

ОТЗЫВ НАУЧНОГО РУКОВОДИТЕЛЯ

на диссертационную работу Ерещенко Алексея Владимировича «Применение графовых нейронных сетей для анализа молекулярных структур», представленную на соискание ученой степени кандидата технических наук по специальности 1.2.1 — Искусственный интеллект и машинное обучение

Ерещенко Алексей Владимирович после окончания в 2021 году магистратуры Московского авиационного института по образовательной программе «Машинное обучение и управление большими данными» поступил в аспирантуру Федерального исследовательского центра «Информатика и управление» РАН по научной специальности 1.2.1 — «Искусственный интеллект и машинное обучение». В ходе обучения в аспирантуре подготовил диссертацию на тему «Применение графовых нейронных сетей для анализа молекулярных структур».

Актуальность диссертационной работы обусловлена важностью автоматизации разработки новых лекарственных молекул. Поскольку процесс разработки является многоэтапным и дорогостоящим, важную роль играют методы компьютерного моделирования. Применение методов машинного обучения позволяет существенно ускорить такие стадии разработки лекарств, как поиск сайтов связывания, выявления свойств сайта связывания, оценки свойств малых молекул. В работе сделан акцент на графовых нейронных сетях, обладающих высокой гибкостью за счет реализации различных способов агрегации данных на вершинах, что является принципиальным в задачах рассматриваемого класса.

В работе получены следующие основные результаты:

предложен алгоритм поиска сайтов связывания белковых молекул с применением графовых нейронных сетей и графового представления трехмерной структуры белка, продемонстрирована более высокая точность поиска сайтов связывания данного алгоритма по сравнению с известными алгоритмами, применяемыми в данной области;

разработан алгоритм аннотации сайтов связывания белковых молекул с применением графовых нейронных сетей и графового представления трехмерной структуры белка, продемонстрирована более высокая точность аннотации данного алгоритма по сравнению с распространенными алгоритмами, применяемыми в данной области;

продемонстрирована применимость оценок, генерируемых предложенным алгоритмом, в качестве признакового описания пространства. Показано, что модели, обученные на подобном описании, демонстрируют сравнимую или превосходящую точность по сравнению с существующими аналогами;

предложены алгоритмы предсказания свойств малых молекул, а именно ингибирующую активность против тех или иных мишеней, а также растворимость, с применением графовых нейронных сетей и графового представления молекулы;

продемонстрировано преимущество графовой нейронной сети по сравнению с известными алгоритмами машинного обучения в задаче предсказания наличия ингибирующей активности против заданной мишени.

Результаты диссертационной работы регулярно докладывались на национальных и международных научных конференциях, опубликованы в ведущих научных изданиях.

В целом за время работы над диссертацией Ерещенко А.В. проявил высокую научную квалификацию, способность самостоятельно ставить и решать сложные исследовательские задачи, уверенное владение современным аппаратом машинного обучения и анализа данных.

Высокая квалификация в области разработки систем машинного обучения, а также опыт проведения междисциплинарных исследований, позволили Ерещенко А.В. интегрировать результаты работы в отраслевые технические решения Федерального государственного унитарного предприятия «Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики им. Н.Л. Духова» (ФГУП «ВНИИА»)

Диссертационная работа Ерещенко А.В. «Применение графовых нейронных сетей для анализа молекулярных структур» является законченной самостоятельной научно-квалификационной работой, содержащей новые научные результаты. Результаты диссертации, выносимые на защиту, получены лично автором.

Диссертационная работа Ерещенко А.В. удовлетворяет всем требованиям, предъявляемым ВАК к диссертациям, представляемым на соискание учёной степени кандидата технических наук по специальности 1.2.1 — Искусственный интеллект и машинное обучение. Диссертант Ерещенко А.В. является квалифицированным специалистом по данной специальности и заслуживает присуждения ему учёной степени кандидата технических наук.

Доктор физико-математических наук,
профессор, профессор кафедры
вычислительной математики и
программирования Московского
авиационного института, МАИ

эл. почта: reviznikov@mai.ru

Ревизников Дмитрий Леонидович

27 июня 2025 г.



Подпись Д.Л. Ревизникова удостоверяю.

Директор дирекции института №8
«Компьютерные науки и прикладная
математика» Московского авиационного
института, МАИ

