

Отзыв
на дипломную работу
**«РАЗРАБОТКА АЛГОРИТМА ОЦЕНКИ ИНГИБИТОРНОЙ
АКТИВНОСТИ ХИМИЧЕСКОГО СОЕДИНЕНИЯ»**

Анищенко Арсения Игоревича

Дипломная работа Анищенко Арсения Игоревича выполнена при завершении освоения содержания образовательной программы высшего образования первой ступени по специальности «информатика».

Целью дипломной работы является создание нового алгоритма оценки ингибиторной активности химических соединений на основе технологии машинного обучения и молекулярных фингерпринтов.

Несмотря на большое число появившихся за последние десятилетия различных программных продуктов для расчета межмолекулярных взаимодействий, молекулярной динамики, квантово-химических взаимодействий и т.д., задача по созданию программы, которая позволит без значительных затрат ресурсов и времени осуществлять поиск потенциальных лекарственных препаратов, является актуальной. Метод машинного обучения – это один из наиболее современных методов для разработки достаточно быстрого и высокоэффективного программного обеспечения. В связи с этим очевидны актуальность и практическая значимость дипломной работы Анищенко А.И., которая состоит в разработке алгоритма оценки ингибиторной активности химических соединений. Для решения поставленной задачи А.И. Анищенко использованы современные методы машинного обучения.

В работе А.И. Анищенко разработал алгоритм генерации новых потенциальных ингибиторов проникновения белка gp120 ВИЧ-1 и проверки их активности. Для сгенерированных при помощи автоэнкодера фингерпринтов были найдены аналоги химических соединений в базе данных ZINC и предсказана их ингибиторная активность, которая в последствии была проверена методами молекулярного моделирования.

Работа выполнена на высоком научном уровне с использованием современных методов компьютерного молекулярного моделирования.

Полученные результаты и сделанные на их основе выводы обоснованы. Опубликована статья в журнале «Информатика» Разработка генеративной состязательной нейронной сети для идентификации потенциальных ингибиторов ВИЧ-1 методами глубокого обучения / Г. И. Николаев [и др.] // Информатика. – 2020. – Т. 17, № 1. – С. 7–17. <https://doi.org/10.37661/1816-0301-2020-17-1-7-17>.

Выполненное исследование соответствует требованиям, предъявляемым к дипломным работам (уровень оригинальности работы составляет «94,20%»), и может быть отмечено оценкой 10 «десять».

Рекомендую присвоить Анищенко А.И. квалификацию «математик-системный программист».

Руководитель дипломной работы
старший преподаватель

Г.И. Николаев