

Рецензия на статью «Предсказание свойств и типов атомов в молекулярных графах при помощи сверточных сетей»

Вардан Манучарян

«Предсказание свойств и типов атомов в молекулярных графах при помощи сверточных сетей»

Статья посвящена весьма актуальной проблеме классификации атомов для предсказания их свойств в молекуле: методам построения признаков с помощью сверточной сети. Полученные вектора признаков учитывают как свойства отдельных атомов, так и их взаимодействия с соседними атомами и могут быть применены как основа для задач классификации и регрессии.

Введение статьи состоит из обзора способов представления молекул в виде графов и описания операции конволюции применительно к таким представлениям. В следующем разделе описывается архитектура сети и выборка, на которой производилось обучение. В этом же разделе приводится подробное пояснение к параметрам модели и методам ее оптимизации.

В рецензируемой статье содержится некоторые противоречие: в аннотации заявлено, что 3D структура моделей не учитывается, при этом во введении говорится о представлении объектов «в виде трёхмерных молекулярных графов». Кроме того, отсутствует раздел с результатами проведенных экспериментов.

В целом, считаю, что статья полезна, понятно написана, и весьма содержательна.

Рекомендую принять статью к печати в журнале «Journal» с некоторыми доработками.

Рецензент

К.ф.-м.н. Мистер Фаттахов