



Директор
Інституту фізики НАН України
акад. НАН України
Бондар М.В.

В И Т Я Г

з протоколу № 5 від 29 квітня 2026 р.
засідання розширеного наукового семінару відділу фізики біологічних систем
Інституту фізики НАН України

ПРИСУТНІ:

З відділу фізики біологічних систем Інституту фізики НАН України:

Головуючий на семінарі - завідувач відділу, д.ф.-м.н., професор
Довбешко Галина Іванівна

д.ф.-м.н., провідний науковий співробітник Єсилевський Семен Олександрович

д.ф.-м.н., провідний науковий співробітник Гнатюк Олена Петрівна

к.ф.-м.н. старший науковий співробітник Оленчук Марина Володимирівна

к.х.н., науковий співробітник Губарені Євген Віталійович

к.х.н., старший науковий співробітник Барабаш Юрій Маркович

доктор філософії в галузі фізики, молодший науковий співробітник
Монастирський Григорій Павлович

Аспіранти: Войціцький Тарас, Колесів Ігор, Ісоков Тимур, Савченко Ілля

ЗАПРОШЕНІ:

д.ф.-м.н. доцент Ніколаєнко Тимофій Юрійович, Київський національний
університет ім. Тараса Шевченка

З інших структурних підрозділів Інституту фізики НАН України

д.ф.-м.н., провідний науковий співробітник Габович Олександр Маркович,
Інституту фізики НАН України

д.ф.-м.н., провідний науковий співробітник Войтенко Олександр Іванович,

З інших структурних підрозділів НАН України

д.ф.-м.н., завідувач відділу молекулярної біофізики Степаньян Степан
Григорович, Фізико-технічний інститут низьких температур ім. Б. І. Веркіна НАН
України

д.ф.-м.н., провідний науковий співробітник Косевич Марина Вадимівна, Фізико-технічний інститут низьких температур ім. Б. І. Веркіна НАН України

д.ф.-м.н., Перепелиця Сергій Миколайович, директор Інституту теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова НАН України

З присутніх докторів фізико-математичних наук – 9 (у т.ч. 1 - професор, 5 - старший науковий співробітник, 2 - старший дослідник, 1 - доцент), 1 кандидат фізико-математичних наук, 2 кандидати хімічних наук, 1 доктор філософії – фахівці за профілем поданої на розгляд дисертації.

ПОРЯДОК ДЕННИЙ:

Обговорення дисертаційної роботи аспіранта Войціцького Тараса Васильовича на тему: «Визначення параметрів нековалентних взаємодій малих органічних молекул із протеїнами на основі моделей машинного навчання», поданої на здобуття ступеня доктора філософії за спеціальністю 104 – Фізика та астрономія, та прийняття рішення щодо рекомендації дисертації до попереднього розгляду у разовій спеціалізованій вченій раді.

СЛУХАЛИ:

Доповідь аспіранта відділу фізики біологічних систем Інституту фізики НАН України, Войціцького Тараса Васильовича, за матеріалами дисертаційної роботи «Визначення параметрів нековалентних взаємодій малих органічних молекул із протеїнами на основі моделей машинного навчання», поданої на здобуття ступеня доктора філософії з галузі знань 10 «Природничі науки» за спеціальністю 104 «Фізика та астрономія».

Тема дисертаційної роботи була затверджена рішенням Вченої ради Інституту фізики НАН України Протокол №2 від «23» лютого 2023 року, уточнена та остаточно затверджена рішенням Вченої ради Протокол №5 від «16» квітня 2026 року.

Науковий керівник – д.ф.-м.н., пров. н. с. відділу фізики біологічних систем Інституту фізики НАН України Єсилевський Семен Олександрович.

Доповідач обґрунтував вибір теми дослідження, визначив мету та завдання, об'єкт та предмет дослідження, методи дослідження, вказав наукову новизну отриманих результатів, науково-практичну значущість роботи, виклав основні наукові положення та висновки, що виносяться на захист.

У своїй доповіді дисертант детально представив основні результати дисертаційної роботи «Визначення параметрів нековалентних взаємодій малих органічних молекул із протеїнами на основі моделей машинного навчання».

На початку він обґрунтував актуальність обраної тематики, підкресливши критичну роль віртуального скринінгу у пошуку нових біологічно активних молекул та необхідність підвищення точності й швидкості наявних методів молекулярного докінгу. Було зазначено, що традиційні підходи швидкої фільтрації часто не забезпечують достатньої достовірності, а високоточні обчислювальні методи є занадто ресурсомісткими для скринінгу мільйонів сполук.

У вступі дисертант визначив мету роботи - розробити та оптимізувати методи машинного навчання для передбачення кількісних характеристик біологічної активності та структурних характеристик молекулярних комплексів протеїн-мала органічна молекула на основі аналізу закономірностей нековалентних взаємодій та створення фізично обґрунтованих вхідних репрезентацій даних для штучних нейронних мереж. Для досягнення мети було розроблено завдання, що охоплювали створення моделі передбачення афінності зв'язування 3DProtDTA на основі графів протеїнів, розробку алгоритму генерації модельних систем протеїн-ліганд та впровадження методу високопродуктивного докінгу ArtiDock.

Дисертант детально зупинився на характеристиці моделі 3DProtDTA, яка використовує структури білків, передбачені методом AlphaFold, та інтегрує фізико-хімічні й еволюційні характеристики амінокислот. Було показано, що така модель перевершує аналоги на 1-20% за показниками середньоквадратичної похибки та коефіцієнтом конкордації на стандартних наборах даних.

У подальшій частині доповіді здобувач зосередився на аналізі геометричних параметрів нековалентних взаємодій. Використання детального статистичного аналізу цих взаємодій дозволило створити алгоритм аугментації даних моделей машинного навчання, що підвищив частку правильних передбачень положення лігандів на до 10% за критерієм середньоквадратичного відхилення.

У фінальній частині було представлено результати розробки методу ArtiDock. Використання нового набору даних PLINDER для навчання та оцінки дозволило створити інструмент, який за швидкістю виконання перевершує класичні підходи та методи машинного навчання для молекулярного докінгу, забезпечуючи при цьому високу точність у реальних сценаріях докінгу.

У підсумку Войціцький Т.В. наголосив, що його робота є практичною реалізацією фундаментальних фізико-хімічних знань про взаємодії протеїн-мала молекула користуючись методами машинного навчання. Отримані результати відкривають можливості для створення високоефективних обчислювальних платформ, що значно прискорять процес розробки нових лікарських засобів.

ВИСТУПИ ТА ОБГОВОРЕННЯ:

У виступах було відзначено актуальність та наукову новизну представлених результатів, особливо в частині застосування методів машинного навчання для передбачення афінності зв'язування та молекулярного докінгу в системах протеїн-ліганд. Робота має міждисциплінарний характер, поєднуючи біофізику, хемоінформатику та машинне навчання, і виконана на високому методичному рівні з публікаціями в журналах першого квартилю.

По доповіді було поставлено запитання, зокрема щодо репрезентації білків у вигляді графів для нейронних мереж, статистичного аналізу нековалентних взаємодій у комплексах протеїн-ліганд, алгоритму генерації штучних тренувальних даних, врахування конформаційної гнучкості молекул, а також щодо критеріїв оцінювання точності методів молекулярного докінгу.

Зауваження носили редакційний і уточнювальний характер:

Доктор філософії в галузі фізики Монастирський Григорій Павлович звернув увагу на необхідність пояснення базової термінології (ліганд, афінність) та рекомендував адаптувати презентацію для фізичної аудиторії.

д.ф.-м.н. Войтенко Олександр Іванович зауважив, що презентація потребує скорочення до 20 хвилин для захисту та рекомендував переглянути вступну частину.

д.ф.-м.н. Войтенко Олександр Іванович рекомендувала чіткіше визначити рамки застосування методу та наголосити на практичному значенні для індустрії розробки ліків.

к.х.н. Губарені Євген Віталійович звернув увагу на необхідність візуалізації поняття графа та уточнення списку атомів, що беруть участь у водневих зв'язках.

д.ф.-м.н. Ніколаєнко Тимофій Юрійович:

Що є новим у вашому підході до передбачення афінності зв'язування? Яка роль репрезентації білка? Чи навчалась модель на характеристиках комплексів?

Войціцький Тарас Васильович:

Новизна полягає у використанні передбаченої за допомогою AlphaFold структури білка, конвертованої у графову репрезентацію. Білки представлені у вигляді графів, де амінокислоти є вершинами з фізико-хімічними та еволюційними характеристиками, а нековалентні контакти між амінокислотами є ребрами. Такий підхід серед опублікованих методів раніше не зустрічався. Модель навчалась окремо на репрезентації білка і ліганду, оскільки структурні характеристики комплексу не були відомі.

д.ф.-м.н. Ніколаєнко Тимофій Юрійович:

З яких структур отримувались статистичні характеристики нековалентних взаємодій?

Войціцький Тарас Васильович:

Статистичні характеристики отримувались з 10 000 високоякісних комплексів бази даних PDB Bind. Комплекси були відфільтровані за якістю експериментальних даних, роздільною здатністю та відсутністю стеричних зіткнень між білком і лігандом.

д.ф.-м.н. Ніколаєнко Тимофій Юрійович:

Як враховується порядок утворення різних типів нековалентних взаємодій в алгоритмі генерації штучних комплексів? Чи враховується крос-кореляція між змінними?

Войціцький Тарас Васильович:

Алгоритм є ітеративним. Першими обираються взаємодії зі специфічними вимогами до кутів зв'язування, наприклад, водневі зв'язки, оскільки якщо спочатку утворити багато амінокислот з гідрофобними контактами, буде важко знайти місце з потрібним кутом для водневого зв'язку. Далі будуються галогенні зв'язки, катіон-аніонні взаємодії, пі-стекінг тощо.

д.ф.-м.н. Перепелиця Сергій Миколайович:

Аналіз нековалентних взаємодій проводився по всіх комплексах в базі даних з різними лігандами? Немає конкретно визначеної молекули, яка вивчається?

Войціцький Тарас Васильович:

Саме так, на усіх комплексах, попередньо відфільтрованих за якістю (близько 10000 комплексів). Тому, аналізувались дуже різні молекули.

д.ф.-м.н. Перепелиця Сергій Миколайович:

Як враховується конформаційна гнучкість малої молекули при молекулярному докінгу? Чи може молекула змінювати свою конформацію для кращого зв'язування?

Войціцький Тарас Васильович:

Модель навчається на статичних даних - експериментальних структурах комплексів з відомою кінцевою геометрією. Динаміка зміни конформації ліганду не враховується безпосередньо. На вхід подається випадковий конформер малої молекули, а фінальні торсійні кути визначаються з передбаченої матриці міжатомних відстаней.

д.ф.-м.н. Перепелиця Сергій Миколайович:

Як проводилась порівняльна оцінка вартості застосування різних підходів?

Войціцький Тарас Васильович:

Вартість передбачення для 1 мільйона малих молекул визначалась через вартість погодинної оренди робочих станцій, на яких відбувався запуск алгоритмів та загальний час, витрачений для передбачення положень молекул на тестових даних.

Доктор філософії в галузі фізики Монастирський Григорій Павлович:

Ви показували список публікацій за темою, у яких журналах опубліковані ці роботи?

Войціцький Тарас Васильович:

Роботи, які описані у 2-му та 3-му розділах опубліковані в RSC Advances, робота по 4-му розділу - Journal of Chemical Information and Modeling. На момент публікацій, ці видання були першого квартилю.

д.ф.-м.н. Войтенко Олександр Іванович:

Який критерій використовується в методі молекулярного докінгу на основі машинного навчання? У класичному докінгу мінімізується енергія системи, а що тут?

Войціцький Тарас Васильович:

Методи на основі машинного навчання почали розвиватися як відповідь на те, що традиційні методи мінімізації енергії досягли плато практичної точності. Розроблений метод передбачає міжатомну матрицю відстаней, з якої

алгоритмічно генерується просторове положення ліганду. Метод є попереднім етапом для швидкого відсіювання мільйонів сполук до сотень найперспективніших для подальшого аналізу точнішими методами.

д.ф.-м.н. Косевич Марина Вадимівна:

Як можна практично застосувати або комерціалізувати отримані результати?

Войціцький Тарас Васильович:

Ці методи вже застосовуються в комерційних проєктах компанії, що займається розробкою ліків. Підхід з другого розділу використовується для швидкої фільтрації сполук з мільйонів до десятків тисяч, а швидкий молекулярний докінг з четвертого розділу - для подальшого звуження вибірки до сотень найперспективніших сполук.

д.ф.-м.н. Косевич Марина Вадимівна:

В контексті машинного навчання, чому “навчилася машина” внаслідок вашої роботи?

Войціцький Тарас Васильович:

Машина з другого розділу навчилася передбачати афінність зв'язування для будь-якої вхідної пари білок-ліганд. Машина для молекулярного докінгу навчилася передбачати міжатомну матрицю відстаней, з якої алгоритмами генерується фінальне положення ліганду в сайті зв'язування білка.

По завершенню обговорення учасники семінару відзначили, що дисертаційна робота Войціцького Тараса Васильовича відповідає вимогам, які висуваються до робіт на здобуття наукового ступеня доктора філософії за спеціальністю 104 «Фізика та астрономія». Було підкреслено, що дослідження має завершений характер, а основні завдання, визначені у вступі, вирішені у повному обсязі. Результати опубліковано у високореєтингових виданнях.

У ході дискусії ставилися запитання щодо новизни підходу до репрезентації білків, статистичного аналізу нековалентних взаємодій, врахування конформаційної гнучкості молекул та критеріїв оцінювання методів докінгу. Здобувач дав вичерпні пояснення та уточнив, що отримані методи вже практично застосовуються в комерційних проєктах з розробки ліків. Було зауважено необхідність адаптації презентації до обмеженого за часом формату захисту

дисертації, пояснення базової термінології для фізичної аудиторії та чіткішого визначення рамок застосування методу.

Учасники семінару з відділу фізики біологічних систем, а саме науковий керівник д.ф.-м.н. Єсилевський Семен Олександрович, д.ф.-м.н., проф. Довбешко Галина Іванівна, д.ф.-м.н. Гнатюк Олена Петрівна та к.ф.-м.н. Оленчук Марина Володимирівна, відзначили високу працездатність та відповідальність дисертанта та підкреслили практичне значення отриманих результатів.

д.ф.-м.н. Габович Олександр Маркович, д.ф.-м.н. Войтенко Олександр Іванович, д.ф.-м.н. Перепелиця Сергій Миколайович та д.ф.-м.н. Степаньян Степан Григорович відзначили хорошу якість роботи та актуальність напрямку, зокрема застосування машинного навчання для природничих наук.

Також було озвучено висновок наукового керівника.

ВИСНОВОК

Інститут фізики НАН України

Про наукову новизну, теоретичне та практичне значення результатів дисертації

Войціцького Тараса Васильовича

на тему: «Визначення параметрів нековалентних взаємодій малих органічних молекул із протеїнами на основі моделей машинного навчання»,

поданої на здобуття ступеня доктора філософії в галузі знань 10 Природничі науки за спеціальністю 104 – Фізика та астрономія

Нековалентні взаємодії між протеїнами та малими органічними молекулами визначають специфічність і міцність утворення молекулярних комплексів, які лежать в основі біологічної активності лікарських засобів. Утворення комплексу протеїн-ліганд описується законами кінетики та термодинаміки й визначається балансом гідрофобних контактів, водневих та галогенних зв'язків, електростатичних і ван-дер-ваальсових взаємодій, а також π -стекінгу. Експериментальні методи визначення структурних та енергетичних характеристик цих комплексів є високоточними, проте занадто трудомісткими для масового скринінгу мільйонів молекул-кандидатів. Класичні обчислювальні підходи, зокрема молекулярний докінг, значною мірою досягли плато своєї практичної точності, що робить розробку нових методів на основі машинного навчання актуальною науковою проблемою фізики біологічних систем.

Наукова новизна отриманих результатів полягає у розробці комплексу методів машинного навчання для передбачення параметрів нековалентних взаємодій у системі протеїн-мала органічна молекула, що ґрунтуються на фізичних принципах молекулярного розпізнавання. Вперше створено графову нейронну мережу 3DProtDTA, яка кодує тривимірну структуру протеїнів на рівні амінокислотних залишків із використанням структур, передбачених методом

AlphaFold, та перевершує наявні аналоги за точністю передбачення афінності зв'язування на 1–20%. Вперше запропоновано підхід до розширення тренувальних даних для моделей молекулярного докінгу шляхом генерації штучних комплексів протеїн-ліганд, які відтворюють статистичні закономірності нековалентних взаємодій реальних експериментальних систем, що дозволяє розв'язати проблему обмеженої кількості доступних експериментальних даних. Підтверджено, що тренування моделей з використанням штучних комплексів підвищує частку правильних передбачень положення лігандів на до 10% та знижує частку передбачень зі стеричними зіткненнями на 5–6%. Створено новий метод молекулярного докінгу ArtiDock, який поєднує точність сучасних нейронних мереж зі швидкістю, необхідною для віртуального скринінгу, і перевершує класичні підходи на 9–10% за критерієм RMSD та інші методи машинного навчання на 2–3% за критеріями RMSD та хімічної коректності.

Теоретичне значення роботи полягає у встановленні кількісних статистичних закономірностей геометричних параметрів основних типів нековалентних взаємодій у системі протеїн-ліганд та обґрунтуванні ефективності інтеграції фізико-хімічних властивостей біологічних молекул в архітектури моделей глибинного навчання. Зокрема, доведено, що поєднання просторової інформації про структуру протеїну у вигляді графів із фізико-хімічними та еволюційними характеристиками амінокислот суттєво підвищує точність передбачень, а використання фізично обґрунтованих штучних комплексів як аугментованих даних є ефективною стратегією подолання дефіциту експериментальних даних у задачах молекулярного докінгу.

Практичне значення отриманих результатів визначається тим, що розроблені підходи дозволяють значно прискорити процес *in silico* пошуку нових лікарських засобів шляхом швидкого та точного передбачення афінності та геометрії зв'язування між протеїнами-мішенями та потенційними ліками. Методологія генерації штучних комплексів протеїн-ліганд дозволяє підвищити

точність моделей машинного навчання для роботи з новими класами протеїнів та лігандів, для яких відсутні експериментально визначені дані. Результати досліджень частково реалізовані у програмному забезпеченні з відкритим кодом, а остаточні версії розробок впроваджено як комерційно доступний продукт.

Таким чином, тема є актуальною для досліджень на межі фізики біологічних систем, обчислювальної хімії та фармацевтики. Отримані результати дозволяють не лише підвищити точність обчислювальних методів передбачення нековалентних взаємодій, а й запропонувати нові підходи до розв'язання фундаментальної проблеми обмеженості експериментальних даних у задачах комп'ютерного моделювання молекулярних взаємодій.

Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами, грантами

Робота виконувалась у відділі фізики біологічних систем, Інституту фізики Національної академії наук України в рамках тем:

- 1.4. В/218, Державний реєстраційний номер: 0123U100990, Фізичні ефекти та молекулярні механізми взаємодії біологічних молекул та біологічних систем різного рівня структурної організації з малими молекулами, нанорозмірними та супрамолекулярними комплексами (2023-2027 рр.).
- 2020-21, 2023 - НФДУ № 2020.02/0027, «Низькорозмірні графеноподібні дихалькогеніди перехідних металів з контрольованими полярними та електронними властивостями для перспективних застосувань у нанoeлектроніці та біомедицині».

Публікації

1. T. Voitsitskyi, R. Stratiichuk, I. Koleiev, L. Popryho, Z. Ostrovsky, P. Henitsoi, I. Khropachov, V. Vozniak, R. Zhytar, D. Nechepurenko, S. Yesylevskyy, A. Nafiiiev, and S. Starosyla. 3DProtDTA: a deep learning model for drug-target affinity prediction based on residue-level protein graphs. RSC Adv., vol. 13, no. 15, pp. 10261–10272, Mar. 2023, DOI: 10.1039/D3RA00281K (Q1).

Особистий внесок здобувача: розроблено графову штучну нейронну мережу 3DProtDTA для передбачення афінності зв'язування малих молекул із протеїнами на основі графового представлення структури протеїну на рівні амінокислотних залишків з використанням AlphaFold-передбачених структур: реалізовано програмні модулі генерації ознак, підбору гіперпараметрів, тренування й тестування моделі; досліджено наявні методи передбачення афінності та виконано систематичне порівняння з ними; написано текст публікації та підготовлено таблиці й рисунки.

2. T. Voitsitskyi, V. Bdzhola, R. Stratiichuk, I. Koleiev, Z. Ostrovsky, V. Vozniak, I. Khropachov, P. Henitsoi, L. Popryho, R. Zhytar, S. Yesylevskyy, A. Nafiiiev, and S. Starosyla. Augmenting a training dataset of the generative diffusion model for molecular docking with artificial binding pockets. RSC Adv., vol. 14, no. 2, pp. 1341–1353, Jan. 2024, DOI: 10.1039/D3RA08147H (Q1).

Особистий внесок здобувача: розроблено алгоритм генерації штучних комплексів сайт зв'язування протеїну-ліганд, що відтворюють одновимірні статистичні розподіли геометричних параметрів нековалентних взаємодій реальних експериментально визначених комплексів: реалізовано програмні модулі попередньої обробки даних, генерації сайтів зв'язування та ознак, тренування й тестування ML-моделі молекулярного докінгу; досліджено наявні ML-підходи до молекулярного докінгу; написано текст публікації та підготовлено таблиці й рисунки.

3. T. Voitsitskyi, I. Koleiev, R. Stratiichuk, O. Kot, R. Kyrylenko, I. Savchenko, V. Husak, S. Yesylevskyy, S. Starosyla, and A. Nafiiiev. ArtiDock: Accurate Machine Learning Approach to Protein–Ligand Docking Optimized for High-Throughput Virtual Screening. J. Chem. Inf. Model., vol. 66, no. 4, pp. 2117–2128, Feb. 2026, DOI: 10.1021/acs.jcim.5c02777 (Q1).

Особистий внесок здобувача: розроблено метод молекулярного докінгу ArtiDock: реалізовано модель ArtiDock та алгоритм післяобробки, що перетворює передбачену матрицю міжмолекулярних відстаней на хімічно валідне положення ліганду; підготовлено навчальні дані зі структурно обґрунтованим розбиттям, виконано підбір гіперпараметрів, тренування й оцінювання моделі; проведено порівняння розробленої моделі з іншими методами молекулярного докінгу; написано текст публікації та підготовлено таблиці й рисунки.

Опубліковані праці апробаційного характеру

1. T. Voitsitskyi, O. Gnatyuk, F. Naeimaeirouhani, O. Skorokhod, G. Dovbeshko, G. Gilardi. Universal force field minimization for predicting secondary structure changes in proteins due to post-translational modifications. XXVI Galyna Puchkovska International School-Seminar “Spectroscopy of Molecules and Crystals” (ISSSMC-2024). Постерна доповідь. Вересень 2024, Воянув, Польща.

2. Т. Войціцький, В. Бджола, І. Колесів, С. Єсилевський, С. Старосила. Аналіз нековалентних взаємодій в системі мала молекула-білок для оптимізації процесу тренування моделей машинного навчання. Підсумкова наукова конференція ІФ НАН України ПНК-2024. Усна доповідь. Лютий 2025, Київ, Україна.

3. T. Voitsitskyi, I. Koleiev, S. Starosyla, S. Yesylevskyy. Accurate machine learning approach to protein-ligand docking. «NANOBIOPHYSICS: Fundamental and Applied Aspects» (NBP-2025). Усна доповідь. Жовтень 2025, Харків, Україна.

4. T. Voitsitskyi. Protein-Ligand Docking with Machine Learning. APS Satellite Workshop «Applied Problems of Theoretical and Computational Biophysics». Усна доповідь. Березень 2026, Київ, Україна.

5. T. Voitsitskyi, I. Koleiev, S. Starosyla, S. Yesylevsky. Molecular docking of ligands in heteroatom-containing protein binding sites using machine learning. Biophysics Week 2026 «Biophysics in Ukraine: Human Energy and Willpower in Science and Education During the Wartime». Усна доповідь. Березень 2026, Київ, Україна.

Структура роботи Дисертація містить вступ, чотири розділи, висновки та додатки. Повний обсяг дисертації складає 197 сторінок та містить 28 рисунків та 23 таблиці. Список використаних джерел - 185 найменувань на 13 сторінках. Додатки - 19 сторінок, що містять 3 рисунки та 7 таблиць.

Оцінка мови та стилю дисертації Дисертація виконана українською фаховою мовою з правильним вживанням спеціальної термінології. Стил викладення в дисертації матеріалів досліджень, наукових положень та висновків забезпечує доступність їх сприйняття. Оформлення дисертаційної роботи відповідає стилю науково-дослідної літератури.

Особистий внесок здобувача полягає в розробці методів і моделей для передбачення афінності зв'язування та молекулярного докінгу: реалізовано програмні модулі попередньої обробки даних, генерації ознак, тренування й тестування моделей; розроблено алгоритми генерації навчальних даних і післяобробки результатів передбачення; виконано підбір гіперпараметрів і систематичне порівняння розроблених методів з наявними підходами; написано тексти публікацій та підготовлено таблиці й рисунки.

УХВАЛЕНО

1. Затвердити висновок про наукову новизну, теоретичне та практичне значення результатів дисертації Войціцького Тараса Васильовича на тему: «Визначення параметрів нековалентних взаємодій малих органічних молекул із протеїнами на основі моделей машинного навчання»,

2. Констатувати, що за актуальністю, ступенем наукової новизни, обґрунтованістю, науковою та практичною цінністю здобутих результатів дисертація Войціцького Тараса Васильовича відповідає спеціальності 104 Фізика та астрономія та вимогам Порядку підготовки здобувачів вищої освіти ступеня доктора філософії та доктора наук у закладах вищої освіти (наукових установах), затвердженого постановою Кабінету міністрів України від 23 березня 2016 р. №261, пп. 6,7,8 Порядку присудження ступеня доктора філософії та скасування рішення разової спеціалізованої ради закладу вищої освіти, наукової установи про присудження ступеня доктора філософії, затвердженого постановою Кабінету Міністрів України від 12 січня 2022 р. № 44

3. Рекомендувати дисертацію Войціцького Тараса Васильовича на тему: «Визначення параметрів нековалентних взаємодій малих органічних молекул із протеїнами на основі моделей машинного навчання», до захисту на здобуття ступеня доктора філософії за спеціальністю 104 – Фізика та астрономія.

4. Рекомендувати вченій раді Інституту фізики НАН України затвердити склад разової спеціалізованої вченої ради

Голова ради:

Габович Олександр Маркович, доктор фізико-математичних наук, старший науковий співробітник, провідний науковий співробітник відділу фізики кристалів, Інститут фізики НАН України;

Рецензенти:

Войтенко Олександр Іванович, доктор фізико-математичних наук, старший науковий співробітник, провідний науковий співробітник відділу фізики кристалів, Інститут фізики НАН України;

Офіційні опоненти:

Степаньян Степан Григорович, доктор фізико-математичних наук, старший науковий співробітник, завідувач відділу молекулярної біофізики, Фізико-технічний інститут низьких температур ім. Б. І. Веркіна НАН України;

Перепелиця Сергій Миколайович, доктор фізико-математичних наук, старший дослідник, директор інституту, Інститут теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова НАН України;

Ніколаєнко Тимофій Юрійович, доктор фізико-математичних наук, доцент кафедри молекулярної фізики, фізичний факультет, Київський національний університет імені Тараса Шевченка.

Результати голосування щодо рекомендації до захисту дисертації
Войціцького Тараса Васильовича

«За» - 13

«Проти» - 0

«Утримались» - 0

Головуючий на засіданні:

д.ф.-м.н., професор Довбешко Галина Іванівна

Секретар:

к.ф.-м.н. Оленчук Марина Володимирівна