КУМСКОВ МИХАИЛ ИВАНОВИЧ

KUMSKOV@MAIL.RU

MIKHAIL.KUMSKOV@MATH.MSU.RU

СЕМИНАР

«МЕТОДЫ АНАЛИЗА МОЛЕКУЛЯРНЫХ ГРАФОВ В ЗАДАЧЕ «СТРУКТУРА-СВОЙСТВО»

МОЛЕКУЛЯРНЫЕ ГРАФЫ

Задача прогнозирования лекарственной и биологической активности М-графов

QSAR - Quantitative Structure-Activity Relationship

ИЗОБРАЖЕНИЯ

- Задача поиск ***заданных объектов*** на картинке
- Задача – поиск точек описания (Особых Точек – ОТ)
- Задача *сегментации* изображений на *поверхности М-графа*

ВРЕМЕННЫЕ РЯДЫ

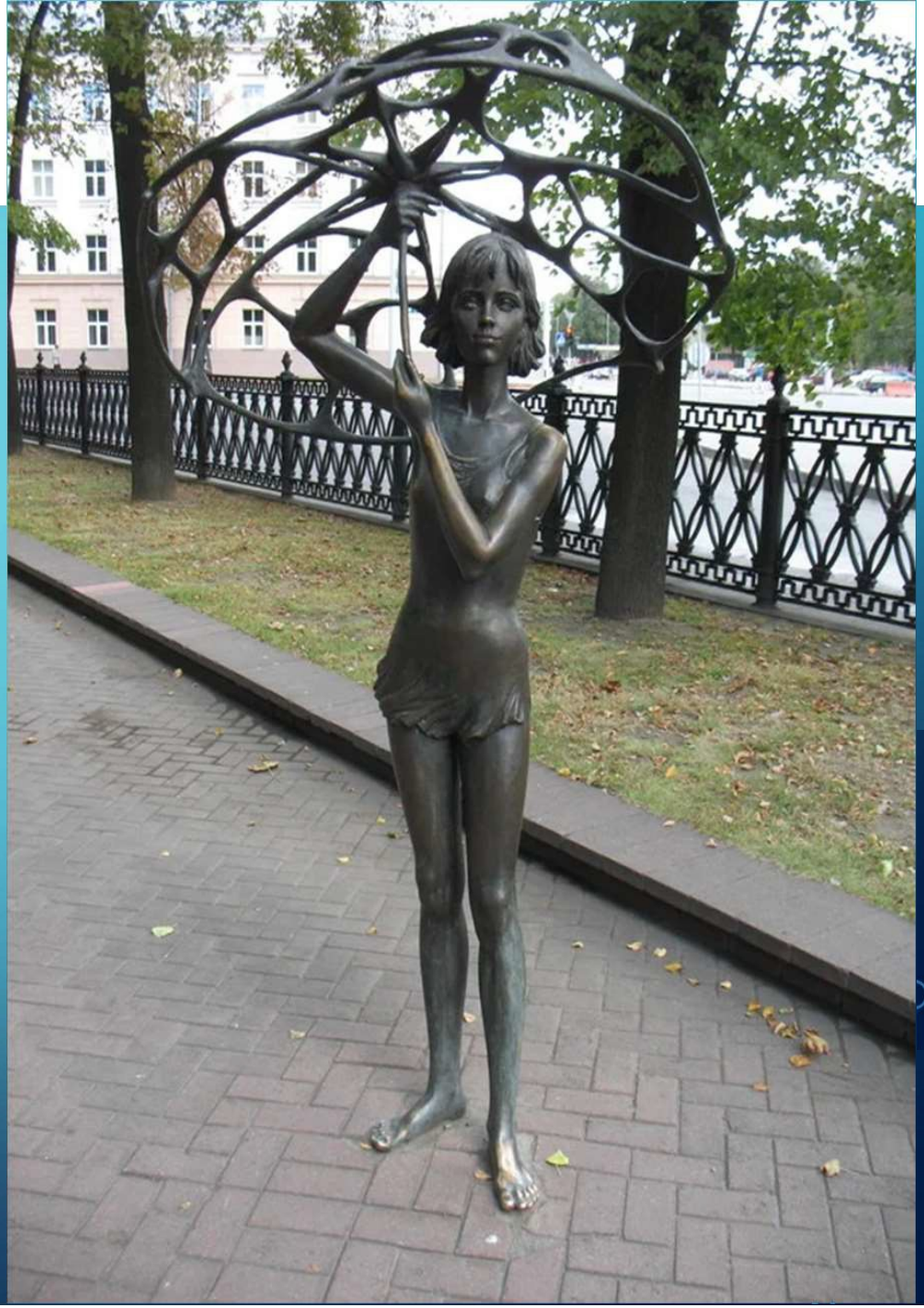
- Задача прогнозирования *трендов* финансовых котировок
- Задача написание торговых *ботов*, где реализующих модели прогноза тренда котировок

ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ИНФОРМАТИКА

- Дизайн признаков структурных объектов в задаче «структура-свойство» с использованием архитектур ***глубоких нейронных сетей***

Разделы теоретической информатики:

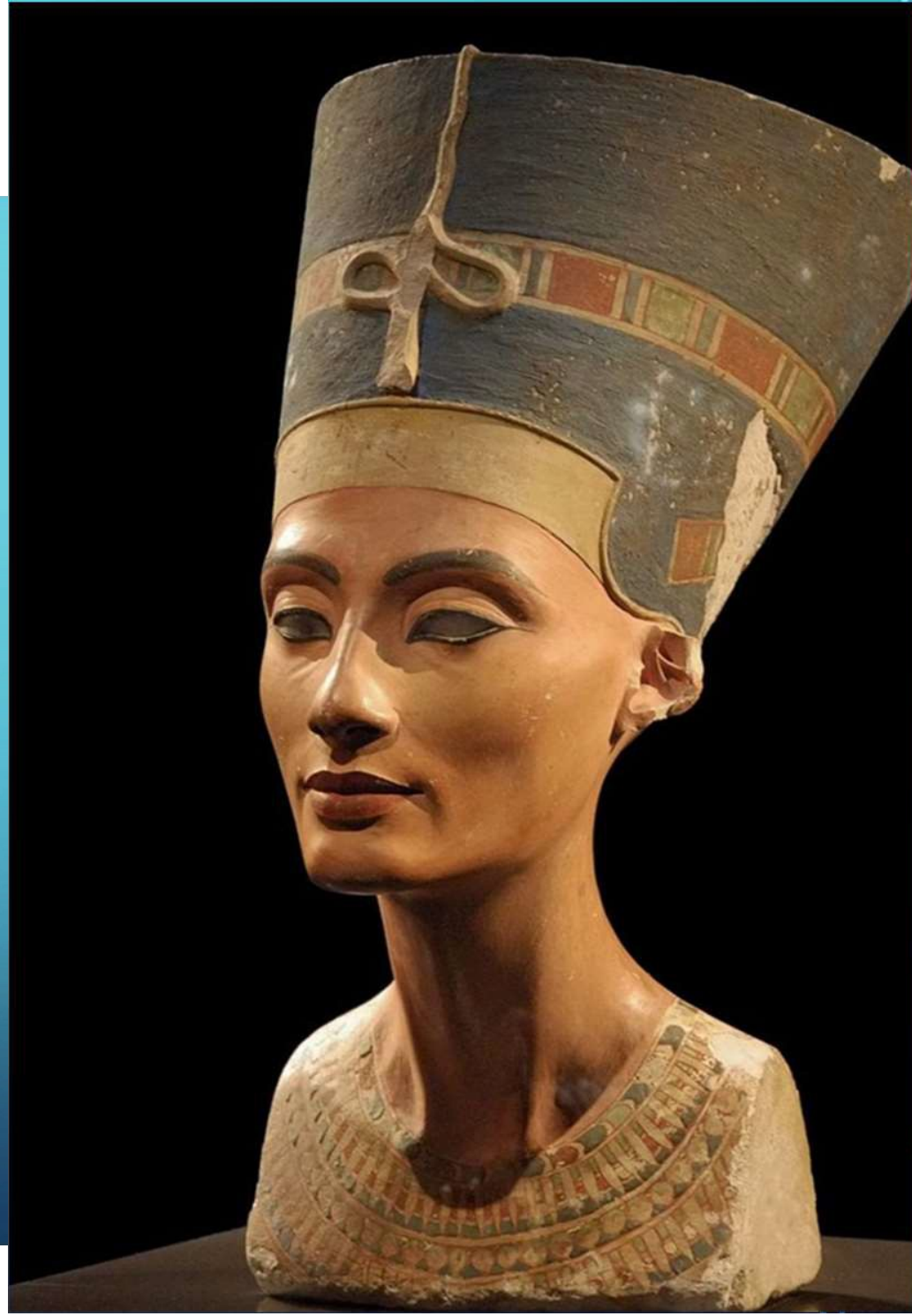
- *Анализ данных*
- *Большие данные*
- *Математические методы искусственного интеллекта, нейронных сетей.*



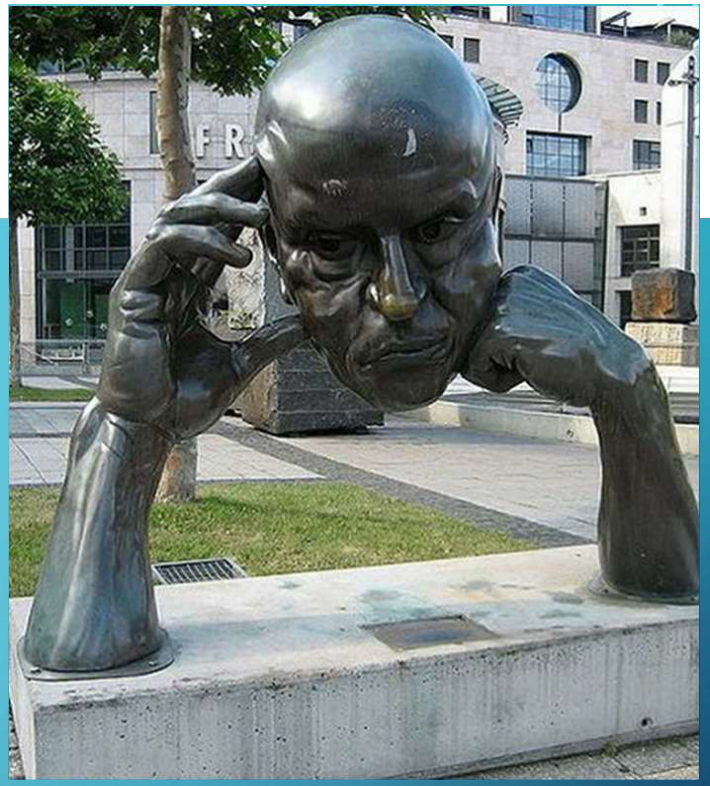
МАШИННОЕ ОБУЧЕНИЕ

- Программирование на ***Python*** — использование многочисленных библиотек машинного обучения

- Программирование нейронных сетей на ***TensorFlow и Keras***, —
- посмотрите в интернете!



ЗАДАЧА «СТРУКТУРА - СВОЙСТВО»



Задано множество объектов:

- имеем на входе множество пар (объект, свойство)

Построить модель отображения объектов в «целевое свойство» с минимизацией ошибки

При появлении нового объекта по модели проводится прогнозирование «целевого свойства» или «***отказ от прогноза***»

КЛЮЧЕВАЯ ОСОБЕННОСТЬ ЗАДАЧИ

Заранее ***не задано*** пространство признаков исследуемых структурных объектов

Это позволяет решать путем конструирования представления Объекта в модели, *адаптированное* под «целевое свойство» при заранее заданном методе прогнозирования

Вопросы?