

## ОТЗЫВ

научного руководителя на диссертационную работу

Богдановой Елизаветы Александровны

**«Предсказание аффинности в белок-белковых комплексах на основе межатомных расстояний с использованием трёхмерной свёрточной нейронной сети»,  
представленную на соискание учёной степени кандидата биологических наук по  
специальности 1.5.8. – «Математическая биология, биоинформатика»**

Работа Е.А. Богдановой посвящена исследованию интерфейса взаимодействия белок-белковых комплексов и разработке нового метода для оценки их аффинности. Взаимодействия между белками играют ключевую роль в различных физиологических и патофизиологических процессах. Аффинность связывания является одной из основных характеристик этих взаимодействий, и ее определение имеет важное значение для разработки разнообразных биотехнологических препаратов и лекарств, включая противоопухолевые и противовирусные средства. Разработка алгоритмов для точной оценки энергии взаимодействия может значительно ускорить процесс оценки и отбора потенциальных белковых лекарств на ранних стадиях их разработки.

В ходе работы над диссертацией Богдановой Е.А. был разработан алгоритм анализа структурных моделей белок-белковых комплексов, позволяющий с точностью, превосходящей альтернативные методы, выполнять оценку энергии взаимодействия белков. В частности, данный алгоритм был применен для рассмотрения комплексов ряда экспериментально полученных структур комплексов RBD SARS-COV-2 и ACE2 человека, а также для анализа стабильности взаимодействий различных вариантов гистонов внутри нуклеосомы. Предполагается, что разработанный алгоритм найдёт широчайшее применение в молекулярном моделировании и вычислительной биологии в целом.

За время работы Богданова Е.А. зарекомендовала себя грамотным и квалифицированным сотрудником, отличающимся высокой дисциплиной, склонностью к саморазвитию и увлечённостью своей научной работой. Она хорошо знакома с литературой по теме своей работы, имеет большой опыт работы с различным программным обеспечением и вычислительными платформами. Она способна самостоятельно формулировать научные задачи, выбирать и реализовывать эффективные способы их решения, а также наглядно представлять получаемые результаты.

Богданова Е.А. хорошо показала себя в коллективной работе как при выполнении работ по своему направлению, так и при работе над смежными проектами. Результаты диссертационной работы Богдановой Е.А. опубликованы в ряде статей в реферируемых

журналах, в том числе в изданиях с высоким импакт-фактором, а также были доложены на конференциях.

Принимая во внимание вышесказанное, я рекомендую Богданову Елизавету Александровну к присуждению степени кандидата биологических наук по специальности 1.5.8. «Математическая биология, биоинформатика».

Научный руководитель:

кандидат физико-математических наук

доцент кафедры биоинженерии

биологического факультета

МГУ им. М. В. Ломоносова



Новоселецкий Валерий Николаевич

12 августа 2024 г.

