

Заключение диссертационного совета МГУ.015.10
по диссертации на соискание ученой степени кандидата наук

Решение диссертационного совета от 05.03.2025 года № 3

О присуждении Богдановой Елизавете Александровне, гражданке РФ, ученой степени кандидата биологических наук.

Диссертация «Предсказание аффинности в белок-белковых комплексах на основе межатомных расстояний с использованием трёхмерной свёрточной нейронной сети» по специальности 1.5.8. Математическая биология, биоинформатика принята к защите диссертационным советом 20.01.2025, протокол № 1.

Соискатель Богданова Елизавета Александровна, 1997 года рождения, в 2024 окончила аспирантуру биологического факультета Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова», срок обучения – 1.10.2020-30.09.2024 года.

Соискатель работает младшим научным сотрудником кафедры биоинженерии биологического факультета Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова».

Диссертация выполнена на кафедре биоинженерии биологического факультета Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова».

Научный руководитель:

Новоселецкий Валерий Николаевич, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры биоинженерии биологического факультета Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова».

Официальные оппоненты:

1. Коваленко Илья Борисович, доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник кафедры биофизики биологического факультета Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова»,

2. Хренова Мария Григорьевна, доктор физико-математических наук, профессор, профессор РАН, профессор кафедры физической химии химического факультета Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова»,

3. Попцова Мария Сергеевна, кандидат физико-математических наук, заведующий международной лабораторией биоинформатики Института искусственного интеллекта Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики» дали положительные отзывы на диссертацию.

Выбор официальных оппонентов обосновывался их высокой компетентностью в области математической биологии и биоинформатики, а также наличием большого количества публикаций в ведущих российских и зарубежных рецензируемых научных изданиях по тематике диссертации соискателя.

Соискатель имеет 7 опубликованных работ, в том числе по теме диссертации 4 работы, из них 3 статьи, опубликованные в рецензируемых научных изданиях, рекомендованных для защиты в диссертационном совете МГУ по специальности 1.5.8. Математическая биология, биоинформатика.

Основные публикации по теме диссертации (в скобках приведен объем публикации и вклад автора в печатных листах):

- **Bogdanova E. A.,** Novoseletsky V. N. ProBAN: Neural network algorithm for predicting binding affinity in protein–protein complexes // *Proteins: Structure, Function and Bioinformatics*. — 2024. — V. 92, № 9, P. 1127–1136, JIF (для WoS) = 3,2, Q1 - (1,2/1,1), DOI: 10.1002/prot.26700.
- **Bogdanova E. A.,** Novoseletsky V. N., Shaitan K. V. Binding affinity prediction in protein-protein complexes using convolutional neural network // *Advances in Neural Computation, Machine Learning, and Cognitive Research VII. NEUROINFORMATICS 2023*. — Vol. 1120 of *Studies in Computational Intelligence*. — Springer Cham: 2023. — P. 389–397, SJR (для Scopus)=0,21, Q4 - (1/0,85), DOI: 10.1007/978-3-031-44865-2_42.
- **Богданова Е. А.,** Чернухин А. В., Шайтан К. В., Новоселецкий В. Н. Оценка аффинности связывания в комплексах ACE2-RBD S-белка коронавируса с использованием сверточных нейронных сетей // *Биофизика*. — 2024. — Т. 69, № 5, P. 979–989, РИНЦ (для RSCI и ВАК/МГУ)=0,58, (1,6/0,8), DOI: 10.31857/S0006302924050053.

На автореферат диссертации дополнительных отзывов не поступало.

Диссертационный совет отмечает, что представленная диссертация на соискание ученой степени кандидата биологических наук является научно-квалификационной работой, в которой на основании выполненных автором исследований содержится решение задач, имеющих значение для развития математической биологии, биоинформатики, в частности

в области применения методов искусственного интеллекта для анализа аффинности белок-белковых взаимодействий.

Диссертация представляет собой самостоятельное законченное исследование, обладающее внутренним единством. Положения, выносимые на защиту, содержат новые научные результаты и свидетельствуют о личном вкладе автора в науку:

1. Трехмерная сверточная нейронная сеть ProBAN позволяет предсказывать значение аффинности связывания (константа диссоциации и свободная энергия Гиббса) для белок-белковых и белок-пептидных комплексов, используя в качестве входных данных их пространственные структуры.
2. Метод предобработки пространственных структур белок-белковых комплексов, основанный на локализации интерфейса связывания и выделении в отдельные каналы атомов, участвующих в образовании межмолекулярных контактов, учитывает важные типы взаимодействий между молекулами и сохраняет информацию об их пространственных характеристиках.
3. Нейросетевая модель ProBAN демонстрирует лучшее качество предсказания энергии связывания в белок-белковых комплексах по сравнению со всеми существующими альтернативными подходами в независимом тестировании на разнородных наборах комплексов (высоко- и низкоаффинные, нативные и мутантные формы).
4. Предсказательная модель ProBAN эффективна для оценки влияния точечных мутаций на белок-белковые взаимодействия, а также на стабильность образуемых белковыми молекулами комплексов.

На заседании 05.03.2025 года диссертационный совет принял решение присудить Богдановой Елизавете Александровне ученую степень кандидата биологических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 12 человек, из них докторов наук по специальности 1.5.8. Математическая биология, биоинформатика - 6, участвовавших в заседании, из 16 человек, входящих в состав совета, проголосовали: «за» – 12, «против» – 0, «недействительных бюллетеней» – 0.

Председатель совета, д.х.н., проф.

Швядас В. К.

Ученый секретарь совета, к.х.н.

Шаповалова И. В.

06.03.2025