

## 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

Диссертационная работа И. В. Ромеро Рейес посвящена важной и актуальной теме - разработке численных методов оценки аффинности комплексов «белок-лиганд» и их реализации в виде комплекса программ на графических процессорах. При этом для вычисления (прогнозирования) оценок используется механизм искусственных нейронных сетей. В работе проведено совместное использование разных подходов к прогнозированию на основе разумной и интересной комбинации классических методов количественной корреляции структура-активность (ККСА или QSAR – Quantitative Structure-Activity Relationship).

Предложенный и реализованный в работе подход позволил использовать положительные аспекты QSAR, хемоинформатики, методов молекулярного моделирования и выявления корреляций «структура-активность», - в результате чего в работе было показано, что возможно получать более точные оценки аффинности комплексов «белок-лиганд» за более короткое время счета.

Исследование И. В. Ромеро Рейес имеет как теоретический, так и прикладной характер. Работу отличает корректно и грамотно сформулированные цель и задачи исследования, адекватно подобранные методы его проведения. Научная новизна и практическая значимость полученных результатов сомнений не вызывают.

В работе использованы современные инструменты компьютерного молекулярного моделирования, в том числе программные пакеты докинга DOCK 6.5, молекулярной динамики AMBER 9.0 и 3D-QSAR SYBYL 8.1. Отдельно следует отметить применение системы MATLAB 2012 и технологии параллельного программирования CUDA.

И. В. Ромеро Рейес разработала оригинальный пакет компьютерных программ для численной оценки аффинности лигандов к белкам-мишеням на основе подхода, совмещающего методы молекулярного моделирования и искусственных нейронных сетей. Пакет реализован на графических процессорах с применением технологии CUDA. Эффективность созданного пакета программ очевидна, если рассмотреть результаты вычислительных экспериментов: время обучения сокращается в 69 раз при распараллеливании счета на 256 нейронных сетей.

Коэффициент детерминации между расчетными и экспериментальными показателями аффинности составил 0,77, что существенно выше точности 3D-QSAR с использованием методов CoMFA и CoMSIA - для них коэффициент детерминации равен 0,39 и 0,37, соответственно.

Замечаний по автореферату нет.

Считаю, что диссертационная работа И. В. Ромеро Рейес удовлетворяет всем требованиям Минобрнауки РФ, предъявляемым к кандидатским диссертациям по специальности 05.13.18 – математическое моделирование, численные методы и комплексы программ, а её автор Илякай Владиславовна Ромеро Рейес заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук.

Профессор кафедры  
вычислительной математики  
механико-математического факультета  
МГУ имени М.В.Ломоносова  
доктор физ.мат. наук

  
М.И. Кумсков

Подпись профессора М.И.Кумскова заверяю



*Илякай Владиславовна Ромеро Рейес*  
*исполн. зам. декана*