

Голові разової спеціалізованої вченої ради  
Національного університету «Львівська  
політехніка»  
д.т.н., професору Наталії ШАХОВСЬКІЙ

## **ВІДГУК ОФІЦІЙНОГО ОПОНЕНТА**

доктора технічних наук, професора Комара Мирослава Петровича на  
дисертаційну роботу **Гурбича Олександра Вікторовича** «Методи та засоби  
аналізу хімічних сполук засобами штучного інтелекту»,  
подану до захисту на здобуття наукового ступеня **доктора філософії**  
з галузі знань 12 «Інформаційні технології»  
спеціальності 122 «Комп'ютерні науки»

### **1. Актуальність теми дисертаційної роботи**

Завдання дисертаційної роботи Гурбича Олександра з розроблення методів та засобів аналізу хімічних сполук засобами штучного інтелекту та наступне поєднання створених елементів у вигляді інформаційної системи повного циклу дизайну ліків є актуальним, оскільки машинне навчання здатне скоротити ранні етапи дослідження та виробництва нових ліків.

### **2. Зв'язок роботи з науковими програмами, темами**

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).

### **3. Наукова новизна результатів дисертаційної роботи**

Дисертаційна робота Гурбича Олександра має наступні пункти наукової новизни:

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

Вдосконалено архітектуру графової нейронної мережі для передбачення виходу продукту хімічної реакції шляхом додавання інформації про учасників хімічного перетворення.

Вперше розроблено метод генерування молекулярних структур, що дозволяє контролювати одну або більше властивостей генерованих молекул, а також має послідовний модуль виправлення помилок хімічної будови.

Шляхом спрощення групи нейронів за одну ітерацію та застосуванням методу перехресної перевірки модифіковано метод редукції. Вказані модифікації дозволяють уникнути пристосування моделі до даних у тестовій вибірці та видаляти надлишкові ваги - за малу кількість ітерацій. На прикладних задачах по передбаченню молекулярної афінності та виходу продукту хімічної реакції показано ефективність покращеного методу редукції.

### **4. Короткий аналіз основного змісту дисертації**

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.

У третьому розділі розроблено метод прогнозування виходу продукту хімічної реакції. Прогнозування виходу продукту хімічної реакції виконується за допомогою нової архітектури графової нейронної мережі.

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.

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.

## **5. Ступінь обґрунтованості наукових положень, висновків і рекомендацій, їх достовірність**

Обґрунтованість теоретичних і прикладних положень, висновків і рекомендацій засвідчується високим науково-методичним рівнем проведення досліджень і аналізу їх результатів. 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.

## **6. Практичні результати роботи**

Результати дисертаційної роботи впроваджено в ТЗОВ "СофтСерв-Індустрія", а також у комерційному проекті (HTG Molecular Diagnostics). Автором розроблено діаграму мікросервісної архітектури інформаційної системи для розрахункового синтезу молекул із заданими властивостями.

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.

### **7. Оформлення дисертації, дотримання вимог академічної доброчесності та повнота викладу наукових положень та результатів в опублікованих працях**

Дисертація Гурбича О.В. має чітку логічну структуру. У кінці кожного розділу є проміжні висновки, що коротко підсумовують зміст розділу. Також є загальні висновки, які узагальнюють головні здобутки усієї роботи в цілому. 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. Також робота успішно пройшла перевірку на плагіат.

Основні результати дослідження включають 3 статті у наукових фахових виданнях України, та 5 статей у наукових виданнях інших держав. Основі положення дисертації викладено в опублікованих працях. Повний обсяг роботи становить 252 сторінки друкованого тексту, з них основний текст – на 127 сторінках. Список використаних джерел містить 292 найменування. Оформлення дисертації відповідає усім необхідним вимогам, вимоги щодо кількості та якості публікацій виконано.

### **8. Мова та стиль дисертаційної роботи**

Тема, зміст та отримані наукові результати роботи відповідають спеціальності 122 «Комп'ютерні науки», галузі знань 12 «Інформаційні технології». Дисертація написана науково-правильною мовою у академічному стилі з використанням технічної термінології.

## **9. Зауваження до дисертації:**

1. Не коректно сформульовано мету дисертаційного дослідження, адже «розроблення методів та засобів...» - це засіб досягнення мети.

2. У науковій новизні та у висновках є деякі неточності щодо формулювання назв запропонованих методів, зокрема «метод прогнозування...» та «метод аналізу...», «метод генерування...» та «метод дизайну...».

3. В роботі не згадується, що отримані результати використовуються в навчальному процесі та у комерційних розробках, хоча з актів впровадження це можна зрозуміти.

4. У літературному огляді потрібно акцентувати увагу на невирішених задачах, які вирішуватимуться надалі у роботі.

5. У п'ятому розділі описано архітектуру інформаційної системи, але не описано вимоги до технічного забезпечення, яке необхідне для забезпечення функціонування системи та виконання поставлених завдань.

6. В тексті дисертації зустрічаються стилістичні та граматичні помилки, англомовна лексика та аббревіатури.

7. Зауваження до списку використаних джерел: зустрічаються джерела, в яких не зазначено назви, наприклад джерела 24-26 та ін.; окремі посилання на літературні джерела 1985, 1988, 1995 років, наприклад джерела 47-50; автор використовує різні стилі оформлення списку джерел.

Зазначені зауваження не є критичними для успішного захисту та не знижують наукової та практичної цінності дисертації.

## **Висновки щодо дисертації в цілому**

Дисертаційна робота Гурбича О.В. «Методи та засоби аналізу хімічних сполук засобами штучного інтелекту» є закінченою кваліфікаційною науковою працею, яка містить раніше не захищені наукові положення. Одержані автором висновки та результати представляють наукову новизну і практичну цінність та є значущими для галузі інформаційних технологій та комп'ютерних наук, оскільки дозволяють більш ефективно розробляти нові лікарські речовини.



Дисертаційна робота Гурбича Олександра Вікторовича «Методи та засоби аналізу хімічних сполук засобами штучного інтелекту» за структурою, обсягом,

змістом, якістю викладу і оформлення відповідає вимогам “Порядку присудження ступеня доктора філософії та скасування рішення спеціалізованої вченої ради закладу вищої освіти, наукової установи про присудження ступеня доктора філософії”, затвердженого постановою Кабінету Міністрів України від 12 січня 2022 року №44. Автор дисертації, Гурбич Олександр Вікторович, заслуговує на присудження йому наукового ступеня доктора філософії за спеціальністю 122 - Комп'ютерні науки.

Офіційний опонент –

доктор технічних наук, професор,  
завідувач кафедри інформаційно-  
обчислювальних систем і управління  
Західноукраїнського національного  
університету

Мирослав КОМАР

|                                 |  |
|---------------------------------|--|
| Підпис                          |  |
| Завіряю:                        |  |
| НАЧАЛЬНИК<br>ЗАГАЛЬНОГО ВІДДІЛУ |  |

