

Рецензия на рукопись

Geometric Deep Learning for Protein-Protein Binding Affinity Prediction

Алиев А.

В данной работе рассматриваются задача предсказания свойств связей протеин-протеин, которые являются объектом активного изучения последние 20 лет. Автор предлагает рассмотреть методы машинного обучения, а именно геометрический подход в глубоком обучении и более классические модели такие как катбуст.

В названии работы стоит сменить Geometric Deep Learning на какие-то более конкретные методы. Тоже самое стоит сделать в ведении. Появление не описанных геометрических методов, на которые ссылается автор, не позволяет понять о чем в дальнейшем пойдет речь в работе, какие методы планируется применять.

В разделе Objective идет перечисление целей данной работы, возможно было бы уместно добавить выделение их с помощью списка.

В теоретическом описании происходящего для лучшего понимания стоит описать модель и функцию ошибки в классических математических терминах — как отображения из одного множества в другое, например из R^n в R^+ . В дальнейшем мы делаем какие-то утверждения про эти функции и такое уточнение сделало бы текст менее путанным.

Стоит так же привести ссылки на материалы по которым строятся теоретические гипотезы в данной модели, либо явно указать из каких соображений автор к ним приходит.

В разделе с экспериментом не приводится указания на то как выглядит пайплайн эксперимента, не приводятся ссылки на код. Так же стоит исправить подпись к графику, которая оказалась на другой странице.

В разделе с визуализацией не подписано, что значат цвета на первом графике, нет никаких комментариев, которые описывали бы, что происходит на представленных картинках.

Рецензент:

Пыж В.А.