ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА 24.1.224.03, СОЗДАННОГО НА БАЗЕ ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО УЧРЕЖДЕНИЯ «ФЕДЕРАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ЦЕНТР «ИНФОРМАТИКА И УПРАВЛЕНИЕ» РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК», ПО ДИССЕРТАЦИИ НА СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ КАНДИДАТА НАУК

Аттестационное дело № _____

Решение диссертационного совета 24.1.224.03 от 19.03.2026 г., №7

О присуждении Ерещенко Алексею Владимировичу, гражданину Российской Федерации, учёной степени кандидата технических наук.

Диссертация «Применение графовых нейронных сетей для анализа молекулярных структур» по специальности 1.2.1 — «Искусственный интеллект и машинное обучение» принята к защите 6 ноября 2025 г., протокол № 11, диссертационным советом 24.1.224.03 на базе Федерального государственного учреждения «Федеральный исследовательский центр «Информатика и управление» Российской академии наук» (ФИЦ ИУ РАН), 119333, г. Москва, ул. Вавилова, д. 44/2, созданным на основании приказа Министерства науки и высшего образования Российской Федерации № 1732/нк от 13.12.2022.

Соискатель Ерещенко Алексей Владимирович, дата рождения 25 августа 1994 года, в 2021 году окончил Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет)» по направлению 02.04.02 «Фундаментальная информатика и информационные технологии». С 2022 по 2025 г. обучался в очной аспирантуре ФИЦ ИУ РАН. В настоящее время работает в Федеральном государственном унитарном предприятии «Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики им. Н.Л. Духова» в должности научного сотрудника.

Диссертация выполнена в отделе №27 ФИЦ ИУ РАН.

Научный руководитель – Ревизников Дмитрий Леонидович, доктор физико-математических наук, профессор, профессор кафедры вычислительной математики и программирования Московского авиационного института.

Официальные оппоненты:

Куравский Лев Семёнович, доктор технических наук, профессор, декан факультета «Информационные технологии» Федерального государственного

бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный психолого-педагогический университет»;

Иванков Дмитрий Николаевич, кандидат физико-математических наук, старший преподаватель Центра био- и медицинских технологий Автономной некоммерческой образовательной организации высшего образования «Сколковский институт науки и технологий»

дали **положительные** отзывы на диссертацию.

Ведущая организация – Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт системного программирования им. В.П. Иванникова Российской академии наук (ИСП РАН) в своём положительном отзыве, подписанном Карпулевичем Евгением Андреевичем, кандидатом физико-математических наук, заведующим 30-го центра Цифровой экосистемы научного центра мирового уровня «Цифровой биодизайн и персонализированное здравоохранение» ИСП РАН, указала, что работа посвящена актуальной задаче создания алгоритмов искусственного интеллекта, основанных на графовом представлении данных, для анализа молекулярных структур, с целью их применения в области медицинской химии.

В отзыве отмечено, что Ерещенко А.В. предложены алгоритмы, основанные на графовых нейронных сетях, для решения различных задач медицинской химии, а именно поиск сайтов связывания белковых молекул, оценка их биохимической активности, предсказание фармацевтических свойств малых молекул и первичный анализ их возможных мишеней. Ключевыми результатами названы создание оригинального алгоритма и собственной нейросетевой архитектуры для поиска объемных сайтов связывания белковых молекул, разработка графовых нейросетевых моделей для классификации пространства поверхности трехмерной белковой структуры с использованием экспертно сформированных функциональных групп, демонстрация применимости оценок этих нейросетей для разработки и обучения других нейросетевых моделей, а также разработка нейросетевых алгоритмов предсказания определенных свойств малых молекул. Подчеркнута практическая значимость работы, подтвержденная эффективным внедрением предложенных моделей и алгоритмов в промышленную практику, а также их применением для оценки ингибирующей активности открытых наборов органических молекул.

В отзыве ведущей организации сформулирован ряд замечаний, не носящих принципиального характера и не снижающих общей положительной оценки диссертации. Отмечено, что диссертация удовлетворяет требованиям «Положения о присуждении ученых степеней», а Ерещенко А.В. заслуживает присуждения учёной степени кандидата технических наук по специальности 1.2.1 «Искусственный интеллект и машинное обучение».

Основные результаты диссертации опубликованы в 4 работах в рецензируемых изданиях из перечня ВАК и приравненных наукометрических баз, из которых три индексируются в Q1 Scopus/WoS. Кроме того, по результатам проведенной работы было зарегистрировано программное средство, был получен патент.

Недостоверные сведения об опубликованных соискателем работах в диссертации отсутствуют. Диссертация соответствует п. 14 Положения о присуждении учёных степеней. Автор подробно указал личный вклад в опубликованные в соавторстве работы.

Работы Ерещенко А.В. по теме диссертации:

1. Evteev, S.A., **Ereshchenko, A.V.**, Ivanenkov, Y.A. SiteRadar: Utilizing Graph Machine Learning for Precise Mapping of Protein-Ligand-Binding Sites // Journal of chemical information and modeling. – 2023. – Vol. 63 (4). – P. 1124–1132. DOI: 10.1021/acs.jcim.2c01413 **(WoS, Scopus)**
2. Evteev, S., **Ereshchenko, A.**, Adjugim, D., Vyacheslavov, A., Pastukhova, A., Malyshev, A., Terentiev, V. and Ivanenkov, Y. Skittles: GNN-Assisted Pseudo-Ligands Generation and Its Application for Binding Sites Classification and Affinity Prediction // Proteins. – 2025. – Vol. 93 (7). – P. 1269–1280. DOI: 10.1002/prot.26816 **(WoS, Scopus)**
3. Ivanenkov, Y., Evteev, S., Malyshev, A., Terentiev, V., Bezrukov, D., **Ereshchenko, A.**, Korzhenevskaya, A., Zagribelnyy, B., Shegai, P., Kaprin, A. AlphaFold for a medicinal chemist: tool or toy? // Russ. Chem. Rev. – 2024. – Vol. 93 (3). – P. RCR5107. DOI: 10.59761/RCR5107 **(RSCI, WoS, Scopus)**
4. **Ereshchenko A.V.** Applying machine learning for solubility prediction: comparing different representations of molecular data // Modelling and Data Analysis. – 2025. – Vol. 15 (1). – P. 35–50. DOI: 10.17759/mda.202515010

На автореферат поступили отзывы:

1.Лагунина Алексея Александровича, д.б.н., профессора РАН, заведующего кафедрой биоинформатики Института биомедицины (МБФ) ФГАОУ ВО «Российский национальный исследовательский медицинский университет имени Н.И. Пирогова»;

2.Тарасовой Ольги Александровны, к.б.н., заведующей лабораторией анализа больших данных для цифровой фармакологии ФГБНУ «Научно-исследовательский институт биомедицинской химии имени В.Н. Ореховича»;

3.Степаняна Ивана Викторовича, д.б.н., к.т.н., ведущего научного сотрудника лаборатории исследования биомеханических систем Института машиноведения им. А.А. Благонравова Российской академии наук;

4. Аристова Антона Олеговича, д.т.н., профессора кафедры автоматизированного проектирования и дизайна Университета науки и технологий МИСИС.

Все отзывы положительные, замечания носят рекомендательный характер, не являются принципиальными и не влияют на оценку теоретических и практических результатов диссертационной работы.

Имеется акт о внедрении, полученный от ФГУП «Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики им. Н.Л. Духова».

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается их достижениями в области искусственного интеллекта, биомедицинских технологий, что подтверждается их публикациями в авторитетных рецензируемых изданиях.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

разработан комплексный алгоритм с применением графовых нейронных сетей, кластеризации и формирования зон трехмерного пространства для поиска сайтов связывания белков, создающий по результату работы объемное представление участков связывания на поверхности молекулы. Показана эффективность алгоритма по сравнению с существующими решениями;

предложен алгоритм с применением графовых нейронных сетей для классификации пространства поверхности белка с использованием разработанных экспертами функциональных групп. Показана эффективность предложенного алгоритма по сравнению с существующими решениями;

показана применимость оценок графовых нейронных сетей классификации пространства для разработки и обучения других нейросетевых моделей, на примере решения задач предсказания свойств сайтов связывания, а также оценки сродства малых молекул к заданной белковой молекуле. Проведено сравнение данных моделей с аналогами;

разработаны алгоритмы, использующие графовые нейронные сети, предсказывающие ряд свойств малых молекул, в том числе растворимость и наличие ингибирующей активности против тех или иных белковых мишеней. Продемонстрировано преимущество разработанной графовой нейронной сети по сравнению с известными алгоритмами машинного обучения в решении этих задач.

Теоретическая значимость работы заключается в разработке методов графового представления трехмерных молекулярных структур и построения на этой основе графовых нейронных сетей для решения задач медицинской химии и разработки лекарств. Кроме того, предложено использование аннотаций трехмерного пространства на поверхности белковых молекул, полученных с помощью созданных в ходе проведенной работы графовых нейронных сетей, в роли дескрипторов, способных заменить или дополнить традиционные признаки при

обучении других нейросетевых моделей для решения релевантных задач в рассматриваемой области.

Практическая значимость исследования определяется созданием алгоритмов поиска объемных сайтов связывания белков, их аннотации в соответствии с функциональными свойствами, их классификации, а также алгоритма прогнозирования аффинности малых молекул. Алгоритмы внедрены в разрабатываемую программную платформу ФГУП «Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики имени Н.Л. Духова» по дизайну лекарственных средств, что подтверждено соответствующим актом. Реализованным алгоритмом по предсказанию наличия ингибирующей активности размечена крупная библиотека органических соединений, что имеет практическую значимость для специалистов предметной области.

Оценка достоверности результатов исследования выявила их воспроизводимость в различных условиях функционирования представленных решений. Результаты подтверждены их согласованностью с известным фактам и исследованиям в рассматриваемой предметной области, экспериментальной проверкой на созданных экспертами предметной области наборах данных, общепризнанных бенчмарках (Astex Diverse Set), а также сравнительным анализом разработанных моделей и алгоритмов с ведущими аналогами (Fpocket, PUResNet, AutoSite, BionoiNet, InteractionGraphNet, AutoDock Vina). Достоверность полученных результатов подтверждена апробацией на международных научных конференциях и публикациями в рецензируемых журналах.

Личный вклад соискателя в работах с соавторами заключается в следующем: в [1] соискателем была проведена следующая работа: анализ и обработка подготовленных экспертами для обучения данных, формирование обучающей и валидационной выборок, подготовка архитектуры нейросети, тестирование различных архитектур нейросетей, обучение моделей, подбор алгоритмов кластеризации, перебор гиперпараметров кластеризации, разметка комплексов в ходе независимого тестирования (включая применение алгоритмов сравнения). В [2] соискателем была проведена работа по анализу и обработке подготовленных экспертами для обучения данных для моделей аннотации сайтов связывания, формированию обучающей и валидационной выборок, подготовке архитектуры нейросети, тестированию различных архитектур нейросетей, обучению моделей. Также была проведена работа по доработке нейросети по предсказанию аффинности малой молекулы, дополнительных экспериментов по ее обучению, были проведены эксперименты по применению различного признакового описания и их влияния на итоговую точность модели. В [3]

соискателем была проведена работа по исследованию применяемых вычислительных решений и анализу алгоритма AlphaFold.

В ходе защиты диссертации были высказаны следующие замечания:

1. В главе 1 ограничением разработанного алгоритма поиска сайтов связывания указана скорость расчетов. Было бы целесообразно привести сравнение скорости работы алгоритма с рассмотренными в работе аналогами.

2. В главе 2 представлена архитектура графовой нейронной сети, являющейся модификацией архитектуры, представленной в главе 1. Было бы целесообразно сравнить ее эффективность с реализованной в главе 1 нейросетью в рамках рассматриваемой в главе 2 задачи.

3. В главе 3 целесообразно было бы обучить модель, не использующую данные о трехмерной структуре молекулы, в рамках решения задачи предсказания наличия ингибирующей активности, для оценки вклада трехмерных данных.

Соискатель Ерещенко А.В. ответил на заданные вопросы и согласился с замечаниями, указанными ему в ходе заседания.

На заседании 19 марта 2026 г. диссертационный совет принял решение присудить Ерещенко Алексею Владимировичу учёную степень кандидата технических наук за развитие методов искусственного интеллекта в анализе молекулярных структур и решении задач медицинской химии.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 23 человек, из них 6 докторов наук по специальности 1.2.1 «Искусственный интеллект и машинное обучение» (технические науки), участвовавших в заседании, из 29 человек, входящих в состав совета, дополнительно введены на разовую защиту 0 человек, проголосовали: за – 22, против – 0, недействительных бюллетеней 1.

Председатель
диссертационного совета 24.1.224.03, д.ф.-м.н. Воронцов К.В.

Учёный секретарь
диссертационного совета 24.1.224.03, к.т.н. Рейер И.А.

19 марта 2026 г.