

О Т З Ы В

научного руководителя

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

И. В. Ромеро Рейес принята на работу в лабораторию параллельных вычислений и информационных технологий ФГБУ «ИБМХ» РАМН после окончания обучения в Государственном образовательном учреждении высшего профессионального образования «Московский инженерно-физический институт (технический университет)». Она получила диплом с отличием по специальности «Прикладная математика и информатика» на факультете экспериментальной и теоретической физики. Дипломная работа И. В. Ромеро Рейес была посвящена двухчастичным корреляциям в протон-протонных и ядро-ядерных столкновениях при высоких энергиях. Работа в отделе биоинформатики ФГБУ «ИБМХ» РАМН потребовала от нее освоения полностью новой для нее области. В лаборатории параллельных вычислений и информационных технологий основные обязанности И. В. Ромеро Рейес связаны с развитием облачной инфраструктуры института, разработкой и поддержкой веб-сайтов института, и разработкой программного обеспечения и его применения для решения вычислительных задач, поставленных экспериментальными лабораториями института. При разработке математического и программного обеспечения И. В. Ромеро Рейес освоила новые методы и инструментарий высокопроизводительных многопоточных вычислений, в том числе параллельное программирование на гибридных платформах с многоядерными графическими процессорами с использованием технологий CUDA и OpenCL.

За время работы в лаборатории параллельных вычислений и информационных технологий ФГБУ «ИБМХ» РАМН И. В. Ромеро Рейес была одним из основных архитекторов облака института и стала его бессменным администратором, проявила себя как самостоятельный творческий специалист, с высокой работоспособностью и ответственностью в решении поставленных перед ней задач. И. В. Ромеро Рейес выросла в квалифицированного специалиста в области высокопроизводительных вычислений, численных методов и разработки прикладного программного обеспечения для решения задач био- и хемоинформатики и системной биологии, и стала полноправным членом коллектива, ответственно и творчески выполняющим порученную ей работу.

Как научный руководитель я знаю И. В. Ромеро Рейес с момента обсуждения возможной темы ее диссертационной работы. Предложенные ею идеи актуальны и важны для конструирования новых высокоэффективных и безопасных лекарств, а для диссертационной работы она выбрала конкретную актуальную задачу повышения точности компьютерной оценки аффинности комплексов белок-лиганд. Следует отметить, что И. В. Ромеро Рейес способна к автономной самостоятельной работе, умеет ставить задачи в рамках данной руководством цели и с успехом найти пути к их решению.

Диссертационная работа И. В. Ромеро Рейес посвящена разработке численных методов для оценки аффинности комплексов белок-лиганд с применением нейронных сетей и их реализации в виде комплекса программ на графических процессорах. За период работы над диссертацией она освоила теоретические основы компьютерных методов анализа взаимосвязи «структура-активность» и молекулярного моделирования, особенно направление методов анализа многомерных данных и искусственных нейронных сетей и их программную реализацию. По теме диссертации И. В. Ромеро Рейес подготовила три статьи в рецензируемых журналах. Кандидатские экзамены по философии, английскому языку и специальности «математическое моделирование, численные методы и комплексы программ» сданы на «отлично». Полученные результаты неоднократно докладывались И. В. Ромеро Рейес на конференциях, в том числе на двух международных.

Предложенный и реализованный И. В. Ромеро Рейес подход позволяет использовать лучшие стороны методов молекулярного моделирования и анализа связей «структура-активность», нивелировать их недостатки и получать более точные, важные для конструирования лекарств, оценки аффинности комплексов белок-лиганд.

По моему мнению, 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.

Ведущий научный сотрудник
лаборатории структурно-функционального конструирования лекарств
ФГБУ «ИБМХ» РАМН,
кандидат физико-математических наук

Д. А. Филимонов

Подпись Д.А. Филимонова заверяю:
Ученый секретарь ФГБУ «ИБМХ» РАМН,
кандидат химических наук



Е. А. Карпова