

ОТЗЫВ

на автореферат

диссертационной работы Ерещенко Алексея Владимировича
«Применение графовых нейронных сетей для анализа молекулярных
структур»

на соискание учёной степени кандидата технических наук по
специальности 1.2.1 – Искусственный интеллект и машинное обучение

В настоящее время во многих областях медицины, фармакологии, биотехнологии и даже смежных направлениях спортивной индустрии и индустрии красоты и здоровья, значительную роль играет исследование белковых структур. Однако, с ростом вычислительной мощности, подобные задачи выходят на новый уровень детализации структур, где рассматривается не только элементарные химические соединения, но и молекулы, из которых они состоят. По мере развития технологий, также накапливаются знания о структуре белков, из которых формируются значительные наборы данных, в которых появляется возможность поиска новых закономерностей, предшествующего лабораторным экспериментам. В такой ситуации значительную роли играют методы машинного обучения. Однако, несмотря на универсальность моделей искусственного интеллекта, методов машинного обучения, становятся актуальными классы задач, тесно связанных с разметкой данных, что является принципиально важным для сокращения времени обучения, повышения точности моделей. В этой связи становится актуальным ансамбль общих моделей, решающих широкий круг задач с частными моделями. Кроме того, немаловажно и то, что в структурах биологических систем также наблюдается идея двусортности множества – наличия элементов и отношений между ними. Кроме самих структур подобными свойствами обладают и модели их классификации. Поэтому исследования аспектов теоретико-графовых моделей вкпе с машинным обучением и их медико-биологические предметные интерпретации несомненно являются **актуальными**.

В диссертационной работе решена научно-прикладная задача обоснования и разработки комплексного алгоритмического обеспечения, построенного на графовых нейронных сетях для решения ряда задач моделирования процессов, связанных с формированием структур белка и из взаимодействием друг с другом, а именно поиск зон связывания молекул

белка, оценка указанных зон, алгоритмы предсказания мишеней малой молекулы, оценки фармакокинетических свойств молекул.

Теоретическая значимость заключается в построении новых предметных интерпретаций графовых нейронных сетей и разработки на их основе описаний поведения микромолекулярных структур.

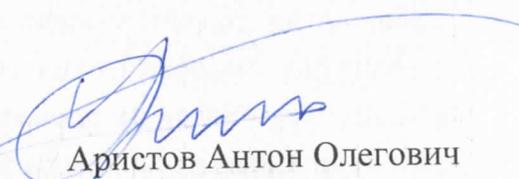
Практическая значимость результатов заключается в генерации теоретически обоснованной базы данных лекарственных молекул, содержащей более 80 000 соединений.

В качестве **замечания** следует отметить, отсутствие в автореферате и диссертации общих рекомендаций по использованию разработанных моделей и алгоритмов, их программной реализации и расширению области применения.

Обозначенное замечание не снижает положительного впечатления о работе.

На основании представленного автореферата считаю, что диссертация является законченной научно-квалификационной работой, соответствующей требованиям ВАК РФ, предъявляемым к диссертациям на соискание учёной степени кандидата технических наук, а её автор Ерещенко Алексей Владимирович **заслуживает** присуждения указанной учёной степени по специальности 1.2.1 – Искусственный интеллект и машинное обучение.

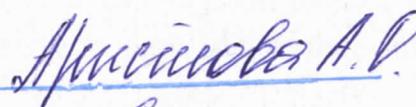
Доктор технических наук,
профессор кафедры автоматизированного
проектирования и дизайна
Университета науки и технологий МИСИС


Аристов Антон Олегович

Адрес организации : 119991, Москва, Ленинский проспект, д.4 стр. 1
тел. +7 (906) 786-7124, e-mail: aristov.ao@misis.ru



Подпись _____
Завещаю
Зам. начальника
отдела кадров


Кузнецова А.Е.

« 04 » 03 2016 г.