

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Прохорова Евгения Игоревича «Адаптивная двухфазная схема решения задачи 'структура-свойство'», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности «05.13.17 – теоретические основы информатики».

Актуальность и практическая ценность данной работы не вызывают сомнений, поскольку построение моделей «структура-свойство» и оценка областей их применимости являются центральными задачами хемоинформатики и играют значительную роль в разработке новых лекарственных препаратов и материалов. В диссертационной работе предлагается новый двухуровневый подход, который в определенной мере можно считать альтернативой традиционному одноуровневому подходу, в рамках которого отнесение объекта к одному из классов и оценка надежности такого отнесения осуществляется в рамках одной и той же модели. Предлагаемый подход также можно считать разумной альтернативой популярной в настоящее время в хемоинформатике концепции областей применимости моделей, основанной на описании данных при помощи дополнительных моделей «без учителя». В его основе лежит приведенный на стр. 14 автореферата математический результат, оформленный в виде теоремы и нескольких следствий, который можно считать надежным теоретическим обоснованием предложенной в диссертационной работе схемы решения задачи «структура-свойство». Эффективность применения этой схемы продемонстрирована на конкретных примерах построения моделей «структура-свойство» для прогнозирования противоопухолевой активности химических соединений и их способности ингибировать активность одного из ферментов.

Имеется несколько замечаний по тексту автореферата диссертации.

1. На стр. 10 автореферата не объяснено обозначение SRM , а на стр. 11 – ρ и Z_j .
2. В формуле на стр. 12 автореферата в знаменателе должна стоять сумма мер принадлежности M -графов различным кластерам.

Приведенные замечания, однако, носят чисто технический характер и никак не снижают ценности диссертационной работы. Она в целом удовлетворяет требованиям Положения о присуждении ученых степеней,

предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор Прохоров Евгений Игоревич заслуживает присуждение ему ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности «05.13.17 – теоретические основы информатики».

Ведущий научный сотрудник
кафедры физики полимеров и кристаллов
физического факультета Московского
государственного университета
имени М.В.Ломоносова,
доктор физико-математических наук

И. И. Баскин

“ 14 ” мая 2014 г.

Подпись д.ф.-м.н., ведущего научного сотрудника И.И.Баскина подтверждаю

 


Отзыв подготовил ведущий научный сотрудник кафедры физики полимеров и кристаллов физического факультета
ФГБОУ ВПО «Московский государственный университет
имени М.В. Ломоносова», д.ф.-м.н., Баскин Игорь Иосифович
e-mail: igbaskin@gmail.com
119991, ГСП-1, Москва, Ленинские Горы, МГУ им. М.В. Ломоносова,
физический факультет, кафедра физики полимеров и кристаллов
Телефон: +7 (495) 939-1013