

Рецензия на рукопись
Использование графовых моделей для прогнозирования количественного
выхода химических реакций
Гунаев Руслан, Никитин Филипп

Шапка:

На что идет ссылка после фамилий авторов?

Введение:

Ссылка на [2] не вписывается в текст – слишком общая фраза.

Непонятно связь при ссылке на [9,13], представлено ли в них построковое представление

Если вторая цель задачи выделена отдельным абзацем, то почему не выделена первая?

В целом, из введения ясно, что хочет автор описать в статье. Также ясен общий подход, который будет использоваться при решении задачи.

Постановка проблемы:

2.1 Хотелось бы понять, что значат строчки из букв в списке 1-4. Также, это было более наглядным, если бы каждый пример, как выглядят данные, иллюстрировался реальной химической реакцией.

2.1-2.2 Хотелось бы более формального описания, используя математические формулы и т.п.

2.3 Что значит индекс (0) у каждого эмбединга? Зачем он нужен, если он присутствует везде? Только потом становится понятным, что это означает номер состояния.

2.3 В формуле (4) введен новый индекс g , как он соотносится с ранее введенным индексом m_i .

2.4 Похожая проблема с предыдущей, проблема с индексами у **h**. Почему векторное представление молекул веществ и векторное представление реакции обозначены одной буквой?

2.6 Что значит «linear» в формуле (12)?

2.7 Не написана общая формула ошибки в виде формулы, что облегчило бы словесное описание.

Хотелось бы словесное описание методов и формула представить в виде формул. Уже написанные формулы должны быть доработаны, чтобы легче читалось и понималось при прочтении.

Стр 1, абзац 1: фраза «можно разделить на две части», хотя дальше идет больше, чем две части

Стр 1, абзац 1, строчка 2: должно быть «молекул-кандидатов»

Стр 1, абзац 1, строчка 2: опечатка «кондидата»

Стр 1, абзац 1, строчка 4, «например» выделяется запятыми

Стр 1, абзац 1, строчка «молекулярного графов»

Стр 1, абзац 1, строчка 6: заменить слово обозрены

Стр 1, абзац 1, строчка 10: «рекуррентных»

Стр 1, абзац 3, строчка 1: «глубинного» стоит заменить на «глубокого»

Стр 1, абзац 3, строчка 2: подряд идут двоеточия в одном предложении

Стр 2, абзац 1, строчка 4: выделить «более того» запятой

Стр 2, абзац 1, строчка 6: «обобщением»

Стр 3, абзац 3, строчка 1: «представление»

Стр 3, абзац 3, строчка 2: «обозначения»

Стр 3, абзац 6, строчка 2: «эквивалентны»

Стр 3, абзац 7, строчка 2: «химической»

Стр 3, абзац 8, строчка 1: «молекул»

Стр 3, абзац 8, строчка 2: «предлагается»

Стр 4, абзац 1, строчка 1: «позволяют»

Стр 4, абзац 1, строчка 4: «прийдем», «вормулам»
Стр 4, абзац 2, строчка 1: «такм»
Стр 4, абзац 2, строчка 2: «исхоного»
Стр 4, абзац 2, строчка 3: «вршинами»
Стр 4, абзац 2, строчка 4: «свзи», «молекулы» и «рекции»
Стр 4, абзац 3, строчка 2: «решающей»
Стр 4, абзац 4, строчка 2: «фукции», «вычисляетс»

В связи с большим количеством опечаток и грамматических ошибок рекомендуется использовать редактор слов.

Заключение:

В целом, работа неплохая. То, как излагается материал, понятен, однако в некоторых местах, указанных выше, требуется доработка: изменить формулировку предложений для более четкого выражения информации; изменить формулы, сделать их более корректными не только с математической точки зрения, но и с точки зрения записи.

Замечание:

Код не был предоставлен, так как используется в работе, которая еще не была опубликована.

Рецензент: Исламов Рустем