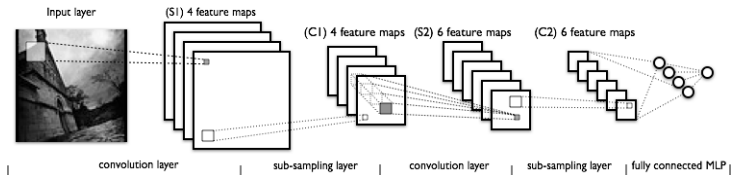


FIGURE – Réseau LeNet5

- Filtres de caractéristiques
- Regroupement
- Permet d'isoler des motifs locaux
- Très utilisé en reconnaissance d'image

# Réseaux Convolutionnels : recherche de motif

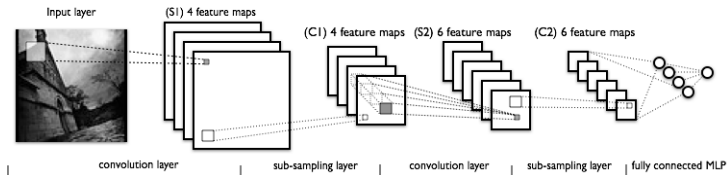
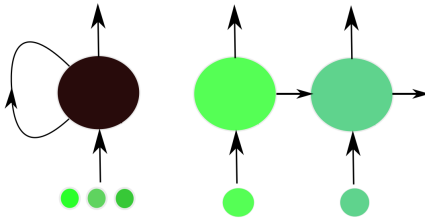


FIGURE – Réseau LeNet5

- Filtres de caractéristiques
- Regroupement
- Permet d'isoler des motifs locaux
- Très utilisé en reconnaissance d'image

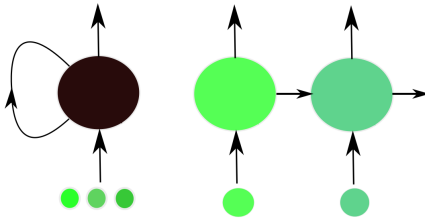
# Réseaux récurrents : tenir compte de l'ordre d'apparition



**FIGURE** – Couche récurrente

- Dépendance temporelles
- Sortie + état caché
- Pas de dépendances hiérarchiques
- Réseau « profond » à une couche
- Très utilisé en langues naturelles
- Unité LSTM

# Réseaux récurrents : tenir compte de l'ordre d'apparition



**FIGURE** – Couche récurrente

- Dépendance temporelles
- Sortie + état caché
- Pas de dépendances hiérarchiques
- Réseau « profond » à une couche
- Très utilisé en langues naturels
- Unité LSTM

# Réseaux récurrents : tenir compte de l'ordre d'apparition

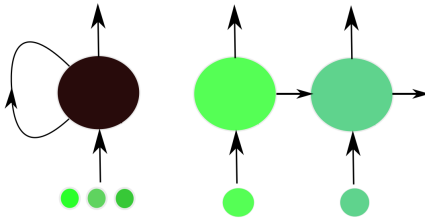


FIGURE – Couche récurrente

- Dépendance temporelles
- Sortie + état caché
- Pas de dépendances hiérarchiques
- Réseau « profond » à une couche
- Très utilisé en langues naturels
- Unité LSTM

# Réseaux récurrents : tenir compte de l'ordre d'apparition

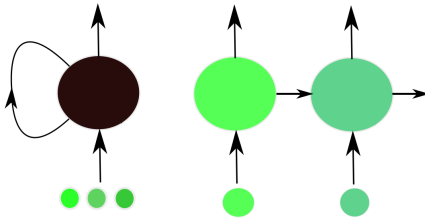


FIGURE – Couche récurrente

- Dépendance temporelles
- Sortie + état caché
- Pas de dépendances hiérarchiques
- Réseau « profond » à une couche
- Très utilisé en langues naturels
- Unité LSTM

# Réseaux récurrents : tenir compte de l'ordre d'apparition

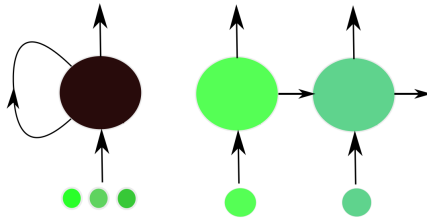


FIGURE – Couche récurrente

- Dépendance temporelles
- Sortie + état caché
- Pas de dépendances hiérarchiques
- Réseau « profond » à une couche
- Très utilisé en langues naturelles
- Unité LSTM

# Réseaux récurrents : tenir compte de l'ordre d'apparition

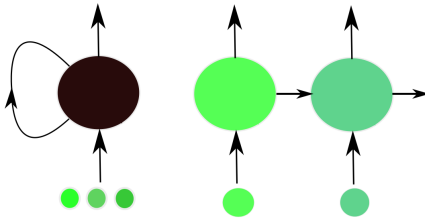
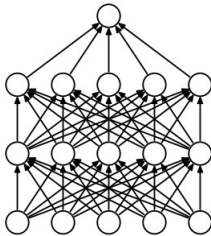


FIGURE – Couche récurrente

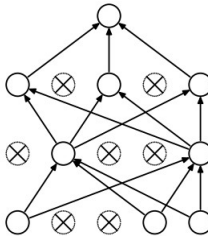
- Dépendance temporelles
- Sortie + état caché
- Pas de dépendances hiérarchiques
- Réseau « profond » à une couche
- Très utilisé en langues naturels
- Unité LSTM



# Eviter le sur-entraînement



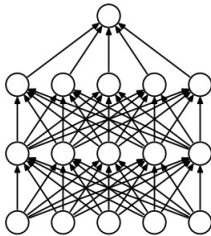
(a) Standard Neural Net



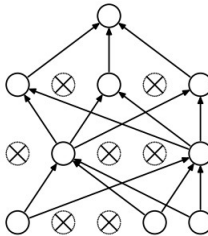
(b) After applying dropout.

- Désactiver aléatoirement des neurones
- Généraliser la représentation apprise
- Eliminer la concentration d'information
- Faire travailler tout le réseau
- Permet d'entraîner ad nauseam

# Eviter le sur-entraînement



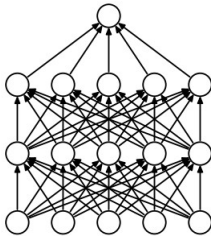
(a) Standard Neural Net



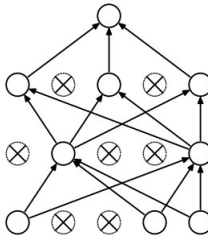
(b) After applying dropout.

- Désactiver aléatoirement des neurones
- Généraliser la représentation apprise
- Eliminer la concentration d'information
- Faire travailler tout le réseau
- Permet d'entraîner ad nauseam

# Eviter le sur-entraînement



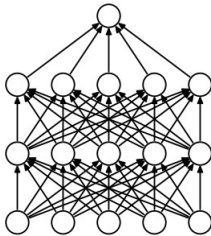
(a) Standard Neural Net



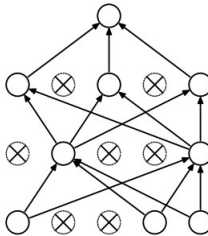
(b) After applying dropout.

- Désactiver aléatoirement des neurones
- Généraliser la représentation apprise
- Eliminer la concentration d'information
- Faire travailler tout le réseau
- Permet d'entraîner ad nauseam

# Eviter le sur-entraînement



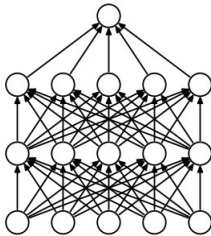
(a) Standard Neural Net



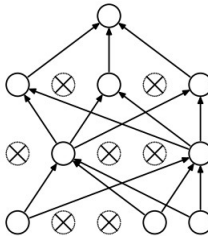
(b) After applying dropout.

- Désactiver aléatoirement des neurones
- Généraliser la représentation apprise
- Eliminer la concentration d'information
- Faire travailler tout le réseau
- Permet d'entraîner ad nauseam

# Eviter le sur-entraînement



(a) Standard Neural Net



(b) After applying dropout.

- Désactiver aléatoirement des neurones
- Généraliser la représentation apprise
- Eliminer la concentration d'information
- Faire travailler tout le réseau
- Permet d'entraîner ad nauseam

# Outline

- 1 Apprentissage profond ?
  - Pourquoi l'apprentissage profond ?
  - Entraînement non-supervisé
  - Architectures standards
  - **Application : Protéines**
  - Etat de l'art
- 2 Etude réalisée
  - Séquences peptidiques
  - Architectures entraînées
  - Résultats

# Plus qu'une chaîne d'acides aminés

- Acide aminés : molécules chimiques
- Structure primaire : chaîne d'acides aminés
- Structure secondaire : structures locales formées par les acides
- Structure tertiaire forme tridimensionnelle

# Plus qu'une chaîne d'acides aminés

- Acide aminés : molécules chimiques
- Structure primaire : chaîne d'acides aminés
- Structure secondaire : structures locales formées par les acides
- Structure tertiaire forme tridimensionnelle



# Plus qu'une chaîne d'acides aminés

- Acide aminés : molécules chimiques
- Structure primaire : chaîne d'acides aminés
- Structure secondaire : structures locales formées par les acides
- Structure tertiaire forme tridimensionnelle

# Plus qu'une chaîne d'acides aminés

- Acide aminés : molécules chimiques
- Structure primaire : chaîne d'acides aminés
- Structure secondaire : structures locales formé par les acides
- Structure tertiaire forme tridimensionnelle

# Outline

- 1 Apprentissage profond ?
  - Pourquoi l'apprentissage profond ?
  - Entraînement non-supervisé
  - Architectures standards
  - Application : Protéines
  - Etat de l'art
- 2 Etude réalisée
  - Séquences peptidiques
  - Architectures entraînées
  - Résultats

# Peu de travaux concernant les protéines

- Acide aminés
- Structure primaire : chaîne d'acides aminés
- Structure secondaire : structures locales formé par les acides
- Structure tertiaire forme tridimensionnelle

# Peu de travaux concernant les protéines

- Acide aminés
- Structure primaire : chaîne d'acides aminés
- Structure secondaire : structures locales formé par les acides
- Structure tertiaire forme tridimensionnelle

# Peu de travaux concernant les protéines

- Acide aminés
- Structure primaire : chaîne d'acides aminés
- Structure secondaire : structures locales formé par les acides
- Structure tertiaire forme tridimensionnelle

# Peu de travaux concernant les protéines

- Acide aminés
- Structure primaire : chaîne d'acides aminés
- Structure secondaire : structures locales formé par les acides
- Structure tertiaire forme tridimensionnelle

# Outline

- 1 Apprentissage profond ?
  - Pourquoi l'apprentissage profond ?
  - Entraînement non-supervisé
  - Architectures standards
  - Application : Protéines
  - Etat de l'art
- 2 Etude réalisée
  - Séquences peptidiques
  - Architectures entraînées
  - Résultats



# Traiter les protéines à partir de la structure primaire

- Travaux usuels : représentation par pseudo-vecteur de fréquence
- Etude sur les séquences peptidiques
- Insuffisance d'une indexation
- Structure tertiaire forme tridimensionnelle

# Traiter les protéines à partir de la structure primaire

- Travaux usuels : représentation par pseudo-vecteur de fréquence
- Etude sur les séquences peptidiques
- Insuffisance d'une indexation
- Structure tertiaire forme tridimensionnelle

# Traiter les protéines à partir de la structure primaire

- Travaux usuels : représentation par pseudo-vecteur de fréquence
- Etude sur les séquences peptidiques
- Insuffisance d'une indexation
- Structure tertiaire forme tridimensionnelle

# Traiter les protéines à partir de la structure primaire

- Travaux usuels : représentation par pseudo-vecteur de fréquence
- Etude sur les séquences peptidiques
- Insuffisance d'une indexation
- Structure tertiaire forme tridimensionnelle

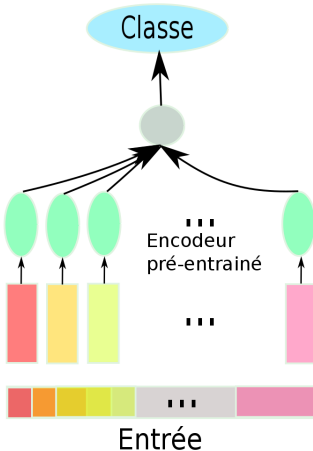
# Traiter les protéines à partir de la structure primaire

- Travaux usuels : représentation par pseudo-vecteur de fréquence
- Etude sur les séquences peptidiques
- Insuffisance d'une indexation
- Structure tertiaire forme tridimensionnelle

# Outline

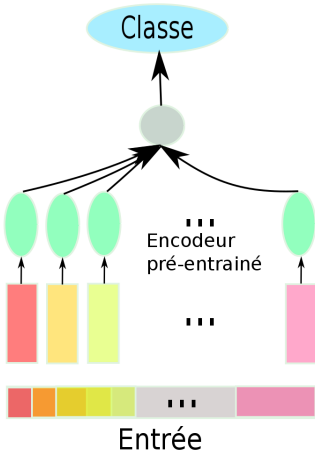
- 1 Apprentissage profond ?
  - Pourquoi l'apprentissage profond ?
  - Entraînement non-supervisé
  - Architectures standards
  - Application : Protéines
  - Etat de l'art
- 2 Etude réalisée
  - Séquences peptidiques
  - **Architectures entraînées**
  - Résultats

# Autoencodeurs



- Plusieurs niveaux d'abstraction
- Evanouissement de gradient
- Grands ensembles d'entraînement
- Bons résultats en reconnaissance d'image, langages naturels:

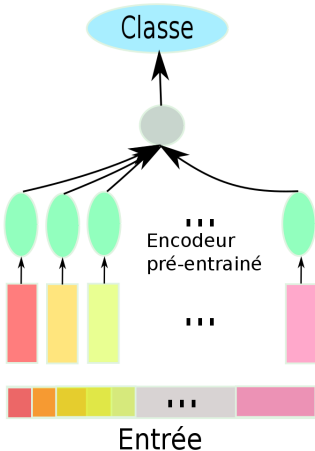
# Autoencodeurs



- Plusieurs niveaux d'abstraction
- Evanouissement de gradient
- Grands ensembles d'entraînement
- Bons résultats en reconnaissance d'image, langages naturels:

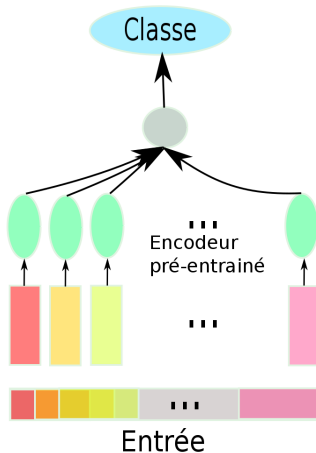


# Autoencodeurs



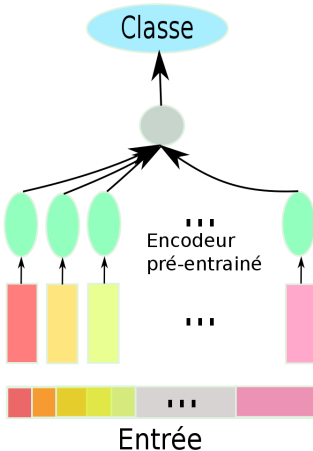
- Plusieurs niveaux d'abstraction
- Evanouissement de gradient
- Grands ensembles d'entraînement
- Bons résultats en reconnaissance d'image, langages naturels:

# Autoencodeurs



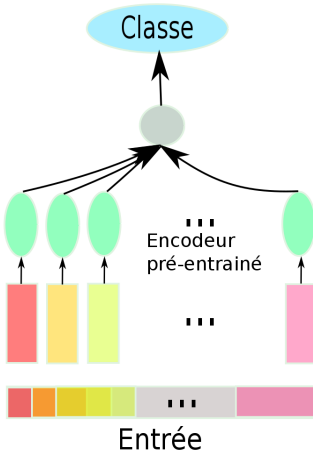
- Plusieurs niveaux d'abstraction
- Evanouissement de gradient
- Grands ensembles d'entraînement
- Bons résultats en reconnaissance d'image, langages naturels, ...

# Classificateur



- Premières couches pré-entraînées
- Couches récurrentes appliquées à des chaînes courtes
- 
- Bons résultats en reconnaissance d'image, langages

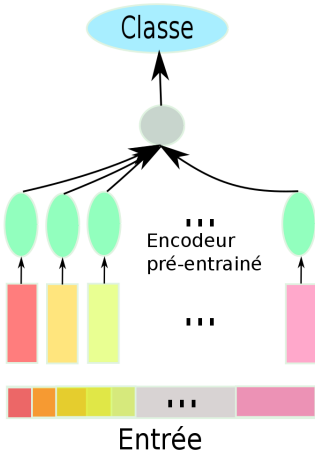
# Classificateur



- Premières couches pré-entraînées
- Couches récurrentes appliquées à des chaînes courtes

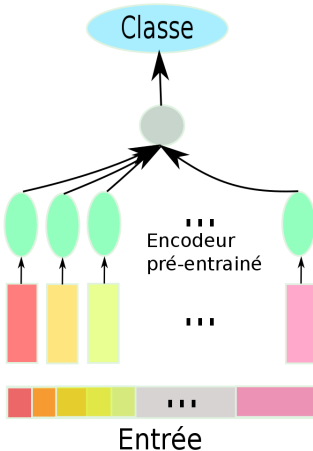
- 
- Bons résultats en reconnaissance d'image, langages

# Classificateur



- Premières couches pré-entraînées
- Couches récurrentes appliquées à des chaînes courtes
- 
- Bons résultats en reconnaissance d'image, langages

# Classificateur

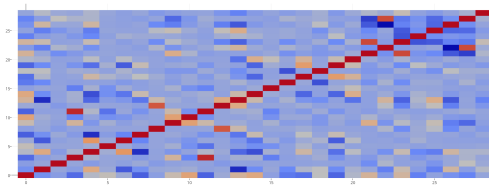


- Premières couches pré-entraînées
- Couches récurrentes appliquées à des chaînes courtes
- 
- Bons résultats en reconnaissance d'image, langages

# Outline

- 1 Apprentissage profond ?
  - Pourquoi l'apprentissage profond ?
  - Entraînement non-supervisé
  - Architectures standards
  - Application : Protéines
  - Etat de l'art
- 2 **Etude réalisée**
  - Séquences peptidiques
  - Architectures entraînées
  - **Résultats**

# Les représentation latentes présentent des corrélations remarquables



- Dimensions liées dans l'espace latent

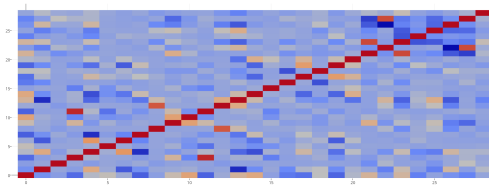
● Corrélation de coordonnées à l'hydropathie, à la charge ...

- Pas de corrélation à la structure spatiale

FIGURE – Fonctionnement d'un neurone



# Les représentation latentes présentent des corrélations remarquables



- Dimensions liées dans l'espace latent
- Corrélation de coordonnées à l'hydropathie, à la charge ...
- Pas de corrélation à la structure spatiale

FIGURE – Fonctionnement d'un neurone

# Les représentation latentes présentent des corrélations remarquables

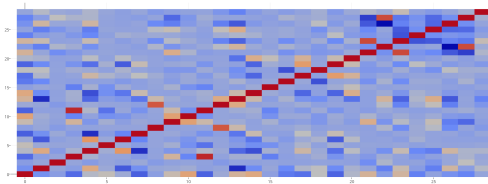


FIGURE – Fonctionnement d'un neurone

- Dimensions liées dans l'espace latent
- Corrélation de coordonnées à l'hydropathie, à la charge ...
- Pas de corrélation à la structure spatiale

# Les représentation latentes présentent des corrélations remarquables

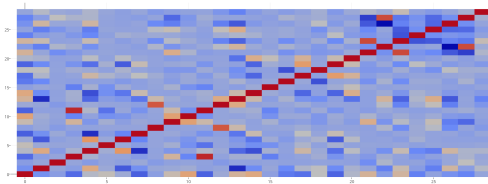


FIGURE – Fonctionnement d'un neurone

- Dimensions liées dans l'espace latent
- Corrélation de coordonnées à l'hydropathie, à la charge ...
- Pas de corrélation à la structure spatiale

# Les représentations latentes sont exploitables par un classificateur structural

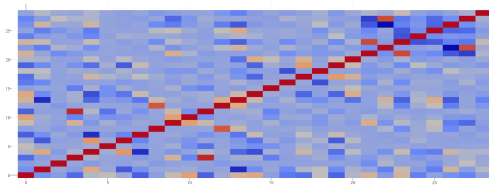
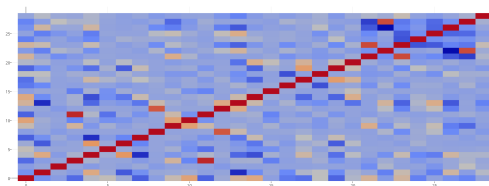


FIGURE – Fonctionnement d'un neurone

- Dimensions liées dans l'espace latent
- Corrélation de coordonnées à l'hydropathie, à la charge ...
- Pas de corrélation à la structure spatiale

# Les représentations latentes sont exploitables par un classificateur structural



- Dimensions liées dans l'espace latent
- Corrélation de coordonnées à l'hydropathie, à la charge ...
- Pas de corrélation à la structure spatiale

FIGURE – Fonctionnement d'un neurone

# Les représentations latentes sont exploitables par un classificateur structural

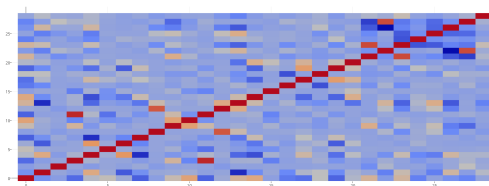


FIGURE – Fonctionnement d'un neurone

- Dimensions liées dans l'espace latent
- Corrélation de coordonnées à l'hydropathie, à la charge ...
- Pas de corrélation à la structure spatiale

# Les représentations latentes sont exploitables par un classificateur structural

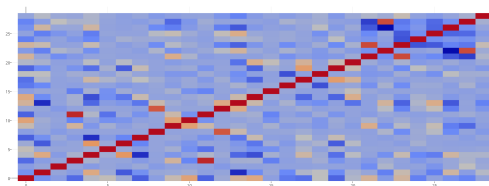


FIGURE – Fonctionnement d'un neurone

- Dimensions liées dans l'espace latent
- Corrélation de coordonnées à l'hydropathie, à la charge ...
- Pas de corrélation à la structure spatiale

# Summary

- The **first main message** of your talk in one or two lines.
- The **second main message** of your talk in one or two lines.
- Perhaps a **third message**, but not more than that.
- Outlook
  - Something you haven't solved.
  - Something else you haven't solved.



# For Further Reading I



A. Author.

*Handbook of Everything.*

Some Press, 1990.



S. Someone.

On this and that.

*Journal of This and That*, 2(1) :50–100, 2000.