

**Отзыв на автореферат
диссертационной работы Тимониной Дарьи Сергеевны
«Биоинформатический анализ суперсемейств белков на уровне 3D-
структурной организации с использованием методов машинного
обучения», представленной на соискание ученой степени кандидата
биологических наук по специальности 1.5.8 – «Математическая
биология, биоинформатика»**

Диссертационная работа Тимониной Д.С. посвящена выявлению и анализу структурных паттернов суперсемейств белков. Взаимосвязь структуры и свойств белковых молекул, в первую очередь, обладающих каталитической или избирательно связывающей функциями находится в центре внимания исследователей в течение многих десятилетий. До недавних пор такие исследования носили, в основном, 1D-характер (сравнение аминокислотных последовательностей и поиск корреляций с функцией) или отталкивались от таких параметров биомолекул, как доля вторичных структур, гидрофобность поверхности, значение изоэлектрической точки и т.п. Бурное развитие вычислительных средств, появление нейронных сетей и накопление огромных банков разнообразных детализированных данных привело к качественному изменению стратегии исследования, ее переходу на 3D-уровень анализа структурных мотивов.

Представленная работа как раз относится к разряду таких идеологически усовершенствованных исследований, в связи с чем ее актуальность не вызывает сомнений. В тексте автор предлагает новый подход к анализу структурных выравниваний гомологичных белков, основанный на выявлении 3D-специфических паттернов суперсемейства белков с помощью методов кластеризации. Выявление таких паттернов позволяет определить элементы структур белков, которые отвечают за их функциональное разнообразие, что в свою очередь, может быть использовано для инженерии белков с нужными свойствами. Автор предлагает метрику для ранжирования 3D-специфических паттернов, а также статистическую модель для отделения функционально-важных паттернов от случайных колебаний структуры. В автореферате автор

приводит примеры 3D-специфических паттернов, найденных в суперсемействах белков.

Автореферат диссертационной работы хорошо структурирован, содержит достаточное количество иллюстраций, которые помогают в понимании текста, а также приводит достаточное количество иллюстраций найденных 3D-специфических паттернов.

Новизна работы не вызывает сомнений, так как метод сравнения гомологичных белков, основанный на выявлении таких элементов структуры, которые совпадают внутри подсемейств и различаются между подсемействами, неизвестен.

Существенных замечаний по работе нет. Можно отметить некоторое количество повторов текста, встречающихся в пределах одного абзаца, что несколько осложняет чтение, но ни коим образом не снижает общей исключительно высокой оценки.

Автореферат диссертации Тимониной Дарьи Сергеевны полностью отвечает требованиям, предъявляемым к работам подобного типа, а автор заслуживает присуждения ученой степени кандидата биологических наук по специальности 1.5.8 - математическая биология, биоинформатика.

Профессор кафедры химической энзимологии химического факультета Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова», доктор химических наук по специальности 02.00.15 – химическая кинетика и катализ:

Александр Кириллович Гладилин

Адрес: 119991, Россия, Москва, Ленинские горы, д. 1,

Тел: +7 916 353 7033

E-mail: alexsandr.gladilin@school.msu.ru

Личную подпись
ЗАВЕРЯЮ:
Нач. отдела
химической