**ОТЗЫВ**

на выпускную квалификационную работу

на тему “**Вариативная идентификация природных соединений по масс-спектрам**”

выполненную

**Вяткиным Никитой Сергеевичем**

Работа Н.С. Вяткина посвящена важной проблеме в метаболомике – поиску новых природных соединений по данным масс-спектрометрии. Многие природные соединения обладают важными биологическими активностями и входят в состав современных лекарственных препаратов, включая антибиотики, противовирусные и противораковые препараты. Однако поиск новых соединений данного класса затруднен их большим химическим разнообразием, малой молекулярной массой и крайне низкой концентрацией в природных образцах. Высокая чувствительность масс-спектрометрии позволяет детектировать природные соединения, однако последующая интерпретация данных, определение химической формулы и структуры новых соединений, а также отсеивание уже известных молекул является сложной вычислительной задачей и требуют разработки специализированных программных инструментов.

Н.С. Вяткин быстро освоил новую для себя предметную область и ведущие программные инструменты в ней и смог внести заметный вклад в их развитие. Так основным результатом работы стало существенное расширение функциональности VarQuest – ведущего инструмента для высокопроизводительной идентификации новых вариантов известных природных соединений. В то время как исходная версия VarQuest позволяла находить молекулы отличающиеся от известных в максимум одной аминокислоте, созданная в рамках ВКР версия позволяет идентифицировать соединения с двумя модификациями/мутациями, то есть осуществляет поиск в пространстве на порядок большем, чем исходная программа. Было проведено тщательное тестирование нового инструмента на размеченных экспертами данных масс-спектрометрии и продемонстрированна его корректность и функциональное преимущество над исходной версией программы. Кроме того, Н.С. Вяткиным был получен и ряд любопытных дополнительных результатов: создан новый подход к фильтрации молекул-кандидатов (позволил улучшить точность работы обеих версий программы VarQuest) и разработан эффективный алгоритм проверки графов на изоморфизм для графов пептидных природных соединений (использовался для проверки корректности работы программ и оптимизации их параметров).

Во время выполнения работы, Н.С. Вяткин проявил себя как самостоятельный и дисциплинированный исследователь, способный достигать поставленных задач в надлежащие сроки и с высоким качеством. Он как предлагал и реализовывал собственные идеи, так и тщательно прислушивался к предложениям и замечаниям научного руководителя. Считаю, что данная работа заслуживает оценки “отлично”, а Н.С. Вяткин присвоения степени бакалавра.

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