

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации
Ерещенко Алексея Владимировича

«Применение графовых нейронных сетей для анализа молекулярных структур»,
представленной на соискание учёной степени кандидата технических наук по
специальности 1.2.1 «Искусственный интеллект и машинное обучение»

Диссертационная работа Ерещенко Алексея Владимировича на тему «Применение графовых нейронных сетей для анализа молекулярных структур» является законченной научно-квалификационной работой, посвященной актуальному научному направлению, а именно разработке и применению моделей искусственного интеллекта в медицинской химии. Реализованные в ходе проведенного исследования графовые нейронные сети были применены для решения таких задач, как поиск объемных сайтов связывания в белковых молекулах, аннотация пространства сайтов связывания в соответствии с биохимическими свойствами, а также предсказание таких свойств малых молекул, как растворимость и наличие ингибирующей активности против заданной мишени.

В автореферате указаны следующие ключевые научные результаты диссертационной работы:

1) Разработаны графовые нейронные сети для предсказания сайта связывания белковой молекулы на основе нового алгоритма, способного создавать объемное представление зоны связывания на поверхности молекулы. Было проведено сравнение алгоритма с существующими аналогами и показано преимущество разработанного алгоритма.

2) Разработана графовая нейронная сеть классификации пространства на поверхности белка в соответствии с экспертно разработанными типами. Реализованная графовая сеть была применена в рамках алгоритма разметки пространства поверхности белка, было проведено сравнение алгоритма с аналогами. Решение данной задачи с применением машинного обучения и графовых нейронных сетей было проведено впервые. Кроме того, была показана применимость оценок созданных нейросетей в качестве признакового описания пространства, которое может быть использовано для обучения иных моделей машинного обучения, решающих различные задачи медицинской химии.

3) Разработана графовая нейронная сеть, совмещающая представление малой органической молекулы в виде набора графов ее возможных трехмерных конформаций с ее физико-химическими дескрипторами, для предсказания наличия ингибирующей активности против заданных мишеней.

Практическая значимость работы подтверждается внедрением разработанных графовых нейронных сетей и использующих их алгоритмов в разрабатываемой программной платформе ФГУП «ВНИИА» по созданию лекарственных молекул. Кроме того, алгоритм предсказания наличия ингибирующей активности был применен для аннотации открытой библиотеки из более чем 80 000 соединений без известного профиля активности.

Есть небольшое замечание к стилю написания задач диссертационной работы на странице 4, которые больше похожи на формулировку выводов. В качестве рекомендации можно отметить, что сделанный в главе 1 сравнительный анализ был проведен на

экспертно разработанной выборке данных, не находящейся в открытом доступе. Представляло бы интерес также сравнить модели и на существующих открытых бенчмарках, используемых в других публикациях по схожим методам. Данные замечания носят рекомендательный характер и не снижают общей высокой оценки проделанной работы.

Автореферат последователен, структурирован, верно и полно отражает содержание диссертационной работы, работа соответствует целям и задачам исследования.

Считаю, что диссертационная работа «Применение графовых нейронных сетей для анализа молекулярных структур» Ерещенко Алексея Владимировича соответствует всем требованиям ВАК РФ, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата наук, а Ерещенко Алексей Владимирович заслуживает присуждения учёной степени кандидата технических наук по специальности 1.2.1 «Искусственный интеллект и машинное обучение».

Доктор биологических наук, профессор РАН
заведующий кафедрой биоинформатики Института биомедицины (МБФ) Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Российский Национальный Исследовательский Медицинский Университет им. Н.И. Пирогова» Министерства здравоохранения Российской Федерации
Лагунин Алексей Александрович

19.02.2026

Контактные данные:

Рабочий тел.: +7 (495) 434-35-21; рабочий e-mail: lagunin_aa@rsmu.ru

Адрес места работы: 117513, г. Москва, Островитянова ул., д. 1, стр.1; ФГАОУ ВО РНИМУ им. Н.И. Пирогова Минздрава России (Пироговский Университет), Институт биомедицины (МБФ)

Подпись сотрудника ФГАОУ ВО РНИМУ им. Н.И. Пирогова Минздрава России (Пироговский Университет), д.б.н., проф. РАН Лагунина А.А. удостоверяю

