



**Учреждение Российской академии наук
Центр теоретических проблем физико-химической фармакологии РАН
ЦТП ФХФ РАН**

«02 декабря 2016 г.»

Москва, 119991, ул. Косыгина 4, т. 938-25-33

№ 148-ОТ

ОТЗЫВ

на автореферат Сергуничева А.А. «Методы вычислительного анализа метаболических моделей для интерпретации транскриптомных и метаболомных данных»,
представленной на соискание ученой степени
кандидата технических наук
по специальности "05.13.18 – математическое моделирование,
численные методы и комплексы программ"

Работа посвящена актуальной и новой теме – разработке новых более эффективных методов анализа экспериментальных данных по регуляции метаболизма. Быстрое развитие транскриптомики и метаболомики делает невозможным анализ старыми методами быстро возрастающего объема знаний на эту тему.

Главными результатами работы, на мой взгляд, является разработка трех методов анализа метаболических сетей и созданы программы, эффективно реализующие эти методы. Метод FGSEA (Fast Gene Set Enrichment Analysis) предназначен для проведения анализа представленности функциональных наборов генов. Он позволяет идентифицировать регулируемые метаболические пути, используя только информацию о множестве возможных реакций, их регуляции генами и их участии в метаболических путях. За счет использования разработанного алгоритма кумулятивного вычисления GSEA-статистики представленности, он позволяет достичь ускорения в сотни раз по сравнению с существующим методом GSEA.

Метод GAM (Genes And Metabolites) предназначен для выделения активных метаболических модулей с помощью анализа сети метаболических реакций. Он позволяет, используя информацию о связях реакций в метаболической модели, идентифицировать регулируемые метаболические пути и их взаимосвязи. Главным достижением этого метода является возможность использования нескольких вариантов представления сети реакций в виде графа в зависимости от входных данных.

Метод GATOM для выделения активных метаболических модулей использует реальные биохимические атомные модели промежуточных метаболитов и графы переходов между ними. Он позволяет идентифицировать регулируемые метаболические пути и их взаимосвязи, используя информацию о внутренней атомарной структуре метаболитов.

Приведенные в работе примеры использования разработанных методов показывают высокую эффективность созданных диссертантом методов и программ.

В целом, рецензируемая работа является хорошим примером качественно сделанного современного исследования. Автор внес в науку хороший вклад, показал себя зрелым ученым, готовым к самостоятельной работе и безусловно заслуживает присуждения искомой степени.

Директор Центра,
доктор биологических наук, профессор



Ф.И. Атауллаханов