

# Спецсеминар

*Название курса на русском языке*

Методы анализа молекулярных графов в задаче «структура-свойство»

*Название курса на английском языке*

Methods for the analysis of molecular graphs in the "structure-property" problem

*Руководитель семинара (фамилия имя отчество)*

Кумсков Михаил Иванович

*Целевая ауд. 1к, 2к, 3к, 4к. 5к. 6к, асп., магистр (можно несколько)*

3, 4, 5, 6, аспиранты, магистры

*Как проходит*

по понедельникам с 10:30 – 13:00 дистанционно. Связь с руководителем спецсеминара: [kumskov@mail.ru](mailto:kumskov@mail.ru), [mikhail.kumskov@math.msu.ru](mailto:mikhail.kumskov@math.msu.ru)

*Просеминаром не является.*

*Аннотация*

Рассматриваются задачи классификации и прогнозирования на объектах, представленных простыми помеченными графами. Это - молекулярные графы, изображения и временные ряды (финансовых котировок).

**Молекулярные графы** - Задача прогнозирования физико-химических свойств М-графов. QSPR – Quantitative Structure-Property Relationship. Задача прогнозирования лекарственной и биологической активности М-графов - QSAR - Quantitative Structure-Activity Relationship.

**Изображения** - Задача поиск заданных объектов на картинке. Задача восстановление позы человека-спортсмена. Задача сегментации «плоских» изображений – поиск точек описания (Особых Точек – ОТ). Задача сегментации изображений на поверхности молекулярного графа.

**Временные ряды** - Задача прогнозирования *трендов* финансовых котировок. Задача разработки торговых ботов, реализующих модели прогноза тренда котировок.

**Направление исследований** - Найти и оптимизировать «правильное» представление структурного объекта в виде простого помеченного графа. Конструирование разметки вершин графа так, чтобы минимизировать ошибку прогноза в заданном классификаторе.