

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, гражданину 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 № 2.

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 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, доцент Факультета компьютерных наук Федерального государственного бюджетного 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. Разработан новый алгоритм, основанный на трехмерной сверточной нейронной сети, предсказывающий значение аффинности связывания (константа диссоциации и свободная энергия Гиббса) для белок-белковых и белок-пептидных комплексов по их пространственным структурам.
2. Предложен новый метод предобработки пространственных структур белок-белковых комплексов, учитывающий различные типы контактов между молекулами, а также позволяющий сохранить информацию об их пространственных характеристиках.
3. В результате апробации на нескольких разнородных наборах комплексов (высоко- и низкоаффинные, нативные и мутантные формы комплексов) достигнуто лучшее качество предсказания энергии связывания в белок-белковых комплексах по сравнению со всеми существующими альтернативными подходами.
4. Предположено и в ходе тестирования алгоритма показано, что разработанная предсказательная модель способна оценивать влияние 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