

Отзыв

на автореферат диссертации 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

Работа Тимониной Дарьи Сергеевны посвящена исследованию и разработке новых подходов к биоинформатическому анализу суперсемейств белков на уровне 3D-структурной организации с использованием методов машинного обучения. В работе рассматривается задача функциональной классификации суперсемейств белков на основе многоуровневого анализа структурных паттернов, а именно, исследуется возможность использования структурной информации о строении основной и боковой цепей для функциональной классификации ферментов суперсемейства и аннотации функционально важных участков.

В настоящее время методы функциональной классификации, основанные на анализе белков на уровне аминокислотных последовательностей и/или 3D структур, активно развиваются. В рецензируемой работе предлагается новое решение рассматриваемой задачи функциональной классификации суперсемейств белков. В основу предложенного решения принят иерархический подход к выделению паттернов на разных структурной организации белков. Использование для этих целей накопленных данных и их анализ методами машинного обучения позволяет существенно улучшить качество получаемых решений. Тема работы является актуальной и позволяет продвигаться на пути внедрения методов искусственного интеллекта в область биоинформатики.

Цели и задачи исследования четко сформулированы, Указанные в работе положения, выносимые на защиту, дают ясное представление о предлагаемых методах и моделях, разработанном программном обеспечении, предложенной методологии белкового дизайна.


Судя по автореферату, текст работы хорошо структурирован, изложен четко и понятно. Приведенный список цитируемых литературных источников, включающий 156 наименований, свидетельствует о большой аналитической работе, выполненной по анализу состояния исследований в изучаемой области. Приведенное в автореферате описание основного раздела работы раскрывает суть предложенных методов выявления и анализа структурных паттернов суперсемейств белков. В автореферате подробно описан реализованный алгоритм поиска 3D-специфических паттернов. Одним из этапов этого алгоритма является кластеризация участков структурного разнообразия основной и боковых цепей, выполненная с использованием алгоритма машинного обучения HDBSCAN. К достоинствам работы можно отнести проведенную апробацию предложенного нового подхода на широкой выборке суперсемейств белков. Разработанное программное обеспечение представлено для свободного доступа и может быть использовано для решения различных задач структурной биоинформатики. Результаты работы опубликованы в 3-ех статьях в журналах, рецензируемых в Web of Science и Scopus, одной статье в российском журнале из списка ВАК и доложены на 5-и конференциях.

Представленная Тимониной Дарьей Сергеевной работа выполнена на высоком профессиональном уровне. Можно отметить новаторский подход к решению поставленных задач, позволяющий объединить традиционные методы 3D структурного анализа белков на разных уровнях рассмотрения и современные алгоритмы машинного обучения. Разработанные методы имеют практическую значимость для поиска новых подходов к дизайну улучшенных биокатализаторов и поиску новых лекарств.

Выполненные программные разработки свидетельствуют о высоком уровне владения автором современных информационных технологий.

Анализ автореферата Тимониной Дарьи Сергеевны «Биоинформатический анализ суперсемейств белков на уровне 3D-структурной организации с использованием методов машинного обучения» позволяет сделать вывод о том, что данная работа представляет собой серьезное завершенное научное исследование, полностью отвечает требованиям, изложенным в «Положении о присуждении ученых степеней в Московском государственном университете имени М.В.Ломоносова», а автор Тимонина Дарья Сергеевна заслуживает присуждения ученой степени кандидата биологических наук по специальности 1.5.8 – математическая биология, биоинформатика.

Доцент факультета вычислительной математики и кибернетики МГУ имени М.В.Ломоносова, кандидат физико-математических наук по специальности 05.13.11 «Математическое и программное обеспечение вычислительных машин, комплексов и компьютерных сетей», ученое звание – доцент.

 Нина Николаевна Попова

Адрес:

125171, г. Москва, Россия.

ул. З.и

тел +7


Email:

15 ию

Подпись Н.Н.Поповой заверяю

Начальник отдела кад
имени М.В.Ломоносо

ной математики и кибернетики МГУ

 Петр Васильевич Денисов