

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Бизюковой Надежды Юрьевны
**«Формирование знаний о биологической активности
низкомолекулярных органических соединений»**, представленной на
соискание ученой степени кандидата биологических наук по специальности
1.5.8 – Математическая биология, биоинформатика.

Стремительный рост числа биомедицинских публикаций привел к ситуации, когда традиционные подходы к систематическому обзору литературы становятся практически невозможными без привлечения методов автоматизированного анализа текстов. Особенно остро эта проблема стоит в области медицинской химии и фармакологии, где информация о биологической активности низкомолекулярных соединений критически важна для разработки новых лекарственных препаратов, репозиционирования известных молекул и понимания механизмов действия. Диссертационная работа Бизюковой Надежды Юрьевны посвящена разработке и реализации метода автоматизированного извлечения сведений о биологической активности низкомолекулярных органических соединений на основе анализа текстов научных публикаций. Актуальность работы не вызывает сомнений и полностью соответствует современным тенденциям развития биоинформатики и цифровой медицины.

Автором использован широкий спектр современных методов интеллектуального анализа текстов – от классических (CRF, метод опорных векторов, случайный лес) до нейросетевых подходов (LSTM, HunFlair). Выбор методов обоснован спецификой решаемых задач и подтвержден экспериментальными сравнениями. Сопоставление извлеченных сведений с данными фактографической базы ChEMBL показало согласованность результатов и выявило дополнительные связи, отсутствующие в существующих ресурсах, что подтверждает не только корректность, но и дополнительную ценность разработанного метода.

В работе рассмотрены вопросы формирования коллекций биомедицинских текстов, разработки методов распознавания наименований биомедицинских объектов и извлечения ассоциаций между ними, а также создания базы данных, обеспечивающей структурированное представление сведений о биологической активности соединений. Автором предложен интегральный подход, объединяющий все эти этапы.

Научная новизна работы заключается в разработке интегрального метода, обеспечивающего системное извлечение и структурирование сведений о биологической активности соединений. Представлен

интегрированный подход, позволяющий интерпретировать результаты извлечения взаимосвязей, который обладает потенциалом масштабирования на иные биомедицинские задачи, за пределами биологической активности химических соединений.

Автор продемонстрировал высокий уровень владения современными методами анализа текстов и машинного обучения. Используемые методы соответствуют поставленным задачам, а достоверность результатов подтверждается применением репрезентативных и всесторонних коллекций текстов, использованием внешних онтологий и сравнением с данными фактографических баз, в частности ChEMBL. Полученные результаты представляются обоснованными и не вызывают сомнений.

Результаты исследования опубликованы в 17 работах, включая 6 статей в рецензируемых научных журналах и 11 публикаций в материалах конференций. Основные положения диссертации были представлены на ряде российских и международных научных мероприятий, включая симпозиумы «Биоинформатика и компьютерное конструирование лекарств», конференции MedChem-Russia, BGRS/SB, ACS Fall и другие. Автореферат написан грамотным научным языком, логично структурирован и полно отражает содержание диссертационной работы.

При общей положительной оценке работы следует отметить некоторые замечания. Было бы интересно подробнее рассмотреть функциональные возможности разработанного веб-интерфейса как практического аспекта результатов представленной работы.

В таблице 1 используется термин «Биологическая активность соединений, ингибирующих вирусные инфекции». Это не корректный термин - соединение не может напрямую ингибировать «инфекцию» как процесс. Оно может ингибировать вирус (его репликацию, проникновение в клетку и т.д.) или специфические мишени (ферменты, рецепторы), что в итоге приводит к подавлению инфекции.

В работе упоминается обработка коллекции из более чем 400 тысяч публикаций по противовирусной активности. Каковы временные и вычислительные затраты на полный цикл анализа (от загрузки текстов до нормализованных ассоциаций) для такого объема данных? Это важный практический аспект для потенциальных пользователей метода.

По содержанию автореферата можно заключить, что диссертационная работа Бизюковой Надежды Юрьевны «Формирование

знаний о биологической активности низкомолекулярных органических соединений» представляет собой законченное исследование, содержащее научно обоснованные и практически значимые результаты. Работа соответствует требованиям пункта 9 «Положения о порядке присуждения ученых степеней», утвержденного Постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842 (с последующими изменениями). Автор заслуживает присуждения ученой степени кандидата биологических наук по специальности 1.5.8 – Математическая биология, биоинформатика.

Доктор химических наук, ведущий научный сотрудник лаборатории физиологически активных веществ НИОХ СО РАН

Яровая Ольга Ивановна

Контактная информация:

630090 г. Новосибирск, проспект Академика Лаврентьева, д. 9,
Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Новосибирский институт органической химии им. Н.Н. Ворожцова
Сибирского отделения Российской академии наук (НИОХ СО РАН)

Телефон: (383)330-88-50, +7913 9094763

Факс: (383)330-97-52

e-mail: ooo@nioch.nsc.ru (Яровая О.И.)

Подпись Яровой О.И. заверяю:

Ученый секретарь НИОХ СО РАН



К.х.н. Бредихин Р.А.

«06» апреля 2026 г.