

## 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»

Диссертационное исследование Ерещенко А.В. посвящено применению и разработке моделей искусственного интеллекта на основании графовых нейронных сетей для работы с органическими молекулярными структурами. Практической сферой применения результатов работы является медицинская химия, а именно разработка лекарственных средств. Реализованные в ходе проведенной исследовательской работы алгоритмы были использованы в таких направлениях, как поиск сайтов связывания в белковых молекулах, оценка биохимической активности пространства на поверхности белковой молекулы, а также предсказание свойств малых молекул.

Рассматриваемая научная область и сфера применения являются перспективными для создания и внедрения новых вычислительных методов, использующих искусственный интеллект. Таким образом, диссертационная работа посвящена актуальному научному направлению.

Научная новизна работы заключается в разработке и экспериментальной валидации алгоритмов на основании графовых нейронных сетей, архитектура которых также была разработана соискателем. В частности, были созданы графовые нейронные сети для классификации пространства с целью определения его возможной принадлежности к сайту связывания на поверхности белка. Данные нейросети были интегрированы в рамках нового комплексного алгоритма по поиску и ранжированию объемных сайтов связывания. Кроме того, были разработаны нейронные сети для классификации пространства на поверхности белка с помощью экспертно разработанных физико-химических типов. Отдельно стоит выделить, что была экспериментально протестирована возможность использования данной нейросетевой разметки в качестве дескрипторов для обучения других нейросетевых моделей: по результату данного эксперимента были успешно созданы графовые нейронные сети для предсказания свойств сайтов связывания, а также для предсказания аффинности малой молекулы к ее белковому окружению. Также в ходе данной работы была реализована графовая нейронная сеть, способная использовать набор трехмерных конформаций малой молекулы в сочетании с ее табличными дескрипторами для предсказания возможности наличия ингибирующей активности против ряда белковых мишеней.

Реализованные в ходе проведенной исследовательской работы алгоритмы были успешно внедрены в программной платформе ФГУП «ВНИИА» по разработке лекарственных молекул, что подтверждает практическую значимость работы. Стоит отметить, что модель предсказания наличия ингибирующей активности была использована для классификации открытой библиотеки из 81 515 структур органических малых молекул, которые ранее не были размечены, что также обладает практической ценностью.

В качестве замечания можно отметить, что было бы целесообразно сравнить модель предсказания наличия ингибирующей активности, которая представлена в главе 3, с существующими и опубликованными моделями, направленными на решение данной задачи. Данное замечание носит рекомендательный характер и не снижает высокую оценку представленной работы.

Диссертационная работа Ерещенко А.В. на тему «Применение графовых нейронных сетей для анализа молекулярных структур» является законченной научно-квалификационной работой, посвященной актуальной теме, и обладает научной новизной и практической значимостью. Основные результаты работы были представлены на тематических конференциях и опубликованы в научных изданиях, индексируемых в Scopus и Web of Science. Работа соответствует поставленным целям и задачам исследования, а автореферат верно и полно отражает ее содержание.

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

Доктор биологических наук, кандидат технических наук,  
Ведущий научный сотрудник лаборатории исследования биомеханических систем  
Степанян Иван Викторович  
Электронная почта: [neugocomp.pro@gmail.com](mailto:neugocomp.pro@gmail.com)

  
24.02.2026

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки  
Институт машиноведения им. А.А. Благонравова Российской академии наук  
1001000, Москва, Малый Харитоньевский переулок, д.4  
Телефон: 8 (495) 628-87-30  
Электронная почта: [info@imash.ru](mailto:info@imash.ru)

Подпись Степаняна И.В. заверяю

*И.О. Директор*  *Розушкин А.В.*