

## ОТЗЫВ

на автореферат диссертации на соискание ученой степени кандидата химических наук **Фоминой Анастасии Дмитриевны** на тему «**Систематический ансамблевый докинг потенциальных лигандов главной протеазы SARS-CoV-2 и белка NS1 флавивирусов**» по специальности «1.4.16. Медицинская химия».

Диссертационная работа Анастасии Дмитриевны посвящена разработке автоматизированной процедуры виртуального скрининга методом ансамблевого докинга, основанной на стандартизированных подходах к отбору структур белковой мишени, генерации и обработке результатов докинга и ретроспективной валидации прогностической способности модели для применения в поиске потенциальных лигандов вирусных белков — главной протеазы SARS-CoV-2 и белка NS1 ортофлавивирусов. Работа обладает высокой актуальностью вследствие необходимости разработки новых противовирусных соединений ввиду угрозы для жизни и здоровья людей по всему миру, обусловленной вирусными инфекциями вообще, и, заболеваниями, вызываемыми ортофлавивирусами, в частности.

Работа обладает существенной новизной, поскольку разработан и реализован новый подход к систематическому отбору разнообразных ансамблей белковых структур, который позволяет учитывать среднеквадратичное отклонение атомов аминокислотных остатков. Обладающей практической значимостью является и разработанная автором диссертации база данных с информацией об экспериментальном исследовании активности низкомолекулярных соединений в отношении главной протеазы SARS-CoV-2 и других бетакоронавирусов.

Практическая значимость работы заключается в возможности применения разработанного алгоритма для виртуального скрининга низкомолекулярных соединений с целью отбора перспективных «хитов» для последующего экспериментального тестирования.

По результатам ознакомления с авторефератом возникло несколько замечаний, не снижающих общую значимость работы.

1. Основное содержание работы, с. 8. Рекомендуется указать порог для разрешения, который использовался для исключения из рассмотрения структур с недостаточным разрешением.
2. Рисунок 1. Предлагаю заменить «скачивание» на «загрузка» или «извлечение».
3. Предложение «Несколько функций от индивидуальных оценок докинга сравнивали, чтобы найти наиболее мощную» выглядит несколько неясным имеет смысл уточнить, чтобы было более понятно, какие именно функции использовались, как именно они

связаны с оценками молекулярного докинга, и что подразумевается под «найти наиболее мощную»?

4. Имеет смысл чуть подробнее описать, как формируется значение «оценки докинга»?
5. Точность классификационных моделей превышает точность виртуального скрининга методом ансамблевого докинга, и, более того, докинга в одну структуру. Возможно, стоит уточнить, что это утверждение приведено «в контексте» текущей работы с такими моделями машинного обучения и выборками, которые использовались.
6. С. 7, Фоминой А.Д – не хватает точки после инициала отчества.

Несмотря на приведенные незначительные замечания Автор диссертационной работы Фомина Анастасия Дмитриевна заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.16. Медицинская химия

Заведующий лабораторией анализа

больших данных для цифровой фармакологии, ИБМХ

Кандидат биологических наук,

О.А. Тарасова.



Почтовый адрес: 119021, г. Москва, ул. Погодинская, д. 10 с. 8

Рабочий телефон: +7 (499) 255 30 29; Рабочий e-mail: olga.tarasova@ibmc.msk.ru

Наименование организации: Федеральное государственное бюджетное научное учреждение «Научно-исследовательский институт биомедицинской химии имени В.Н. Ореховича»

13.10.2025

П

У