

Направление курсовых и дипломных работ профессора Кумскова М.И. формулируется как

Классификация структурных объектов, заданных помеченными графами,
(включая прогнозирование свойств лекарственных соединений и методы распознавания объектов на изображениях)

Задача нахождения зависимостей (количественных корреляций) "структура-свойство" молекулярных графов, представляющих в компьютере химические соединения, привлекает к себе повышенное внимание. Наличие оперативного доступа к фактографическим базам данных (СБД), содержащим сведения о свойствах и структуре молекул позволяет строить модели и использовать уже имеющиеся данные "структура молекулы- проявляемые свойства" для проведения обобщений с тем, чтобы иметь возможность целенаправленно проводить «внеэкспериментальный» поиск новых соединений, обладающих заданным набором свойств.

Разработка методов поиска количественных корреляций "структура-свойство" химических соединений выделилась в отдельное научное направление. Модели "структура-свойство" используются для предварительной внеэкспериментальной оценки свойств новых соединений. Это позволяет проводить «обобщение» дорогостоящих экспериментальных данных, и получать ответы на вопросы о том, в каком направлении медицинским химикам следует планировать синтез новых лекарственных соединений.

Существует большое многообразие отечественных и зарубежных систем прогнозирования свойств молекул. Как правило, они используют заранее predetermined, очень большой но фиксированный набор молекулярных признаков (или дескрипторов), проводится

поиск зависимостей.

На кафедре вычислительной математики развивается новый подход к моделированию зависимостей «структура-свойство». Признаковые пространства, в которых проводится описание молекулярных графов, формируются автоматически с индуктивным усложнением детализации описания молекул. Структура молекулы может быть представлена на нескольких уровнях сложности: на топологическом, на двумерно-топологическом (с указанием планарной проекции атомов), в 3D виде, в трехмерном виде с дополнительным расчетом пространственных потенциалов.

Заранее не известно для заданного свойства, на каком уровне детализации нужно проводить описание молекул. Выбор уровня представления молекул и формирование молекулярных признаков, адаптированных для исследуемого свойства, проводится экспертом в процессе построения и селекции моделей «структура-свойство».

За счет такой методики прогнозирования увеличение предсказательной силы моделей «структура-свойство» проводится не за счет использования специальных классификационных моделей (нечеткие множества, нейронные сети, иерархические классификаторы) или усложнения вида функциональной зависимости, а на основе постепенной (индуктивной) детализации дескрипторов молекулярных графов, которые последовательно представляются на различных уровнях.

Направление разрабатывается в рамках успешно выполненных проектов Российского фонда фундаментальных исследований (РФФИ):

- 10-07-00694: «Развитие и реструктуризация репозитория моделей "структура-свойство" с целью проведения массового скрининга молекул»;

- 07-07-00282: «Система прогнозирования свойств химических соединений. Унифицированный репозиторий QSAR моделей и молекул»;
- 98-01-00324: «Распознавание и классификация пространственных форм гибких молекул с использованием структурных символьных спектров и эволюционных алгоритмов»;
- 97-07-90307: «Селекция метрик для поиска подобных молекул в структурных фактографических БД с использованием знаний “структура-свойство”»;
- 96-01-01598: "Распознавание пространственных форм молекул биологически активных соединений с целью компьютерного предсказания свойств новых веществ";
- 94-01-00041: "Инструментальная система формирования баз знаний о зависимостях "структура-свойство" органических соединений на основе символьного представления фрагментов молекулярных графов";
- 93-012-1045: "Унифицированные математические модели и программно инструментальные системы для прогнозирования новых органических соединений с заданными свойствами".

Ниже приведены ссылки на работы, выполненные на кафедре вычислительной математики под научным руководством М.И.Кумскова.

- В мае 2014 года на мехмате защищена кандидатская диссертация **Прохорова Е.И.**: Адаптивная двухфазная схема решения задачи «структура-свойство» -
Специальность: 05.13.17 - Теоретические основы информатики

Автореферат и текст работы - см. <http://istina.msu.ru/dissertations/5832735/>

- Рассмотрена задача «Структура – Свойство», которая состоит в поиске зависимости между структурой химических соединений (молекулярными графами), и их биологическими свойствами.
- Разработана модель, описывающая ограничения допустимости, необходимые для прогнозирования зависимости «структура – свойство» по конкретному алгоритму. Определена эффективность использования введенных ограничений. Приведены теоретические оценки эффективности использования предложенных ограничений и качества моделей.
- Описан метод решения задачи «структура – свойство», использующий ограничения допустимости.
- Рассмотрен подход формирования «фрагментных дескрипторов» особых точек молекулярных графов, позволяющий существенно снизить вычислительную сложность построения моделей «структура – свойство».
- Описаны результаты вычислительных экспериментов практического тестирования ограничений допустимости.

- В 2010 году на мехмате защищена кандидатская диссертация **Девятьяров Д.А.** «Использование нечеткой логики при описании молекул в задаче «Структура-Свойство»
Специальность: 05.13.17 - Теоретические основы информатики

Автореферат и текст работы - см. <http://istina.msu.ru/dissertations/3538861/>

- Разработан метода представления информации о пространственных структурах молекул, основанный на **нечетких структурных дескрипторах**, в задаче «структура-свойство».

- Разработан алгоритм формирования алфавита нечетких структурных 3D-дескрипторов и алгоритм оптимизации нечеткого описания молекул с целью поиска лучшей модели в заданном классе предсказывающих функций.
- Проведена оценка вычислительной сложности алгоритмов, проведены вычислительные эксперименты и подтверждена практическая значимость подхода при прогнозировании биологической активности органических соединений.

Работа с классификацией объектов на изображениях:

В 2009 года на мехмате защищена дипломная работа Дмитрием Медниковым «Распознавание объектов на полутоновых изображениях на основе "активного сенсора". Алгоритмы и описание процесса»

Текст работы – см. <http://istina.msu.ru/diplomas/11639339/>

- Развита один из подходов к распознаванию объектов на полутоновых изображениях – подход использующий **активный сенсор**.
- Проведен обзор существующих подходов к распознаванию, дана унификация определений и их строгая математическая фиксация.
- Даны теоретические оценки вычислительной сложности предлагаемой двухэтапной схемы распознавания объектов на изображениях.
- Описана реализация системы, использующей активный сенсор, и приведены результаты численных экспериментов на ее основе. Сформулирован процесс работы оператора системы при построении объектного классификатора, использующего активный сенсор. Приведены требования к информационной системе, автоматизирующей данный процесс.

В 2005 года на мехмате защищена дипломная работа Семеном Сергунином «Вычислительная Модель Распознавания Объектов Сцен с Использованием Активного Сенсора»

Текст работы – см. <http://istina.msu.ru/diplomas/12079180/>

- Разработана вычислительная объектная модель (ОМ) для распознавания предметов на изображениях сцены с использованием активного сенсора;
- На этой основе предложен процесс распознавания объектов заданной предметной области и проведено исследование его особенностей, включая определение параметров настройки ОМ
- Предложен новый метод итеративного анализа сцен на основе активного сенсора, использующий объектную модель для представления и распознавания предметов.
- Показано преимущество объектной модели (ОМ) при решении задачи «объект-фон» за счет проведения «объектной сегментации» сцены.
- Определены параметры настройки объектной модели на основе использования понятий ОМ-алфавита и конфигураций маркированных особых точек.