



شصتمین وبینار از سلسله وبینارهای انجمن آمار ایران

مدل سازی تولیدی با رمز گذارهای خود کار متغیری:

رویکردی قدرتمند برای کشف دارو

مهران خدابنده

پژوهشگر دانشگاه سایمون فریزر، بنیان گذار شرکت Variational AI

چهارشنبه ۱۴۰۱/۱۱/۰۵ ساعت ۱۸ تا ۱۹:۳۰

مدل های مولد عمیق ابزاری قدرتمند برای مدل سازی توزیع های پیچیده و تولید داده های مصنوعی هستند. این مدل ها که شامل رویکردهایی مانند شبکه های متخاصم مولد (GAN)، رمزگذارهای خودکار متغیر (VAE)، مدل های مبتنی بر انرژی (EBM) و جریان های عادی ساز (Normalizing Flows) می شوند، در موارد مختلفی از جمله تولید تصویر و مدل سازی زبان طبیعی مورد استفاده گسترده قرار گرفته اند. هر کدام از این رویکردها از نظر زمان اجرا، تنوع نمونه ها، کیفیت نمونه ها و محدودیت های معماری، نقاط قوت و ضعف خاص خود را دارند. در این ارائه، ما بر روی VAE ها تمرکز می کنیم. به مبانی نظری آن می پردازیم و چگونگی استفاده از آنها برای تولید نمونه با وجود محدودیت های دلخواه را بررسی می کنیم. در نهایت، به طور خاص، به استفاده از VAE ها برای کشف دارو می پردازیم.



The 60th webinar of the Iranian Statistical Society

Generative Modeling with Variational Autoencoders: A Powerful Approach for Drug Discovery

Mehran Khodabandeh
Research assistant at Simon Fraser University
Co-founder at Variational AI

25/01/2023

18-19:30

Deep generative models are a powerful tool for modeling complex distributions and generating synthetic data. These models, which include approaches such as Generative Adversarial Networks (GANs), Variational Autoencoders (VAEs), Energy-Based Models (EBMs), and Normalizing Flows, have seen widespread adoption in a variety of applications, including image generation, language modeling. Each approach comes with its own trade-offs in terms of run-time, diversity of samples, quality of samples, and architectural restrictions.

In this presentation, we will focus on VAEs and delve into the theoretical foundations and explore how they can be used to generate samples with specific constraints. More specifically, we will focus on the use case of VAEs in drug discovery.