

UNIVERSITATEA BABEȘ-BOLYAI
FACULTATEA DE MATEMATICĂ ȘI INFORMATICĂ



Învățarea nesupervizată și fuziunea reprezentărilor în probleme de învățare supervizată. Aplicații în științe ale naturii

Rezumatul tezei de doctorat

Student doctorand: Albu Alexandra-Ioana
Conducător științific: Prof. dr. Czibula Gabriela

2023

Cuvinte cheie: Metode pentru învățarea reprezentărilor, Autoencoders, Contrastive Learning, Metode pentru fuziunea reprezentărilor, Învățarea folosind etichete incorecte.

Cuprins

Cuprinsul tezei de doctorat	2
Lista publicațiilor	6
Introducere	9
1 Fundamente teoretice	13
1.1 Învățarea profundă: noțiuni teoretice	13
1.2 Predicția interacțiunilor dintre proteine	14
1.3 Predicția pe termen scurt a vremii	14
2 Noi modele de clasificare în prezența etichetelor incorecte folosind metode nesupervizate pentru învățarea reprezentărilor	16
2.1 O metodă de învățare profundă bazată pe agregarea temporală a celor mai apropiați k vecini	16
2.2 O metodă de învățare prin concordanță între reprezentări supervizate și nesupervizate	17
2.3 Concluzii	17
3 Metode de învățare și fuziune a reprezentărilor pentru predicția interacțiunilor dintre proteine	18
3.1 <i>AutoPPI</i> : Predicția interacțiunilor dintre proteine folosind <i>autoencoders</i>	18
3.2 O metodă folosind <i>supervised autoencoders</i> pentru predicția interacțiunilor dintre proteine	19
3.3 <i>MM-StackEns</i> : O nouă abordare multimodală de tip ansamblu pentru predicția interacțiunilor dintre proteine	19
3.4 Concluzii	20
4 Metode de învățare și fuziune a reprezentărilor pentru predicția pe termen scurt a vremii	21
4.1 <i>AutoNowP</i> : o metodă folosind <i>autoencoders</i> convoluționali pentru predicția datelor radar	21
4.2 <i>NeXtNow</i> : o nouă arhitectură convoluțională pentru predicția pe termen scurt a vremii	22
4.3 Funcții de cost perceptuale bazate pe <i>autoencoders</i> pentru îmbunătățirea modelelor de predicție pe termen scurt a vremii	22
4.4 Concluzii	22
Concluzii	24

Cuprinsul tezei de doctorat

Glosar	4
Lista figurilor	5
Lista tabelelor	6
Lista Publicațiilor	8
Introducere	11
1 Fundamente teoretice	17
1.1 Învățarea profundă: noțiuni teoretice	17
1.1.1 Rețele neuronale	17
1.1.2 Paradigme de învățare	20
1.1.3 Metode pentru învățarea nesupervizată a reprezentărilor	21
1.1.3.1 Autoencoders	21
1.1.3.2 Contrastive learning	22
1.1.3.3 Modele de limbaj natural	23
1.1.4 Provocări în învățarea supervizată. Învățarea folosind etichete incorecte	23
1.1.5 Metode pentru învățarea reprezentărilor în probleme supervizate	26
1.1.6 Metode de fuziune a reprezentărilor	29
1.2 Predicția interacțiunilor dintre proteine. Formularea problemei și abordări înrudite	30
1.2.1 Formularea problemei	30
1.2.2 Recenzarea literaturii de specialitate în problema predicției interacțiunilor dintre proteine	32
1.3 Predicția pe termen scurt a vremii. Formularea problemei și abordări înrudite	34
1.3.1 Surse de date meteorologice	34
1.3.2 Recenzarea literaturii de specialitate în predicția pe termen scurt a vremii	37
2 Noi modele de clasificare în prezența etichetelor incorecte folosind metode nesupervizate pentru învățarea reprezentărilor	40
2.1 O metodă de învățare profundă bazată pe agregarea temporală a celor mai apropiați k vecin	41
2.1.1 Metoda propusă	41
2.1.2 Detalii de antrenare	43
2.1.2.1 Seturi de date	43
2.1.2.2 Detalii de antrenare	43
2.1.3 Rezultate	44

2.1.4	Concluzii	45
2.2	O metodă de învățare prin concordanță între reprezentări supervizate si nesupervizate	45
2.2.1	Metoda propusă	46
2.2.2	Evaluarea experimentală	48
2.2.2.1	Seturi de date	48
2.2.2.2	Metode din literatură	49
2.2.2.3	Arhitectura rețelei și detalii de antrenare	49
2.2.2.4	Comparații cu metodele din literatură	51
2.2.3	Analiza metodei propuse	53
2.2.4	Concluzii	55
3	Metode de învățare și fuziune a reprezentărilor pentru predicția interacțiunilor dintre proteine	56
3.1	<i>AutoPPI</i> : Predicția interacțiunilor dintre proteine folosind <i>autoencoders</i>	58
3.1.1	Metodologie	58
3.1.1.1	Reprezentarea proteinelor	59
3.1.1.2	Arhitecturi propuse	60
3.1.1.2.1	Arhitectura Joint-Joint	60
3.1.1.2.2	Arhitectura Siamese-Joint	60
3.1.1.2.3	Arhitectura Siamese-Siamese	61
3.1.1.3	Evaluarea performanței modelului	62
3.1.2	Analiză experimentală	63
3.1.2.1	Seturi de date	63
3.1.2.2	Rezultate	63
3.1.3	Comparații cu metodele din literatură	64
3.1.4	Concluzii	65
3.2	O metodă folosind <i>supervised autoencoders</i> pentru predicția interacțiunilor dintre proteine	66
3.2.1	Metodologie	66
3.2.1.1	Reprezentarea datelor	66
3.2.1.2	Metoda propusă	67
3.2.1.3	Metodologia de evaluare	68
3.2.2	Analiză experimentală	68
3.2.2.1	Seturi de date	68
3.2.2.2	Arhitectura rețelei	69
3.2.2.3	Rezultate	69
3.2.3	Comparații cu metodele din literatură	70
3.2.4	Concluzii	71
3.3	<i>MM-StackEns</i> : O nouă abordare multimodală de tip ansamblu pentru predicția interacțiunilor dintre proteine	72
3.3.1	Metodologie	73
3.3.1.1	Modulul de reprezentare a datelor	74
3.3.1.2	Modulul de fuziune a reprezentărilor	75
3.3.1.3	Componenta de procesare a secvențelor	76
3.3.1.4	Componenta de procesare a grafului	77
3.3.1.5	Strategia de tip ansamblu cu două nivele	78
3.3.1.6	Testare	79

3.3.2	Analiza experimentală	80
3.3.2.1	Seturi de date	80
3.3.2.2	Detalii de antrenare	82
3.3.2.3	<i>Ablation study</i>	83
3.3.2.4	Compararea reprezentărilor proteice	86
3.3.3	Discuții	87
3.3.3.1	Comparații cu metodele din literatură	87
3.3.3.2	Analiza statistică	93
3.3.3.3	Analiza timpului de execuție	94
3.3.4	Concluzii	95
4	Metode de învățare și fuziune a reprezentărilor pentru predicția pe termen scurt a vremii	97
4.1	<i>AutoNowP</i> : o metodă folosind <i>autoencoders</i> convoluționali pentru predicția datelor radar	99
4.1.1	Metoda propusă	99
4.1.1.1	Reprezentarea și pre-procesarea datelor	99
4.1.1.2	Antrenarea modelului <i>AutoNowP</i>	100
4.1.1.3	Clasificarea folosind <i>AutoNowP</i>	101
4.1.2	Analiza experimentală	102
4.1.2.1	Seturi de date	102
4.1.2.2	Arhitecturi și detalii de implementare	103
4.1.2.3	Rezultate	104
4.1.3	Discuții	104
4.1.3.1	Analiza performanței modelului <i>AutoNowP</i>	105
4.1.3.2	Comparații cu metode din literatură	105
4.1.4	Concluzii	107
4.2	<i>NeXtNow</i> : o nouă arhitectură convoluțională pentru predicția pe termen scurt a vremii	107
4.2.1	Metodologie	108
4.2.1.1	Formalizarea problemei și pre-procesarea datelor	109
4.2.1.2	Construcția modelului <i>NeXtNow</i>	109
4.2.1.3	Metodologia de testare	110
4.2.2	Analiza experimentală	111
4.2.2.1	Seturi de date	111
4.2.2.2	Detalii de implementare	113
4.2.2.3	Rezultate experimentale	114
4.2.3	Discuții	116
4.2.4	Concluzii	117
4.3	Funcții de cost perceptuale bazate pe <i>autoencoders</i> pentru îmbunătățirea modelelor de predicție pe termen scurt a vremii	120
4.3.1	Metoda propusă	120
4.3.1.1	Pre-procesarea datelor	120
4.3.1.2	Funcția de cost propusă	121
4.3.1.3	Metrici de evaluare	123
4.3.2	Analiza experimentală	123
4.3.2.1	Seturi de date	124
4.3.2.2	Detalii de antrenare	124
4.3.2.3	Rezultate și discuții	125

4.3.3	Concluzii	127
	Concluzii	129
	Bibliografie	131

Lista publicațiilor

Clasamentul publicațiilor a fost realizat conform standardelor CNATDCU (Consiliul Național de Atestare a Titlurilor, Diplomelor și Certificatelor Universitare) aplicabile pentru studenții doctoranzi înscriși după 1 octombrie 2018. Toate clasamentele sunt listate conform clasificării jurnalelor¹ și a conferințelor² în Informatică.

Publicații indexate în Web of Science - Science Citation Index Expanded

- [9] **Alexandra-Ioana Albu**, Maria-Iuliana Bocicor, Gabriela Czibula. *MM-StackEns: A new deep multimodal stacked generalization approach for protein-protein interaction prediction*, Computers in Biology and Medicine, Vol. 153, 106526, 2023 (**AIS Quartile Q2** according to JCR 2022 - **1st position**, WoS category: Engineering, Biomedical).

Rank A, 8 points.

- [12] **Alexandra-Ioana Albu**, Gabriela Czibula, Andrei Mihai, Istvan-Gergely Czibula, Sorin Burcea, and Abdelkader Mezghani. *NeXtNow: A convolutional deep learning model for the prediction of weather radar data for nowcasting purposes*. Remote Sensing 14, no. 16 (2022): 3890 (**AIS Quartile Q2** according to JCR 2021)

Rank B, 1 point.

- [25] Gabriela Czibula, Andrei Mihai, **Alexandra-Ioana Albu**, Istvan-Gergely Czibula, Sorin Burcea, Abdelkader Mezghani. *AutoNowP: An approach using deep autoencoders for precipitation nowcasting based on radar echo prediction*. Mathematics 9(14), Special Issue on “Computational Optimizations for Machine Learning”, 1653, 2021 (**IF Quartile Q1** according to JCR 2020).

Rank A, 2 points.

- [23] Gabriela Czibula, **Alexandra-Ioana Albu**, Maria Iuliana Bocicor, and Camelia Chira. *Auto-PPI: An ensemble of deep autoencoders for protein-protein interaction prediction*. Entropy 23, no. 6 (2021): 643 (**IF Quartile Q2** according to JCR 2020)

Rank B, 2 points.

¹<https://uefiscdi.ro/premierea-rezultatelor-cercetarii-articole>

²<http://portal.core.edu.au/conf-ranks/>

Publicații indexate în Web of Science, Conference Proceedings Citation Index

- [8] **Alexandra-Ioana Albu**. *Temporal ensembling deep k-nearest neighbours for learning with noisy labels*. 31st European Symposium on Artificial Neural Networks, Computational Intelligence and Machine Learning (ESANN 2023), *Accepted*.

Rank B - CORE 2021, 4 points.

- [7] **Alexandra-Ioana Albu**. *Improving radar echo extrapolation models using autoencoder-based perceptual losses*. 27th International Conference on Knowledge-Based and Intelligent Information & Engineering Systems (KES 2023), *Accepted*.

Rank B - CORE 2021, 4 points.

- [6] **Alexandra-Ioana Albu**. *An approach for predicting protein-protein interactions using supervised autoencoders*. 26th International Conference on Knowledge-Based and Intelligent Information & Engineering Systems (KES2022), *Procedia Computer Science*, Volume 207, 2022, pages 2023–2032.

Rank B - CORE 2021, 4 points.

- [5] **Alexandra-Ioana Albu**. *Towards learning transferable embeddings for protein conformations using variational autoencoders*. 25th International Conference on Knowledge-Based and Intelligent Information & Engineering Systems (KES2021), *Procedia Computer Science*, Volume 192, 2021, pages 10–19.

Rank B - CORE 2021, 4 points.

- [10] **Alexandra-Ioana Albu**, Gabriela Czubula. *Analysing protein dynamics using machine learning based generative models*. IEEE 14th International Symposium on Applied Computational Intelligence and Informatics, SACI 2020, Timisoara, Romania, pages 000135-000140, IEEE, 2020.

Rank D - CORE2020, 1 point.

- [11] **Alexandra-Ioana Albu**, Gabriela Czubula. *Learning with label noise through pairwise distance agreement between supervised and self-supervised representations*. Submitted.

Publicații în jurnale și volume ale conferințelor

- [4] **Alexandra-Ioana Albu**, Alina Enescu, Luigi Malagò. *Tumor detection in brain MRIs by computing dissimilarities in the latent space of a variational autoencoder*. Proceedings of the Northern Lights Deep Learning Workshop, Norway, pages 1–6, 2020.

Rank D, 1 point.

Alte publicații

- [2] **Alexandra-Ioana Albu**, Alina Enescu, Luigi Malagò. *Detection of tumours in brain MRIs with variational autoencoders*. ECML PKDD 2020 Workshop Machine Learning for Pharma and Healthcare Applications, 2020.

Rank D, 0 point.

- [3] **Alexandra-Ioana Albu**, Alina Enescu, Luigi Malagò. *Improved slice-wise tumour detection in brain MRIs by computing dissimilarities between latent representations*. 2020 KDD Workshop on Applied Data Science for Healthcare, 2020.

Rank **D**, **0** point.

Scorul publicațiilor: 31 puncte.

Introducere

Scopul acestei teze este de a explora utilizarea unor metode de învățare nesupervizată și fuziune a reprezentărilor în vederea îmbunătățirii performanței modelelor supervizate de învățare profundă.

Învățarea profundă definește un cadru general pentru antrenarea unor modele capabile să învețe reprezentări abstracte ale datelor, prin extragerea automată a informației relevante pentru o anumită problemă [37]. În ciuda faptului că metodele supervizate au obținut rezultate remarcabile într-o multitudine de probleme, succesul lor depinde de existența unor seturi de date de dimensiuni mari, corect etichetate. Cu toate acestea, în multe situații reale, etichetele sunt insuficiente, parțial incorecte sau debalansate, ceea ce afectează semnificativ performanța modelelor de învățare profundă [16, 82, 34]. În contrast, învățarea nesupervizată poate extrage informații despre structura datelor fără a folosi etichete. De aceea, învățarea nesupervizată are potențialul de a oferi informații complementare, care ar putea crește performanța modelelor supervizate. Învățarea nesupervizată a reprezentărilor (*unsupervised representation learning*) a devenit unul dintre cele mai importante sub-domenii ale învățării nesupervizate profunde. Aceasta se concentrează pe obținerea unor reprezentări fidele ale datelor care pot fi utile în alte probleme [15, 34]. Unele dintre cele mai intens studiate astfel de modele includ diverse tipuri de *autoencoders* (AEs), *contrastive learning* și modele de limbaj natural [52, 34]. Studiul avantajului adus de metodele de învățare nesupervizată a reprezentărilor în probleme de clasificare sau de regresie este o temă de interes în literatură, direcțiile principale de cercetare concentrându-se pe: pre-antrenare [34, 77], metode de detecție a anomalilor [18] sau metode semi-supervizate [48, 28]. Prin modelele introduse în această teză am identificat noi direcții și probleme în care metodele nesupervizate de învățare a reprezentărilor pot fi benefice pentru învățarea supervizată. În literatura de specialitate sunt studiate de asemenea metode de combinare a reprezentărilor obținute folosind diferite componente ale modelelor pentru a obține o performanță optimă [27, 68]. Datorită legăturii strânse dintre metodele pentru învățarea și fuziunea reprezentărilor și a caracteristicilor lor complementare, am explorat cele două teme în corelație una cu cealaltă.

Prima problemă abordată în această teză constă în clasificarea în prezența unor etichete incorecte (*label noise*, LN). Obținerea unor modele robuste folosind seturi de antrenare cu etichete incorecte este dificilă, dar poate avea o relevanță practică majoră. Importanța problemei provine din faptul că, de multe ori, în situații reale, procesul de etichetare este imprecis, fie din cauza unor greșeli umane, fie din cauza unor metode automate incorecte [79, 56]. Întrucât rețelele profunde pot învăța adnotări arbitrare [86], dezvoltarea unor algoritmi capabili să generalizeze chiar dacă au fost antrenați cu instanțe incorecte este esențială. În acest context, am dezvoltat două modele ce își propun să folosească metode nesupervizate pentru a ghida procesul supervizat de învățare.

Metoda *TE-kNN*, prezentată în [8], are scopul de a identifica instanțele care au o probabilitate mai mare să aibă etichete corecte, astfel încât doar aceste instanțe să fie folosite în continuare în antrenarea rețelelor. Metoda propusă este similară cu alte metode existente în literatură [13, 60], care calculează un scor indicând dacă o instanță este în acord cu cei mai apropiați vecini, pentru fiecare epocă. Acest scor este utilizat pentru a decide dacă instanța este etichetată corect. Spre deosebire de alte abordări, *TE-kNN* folosește o strategie de agregare temporală (*temporal ensembling*) [50] care ține cont de sco-

rurile obținute de o instanță în epoci anterioare. În acest context, am investigat beneficiul unei scheme de inițializare pentru scoruri folosind vecinii indicați de un AE. Am demonstrat prin experimente pe trei seturi de date cu imagini că metoda propusă este superioară unor abordări din literatură, incluzând modelul clasic bazat pe cei mai apropiați vecini.

Deși eficiente în situații în care puține etichete sunt incorecte, metodele de selecție a instanțelor nu obțin o performanță bună în cazul în care există multe instanțe incorecte, deoarece setul de date selectat este foarte mic [67]. Pentru aceste situații, am propus o nouă metodă, *DIAG* [11], care folosește învățarea nesupervizată pentru a obține reprezentări mai robuste. Modelul propus include o metodă de regularizare care reduce diferența dintre matricea de distanțe calculată folosind reprezentări supervizate și matricea de distanțe obținută printr-un model nesupervizat. Ipoteza de la care am pornit a fost aceea că învățarea unor reprezentări ce sunt în acord cu ambele paradigme de învățare - supervizată și nesupervizată - poate diminua efectul etichetelor incorecte. Experimentele efectuate pe seturi de date sintetice și reale au arătat că *DIAG* obține performanță mai bună decât numeroase abordări din literatură. Cele două metode propuse sunt complementare. Prin aceste două studii, ne-am propus să ilustrăm potențialul metodelor de învățare a reprezentărilor în antrenarea rețelelor neuronale folosind diverse tipuri și cantități de LN.

Cea de-a doua direcție urmată în cercetările noastre a fost constituită de studiul a două teme cu aplicație practică din domeniul științelor naturii. Am ales un domeniu important din biologie, reprezentat de proteomică și un domeniu relevant din meteorologie, reprezentat de predicția pe termen scurt a vremii, pornind de la ipoteza că metodele pentru învățarea și fuziunea reprezentărilor pot fi explorate pentru a îmbunătăți performanța tehnicilor supervizate de învățare profundă.

Proteomica reprezintă studiul proteinelor, care sunt molecule de dimensiuni mari ce influențează toate procesele care au loc în organismele vii. Identificarea interacțiunilor dintre proteine (*protein-protein interaction*, PPI) este o problemă importantă în proteomică având potențialul să influențeze progresul în cercetarea legată de detecția funcțiilor proteinelor precum și în domeniul dezvoltării medicamentelor. Din cauza complexității procedurilor experimentale și a costurilor crescute pe care le implică, studiul metodelor computaționale pentru această problemă prezintă un interes deosebit [69]. Problema poate fi modelată sub forma unei clasificări binare în care instanțele sunt perechi de proteine. Una dintre provocări este reprezentată de dificultatea de a prezice cu acuratețe interacțiuni pentru proteinele care nu au fost incluse în setul de antrenare (pentru care nu există interacțiuni cunoscute), în comparație cu problema mai simplă a identificării de interacțiuni noi pentru proteine întâlnite anterior [31, 61, 47]. Pornind de la aceste probleme de generalizare, ne-am concentrat pe exploatarea metodelor nesupervizate de învățare a reprezentărilor pentru a dezvolta modele îmbunătățite de predicție a interacțiunilor dintre proteine. De asemenea, datorită faptului că instanțele sunt reprezentate de perechi de proteine, al doilea nostru obiectiv a fost dezvoltarea unor module de fuziune a reprezentărilor.

În [23], am propus un clasificator binar, *AutoPPI*, inspirat de metode de detecție a anomaliilor, pentru identificarea interacțiunilor dintre proteine. Modelul constă în antrenarea a doi AEs - un model antrenat pe perechi care interacționează și un model antrenat pe perechi care nu interacționează - și detectarea clasei cu ajutorul modelului care reușește să reconstruiască cel mai bine perechea. Pentru a reconstrui optim perechile de proteine, am dezvoltat două arhitecturi siameze, care utilizează module de fuziune a reprezentărilor. *AutoPPI* a obținut rezultate mai bune decât majoritatea abordărilor din literatură pe seturile de date considerate (13 cazuri din 16 comparații).

Cu toate că *AutoPPI* a obținut o performanță bună pe seturile evaluate, acest model are dificultăți în predicția interacțiunilor pentru proteine care nu au fost întâlnite anterior. A doua noastră abordare [6] a avut drept scop să amelioreze această limitare prin propunerea unei metode bazate pe *supervised autoencoders* [51, 44]. Această metodă folosește rețele neuronale care optimizează simultan

o componentă de clasificare și o componentă de reconstrucție, cea de-a doua având efect regularizator [51, 44]. Modelul propus de noi implică o abordare în două etape constând dintr-o etapă de pre-antrenare folosind un *denoising autoencoder* și o etapă în care este antrenat un *supervised autoencoder*. Am arătat rezultatele bune obținute de metoda noastră în comparație cu multiple abordări din literatură.

Cu cea de-a treia metodă, *MM-StackEns* [9], am urmărit să îmbunătățim mai mult performanța modelelor pentru proteine necunoscute, prin învățarea unor reprezentări mai cuprinzătoare. Spre deosebire de primele două abordări care au folosit doar informații conținute în secvențele de proteine, *MM-StackEns* este un ansamblu constând din două rețele cu structuri diferite - o componentă pentru secvențe și o componentă pentru graful interacțiunilor. Pe lângă aceasta, am folosit o metodă de învățare auto-supervizată (*self-supervised*) a reprezentărilor în contextul identificării interacțiunilor dintre proteine. Am arătat că astfel de reprezentări pot duce la o generalizare mai bună a modelului pentru proteine din afara grafului de antrenare. O altă contribuție a acestui studiu este dezvoltarea unui nou modul de fuziune a reprezentărilor care poate fi cu ușurință integrat atât în modelul corespunzător secvențelor, cât și în cel corespunzător grafului. Abordarea propusă a obținut rezultate mai bune decât restul metodelor din literatură în marea majoritate a scenariilor de evaluare investigate. Prin acest model, am investigat atât metode de fuziune a reprezentărilor, cât și metode de învățare nesupervizată a reprezentărilor cu scopul îmbunătățirii identificării interacțiunilor proteice.

A doua aplicație studiată a fost reprezentată de predicția pe termen scurt a vremii folosind date radar (*nowcasting*). Dată fiind recenta creștere a periodicității fenomenelor extreme, capacitatea de a prezice cu acuratețe evoluția vremii devine tot mai importantă. Reflectivitatea reprezintă unul dintre produsele cel mai des utilizate de către meteorologi pentru detectarea fenomenelor atmosferice. Predicția pe termen scurt a vremii poate fi văzută ca o problemă de predicție spațio-temporală în care scopul este să învățăm o asociere între o secvență de date radar măsurate în momente diferite de timp [63]. Datele radar sunt de dimensiuni mari și prezintă erori cauzate de faptul că măsurătorile pot detecta diverse obiecte din mediul înconjurător. De asemenea, datele meteorologice sunt debalansate întrucât evenimentele severe sunt mai rare [36]. Cu toate acestea, predicția precisă a acestor evenimente extreme este foarte importantă. Dată fiind structura spațială a datelor, arhitecturile convoluționale sunt un domeniu de cercetare promițător. Modelele antrenate cu tehnici clasice tind însă să furnizeze predicții neclare [42]. În cercetarea noastră, am aplicat metode de fuziune a reprezentărilor pentru dezvoltarea de arhitecturi convoluționale și am arătat potențialul modelelor AE în dezvoltarea unor clasificatori pentru date debalansate și a unor funcții de cost noi pentru îmbunătățirea calității imaginilor prezise.

În [25], am introdus *AutoNowP*, o metodă de clasificare binară la nivel de pixel pentru predicția pe termen scurt a vremii. Acest model învață să clasifice dacă o locație de pe hartă va avea o valoare mai mare sau mai mică decât un prag pre-specificat folosind vecinii punctului de la un moment de timp anterior. Acest model este similar cu *AutoPPI* în ceea ce privește metodologia de antrenare și clasificare, dar diferă prin faptul că am folosit funcții de cost specializate pentru fiecare AE. Această modificare are rolul de a introduce o informație suplimentară pentru cele două modele într-un scenariu în care datele de input pentru clase distincte sunt similare. Totodată, în acest studiu am evaluat metoda propusă folosind date debalansate. Am comparat *AutoNowP* cu mai multe metode de învățare automată folosind date radar din România și Norvegia și am arătat că metoda noastră obține rezultate comparabile cu alte modele.

A doua abordare, *NeXtNow* [12], este o rețea convoluțională profundă ce își propune să fie mai scalabilă decât *AutoNowP*, prin modelarea datelor la nivel de hartă și nu la nivel de pixel. Metoda propusă este o arhitectură convoluțională construită folosind blocuri *ResNeXt* [83]. Studiul și-a propus să arate că tehnici pentru fuziunea reprezentărilor precum cele conținute în arhitectura *ResNeXt* pot fi

utile pentru predicția pe termen scurt a vremii. Abordarea propusă a fost evaluată folosind seturi de date radar din România și Norvegia.

În timp ce studiile noastre anterioare s-au concentrat pe proiectarea unor noi modele și arhitecturi, prin cel de-al treilea studiu ne-am orientat spre dezvoltarea unor funcții de cost având drept obiectiv îmbunătățirea calității vizuale a predicțiilor modelelor de învățare profundă. În acest scop, am dezvoltat în [7] o nouă familie de funcții de cost perceptuale (*perceptual losses*) [46], care folosesc AEs pentru extragerea reprezentărilor din date în locul clasificatorilor pre-antrenați utilizați de obicei (ex: VGG). Experimentele efectuate pe date radar din Norvegia au arătat că metoda noastră poate obține predicții de calitate vizuală mai bună decât metodele clasice, la care se adaugă o mică îmbunătățire în ceea ce privește performanța. Metoda propusă are avantajul suplimentar de a fi mai puțin costisitoare din punct de vedere computațional decât clasificatorii de tip VGG.

Datele caracteristice temelor studiate conțin etichete debalansate și parțial incorecte, pe care metodele supervizate nu reușesc să le exploateze eficient. Acest lucru ne-a motivat să investigăm abordări bazate pe tehnici pentru învățarea nesupervizată a reprezentărilor și metode de fuziune a reprezentărilor. Mai mult, prin aplicarea unor astfel de metode în aceste două domenii, ne-am propus să arătăm potențialul combinării unor concepte din învățarea supervizată cu metode pentru învățarea și fuziunea reprezentărilor folosind atât date secvențiale (proteine) cât și date cu structură spațio-temporală (date radar).

Conținutul acestei teze este structurat după cum urmează. Capitolul 1 prezintă o descriere de ansamblu a învățării profunde, incluzând principalele componente utilizate în proiectarea modelelor propuse și o recenzare aprofundată a literaturii de specialitate pentru problemele studiate.

Capitolul 2 prezintă abordările noastre pentru îmbunătățirea modelelor de clasificare în prezența LN folosind metode de învățare nesupervizată a reprezentărilor. Secțiunea 2.1 prezintă prima noastră abordare, *TE-kNN* [8], care este o metodă de selecție a instanțelor. În Secțiunea 2.2, este introdusă o metodă nouă de regularizare *DIAG* [11] care vizează îmbunătățirea robusteții rețelelor neuronale profunde.

Capitolul 3 prezintă contribuțiile noastre originale în proiectarea unor modele pentru predicția interacțiunilor proteice. Secțiunea 3.1 prezintă abordarea noastră *AutoPPI* [23], precum și arhitecturile siameze propuse. În secțiunea 3.2 detaliem abordările propuse folosind *supervised autoencoders* pentru predicția PPIs [6] și evaluăm generalizarea acestora la proteinele din afara grafului de antrenare. Secțiunea 3.3 prezintă a treia noastră contribuție, ansamblul multimodal *MM-StackEns* [9], urmată de o evaluare experimentală extinsă a modelului propus folosind mai multe seturi de date și tipuri de interacțiuni.

Capitolul 4 conține contribuțiile noastre originale pentru dezvoltarea unor modele de *nowcasting*. Secțiunea 4.1 prezintă modelul de clasificare binară *AutoNowP* [25] construit utilizând AEs și potențialul său în *nowcasting*. Arhitectura convoluțională *NeXtNow* [12] este prezentată în Secțiunea 4.2 ca o ilustrare a utilității tehnicilor de fuziune a reprezentărilor în domeniul predicției pe termen scurt a vremii. Secțiunea 4.3 prezintă abordarea noastră pentru îmbunătățirea calității vizuale a datelor radar prezise prin proiectarea unor funcții de cost perceptuale bazate pe un AE [7].

În final, ultima secțiune conturează concluziile acestei teze și direcțiile de extindere viitoare pentru modelele propuse.

Autorul a beneficiat de sprijin financiar acordat prin finanțare NO Grants 2014-2021, în baza proiectului cu nr. 26/2020.

Capitolul 1

Fundamente teoretice

Acest capitol prezintă o descriere generală a aspectelor teoretice principale referitoare la modelele de învățare profundă utilizate în această teză (Section 1.1). În continuare sunt prezentate modelele de învățare profundă propuse în literatură pentru problemele studiate - predicția interacțiunilor dintre proteine (Section 1.2) și predicția pe termen scurt a vremii (Section 1.3).

1.1 Învățarea profundă: noțiuni teoretice

Învățarea profundă este reprezentată de studiul rețelelor neuronale [37]. Maniera în care aceste modele sunt antrenate este influențată de paradigma de învățare utilizată. În învățarea supervizată, un model este antrenat folosind perechi formate din date și etichetele corepunzătoare cu scopul de a asocia instanțele cu o clasă discretă (în probleme de clasificare) sau cu o valoare continuă (în probleme de regresie) [37]. Cu toate acestea, în majoritatea problemelor, sunt necesare seturi de date de dimensiuni mari conținând etichete de calitate pentru a învăța corespunzător această asociere, ceea ce nu este posibil în multe cazuri [34].

O paradigmă diferită este reprezentată de învățarea nesupervizată, care poate identifica structura datelor fără a folosi etichete [37]. Un sub-domeniu al învățării nesupervizate căruia i s-a acordat o atenție considerabilă în ultima vreme este reprezentat de *self-supervised learning*. Principala caracteristică a acestui tip de învățare este faptul că generează o problemă adițională folosind datele ne-adnotate și antrenează modelul folosind problema generată [34]. În cele ce urmează, principalele tipuri de metode de învățarea nesupervizată a reprezentărilor sunt prezentate pe scurt.

AEs sunt rețele neuronale antrenate să reconstruiască instanțele folosind reprezentări intermediare, învățând astfel caracteristici de nivel înalt pentru datele de intrare. Un *denoising autoencoder* (DAE) învață să recreeze datele de intrare pornind de la versiuni modificate ale acestora [37].

Metodele de tip *contrastive learning* sunt o serie de tehnici *self-supervised* ce obțin reprezentări cu proprietatea că instanțele similare sunt grupate în *cluster*e, în timp ce instanțele neasemănătoare se află la distanță mare una față de cealaltă. Acest lucru se realizează prin construirea de perechi de instanțe asemănătoare folosind augmentări [21].

O altă utilizare de succes a paradigmei *self-supervised* este dată de modelele de limbaj natural [34]. Recent, au fost propuse modelele ELMo [62] și BERT [29], care țin cont de contextul unui cuvânt pentru a calcula o reprezentare. Aceste modele sunt de obicei antrenate să prezică următorul cuvânt din secvență sau o porțiune mascată a secvenței.

Reprezentările învățate în mod nesupervizat folosind aceste modele pot fi utile în contexte supervizate. În acest sens, o direcție investigată până acum în literatură s-a concentrat pe pre-antrenare prin învățare nesupervizată, urmată de antrenare supervizată. Aceasta poate fi realizată fie prin folosirea re-

prezentărilor învățate anterior, fie prin ajustarea lor pentru problema curentă (*fine-tuning*) [69, 33, 34]. Abordarea menționată poate fi utilă dacă nu avem acces la multe instanțe etichetate pentru problema supervizată. O altă aplicație importantă este reprezentată de detecția anomaliilor [18], pentru care se utilizează deseori AEs. Alte abordări au introdus metode de optimizare simultană, care au ajutat în prevenirea învățării pe de rost (*overfitting*) [51].

O situație în care metodele tradiționale de învățare supervizată nu reușesc să generalize și care este des întâlnită în practică este dată de prezența etichetelor incorecte. Diverse metode au fost dezvoltate cu scopul reducerii impactului LN [67]. Pornind de la observația că metodele de învățare profundă învață pe de rost adnotările incorecte, au fost studiate diverse metode de regularizare [14, 82, 45, 70, 88, 43, 56]. O altă strategie importantă pentru reducerea efectului LN este reprezentată de identificare instanțelor cu o probabilitate mare de a fi corecte, urmată de antrenarea folosind doar aceste instanțe [60, 13].

1.2 Predicția interacțiunilor dintre proteine

Prima temă cu aplicație practică studiată în această teză a fost reprezentată de predicția interacțiunilor dintre proteine. Detecția precisă a interacțiunilor dintre proteine poate facilita o mai bună înțelegere a funcțiilor proteinelor și a mecanismelor biologice [69].

Până în prezent au fost propuse numeroase metode de învățare automată pentru determinarea interacțiunilor proteice. Literatura s-a concentrat inițial pe metode clasice de învățare automată [38, 22], iar ulterior, au fost studiate rețele neuronale [20, 89]. O serie de studii au investigat utilitatea folosirii unor AEs pentru extragerea de reprezentări [81, 80, 69]. O altă direcție investigată a fost dată de metode de tip ansamblu [19, 54], *graph neural networks* [57, 85] și metode multimodale [87, 55].

Cu toate că performanța metodelor computaționale pentru predicția interacțiunilor dintre proteine a progresat constant pe parcursul anilor, câteva studii au observat diferența între performanța obținută în detecția interacțiunilor între proteine care făceau parte din graful de antrenare comparativ cu performanța obținută pentru proteine neîntâlnite în antrenare [31, 61, 57]. Cu scopul de a crea un protocol cuprinzător pentru sistemele de predicție a interacțiunilor dintre proteine, Park și Marcotte [61] au propus crearea a trei tipuri de seturi de test: seturi de test în care ambele proteine din fiecare pereche au fost întâlnite în antrenare, dar în pereche cu alte proteine (interacțiuni denumite **C1**), seturi de test în care una dintre proteinele din fiecare pereche nu a fost întâlnită (clasa **C2**) și seturi de test în care nicio proteină nu apare în setul de antrenare (clasa **C3**). Studiul menționat a accentuat necesitatea includerii acestor trei tipuri de seturi de test în evaluarea sistemelor de predicție a interacțiunilor dintre proteine, întrucât în situații reale aproximativ 19.2% dintre interacțiuni sunt de tip C1, 49.2 % sunt de tip C2, iar 31.6% sunt de tip C3 [61].

1.3 Predicția pe termen scurt a vremii

Această secțiune prezintă cea de-a doua temă cu aplicație practică studiată din domeniul științelor naturii și anume predicția pe termen scurt a vremii (*nowcasting*).

Posibilitatea de a prezice cu acuratețe fenomenele meteorologice poate avea o importanță crucială pentru activitățile umane, în special în cazul schimbărilor bruște și severe de vreme [1].

Una dintre sursele principale de date utilizate în predicția vremii este reprezentată de datele radar de reflectivitate. Acestea sunt măsurate de către radar în mod periodic, obținându-se valori numerice corespunzătoare unei zone geografice circulare din jurul radarului [36].

Întrucât datele meteorologice au atât structură spațială, cât și temporală, ambele având un rol

important în predicția evoluției vremii, problema poate fi modelată din punct de vedere computațional ca o predicție spațio-temporală [64].

Diverse metode de învățare profundă au fost propuse pentru predicția pe termen scurt a vremii. Acestea pot fi împărțite în două categorii, definite de modul în care dimensiunea temporală este modelată. Prima categorie folosește arhitecturi pur convoluționale. Metodele propuse au fost bazate pe U-Net [1, 75], Xception [65], convoluții 3D [40] sau convoluții cauzale [17]. Cea de-a doua categorie constă în modele bazate pe *convolutional LSTMs* [84, 64, 71], care reprezintă adaptări ale modelului LSTM pentru date cu structură spațio-temporală.

O limitare a modelelor existente este dată de faptul că nu pot prezice cu acuratețe evenimentele severe, caracterizate de valori mari ale reflectivității, din cauza faptului că datele sunt debalansate [36]. O altă limitare este reprezentată de faptul că predicțiile prezintă mai puține detalii decât imaginile radar originale [42, 76, 74]. Acest neajuns este cauzat de folosirea unor funcții de cost calculate la nivel de pixel (spre exemplu *Mean squared error*), care presupun că datele urmează o distribuție normală [58]. Direcțiile principale urmate pentru îmbunătățirea calității predicțiilor au fost: utilizarea *Generative Adversarial Networks* [73], a funcțiilor de cost perceptuale (*perceptula functions*) [76, 78] și a unor abordări hibride [42]. Ideea din spatele funcțiilor de cost perceptuale presupune calcularea distanței dintre imaginea prezisă și cea reală nu direct în spațiul pixelilor, ci într-un spațiu al reprezentărilor care extrage caracteristici de nivel înalt precum stil, conținut sau texturi [30].

Capitolul 2

Noi modele de clasificare în prezența etichetelor incorecte folosind metode nesupervizate pentru învățarea reprezentărilor

Capitolul curent prezintă contribuțiile noastre care au avut drept scop dezvoltarea de noi metode pentru antrenarea robustă a rețelelor în prezența LN prin valorificarea informațiilor nesupervizate din date. Am propus două metode, *TE-kNN* (prezentată în Secțiunea 2.1) și *DIAG* (prezentată în Secțiunea 2.2), ce corespund celor două categorii principale de metode pentru învățare în prezența LN.

2.1 O metodă de învățare profundă bazată pe agregarea temporală a celor mai apropiați k vecini

O direcție importantă de cercetare în învățarea în prezența LN este reprezentată de metodele de selecție a instanțelor, ce au drept scop identificarea instanțelor cu adnotări corecte pentru ca doar aceste instanțe selectate să fie ulterior utilizate în antrenare [39, 13]. O tehnică folosită în mai multe studii este reprezentată de identificarea instanțelor ce sunt în concordanță cu cei mai apropiați k vecini (*k-nearest neighbours*, k -NN) în privința etichetei [13, 60, 35]. Vecinii sunt de obicei calculați folosind reprezentările obținute din penultimul strat al rețelei neuronale [60, 35]. Cu toate acestea, considerarea exclusiv a vecinilor obținuți în epoca actuală poate fi sub-optimală, din cauza etichetelor incorecte ce pot conduce la vecini falși.

Pentru a rezolva această limitare, am propus în [8] o metodă de selecție a instanțelor ce utilizează o tehnică de agregare temporală [50] pentru calculul scorurilor folosite pentru a decide dacă o instanță este corect etichetată. Abordarea noastră calculează o medie ponderată între scoruri anterioare ale unei instanțe și scorul curent, beneficiind astfel de experiența acumulată de model pe parcursul antrenării. Am investigat două inițializări pentru scoruri: o variantă în care toate scorurile inițiale sunt 0 și o alta în care scorurile inițiale sunt calculate folosind vecinii obținuți cu un AE.

Evaluarea experimentală a fost efectuată pe seturile de date SVHN [59], CIFAR-10 și CIFAR-100 [49] folosind LN sintetic. Rezultatele obținute au arătat superioritatea metodei noastre în comparație cu mai multe metode din literatură, incluzând metoda k -NN originală.

2.2 O metodă de învățare prin concordanță între reprezentări supervizate și nesupervizate

În ciuda faptului că metodele de selecție a instanțelor conduc la rezultate bune în cazul în care puține instanțe sunt etichetate greșit, acestea nu sunt potrivite pentru situații cu multe instanțe incorecte [67]. În [11] am propus o metodă ce are drept scop principal îmbunătățirea robusteții rețelelor în această problemă. Motivația alegerii acestei abordări este dată de intuiția că folosirea informației nesupervizate conținute în date poate fi benefică pentru rețele neuronale antrenate cu etichete incorecte.

Metoda propusă presupune învățarea unor reprezentări supervizate care să fie în concordanță cu reprezentările obținute printr-un model nesupervizat. Ipoteza de la care am pornit a fost aceea că învățarea unor reprezentări ce sunt în acord cu ambele paradigme de învățare - supervizată și nesupervizată - poate diminua efectul etichetelor incorecte. Modelul nesupervizat a fost reprezentat de o metodă din clasa *contrastive learning*.

Analiza literaturii a arătat ca abordarea noastră este diferită conceptual de alte metode propuse anterior.

Experimentele efectuate pe date conținând LN sintetic (folosind seturile de date CIFAR-10 și CIDAR-100 [49]) și realist (seturile Animal-10N [66] și Food-101N [53]) au arătat că metoda noastră a obținut o îmbunătățire de până la 61.6% față de cea mai bună abordare din literatura studiată în cazul LN sever și de până la 1.8% în cazul unor cantități moderate de LN.

2.3 Concluzii

Acest capitol prezintă abordările noastre folosind metode pentru învățarea reprezentărilor în clasificarea cu etichete incorecte: o nouă metodă de selecție a instanțelor și o nouă metodă de regularizare. Performanța bună a metodelor propuse în comparație cu metode similare a fost demonstrată folosind multiple seturi de date cu imagini. Este de remarcat însă că metodele propuse sunt generale și ar putea fi aplicate și pe alte tipuri de date.

Precum am menționat anterior, cele două metode sunt complementare. Astfel, direcții viitoare de cercetare vor viza combinarea celor două metode propuse.

Capitolul 3

Metode de învățare și fuziune a reprezentărilor pentru predicția interacțiunilor dintre proteine

Acest capitol prezintă abordările noastre pentru predicția PPI folosind metode pentru învățarea reprezentărilor, precum și modulele de fuziune a reprezentărilor propuse cu scopul obținerii unor arhitecturi mai adecvate pentru perechi de proteine.

Modelele și experimentele prezentate în acest capitol au fost publicate în [23, 6, 9].

Restul capitolului este organizat în modul următor. Secțiunea 3.1 prezintă modelul *AutoPPI*. Secțiunea 3.2 prezintă abordarea noastră folosind *supervised autoencoders*. Secțiunea 3.3 introduce și detaliază modelul de tip ansamblu *MM-StackEns*.

3.1 *AutoPPI*: Predicția interacțiunilor dintre proteine folosind *autoencoders*

Prima abordare pe care am propus-o pentru detecția interacțiunilor dintre proteine este un model de clasificare binară, *AutoPPI* [23]. Acesta este compus dintr-o pereche de AEs folosiți în învățarea caracteristicilor celor două clase disponibile: clasa pozitivă (proteine care interacționează) și clasa negativă (proteine care nu interacționează). În acest studiu, am folosit în problema identificării interacțiunilor dintre proteine o metodă inspirată din tehnici de detecție a anomaliilor [24, 72].

Din cauza faptului că antrenăm AE folosind perechi de proteine, am dezvoltat două noi arhitecturi ce utilizează module de fuziune a reprezentărilor care sunt mai potrivite pentru instanțe de tip pereche decât arhitecturile clasice. Prima arhitectură propusă are o structură comună doar în *encoder*, în timp ce cea de-a doua arhitectură utilizează componente siameze atât în *encoder* cât și în *decoder*.

O analiză a literaturii a relevat noutatea abordării noastre în problema detecției interacțiunilor dintre proteine. Metoda propusă a fost evaluată folosind patru seturi de date conținând proteine de la multiple specii, iar rezultatele obținute au arătat că *AutoPPI* este superior majorității metodelor din literatură evaluate pe aceste seturi de date, obținând rezultate favorabile în 81.25% din comparațiile cu metode din literatură.

3.2 O metodă folosind *supervised autoencoders* pentru predicția interacțiunilor dintre proteine

O limitare a multor metode computaționale pentru detecția interacțiunilor proteice, inclusiv a modelului *AutoPPI*, este performanța sub-optimală pentru interacțiunile de tip C2 și C3 (interacțiuni conținând proteine care nu se află în graful de antrenare).

În [6], am introdus un model având drept scop ameliorarea acestei limitări. Metoda propusă este o abordare în două etape bazată pe *supervised autoencoders*. Prima etapă constă în pre-antrenarea unui DAE pe secvențele proteice. În cea de-a doua etapă, o rețea cu rol de clasificator este atașată de *encoder*-ul pre-antrenat. Modelul învață simultan să clasifice o pereche de proteine și să reconstruiască cele două proteine formând perechea. Alegerea modelului *supervised autoencoder* a fost justificată de efectul de regularizare observat în lucrări anterioare [44, 51]. În mod similar, etapa de pre-antrenare are rolul de a oferi o inițializare robustă pentru rețea. Analiza literaturii existente a indicat că niciun model bazat pe *supervised autoencoders* nu a mai fost utilizat până în prezent pentru detecția interacțiunilor dintre proteine.

Am evaluat atât modelul propus cât și un *supervised autoencoder* clasic folosind două seturi de date cu diferite tipuri de interacțiuni (C1, C2 și C3) și am arătat că metodele noastre obțin rezultate mai bune în comparație cu multiple alte metode din literatură.

3.3 *MM-StackEns*: O nouă abordare multimodală de tip ansamblu pentru predicția interacțiunilor dintre proteine

Cel de-al treilea model, *MM-StackEns*, își propune să îmbunătățească cele două modele prezentate anterior prin micșorarea diferenței între performanța obținută pentru proteine din interiorul și din afara grafului de antrenare.

Metoda propusă, publicată în [9], este o metodă de învățare multimodală ce procesează atât secvențe de proteine cât și întregul graf format de proteinele din setul de antrenare. A fost aleasă o soluție multimodală având drept motivație observația că procesarea unor date care provin dintr-o singură sursă, precum în abordările noastre anterioare, ar putea să nu cuprindă întreaga informație prezentă în interacțiuni. Ipoteza de la care am pornit a fost că agregarea predicțiilor obținute prin procesarea atât a informației din secvențele de amino acizi cât și a topologiei grafului poate duce la predicții mai bune, datorită diferențelor structurale dintre cele două modele. În timp ce modelul corespunzător grafului explorează vecinii unui nod pentru a identifica alți vecini, modelul corespunzător secvențelor se bazează doar pe informația conținută în secvențe. Predicțiile date de cele două modele sunt combinate într-un ansamblu cu două nivele ce utilizează un model de regresie logistică. Pentru a îmbunătăți performanța modelelor individuale și pentru a ține cont de incertitudinile din reprezentările proteinelor, am propus să învățăm reprezentări probabilistice pentru proteine și am introdus un nou modul de fuziune a reprezentărilor pentru perechi de proteine. O altă contribuție a studiului nostru este valorificarea unor metode de învățare nesupervizată a reprezentărilor prin utilizarea unor encodări folosind modelul ELMo [62, 41], pre-antrenat pe baze de date cu secvențe de proteine. Am arătat experimental că această reprezentare este benefică în mod special pentru predicția interacțiunilor unor proteine noi (pentru care nu au fost întâlnite interacțiuni în timpul antrenării).

Un studiu comparativ exhaustiv folosind mai multe seturi de date intra-specie și inter-specie a arătat performanța superioară a modelului *MM-StackEns* în comparație cu multiple metode din literatură.

3.4 Concluzii

Capitolul curent a prezentat modelele propuse de noi pentru problema clasificării interacțiunilor dintre proteine. Metodele propuse au fost evaluate într-o multitudine de situații folosind seturi de date variate și mai multe tipuri de interacțiuni.

Direcții viitoare de cercetare vor investiga metode de încorporare a unor componente care să discrimineze între clase în procedura de antrenare a modelului *AutoPPI*, întrucât în prezent fiecare AE este antrenat pe o singură clasă și are informații doar despre clasa respectivă.

În abordarea bazată pe *supervised autoencoders* am folosit o structură comună pentru cele două proteine din pereche. Cu toate acestea, alte arhitecturi și strategii de reconstrucție sunt posibile, cum ar fi arhitecturi asemănătoare cu cele propuse pentru modelul *AutoPPI*, care modelează perechi de proteine și nu secvențe individuale. Posibilități alternative sunt date de folosirea unor modele probabilistice sau dezvoltarea unor strategii de antrenare în care o proteină este folosită în reconstrucția celeilalte proteine. Aceste direcții vor fi vizate de cercetări viitoare.

În ceea ce privește modelul *MM-StackEns*, o posibilă îmbunătățire poate fi adusă de investigarea unor rețele profunde mai recente de procesare a limbajului natural, cum ar fi ProtBert, ProtAlbert or ProtT5 [32] în locul reprezentărilor ELMo.

Capitolul 4

Metode de învățare și fuziune a reprezentărilor pentru predicția pe termen scurt a vremii

Acest capitol prezintă contribuțiile noastre originale care au utilizat metode pentru învățarea și fuziunea reprezentărilor cu scopul dezvoltării unor noi modele de predicție a vremii.

Modelele și experimentele prezentate în acest capitol au fost publicate în trei lucrări originale [25, 12, 7].

Capitolul curent este structurat în modul următor. Secțiunea 4.1 prezintă clasificatorul binar *AutoNowP*. Modelul *NeXtNow* este prezentat în Secțiunea 4.2. Secțiunea 4.3 prezintă abordarea noastră pentru dezvoltarea unor funcții de cost folosind AE.

4.1 *AutoNowP*: o metodă folosind *autoencoders* convoluționali pentru predicția datelor radar

În [25], am propus *AutoNowP*, o metodă pentru predicția pe termen scurt a vremii folosind AEs. Problema a fost modelată ca o clasificare binară în care scopul este să prezicem dacă reflectivitatea măsurată pentru o locație va fi mai mare decât un prag pre-determinat la un moment de timp folosind reflectivitatea măsurată la un moment de timp anterior. Un rezultat binar este util în predicția pe termen scurt a vremii, fiindcă astfel de praguri corespund unor evenimente meteorologice de diferite intensități [26].

Puține abordări din literatură s-au concentrat pe studierea metodelor de învățare a reprezentărilor pentru prognoza pe termen scurt a vremii. În acest studiu, ne-am propus să explorăm o astfel de direcție, prin introducerea unei metode folosind o pereche de AEs, fiecare antrenat pe instanțele de la o clasă diferită. Pentru ca modelele să învețe să reconstruiască mai bine valori de reflectivitate având aceeași etichetă ca și clasa corespunzătoare aceluși AE, am introdus o funcție de cost ponderată diferită pentru fiecare dintre ele. Am optat pentru această metodă în vederea evaluării utilității reprezentărilor învățate de un AE pentru o clasă de valori de reflectivitate în diferențierea dintre cele două clase. Metoda propusă este similară cu *AutoPPI*, cu deosebirea că pentru *AutoNowP* au fost utilizate arhitecturi convoluționale pentru a exploata structura spațială a datelor și au fost introduse funcții de cost ponderate. Astfel, am arătat potențialul metodei folosite anterior pentru detecția interacțiunilor dintre proteine în predicția pe termen scurt a vremii.

Am evaluat metoda propusă folosind date radar din România și Norvegia.

4.2 *NeXtNow*: o nouă arhitectură convoluțională pentru predicția pe termen scurt a vremii

În [12], am investigat potențialul metodelor de fuziune a reprezentărilor pentru îmbunătățirea modelelor de predicție a vremii, prin introducerea unui nou model convoluțional care folosește blocuri *ResNeXt* [83]. Modelul nostru are o arhitectură encoder-decoder, construită din blocuri *ResNeXt* și convoluții simple, ce asociază una sau mai multe măsurători radar anterioare la una sau mai multe măsurători radar viitoare. Prin urmare, *NeXtNow* reprezintă o adaptare a *ResNeXt* pentru predicția pe termen scurt a datelor radar. În plus, în studiul publicat în [12], a fost efectuată o analiză empirică cu scopul de a evalua impactul utilizării unui context temporal mai mare, conținând mai mulți pași de timp anteriori.

Modelul *NeXtNow* a fost evaluat folosind două seturi de date obținute din România și Norvegia. *NeXtNow* a obținut rezultate mai bune comparativ cu o arhitectură convoluțională [65] propusă în literatură, pentru majoritatea cazurilor evaluate.

4.3 Funcții de cost perceptuale bazate pe *autoencoders* pentru îmbunătățirea modelelor de predicție pe termen scurt a vremii

Al treilea model propus pentru problema predicției vremii, introdus în [7], a avut drept scop îmbunătățirea calității vizuale a imaginilor radar prezise de modelele profunde. Metoda propusă folosește funcții de cost perceptuale, ce calculează o distanță între imaginea prezisă și cea adevărată într-un spațiu al reprezentărilor obținut folosind rețele profunde. Funcțiile de cost perceptuale au fost investigate anterior în literatura de specialitate și sunt de obicei obținute folosind clasificatori profunzi (ex: VGG) pre-antrenați pe setul de date ImageNet [42, 76, 78]. Chiar dacă reprezentările extrase de o rețea VGG pot modela cu succes imagini color naturale, acestea ar putea să nu fie potrivite pentru datele radar, care au caracteristici și aspect diferit. Un alt dezavantaj este dat de faptul ca rețelele de tip VGG sunt arhitecturi de dimensiuni mari.

În [7], am propus o alternativă la utilizarea clasificatorilor profunzi pentru extragerea reprezentărilor utilizate în calculul funcțiilor de cost perceptuale, folosind AEs convoluționali antrenați pe datele radar. Modelul introdus este mai puțin costisitor din punct de vedere computațional decât clasicul VGG și are avantajul de a nu necesita adnotări sau date suplimentare. Am arătat că modelul nostru realizează predicții mai puțin blurate decât funcțiile de cost clasice și obține o mică îmbunătățire a performanței în comparație cu acestea.

4.4 Concluzii

Acest capitol prezintă modelele noastre pentru predicția pe termen scurt a vremii folosind metode pentru învățarea și fuziunea reprezentărilor. Au fost propuse: un clasificator, o arhitectură convoluțională și o nouă funcție de cost.

Dirjecțiile viitoare de cercetare vor viza evaluarea clasificatorului *AutoNowP* în probleme de predicție a vremii folosind alte modele de date. O posibilitate constă în precizarea unei alerte de vreme severă la un moment de timp viitor. Un astfel de scenariu ar implica reprezentarea instanțelor printr-o hartă întregă, caracterizată de valorile reflectivității pentru acea regiune.

Modelul *NeXtNow* poate fi dezvoltat prin includerea unor module din arhitectura noastră în rețele recurente. De asemenea, module de fuziune a reprezentărilor mai complexe pot fi studiate, de pildă

module bazate pe atenție [27]. Astfel, modelul *NeXiNow* poate constitui un punct de pornire pentru dezvoltarea unor modele profunde mai performante pentru predicția vremii.

Alte direcții de cercetare viitoare vor investiga posibilitatea combinării funcțiilor de cost percepționale cu metode adversariale de antrenament pentru a îmbunătăți predicțiile obținute. Totodată, ne propunem să studiem utilizarea în calculul funcției de cost a mai multor reprezentări extrase din diferite straturi ale unui AE. Remarcăm că, deși am evaluat metoda propusă folosind date radar, aceasta ar putea fi aplicată și în alte probleme ce presupun generarea sau prezicerea unor imagini.

Concluzii

Această teză a avut drept scop principal investigarea unor metode pentru a îmbunătăți performanța rețelelor neuronale supervizate folosind principii din învățarea nesupervizată și fuziunea reprezentărilor. În particular, a fost studiată clasificarea folosind seturi de date cu etichete incorecte. Al doilea scop al cercetării noastre a fost de a evalua cât de aplicabile și adecvate sunt metodele propuse de noi în două domenii de cercetare implicând fenomene naturale, care au ca aspect caracteristic comun faptul că utilizează date imprecise și debalansate și pentru care antrenarea unui model folosind tehnici clasice supervizate nu duce la o bună generalizare pe setul de test.

Capitolul 2 a prezentat metodele propuse de noi pentru a îmbunătăți performanța rețelelor neuronale antrenate pe seturi de date cu etichete incorecte. Am prezentat o metodă de selecție a instanțelor, *TE-kNN*, care folosește o procedură de agregare temporală pentru a calcula scoruri mai robuste și o metodă de regularizare, *DIAG*, care folosește reprezentări obținute prin *contrastive learning* pentru a ghida antrenarea modelelor supervizate. Am subliniat performanța bună a ambelor metode și superioritatea lor față de multiple metode folosite anterior în literatură, utilizând seturi de date care folosesc LN sintetic și real.

În capitolul 3, am prezentat metodele proprii de abordare a problemei predicției PPI. Cele trei metode dezvoltate au inclus un clasificator bazat pe AEs, *AutoPPI* alături de care au fost propuse două noi arhitecturi siameze. Cea de-a doua metodă folosește *supervised autoencoders*, pentru predicția PPI. Experimentele pe seturi de date cu trei niveluri diferite de dificultate pentru clasificarea interacțiunilor au arătat că prin modelele propuse se obțin rezultate bune în toate scenariile de evaluare investigate. Al treilea model, *MM-StackEns*, care a fost dezvoltat pornind de la concluziile primelor două abordări, a îmbunătățit suplimentar generalizarea modelelor de predicție a PPIs cu scopul final de a reduce diferența dintre performanța obținută pentru proteinele din interiorul și cele din exteriorul grafului de antrenare. Prin această abordare, am propus învățarea unor reprezentări mai bune pentru perechile de proteine prin combinarea informațiilor extrase din secvențe și din graful de interacțiuni. Totodată, am evaluat îmbunătățirea adusă de modelul de limbaj natural pentru reprezentarea secvențelor proteice și am introdus un nou modul de fuziune a reprezentărilor pentru perechile de proteine. Prin metoda propusă, am obținut rezultate superioare mării majorități a metodelor existente folosind mai multe seturi de date. Abordarea *AutoPPI* și *MM-StackEns* explorează atât metode de învățare a reprezentărilor, cât și module de fuziune a reprezentărilor, subliniind astfel complementaritatea celor două direcții.

Capitolul 4 a prezentat modelele propuse de noi pentru predicția vremii pe termen scurt. Am introdus un model de clasificare construit utilizând AEs, *AutoNowP*, pentru predicția vremii și am evaluat performanța sa. Prin dezvoltarea acestei metode am abordat dintr-o perspectivă unificatoare două domenii aplicative din cadrul larg al științelor naturii și am arătat că AEs pot fi folosite pentru a implementa clasificatori performanți atât în predicția PPI cât și în predicția evenimentelor meteorologice pe termen scurt. Al doilea model a fost propus cu scopul studierii operațiilor de fuziune a reprezentărilor și a utilității lor în predicția vremii. Prin al treilea model am arătat că AEs pot fi integrate cu succes în noi funcții de cost perceptuale care pot îmbunătăți calitatea predicțiilor. Modelele *AutoNowP* și *NeXtNow* au fost evaluate pe data radar atât din Norvegia cât și din România în timp ce

a treia metodă a fost testată folosind date dintr-o singură regiune din Norvegia.

Prin metodele propuse am arătat beneficiile aduse învățarea nesupervizată și fuziunea reprezentărilor în contexte variate. Din punctul de vedere al datelor folosite, cele două probleme de cercetare studiate (predicția PPI și predicția schimbărilor meteorologice pe termen scurt) procesează date cu structuri și caracteristici diverse. Din perspectiva modelelor dezvoltate de noi, metodele de învățare și fuziune a reprezentărilor au fost folosite în crearea unor noi componente arhitecturale, a unor noi modele de clasificare și a unor noi funcții de cost.

Pe lângă direcțiile de dezvoltare ulterioare menționate în fiecare capitol, dorim să studiem în viitor aspecte legate de generalitatea și relevanța practică a metodelor propuse în Capitolul 2 evaluându-le în contextul predicției PPI și al evoluției vremii.

În aceasta teză, dezvoltarea modelelor de fuziune a reprezentărilor s-a bazat în primul rând pe tehnici de fuziune a reprezentărilor intermediare și finale ale rețelelor. Cu toate acestea, direcții viitoare de cercetare ar putea include strategii de fuziune a reprezentărilor inițiale atât pentru proteine cât și pentru date meteorologice. O direcție de dezvoltare înrudită va viza studierea tehnicilor de fuziune a reprezentărilor pentru date multimodale. *MM-StackEns* a fost un prim pas în această direcție, dar abordarea noastră a combinat doar predicțiile modelelor și nu a fuzionat reprezentări multimodale intermediare. Această direcție este de interes, deoarece interacțiunile proteice pot fi caracterizate prin multiple tipuri de informații, precum structuri proteice, secvențe sau informații evolutive [31], în timp ce în domeniul meteorologic, tipuri adiționale de date (imagini din satelit sau date orografice) ar putea fi folosite în corelație cu datele radar [36].

O temă de cercetare care a fost atinsă, dar care nu a fost complet explorată în această teză este reprezentată de învățarea folosind date dezechilibrate. Cercetări viitoare vor fi orientate spre îmbunătățirea metodelor propuse de noi în astfel de situații.

Un alt aspect important din punct de vedere al utilității practice a modelelor noastre, care va fi studiat în viitor, este reprezentat de obținerea unor predicții interpretabile, atât în problema PPI, cât și în predicțiile meteorologice.

Bibliografie

- [1] S. Agrawal, L. Barrington, C. Bromberg, J. Burge, C. Gazen, and J. Hickey. Machine learning for precipitation nowcasting from radar images. In *33rd Conference on Neural Information Processing Systems (NeurIPS 2019)*, pages 1–6, 2019.
- [2] A. Albu, A. Enescu, and L. Malago. Detection of Tumours in Brain MRIs with Variational AutoEncoders. In *ECML PKDD 2020 Workshop Machine Learning for Pharma and Healthcare Applications*, pages 1–6, 2020.
- [3] A. Albu, A. Enescu, and L. Malago. Improved Slice-wise Tumour Detection in Brain MRIs by Computing Dissimilarities between Latent Representations. In *2020 KDD Workshop on Applied Data Science for Healthcare*, 2020.
- [4] A. Albu, A. Enescu, and L. Malago. Tumor detection in brain MRIs by computing dissimilarities in the latent space of a variational autoencoder. In *Proceedings of the Northern Lights Deep Learning Workshop*, pages 1–6. Septentrio Academic Publishing, 2020.
- [5] A.-I. Albu. Towards learning transferable embeddings for protein conformations using variational autoencoders. *Procedia Computer Science*, 192:10–19, 2021.
- [6] A.-I. Albu. An approach for predicting protein-protein interactions using supervised autoencoders. *Procedia Computer Science*, 207:2023–2032, 2022.
- [7] A.-I. Albu. Improving radar echo extrapolation models using autoencoder-based perceptual losses. In *27th International Conference on Knowledge-Based and Intelligent Information & Engineering Systems 2023*. Accepted, 2023.
- [8] A.-I. Albu. Temporal ensembling deep k -nearest neighbours for learning with noisy labels. In *31st European Symposium on Artificial Neural Networks, Computational Intelligence and Machine Learning (ESANN 2023)*. Accepted, 2023.
- [9] A.-I. Albu, M.-I. Bocicor, and G. Czibula. MM-StackEns: A new deep multimodal stacked generalization approach for protein-protein interaction prediction. *Computers in Biology and Medicine*, page 106526, 2023.
- [10] A.-I. Albu and G. Czibula. Analysing protein dynamics using machine learning based generative models. In *2020 IEEE 14th International Symposium on Applied Computational Intelligence and Informatics (SACI)*, pages 000135–000140. IEEE, 2020.
- [11] A.-I. Albu and G. Czibula. Learning with label noise through pairwise distance agreement between supervised and self-supervised representations. Submitted, 2023.

- [12] A.-I. Albu, G. Czibula, A. Mihai, I. G. Czibula, S. Burcea, and A. Mezghani. NeXtNow: A Convolutional Deep Learning Model for the Prediction of Weather Radar Data for Nowcasting Purposes. *Remote Sensing*, 14(16):3890, 2022.
- [13] D. Bahri, H. Jiang, and M. Gupta. Deep k-nn for noisy labels. In *International Conference on Machine Learning*, pages 540–550. PMLR, 2020.
- [14] Y. Bai, E. Yang, B. Han, Y. Yang, J. Li, Y. Mao, G. Niu, and T. Liu. Understanding and improving early stopping for learning with noisy labels. *Advances in Neural Information Processing Systems*, 34:24392–24403, 2021.
- [15] Y. Bengio, A. Courville, and P. Vincent. Representation learning: A review and new perspectives. *IEEE transactions on pattern analysis and machine intelligence*, 35(8):1798–1828, 2013.
- [16] K. Cao, C. Wei, A. Gaidon, N. Arechiga, and T. Ma. Learning imbalanced datasets with label-distribution-aware margin loss. *arXiv preprint arXiv:1906.07413*, 2019.
- [17] R. Castro, Y. M. Souto, E. Ogasawara, F. Porto, and E. Bezerra. Stconvs2s: Spatiotemporal convolutional sequence to sequence network for weather forecasting. *Neurocomputing*, 426:285–298, 2021.
- [18] R. Chalapathy and S. Chawla. Deep learning for anomaly detection: A survey. *arXiv preprint arXiv:1901.03407*, 2019.
- [19] K.-H. Chen, T.-F. Wang, and Y.-J. Hu. Protein-protein interaction prediction using a hybrid feature representation and a stacked generalization scheme. *BMC bioinformatics*, 20(1):1–17, 2019.
- [20] M. Chen, C. J.-T. Ju, G. Zhou, X. Chen, T. Zhang, K.-W. Chang, C. Zaniolo, and W. Wang. Multifaceted protein–protein interaction prediction based on Siamese residual RCNN. *Bioinformatics*, 35(14):i305–i314, 2019.
- [21] T. Chen, S. Kornblith, M. Norouzi, and G. Hinton. A simple framework for contrastive learning of visual representations. In *International conference on machine learning*, pages 1597–1607. PMLR, 2020.
- [22] X.-W. Chen and M. Liu. Prediction of protein–protein interactions using random decision forest framework. *Bioinformatics*, 21(24):4394–4400, 2005.
- [23] G. Czibula, A.-I. Albu, M. I. Bocicor, and C. Chira. AutoPPI: An Ensemble of Deep Autoencoders for Protein–Protein Interaction Prediction. *Entropy*, 23(6):643, 2021.
- [24] G. Czibula, C. Codre, and M. Teletin. AnomalP: An approach for detecting anomalous protein conformations using deep autoencoders. *Expert Systems with Applications*, 166:114070, 2021.
- [25] G. Czibula, A. Mihai, A.-I. Albu, I.-G. Czibula, S. Burcea, and A. Mezghani. AutoNowP: an approach using deep autoencoders for precipitation nowcasting based on weather radar reflectivity prediction. *Mathematics*, 9(14):1653, 2021.
- [26] G. Czibula, A. Mihai, and I. G. Czibula. Radrar: A relational association rule mining approach for nowcasting based on predicting radar products’ values. *Procedia Computer Science*, 176:300–309, 2020. Knowledge-Based and Intelligent Information & Engineering Systems: Proceedings of the 24th International Conference KES2020.

- [27] Y. Dai, F. Gieseke, S. Oehmcke, Y. Wu, and K. Barnard. Attentional feature fusion. In *Proceedings of the IEEE/CVF Winter Conference on Applications of Computer Vision*, pages 3560–3569, 2021.
- [28] M. Deudon. Learning semantic similarity in a continuous space. In *Advances in neural information processing systems*, pages 986–997, 2018.
- [29] J. Devlin, M.-W. Chang, K. Lee, and K. Toutanova. BERT: Pre-training of Deep Bidirectional Transformers for Language Understanding. In *Proceedings of the 2019 Conference of the North American Chapter of the Association for Computational Linguistics: Human Language Technologies, Volume 1 (Long and Short Papers)*, pages 4171–4186, 2019.
- [30] K. Ding, K. Ma, S. Wang, and E. P. Simoncelli. Image quality assessment: Unifying structure and texture similarity. *IEEE transactions on pattern analysis and machine intelligence*, 44(5):2567–2581, 2020.
- [31] B. Dunham and M. K. Ganapathiraju. Benchmark Evaluation of Protein-Protein Interaction Prediction Algorithms. *Molecules*, 27(1), 2022.
- [32] A. Elnaggar, M. Heinzinger, C. Dallago, G. Rehawi, W. Yu, L. Jones, T. Gibbs, T. Feher, C. Angerer, M. Steinegger, et al. ProtTrans: Towards Cracking the Language of Life's Code Through Self-Supervised Deep Learning and High Performance Computing. *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, 2021.
- [33] D. Erhan, A. Courville, Y. Bengio, and P. Vincent. Why does unsupervised pre-training help deep learning? In *Proceedings of the thirteenth international conference on artificial intelligence and statistics*, pages 201–208. JMLR Workshop and Conference Proceedings, 2010.
- [34] L. Ericsson, H. Gouk, C. C. Loy, and T. M. Hospedales. Self-supervised representation learning: Introduction, advances, and challenges. *IEEE Signal Processing Magazine*, 39(3):42–62, 2022.
- [35] C. Feng, G. Tzimiropoulos, and I. Patras. Ssr: An efficient and robust framework for learning with unknown label noise. In *33rd British Machine Vision Conference 2022, BMVC 2022, London, UK, November 21-24, 2022*. BMVA Press, 2022.
- [36] G. Franch, D. Nerini, M. Pendesini, L. Coviello, G. Jurman, and C. Furlanello. Precipitation nowcasting with orographic enhanced stacked generalization: Improving deep learning predictions on extreme events. *Atmosphere*, 11(3), 2020.
- [37] I. Goodfellow, Y. Bengio, and A. Courville. *Deep Learning*. MIT Press, 2016.
- [38] Y. Guo, L. Yu, Z. Wen, and M. Li. Using support vector machine combined with auto covariance to predict protein-protein interactions from protein sequences. *Nucleic acids research*, 36(9):3025–3030, 2008.
- [39] B. Han, Q. Yao, X. Yu, G. Niu, M. Xu, W. Hu, I. Tsang, and M. Sugiyama. Co-teaching: Robust training of deep neural networks with extremely noisy labels. *Advances in neural information processing systems*, 31, 2018.
- [40] L. Han, J. Sun, and W. Zhang. Convolutional neural network for convective storm nowcasting using 3-d doppler weather radar data. *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, 58(2):1487–1495, 2020.

- [41] M. Heinzinger, A. Elnaggar, Y. Wang, C. Dallago, D. Nechaev, F. Matthes, and B. Rost. Modeling aspects of the language of life through transfer-learning protein sequences. *BMC bioinformatics*, 20(1):1–17, 2019.
- [42] Y. Hu, L. Chen, Z. Wang, X. Pan, and H. Li. Towards a more realistic and detailed deep-learning-based radar echo extrapolation method. *Remote Sensing*, 14(1):24, 2021.
- [43] A. Iscen, J. Valmadre, A. Arnab, and C. Schmid. Learning with neighbor consistency for noisy labels. In *Proceedings of the IEEE/CVF Conference on Computer Vision and Pattern Recognition*, pages 4672–4681, 2022.
- [44] D. Jarrett and M. van der Schaar. Target-Embedding Autoencoders for Supervised Representation Learning. In *International Conference on Learning Representations*, 2019.
- [45] I. Jindal, M. Nokleby, and X. Chen. Learning deep networks from noisy labels with dropout regularization. In *2016 IEEE 16th International Conference on Data Mining (ICDM)*, pages 967–972. IEEE, 2016.
- [46] J. Johnson, A. Alahi, and L. Fei-Fei. Perceptual losses for real-time style transfer and super-resolution. In *Computer Vision–ECCV 2016: 14th European Conference, Amsterdam, The Netherlands, October 11–14, 2016, Proceedings, Part II 14*, pages 694–711. Springer, 2016.
- [47] D. Kimothi, P. Biyani, J. Hogan, and M. Davis. Sequence representations and their utility for predicting protein-protein interactions. *IEEE/ACM transactions on computational biology and bioinformatics*, 2021.
- [48] D. P. Kingma, S. Mohamed, D. J. Rezende, and M. Welling. Semi-supervised learning with deep generative models. In *Advances in neural information processing systems*, pages 3581–3589, 2014.
- [49] A. Krizhevsky, G. Hinton, et al. Learning multiple layers of features from tiny images. 2009.
- [50] S. Laine and T. Aila. Temporal ensembling for semi-supervised learning. In *5th International Conference on Learning Representations, ICLR 2017, Toulon, France, April 24–26, 2017, Conference Track Proceedings*. OpenReview.net, 2017.
- [51] L. Le, A. Patterson, and M. White. Supervised autoencoders: improving generalization performance with unsupervised regularizers. In *Proceedings of the 32nd International Conference on Neural Information Processing Systems*, pages 107–117, 2018.
- [52] P. H. Le-Khac, G. Healy, and A. F. Smeaton. Contrastive representation learning: A framework and review. *IEEE Access*, 8:193907–193934, 2020.
- [53] K.-H. Lee, X. He, L. Zhang, and L. Yang. Cleannet: Transfer learning for scalable image classifier training with label noise. In *Proceedings of the IEEE conference on computer vision and pattern recognition*, pages 5447–5456, 2018.
- [54] F. Li, F. Zhu, X. Ling, and Q. Liu. Protein interaction network reconstruction through ensemble deep learning with attention mechanism. *Frontiers in Bioengineering and Biotechnology*, 8, 2020.
- [55] L. Liu, X. Zhu, Y. Ma, H. Piao, Y. Yang, X. Hao, Y. Fu, L. Wang, and J. Peng. Combining sequence and network information to enhance protein–protein interaction prediction. *BMC bioinformatics*, 21(16):1–13, 2020.

- [56] S. Liu, J. Niles-Weed, N. Razavian, and C. Fernandez-Granda. Early-learning regularization prevents memorization of noisy labels. *Advances in neural information processing systems*, 33:20331–20342, 2020.
- [57] G. Lv, Z. Hu, Y. Bi, and S. Zhang. Learning unknown from correlations: Graph neural network for inter-novel-protein interaction prediction. *arXiv preprint arXiv:2105.06709*, 2021.
- [58] M. Mathieu, C. Couprie, and Y. LeCun. Deep multi-scale video prediction beyond mean square error. In *4th International Conference on Learning Representations, ICLR 2016*, 2016.
- [59] Y. Netzer, T. Wang, A. Coates, A. Bissacco, B. Wu, and A. Y. Ng. Reading digits in natural images with unsupervised feature learning. 2011.
- [60] D. Ortego, E. Arazo, P. Albert, N. E. O’Connor, and K. McGuinness. Multi-objective interpolation training for robustness to label noise. In *Proceedings of the IEEE/CVF Conference on Computer Vision and Pattern Recognition*, pages 6606–6615, 2021.
- [61] Y. Park and E. M. Marcotte. Flaws in evaluation schemes for pair-input computational predictions. *Nature methods*, 9(12):1134–1136, 2012.
- [62] M. E. Peters, M. Neumann, M. Iyyer, M. Gardner, C. Clark, K. Lee, and L. Zettlemoyer. Deep Contextualized Word Representations. In *Proceedings of the 2018 Conference of the North American Chapter of the Association for Computational Linguistics: Human Language Technologies, Volume 1 (Long Papers)*, pages 2227–2237, New Orleans, Louisiana, June 2018. Association for Computational Linguistics.
- [63] X. Shi, Z. Chen, H. Wang, D.-Y. Yeung, W.-K. Wong, and W.-c. Woo. Convolutional LSTM network: A machine learning approach for precipitation nowcasting. *Advances in neural information processing systems*, 28, 2015.
- [64] X. Shi, Z. Gao, L. Lausen, H. Wang, D.-Y. Yeung, W.-k. Wong, and W.-c. Woo. Deep learning for precipitation nowcasting: A benchmark and a new model. *arXiv preprint arXiv:1706.03458*, 2017.
- [65] I. A. Socaci, G. Czibula, V.-S. Ionescu, and A. Mihai. *xnow*: A deep learning technique for nowcasting based on radar products’ values prediction. In *IEEE 14th International Symposium on Applied Computational Intelligence and Informatics (SACI 2020)*, pages 117–122. IEEE Hungary Section, 2020.
- [66] H. Song, M. Kim, and J.-G. Lee. Selfie: Refurbishing unclean samples for robust deep learning. In *International Conference on Machine Learning*, pages 5907–5915. PMLR, 2019.
- [67] H. Song, M. Kim, D. Park, Y. Shin, and J.-G. Lee. Learning from noisy labels with deep neural networks: A survey. *IEEE Transactions on Neural Networks and Learning Systems*, 2022.
- [68] S. R. Stahlschmidt, B. Ulfenborg, and J. Synnergren. Multimodal deep learning for biomedical data fusion: a review. *Briefings in Bioinformatics*, 23(2):bbab569, 2022.
- [69] T. Sun, B. Zhou, L. Lai, and J. Pei. Sequence-based prediction of protein protein interaction using a deep-learning algorithm. *BMC bioinformatics*, 18(1):1–8, 2017.
- [70] C. Szegedy, V. Vanhoucke, S. Ioffe, J. Shlens, and Z. Wojna. Rethinking the inception architecture for computer vision. In *Proceedings of the IEEE conference on computer vision and pattern recognition*, pages 2818–2826, 2016.

- [71] C. K. Sønderby, L. Espeholt, J. Heek, M. Dehghani, A. Oliver, T. Salimans, J. Hickey, S. Agrawal, and N. Kalchbrenner. Metnet: A neural weather model for precipitation forecasting. *arXiv*, pages 1–17, 2020.
- [72] M. Teletin, G. Czibula, and C. Codre. AutoSimP: An Approach for Predicting Proteins’ Structural Similarities Using an Ensemble of Deep Autoencoders. In *International Conference on Knowledge Science, Engineering and Management*, pages 49–54. Springer, 2019.
- [73] L. Tian, X. Li, Y. Ye, P. Xie, and Y. Li. A generative adversarial gated recurrent unit model for precipitation nowcasting. *IEEE Geoscience and Remote Sensing Letters*, 17(4):601–605, 2020.
- [74] Q.-K. Tran and S.-k. Song. Computer vision in precipitation nowcasting: Applying image quality assessment metrics for training deep neural networks. *Atmosphere*, 10(5):244, 2019.
- [75] K. Trebing, T. Stanczyk, and S. Mehrkanoon. Smaat-unet: Precipitation nowcasting using a small attention-unet architecture. *Pattern Recognition Letters*, 145:178–186, 2021.
- [76] M. Veillette, S. Samsi, and C. Mattioli. Sevir: A storm event imagery dataset for deep learning applications in radar and satellite meteorology. *Advances in Neural Information Processing Systems*, 33:22009–22019, 2020.
- [77] P. Vincent, H. Larochelle, I. Lajoie, Y. Bengio, P.-A. Manzagol, and L. Bottou. Stacked denoising autoencoders: Learning useful representations in a deep network with a local denoising criterion. *Journal of machine learning research*, 11(12), 2010.
- [78] Y. Wang and H. A. Karimi. Perceptual loss function for generating high-resolution climate data. *Applied Computing and Intelligence*, 2(2):152–172, 2022.
- [79] Y. Wang, W. Liu, X. Ma, J. Bailey, H. Zha, L. Song, and S.-T. Xia. Iterative learning with open-set noisy labels. In *Proceedings of the IEEE conference on computer vision and pattern recognition*, pages 8688–8696, 2018.
- [80] Y. Wang, Z. You, L. Li, L. Cheng, X. Zhou, L. Zhang, X. Li, and T. Jiang. Predicting protein interactions using a deep learning method-stacked sparse autoencoder combined with a probabilistic classification vector machine. *Complexity*, 2018, 2018.
- [81] Y.-B. Wang, Z.-H. You, X. Li, T.-H. Jiang, X. Chen, X. Zhou, and L. Wang. Predicting protein–protein interactions from protein sequences by a stacked sparse autoencoder deep neural network. *Molecular BioSystems*, 13(7):1336–1344, 2017.
- [82] X. Xia, T. Liu, B. Han, C. Gong, N. Wang, Z. Ge, and Y. Chang. Robust early-learning: Hindering the memorization of noisy labels. In *International conference on learning representations*, 2020.
- [83] S. Xie, R. B. Girshick, P. Dollár, Z. Tu, and K. He. Aggregated Residual Transformations for Deep Neural Networks. *2017 IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR)*, pages 5987–5995, 2017.
- [84] S. Xingjian, Z. Chen, H. Wang, D.-Y. Yeung, W.-K. Wong, and W.-c. Woo. Convolutional lstm network: A machine learning approach for precipitation nowcasting. In *Advances in neural information processing systems*, pages 802–810, 2015.

- [85] F. Yang, K. Fan, D. Song, and H. Lin. Graph-based prediction of protein-protein interactions with attributed signed graph embedding. *BMC bioinformatics*, 21(1):1–16, 2020.
- [86] C. Zhang, S. Bengio, M. Hardt, B. Recht, and O. Vinyals. Understanding deep learning requires rethinking generalization. *International conference on learning representations*, 2017.
- [87] D. Zhang and M. R. Kabuka. Multimodal deep representation learning for protein-protein interaction networks. In *2018 IEEE International Conference on Bioinformatics and Biomedicine (BIBM)*, pages 595–602. IEEE, 2018.
- [88] H. Zhang, M. Cisse, Y. N. Dauphin, and D. Lopez-Paz. mixup: Beyond empirical risk minimization. In *International Conference on Learning Representations*, 2018.
- [89] L. Zhao, J. Wang, Y. Hu, and L. Cheng. Conjoint feature representation of go and protein sequence for ppi prediction based on an inception rnn attention network. *Molecular Therapy-Nucleic Acids*, 22:198–208, 2020.