

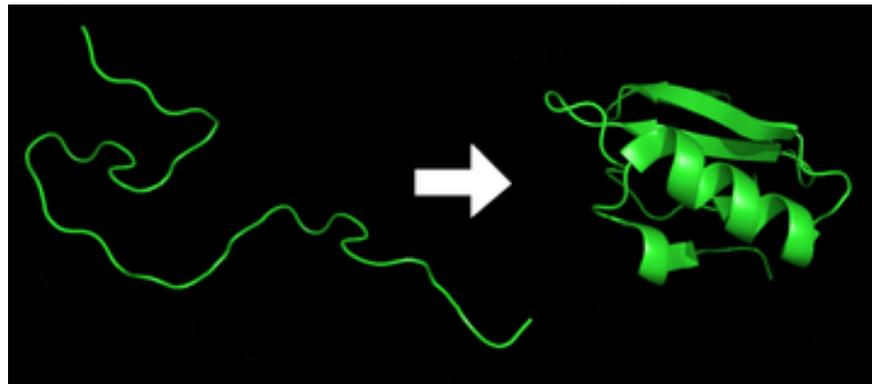
Высокопроизводительные методы прикладной оптимизации

**руководитель - Посыпкин Михаил Анатольевич,
профессор НИУ ВШЭ, главный научный сотрудник
ФИЦ ИУ РАН**

mposypkin@gmail.com

Вычислительная биология

- Крупноблочные модели белка
- Применение методов машинного обучения для предсказания пространственной структуры белков



Исследования и разработка крупноблочных моделей белка

Данная тема направлена на решение одной из ключевых задач современной вычислительной биологии – предсказанию пространственной структуры белка по его аминокислотной последовательности. В рамках крупноблочных моделей аминокислоты и другие крупные фрагменты белка заменяются псевдо-атомами и далее белок моделируется как многозвенная механическая система, части которой взаимодействуют с помощью сил, определяемых потенциалом взаимодействия. В рамках проекта предполагается исследование и модернизация существующих крупноблочных моделей, их программная реализация, экспериментальные исследования. Студенты познакомятся с аппаратом современной вычислительной биологии, освоят языки программирования Python, C++ и различные вспомогательные пакеты.

Применение методов машинного обучения для предсказания пространственной структуры белка

Задача предсказания пространственной структуры белка по его аминокислотной последовательности («фолдинг») белка является одной из самых обсуждаемых проблем современной вычислительной биологии. Студенты познакомятся с основами физико-химических процессов, происходящих в белках, для реализации различных подходов к решению поставленной задачи и изучению свойств белков, который в последствии можно будет использовать в качестве признаков для обучения. В рамках данного проекта основной целью является создание современного программного комплекса по решению вспомогательных задач в фолдинге белка с применением современных инструментов (python, SciPy, BioPython, Keras и т.п.) и использованием методов машинного обучения.

Методы оптимизации и управления для роботов параллельной структуры

Роботы параллельной структуры широко применяются в производстве, космической и оборонной промышленности, медицине и других областях. В рамках проекта предполагается решение ряда актуальных задач: построение рабочей области робота, анализ сингулярностей, оптимизация роботов по ключевым параметрам и критериям. Будет возможность работы с реальным макетом робота, разработки программ по прокладке траектории и управлению движением робота. Студенты овладеют теорией робототехники. При разработке программного обеспечения будут применяться современные языки программирования и прикладные пакеты (C++, Python, Matplotlib, SymPy и другие).

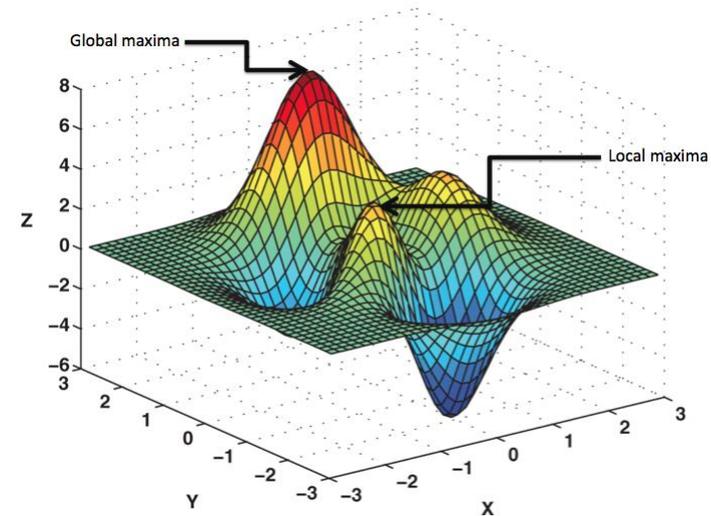


Разработка адаптивных методов локальной оптимизации

Современные методы оптимизации обычно включают в себя много параметров. Например, в координатном спуске имеются параметры "разгона" (увеличение длины шага) и "торможения" (уменьшение длины шага). В общем случае нужен подбор функции определения шага от истории предыдущих шагов.

В рамках работы требуется разработать метрику эффективности метода, а также применить методы аппроксимации, в т.ч. различные универсальные аппроксиматоры (нейросети, символьную регрессию и т.п.) для синтеза наилучшей функции.

В работе могут участвовать несколько человек, т.к. существует много различных методов оптимизации и много подходов к решению данной задачи.



Исследование и разработка высокопроизводительных методов локальной оптимизации

Методы локальной оптимизации применяются при конструировании инженерных конструкций, механизмов, являются фундаментом вычислительной химии и биологии. При большом числе переменных и/или сложной целевой функции подобные методы могут работать неприемлемо долго. Современные высокопроизводительные вычислительные системы и инструменты позволяют существенно ускорить локальные методы оптимизации за счет одновременного вычисления значения целевой функции в различных точках выбранной окрестности текущей. В рамках проекта студенты изучат один или несколько методов локальной оптимизации, разработают и реализуют параллельный вариант, ориентированный либо на многоядерную систему с общей памятью, либо на графический ускоритель (GP GPU). В работе над проектом потребуются изучить современные средства высокопроизводительных вычислений, в том числе многопоточные средства C++, платформу CUDA.

Разработка интервальной библиотеки для Python

Интервальный анализ является мощным инструментом решения оптимизационных задач и систем уравнений. На данный момент существует одна библиотека интервальных вычислений для Питона, но она практически не поддерживается. Кроме того, нет поддержки вычисления интервальных оценок для производных функций.

$$f(x) = x^2, x \in [-2, 2] \Rightarrow f(x) \in [0, 4]$$

В рамках проекта требуется разработать библиотеку для интервальных вычислений, поддерживающую базовую интервальную арифметику, вычисление интервальных оценок для производных функций. Другой темой может быть реализация методов, основанных на интервальной арифметике, например, метода Ньютона и др.

В проекте могут участвовать несколько студентов.

Спасибо за внимание!

mposypkin@gmail.com