

Рецензия
на дипломную работу студента 4 курса ФПМИ БГУ
Анищенко Арсения Игоревича

**«РАЗРАБОТКА АЛГОРИТМА ОЦЕНКИ ИНГИБИТОРНОЙ
АКТИВНОСТИ ХИМИЧЕСКОГО СОЕДИНЕНИЯ»**

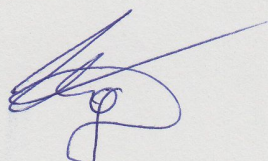
Дипломная работа А. И. Анищенко посвящена разработке и реализации алгоритма оценки потенциальной ингибиторной активности химических соединений, основанного на машинном обучении.

Использование машинного обучения в дизайне лекарственных препаратов сравнительно новый подход, и Анищенко А.И. в рамках своей дипломной работы осуществил исследование возможностей применения данного подхода для решения регрессионной задачи прогнозирования свободной энергии образования комплексов лигандов с белком gp120 оболочки ВИЧ-1. В ходе решения поставленных в работе задач А. И. Анищенко спроектировал и обучил несколько моделей искусственных нейронных сетей как полносвязных, так и сверточных; разработал метод интерпретации результатов работы автоэнкодера для генерации новых потенциальных ингибиторов проникновения белка gp120. Им была создана база данных молекулярных отпечатков на основе базы данных химических соединений ZINC, а также предложены несколько методов виртуального скрининга полученной базы с целью идентификации в ней химических соединений, структура которых соответствует сгенерированным изначально молекулярным дескрипторам.

В ходе выполнения работы А. И. Анищенко продемонстрировал высокий уровень подготовки в области прикладной математики и программирования. Работа получила высокую оценку в системе «Антиплагиат»: оригинальность – 94,20 %.

Считаю, что дипломная работа Анищенко Арсения Игоревича заслуживает оценки 10 «десять».

Рецензент
старший научный сотрудник
Института биоорганической химии
НАН Беларуси, к.х.н.



Ю.В. Корноушенко

