

О Т З Ы В

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

В диссертационной работе И.В. Ромеро Рейес предлагается подход к предсказанию аффинности лиганда к рецептору, в частности к рецепторам глюкокортикоидов и прогестерона. Актуальность данной задачи не вызывает сомнений, поскольку разработанный метод может быть использован для виртуального скрининга потенциальных лекарственных соединений. С этой целью в предлагаемом подходе комбинируются методы молекулярного моделирования, методы распознавания образов (искусственные нейронные сети) и методы снижения размерности пространства признаков.

Используемые подходы последовательно излагаются в работе, полученные данные приводятся в объеме, достаточном для понимания сути проблемы. Алгоритмы обучения с учителем и снижения размерности применены методологически грамотно и позволяют свести к минимуму риск “переобучения”. Отдельно хочется отметить использование экспериментальных данных для веществ, синтезированных и изученных *in vitro*, что позволяет проверить предсказанные значения аффинности комплексов лиганд-рецептор на практике.

Единственным замечанием к настоящей работе является то, что в автореферате не полностью обоснована необходимость разработки схемы с параллельной формой алгоритма оценки аффинности. Однако указанный недостаток является несущественным и не снижает высокой общей научно-практической ценности работы.

Диссертация И.В. Ромеро Рейес «Оценка аффинности комплексов белок-лиганд с применением нейронных сетей» является законченной научно-исследовательской работой и полностью соответствует всем квалификационным требованиям, предъявляемым Минобнауки РФ к кандидатским диссертациям, а ее автор заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 05.13.18 – математическое моделирование, численные методы и комплексы программ.

14 мая 2014 г.

Старший научный сотрудник
лаборатории анализа постгеномных
данных ФГБУ «ИБМХ» РАНН,
кандидат биологических наук

М.А. Пятницкий

Подпись М.А. Пятницкого заверяю:
Ученый секретарь ФГБУ «ИБМХ» РАНН,
кандидат химических наук



Е. А. Карпова

119121, Москва, ул. Погодинская, д. 10, стр.8, Федеральное государственное бюджетное учреждение «Научно-исследовательский институт биомедицинской химии имени В.Н.Ореховича» Российской академии медицинских наук (ФГБУ «ИБМХ» РАНН)