

Рецензия на статью

Формулировка и решение задачи оптимизации, сочетающей классификацию и регрессию,
для оценки энергии связывания белка и маленьких молекул

Игашов Илья

В статье рассматривается задача оценки свободной энергии связывания белка с лигандом. Рассмотрены два основных метода решения задачи 1) классификация и 2) регрессия. Первый даёт плохую точность, второй переобучается. В данной работе предлагается метод, являющийся комбинацией этих двух, который решает их проблемы. Представлена модель и допущения, которые сильно уменьшают вычислительную сложность. В разделе «Постановка задачи» подробно расписана теоретическая постановка задачи оптимизации. Результаты эксперимента нет.

Работа написана понятным языком, читается на одном дыхании. Цель и объект исследования понятны. Претензий к обозначениям и терминам нет. Отсутствует результат опыта и, следовательно, анализ ошибки, что и рекомендуется доработать.

В связи с вышеизложенным, считаю, что рецензируемую статью публиковать необязательно.

Минорные ошибки и замечания по работе указаны в приложенном файле.

Рецензент:

Студент кафедры анализа данных Манучарян Вардан