**ОТЗЫВ**

на выпускную квалификационную работу

на тему “**Вычислительные методы при идентификации малых молекул по масс-спектрам**”

выполненную

**Миловым Артёмом Игоревичем**

Природные соединения имеют множество применений в медицине, фармакологии и т.д. Многие из них обладают сравнительно малой молекулярной массой, в связи с чем их относят к т.н. *малым молекулам*. Для идентификации природных соединений в биологических образцах широко применяется высокопроизводительная тандемная масс-спектрометрия. Большие объемы данных, генерируемые в ходе масс-спектрометрического анализа, требуют применения соответствующих вычислительных методов. В настоящее время исследователям доступен ряд вычислительных инструментов для идентификации экспериментальных масс-спектров путем сравнения их с базой данных химических соединений. Каждый из этих инструментов имеет свои ограничения, обусловленные применяемыми моделями и набором обучающих данных.

Целью работы А.И. Милова являлось создание программного инструмента для сравнительной оценки качества работы инструментов идентификации масс-спектров малых молекул. В программе реализовано два режима: в первом для вычисления метрик используется набор аннотированных данных, где для каждого масс-спектра известен правильный ответ, во втором режиме реализован подход целевой-ложный (*target-decoy*). Последний подход крайне распространен в протеомике, где для оценки доли ложноположительных идентификаций формируется искусственная база данных химических соединений (в случае протеомики – пептидов), каждая идентификация которыми считается ложной. Разнообразие химических структур малых молекул делает построение такой базы данных нетривиальной задачей. Поэтому в работе используется предложенный ранее альтернативный подход, основанный на создании искусственного набора спектров.

Работа была выполнена А.И. Миловым самостоятельно и добросовестно. В ходе работы автор продемонстрировал знания в области статистики, теории алгоритмов и разработки программного обеспечения. Полученные результаты могут служить основой для научной публикации.

Считаю, что выпускная квалификационная работа А.И. Милова заслуживает оценки “отлично”, а ее автор заслуживает присуждения степени бакалавра.

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| Научный руководитель, д.ф.-м.н.,  доцент факультета МКН СПбГУ |  | А.В. Степанов |