

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Ромеро Рейес Илякай Владиславовны «Оценка аффинности комплексов белок-лиганд с применением нейронных сетей», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности «05.13.18 – математическое моделирование, численные методы и комплексы программ».

Актуальность данной работы не вызывает сомнений. Умение оценивать аффинность (т.е. сродство) органических лигандов по отношению к биологическим мишеням играет ключевую роль при разработке лекарственных препаратов. Применение для этой цели методов химической информатики, включающих расчет набора физико-химических дескрипторов, часть из которых вычисляются с использованием молекулярного моделирования, с последующим построением модели «структура-свойство» с помощью искусственных нейронных сетей кажется весьма обоснованным подходом. Из новинок, составляющих научную новизну подхода, особенно следует отметить сочетание нейронных сетей с предобработкой данных с помощью нелинейных методов снижения размерности с расширением вложения для новых точек. Существенным достижением диссертационной работы является также разработка оригинального программного обеспечения, эффективность работы которого достигнута за счет распараллеливания вычислений с помощью графических процессоров. Разработанный в диссертационной работе новый метод предсказания сродства лигандов к белковым макромолекулам, реализованный в созданном для этого программном комплексе, может найти применения при решении многочисленных задач, связанных с разработкой новых лекарственных препаратов.

В качестве замечаний следует отметить, что как в названии диссертации, так и по тексту автореферата, некоторые термины употребляются не всегда стилистически правильно. Следует говорить не о «аффинности комплексов белок-лиганд», а о аффинности лигандов по отношению к белку. Кроме того, вместо «энергии взаимодействия комплексов» следует употреблять «энергия взаимодействия лиганд-белок» либо «энергия образования комплексов».

Приведенные замечания, однако, ни в коей мере не снижают ценности диссертационной работы. Она вполне удовлетворяет требованиям

Минобрнауки, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор Ромеро Рейес Илякай Владиславовна заслуживает присуждение ей ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности «05.13.18 – математическое моделирование, численные методы и комплексы программ».



Prof. Alexandre Varnek
Laboratoire de Chémoïnformatique
UMR 7140 - CNRS/Université de Strasi
1, rue Blaise Pascal
67008 Strasbourg Cedex

Александр Варнек

Профессор Страсбургского университета (Франция),

Заведующий лаборатории хемоинформатики