

Отзыв научного руководителя

диссертационной работы Тимониной Дарьи Сергеевны на тему: «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»

Тимонина Д.С. закончила механико-математический факультет МГУ с красным дипломом в 2017 г. и конкурсную аспирантуру на факультете биоинженерии и биоинформатики МГУ по специальности «математическая биология, биоинформатика» в 2021 г. Диссертационная работы была выполнена на базе отдела биокинетики научно-исследовательского института физико-химической биологии имени А.Н.Белозерского МГУ. Тимонина Д.С. участвовала в выполнении научных проектов РФФИ 20-07-00970_А и РФФИ 18-29-13060, где занималась исследованием взаимосвязи аминокислотной последовательности, структуры и функции ферментов с целью идентификации наиболее важных структурных паттернов в семействах белков и их возможной роли в проявлении функциональных свойств. Тимониной Д.С. было предложено понятие 3D-специфических паттернов, которые схожи внутри подсемейств белков, но различаются между ними и, как было предположено, отвечают за функциональное разнообразие белков суперсемейства. В диссертационной работе был разработан метод выявления 3D-специфических паттернов в суперсемействах белков, дальнейший анализ показал, что в ряде случаев есть литературные данные, свидетельствующие о роли определенных 3D-специфических паттернов в определении профиля субстратной специфичности ферментов суперсемейства, их термостабильности и каталитической активности. Таким образом, Тимониной Д.С. удалось показать, что вариабельность 3D-специфических паттернов является одним из путей, обеспечивающих функциональное разнообразие в суперсемействах белков. Установление роли конкретных 3D-специфических паттернов в проявлении функциональных свойств может помочь при аннотации малоизученных белков суперсемейства, а также при создании препаратов с заданными свойствами в белковой инженерии.

За время работы в отделе биокинетики и проведения диссертационного исследования Тимонина Д.С. зарекомендовала себя высокоорганизованным и увлеченным исследователем, способным к самостоятельной работе. Методы выявления и исследования 3D-специфических паттернов были опубликованы в научных статьях, соответствующее программное обеспечение выложено в открытый доступ: <http://biokinet.cmm.msu.ru/zebra3d>, <https://github.com/TimoninaDaria/Subfamily-Specific-Sidechain-Orientations>. В целом по теме диссертации опубликованы четыре научные статьи в рецензируемых научных журналах, результаты были представлены на пяти конференциях: МССМВ'19, МССМВ'21, «Ломоносов-2019», «Ломоносов-2021» и The 44th FEBS Congress. Считаю, что Тимонина Д.С. является высококвалифицированным специалистом и рекомендую присудить ей искомую степень кандидата биологических наук по специальности 1.5.8 – «математическая биология, биоинформатика».

Научный руководитель:

доктор химических наук,
профессор факультета биоинженерии
и биоинформатики Московского
государственного университета
имени М.В. Ломоносова
Тел.: +7 (495) 939-2355
E-mail: vytas@belozersky.msu.ru

Швядас Витаутас-Юозапас Каятоно