

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Казанцева Федора Владимировича «**Интегрированная информационно-компьютерная платформа для исследования молекулярно-генетических систем**», представленной на соискание степени кандидата биологических наук по специальности 03.01.09. -математическая биология, биоинформатика

В настоящее время в биологических науках накоплен большой объем информации о законах взаимодействия простых компонентов молекулярно-биологических систем, formalизованных в математическом виде, оценены параметры этих взаимодействий. Основываясь на этой информации, исследователи из блоков простых элементарных взаимодействий могут строить, математически formalизовать и исследовать сложные многоуровневые молекулярно-биологические системы. Подобный подход позволяет вычленить и предсказать поведение сложных систем и вычленить ключевые звенья, даже небольшие воздействия на которые будут менять поведение всей системы в целом. Применение подобного подхода в анализе сложных биосистем позволяет заранее предсказать направления экспериментальных исследований и (или) корректно интерпретировать результаты опытов и наблюдений.

Работа Ф. В. Казанцева посвящена актуальной теме – разработка комплексной информационной системы, упрощающей широкому кругу исследователей проведение анализа сложных молекулярно-биологических систем. В процессе работы автором была проведена модификация пакета программ SiBML и адаптация вычислений на высокопроизводительных вычислительных машинах. С применением разработанных программных средств проведен анализ молекулярно-генетических систем некоторых видов бактерий, животных и растений. Разработана база данных МАММОTh для хранения элементарных блоков молекулярно-генетических систем, обеспечивающая возможность генерации комплексных сложных моделей.

В процессе работы Ф. В. Казанцевым были решены задачи: разработка среды моделирования молекулярно-генетических систем с использованием высокопроизводительных вычислительных систем, состоящая из модуля MGSmodeller; проведена апробация среды на моделях ряда молекулярно-генетических систем бактерий *Geobacillus* spp. и стволовых клеток *Mus musculus*; разработан интернет-ресурс МАММОTh – структурированное хранилище математических моделей элементарных блоков молекулярно-генетических систем и система MGSGenerator – генератор описания математической модели на основе ресурса МАММОTh; с использованием вышеперечисленных средств разработана модель потока ауксина в корне растений *A. thaliana*.

Материал в автореферате изложен последовательно, логично и аргументированно. Иллюстративный материал позволяет сделать представления о структуре программного комплекса и результатах модельных экспериментов.

Вместе с тем, автореферат Ф. В. Казанцева имеет ряд недостатков:

- 1) Раздел «Личный вклад автора» содержит развернутое описание роли автора в разработке и исследовании тестовых моделей молекулярно-генетических систем, но не содержит развернутого описания вклада автора в разработку блоков программного комплекса MGSmodeller, МАММОTh и MGSGenerator.
- 2) Автореферат не содержит информации о перечне информационных технологий (пакетов прикладных программ, языков программирования, сред разработки, систем управления базами данных и т. п.), которые использовались при разработке представленной программной платформы. Это затрудняет читателю автореферата возможность сделать адекватные выводы о квалификации автора.
- 3) В автореферате указано (страница 6 второй абзац), что с помощью среды моделирования MGSmodeller производился подбор параметров при адаптации моделей некоторых процессов у *Geobacillus* spp. и *Mus musculus* к реальным данным. При этом

непонятно, содержит ли MGModeller встроенные математические - вычислительные методы (метод градиентного спуска, байесовское моделирование и т. п.) для проведения этой адаптации. Возможно ли получение информации о функциях распределения параметров, определяющих соответствие модели реальным данным? Или адаптация параметров делалась простым перебором значений?

Тем не менее, актуальность, научная новизна и практическая значимость работы Ф. В. Казанцева несомненны. Результаты диссертации, представленные в автореферате, основаны на современном научном уровне и представляют собой законченное исследование. Автореферат диссертации составлен с соблюдением установленных требований, дает адекватное представление о работе. Основные положения проведенных исследований нашли отражение в 11 публикациях в рецензируемых научных журналах, индексируемых базами данных WoS, Scopus и РИНЦ. Результаты работы докладывались на Российских и международных конференциях.

Таким образом, полученные результаты соответствуют уровню кандидатской диссертации, а ее автор заслуживает присуждения степени кандидата биологических наук по рассматриваемой специальности.

Отзыв составил к.б.н., с.н.с. лаб. геносистематики ФГБУН Лимнологического института СО РАН Букин Юрий Сергеевич

16.09.2020г. *Ю.Букин*

Почтовый адрес 664033 г. Иркутск, ул Улан Баторская - 3, а/я 278.

Подпись к.б.н., с.н.с. лаб. геносистематики
Ю.С. Букина заверяю
ученый секретарь ФГБУН
Лимнологического института СО РАН
к.б.н. Н.В Максимова

