

Голові разової спеціалізованої вченої ради  
Національного університету «Львівська політехніка»  
доктору технічних наук, професору  
Шаховській Н.Б.

## **ВІДГУК**

### **офіційного рецензента**

доктора технічних наук, професора

**Виклюка Ярослава Ігоровича**

на дисертаційну роботу

**Гурбича Олександра Вікторовича**

«Методи та засоби аналізу хімічних сполук засобами штучного інтелекту»,  
представлену на здобуття наукового ступеня доктора філософії  
за спеціальністю 122 «Комп'ютерні науки»  
в галузі знань 12 «Інформаційні технології»

**Актуальність роботи.** Дисертаційна робота Гурбича Олександра присвячена розробці методів та засобів штучного інтелекту для інформаційної розробки та відбору найбільш перспективних молекул-кандидатів у лікарські речовини. У зв'язку із непинним зростанням вартості виведення на ринок нових ліків, рентабельність фармацевтичних досліджень спадає. Тому гостро постає потреба здешевлення процесу розробки нових ліків. Запропоновані у роботі методи штучного інтелекту поєднуються у єдину інформаційну систему для розробки лікарських речовин із заданими фізико-хімічними та біологічними властивостями, а також прогнозуванням придатності до синтезу у лабораторії. Набір методів, які розроблені у дисертації, дозволить зменшити кількість молекул-кандидатів на ранній стадії розробки ліків та зумовлює актуальність теми дисертаційної роботи Гурбича Олександра Вікторовича.

**Наукові результати та їх новизна.** Отримані наукові результати розв'язують актуальну науково-прикладну задачу підвищення ефективності розробки нових лікарських речовин, скорочуючи кількість кандидатів для доклінічних досліджень із десятків тисяч до тисяч.

Автором вперше розроблено метод прогнозування молекулярної спорідненості, що поєднує послідовні ансамблі моделей машинного навчання першого рівня та узагальнені лінійні моделі другого рівня для покращеної точності.

Автором вдосконалено архітектуру графової нейронної мережі для прогнозування виходу продукту хімічної реакції шляхом додавання інформації про учасників хімічного перетворення.

Також у роботі вдосконалено метод редукції шляхом спрощення групи нейронів за одну ітерацію та застосуванням методу перехресної перевірки. Ці модифікації дозволяють уникнути пристосування моделі до даних у тестовій вибірці та видаляти надлишкові ваги за малу кількість ітерацій. Видалення надлишкових нейронів у великих нейронних мережах сприяє оптимізації використання обчислювальних ресурсів та підвищує швидкість мережі.

**Практичне значення та практична цінність отриманих результатів.** Дисертаційна робота Гурбича О.В. виконана на кафедрі систем штучного інтелекту Національного університету "Львівська політехніка". Тема дисертації відповідає науковому напрямку кафедри. Дослідження, результати яких викладено в дисертації, виконано відповідно до пріоритетних напрямків науково-дослідних робіт Національного університету "Львівська політехніка", в рамках виконання науково-дослідних робіт за держбюджетною темою «Інформаційна технологія формування психофізичного портрету в умовах стресових ситуацій» (№ держреєстрації 0119U002257).

Практичне значення одержаних результатів полягає у розробці мікросервісної архітектури інформаційної системи створення молекул із заданими властивостями. Така система дає змогу здійснювати цільовий синтез молекул-кандидатів у лікарські речовини. Розроблені у дисертації методи та моделі реалізовано та апробовано у розрахункових та експериментальних дослідженнях.

Результати роботи впроваджені у освітньому процесі Національного університету «Львівська політехніка» при викладанні освітнього компонента «Нейромережеві технології та їх застосування». Результати дисертації були отримані під час роботи здобувача у держбюджетній науково-дослідній роботі

та пройшли дослідницьке випробування. Результати дисертаційної роботи були використані для створення комп'ютерних систем ранньої розробки лікарських речовин у ТОВ “СофтСерв-Індустрія”. Розроблені методи придатні до перевикористання у задачах генерації тексту та аналізу спільнот.

**Оцінка змісту, ступеню завершеності та обґрунтованості положень дисертації.** Дисертація Гурбича Олександра представляє собою завершену наукову працю, яка складається із вступу, п'яти розділів, висновків, списку використаних джерел, 2чотирьох додатків.

У *вступі* наведено актуальність теми дисертації, визначено мету та основні завдання, предмет та об'єкт, подано наукову новизну і практичне значення одержаних результатів. Наводиться інформація про список публікацій автора.

У *першому* розділі проаналізовано існуючі методи та підходи машинного навчання до прогнозування молекулярної спорідненості, фактичного виходу продукту хімічної реакції та інформаційної розробки молекулярних структур. За результатами огляду охарактеризовано недоліки існуючих досліджень в галузі застосування інформаційних технологій для розробки ліків та сформовано завдання дисертаційної роботи.

У *другому* розділі запропоновано метод мета-навчання для прогнозування молекулярної спорідненості між рецептором (велика біомолекула) та лігандами (малі органічні молекули).

У *третьому* розділі розроблено метод прогнозування виходу продукту хімічної реакції. Прогнозування виходу продукту хімічної реакції виконується за допомогою нової архітектури графової нейронної мережі. Дослідження доповнене аналізом даних, результатів і помилок, а також впливу просторових факторів, побічних реакцій, ефективності виділення та очищення на результати прогнозування.

У *четвертому* розділі запропоновано метод, що поєднує кілька глибоких нейронних мереж для створення молекулярних структур із заданими властивостями. Генерування доповнюється виправленням хімічної будови молекул за допомогою рекурентної нейронної мережі з механізмом уваги.

Наукові положення, висновки і рекомендації, отримані на основі практичного впровадження, дисертаційної роботи Гурбича О.В. обґрунтовані коректним використанням математичного апарату, що підтверджує теоретичні дослідження практичними результатами.

Аналіз спорідненості хімічних сполук проводився методом опорних векторів, випадковим лісом, градієнтним бустингом, графовими нейронними мережами та нейронними мережами прямого поширення, а також моделями-трансформерами, методом мета-навчання та поєднанням ансамблів моделей машинного навчання у каскади: класифікаційного та регресійного. Прогнозування виходу продукту хімічної реакції виконувалось деревами рішень, нейронними мережами прямого поширення, моделями-трансформерами.

Аналіз змісту розділів, використаного інструментарію та способів його застосування дозволяє зробити висновок про належну обґрунтованість наукових результатів. Наукові положення, висновки та рекомендації, сформульовані у дисертації, обґрунтовано теоретичним аналізом, результатами практичного використання та інформацією з науково-технічної літератури.

У *п'ятому* розділі розроблено архітектурну діаграму інформаційної системи для створення лікарських речовин із бажаними біологічними та фізико-хімічними властивостями. Інформаційна система поєднує методи, описані у попередніх розділах, утворюючи цілісну систему для розробки лікарських речовин із заданими властивостями.

**Анотація** повно та чітко відображає основні положення, результати та висновки дисертаційної роботи, ступінь новизни та практичне значення результатів досліджень, їх сутність та особистий внесок здобувача.

**Повнота викладення результатів дисертації в наукових виданнях.** Основні результати дослідження опубліковано у 3 статтях в наукових фахових виданнях України, 5 статтях у наукових виданнях інших держав, а також 2 праці апробаційного характеру – у матеріалах і тезах конференцій та препринтах.

Основні положення дисертації повністю викладено в опублікованих працях. Вимоги щодо кількості та якості публікацій виконано.

Повний обсяг роботи становить 252 сторінки друкованого тексту, з них основний текст – на 127 сторінках. Список використаних джерел містить 292 найменування.

**Оформлення дисертації та дотримання вимог академічної доброчесності.** Оформлення дисертації відповідає усім необхідним вимогам. Основні висновки і рекомендації логічно витікають із результатів, які наведено у розділах роботи. Дисертація написана науково-правильною мовою, доступно, на високому технічному рівні з використанням сучасної термінології. Тема, зміст та отримані наукові результати роботи відповідають спеціальності 122 «Комп’ютерні науки», галузі знань 12 «Інформаційні технології».

Аналіз структури та змісту дисертаційної роботи та наукових праць, що опубліковані автором, дозволяє стверджувати, що усі наукові та практичні результати отримані ним особисто і повною мірою опубліковані та апробовані.

У дисертації не виявлено текстових запозичень і використання наукових результатів інших науковців без посилань на відповідні джерела.

Відсутність порушень академічної доброчесності підтверджує наявна довідка про результати перевірки на академічний плагіат дисертації Гурбича Олександра Вікторовича

**Серед недоліків дисертаційної роботи можна відмітити наступні:**

1. Робота автора “Maksym Druchok, Dzvenymyra Yarish, Oleksandr Gurbych, and Mykola Maksymenko. “Towards Efficient Generation, Correction and Properties Control of Unique Drug-like Structures”. In: ChemRxiv (2019). doi: 10.26434/chemrxiv.9941858.v1” не є ні статтею, ні матеріалами конференції - це препринт опублікованої пізніше (2021) роботи “Toward efficient generation, correction, and properties control of unique drug-like structures”.
2. В тексті дисертації зустрічається запозичена лексика іншомовного походження та англійські аббревіатури.
3. Не обгрунтовано вибір мікросервісної архітектури інформаційної системи. Необхідно навести аналіз альтернативних рішень, чітко

виділити переваги та недоліки. На основі аналізу має бути здійснено вибір архітектури.

4. Архітектура діаграма інформаційної системи нейронної мережі могла б бути винесена в додатки.
5. У роботі наявні три додатки (80 сторінок) із викладенням програмного коду. Потрібно було навести лише короткі фрагменти коду ключових рішень.

Вищенаведені зауваження не мають принципового характеру і не впливають на загальну позитивну оцінку роботи. У цілому науковий рівень дисертації високий. Новизна, достовірність, наукове та практичне значення отриманих результатів не викликають сумнівів


**Висновок про відповідність дисертації вимогам, які пред'являються до наукового ступеня наукового ступеня доктора філософії.** Дисертація Гурбича Олександра на тему «Методи та засоби аналізу хімічних сполук засобами штучного інтелекту» є завершеною науково-дослідницькою працею, що містить нові науково обґрунтовані результати. У дисертації було вирішено актуальну науково-прикладну задачу розробки нових лікарських речовин із заданими властивостями за допомогою методів та засобів штучного інтелекту.

Одержані наукові та практичні результати є значущими для галузі інформаційних технологій та комп'ютерних наук. Тема і зміст відповідають спеціальності 122 - Комп'ютерні науки.

Дисертація Гурбича О.В. «Методи та засоби аналізу хімічних сполук засобами штучного інтелекту» за своєю актуальністю, науковою новизною, практичним значенням отриманих результатів, обґрунтованістю основних положень та висновків повністю відповідає вимогам наказу МОН України № 40 від 12.01.2017 р. «Про затвердження вимог до оформлення дисертації», вимогам освітньо-наукової програми, яку успішно завершив здобувач, вимогам «Порядку присудження ступеня доктора філософії та скасування рішення разової спеціалізованої вченої ради закладу вищої освіти, наукової установи про присудження ступеня доктора філософії» (затвердженого Постановою Кабінету Міністрів України 12.09.2022 р. № 44), а її автор, Гурбич

Олександр Вікторович, заслуговує на присудження йому наукового ступеня доктора філософії за спеціальністю 122 - Комп'ютерні науки.

Рецензент - доктор технічних наук, професор  
професор кафедри систем штучного інтелекту  
Національний університет  
"Львівська політехніка"



(підпис)

Я.І. Вижлюк  
(прізвище, ініціали)

"Підпис Вижлюка Я.І. засвідчую"

Віце-секретар  
(науковий ступінь, вчене звання, посада (ПБ))



Р. Бридичевський  
(прізвище, ініціали)