

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Ионова Никиты Сергеевича
**«Разработка информационно-вычислительной платформы
для оценки фармакологического потенциала фитокомпонентов
лекарственных растений»**,

представленной на соискание учёной степени кандидата биологических наук
по специальности

1.5.8. – Математическая биология, биоинформатика

Диссертационная работа Н.С. Ионова посвящена проблеме оценки *in silico* фармакологического потенциала лекарственных растений и входящих в их состав химических соединений. Представлены методы оценки биологической активности фитокомпонентов лекарственных растений, реализован компьютерный инструмент. Работа Никиты Сергеевича Ионова актуальна для систематизации и компьютерного поиска лекарственных соединений, соответствует специальности «Математическая биология, биоинформатика».

Результаты исследования представлены в виде информационно-вычислительной платформы Phyto4Health, на которую получено свидетельство Роспатента о государственной регистрации базы данных. С применением разработанной платформы установлены фармакотерапевтические эффекты фитокомпозиции «Фитоладаптоген» и фитокомпонентов из листьев морозники и других растений. Таким образом, работа Н.С. Ионова имеет несомненную практическую значимость. Достоинством работы является сопоставление структур фитокомпонентов из баз данных различных стран, что позволило сформировать представление о множестве фитокомпонентов лекарственных растений России как о перспективном источнике для поиска целевых биологических активных соединений.

Полученные автором результаты достоверны, выводы и заключение обоснованы, работа представляет собой законченное научное исследование.

К автореферату есть ряд замечаний.

Так, в автореферате активно цитируется литература (например - (Chen et al., 2018) (Yuan et al., 2016), иногда избыточно с инициалами (Chen Y. et al., 2018)), при этом полные данные не приведены (нет списка литературы). Стоило бы или убрать цитирование, или привести в автореферате полный список цитируемой литературы со всеми выходными данными.

Автореферат включает большое число сокращений, ряд из них избыточны. Не все сокращения расшифрованы. Хотя есть и общеизвестные

специалистам (например - FDA), в работе должна быть точность. Особенно это важно для методов, используемых параметров (например - MW, AlogP, HBA/HBD, RTB, tPSA) и форматов данных (MOL, InChi, SMILES).

Аббревиатуры – официальные названия организаций, не приведены (ПГФА МЗ РФ), или показаны после использования – ВИЛАР. Используются не корректные сокращения названий организаций, например «МЗ» - видимо Министерство Здравоохранения, Чередование аббревиатур на русском и английском тяжело читается. Есть досадные опечатки - «Блохинадва».

В рамках автореферата следовало бы более подробно описать процедуры извлечения гетерогенных данных о взаимодействии с молекулярными мишенями. Необходимо детализировать обработку синонимов названий лекарственных растений России.

Список регионов для данных о фитокомпонентах растений отличается - так в Разделе «Цели работы» указано - «...других регионов (Индия, Бразилия. Мексика, Северная Африка, Европейские страны)», а в разделе Положения, выносимые на защиту «...включая Бразилию, Индию, Центральную Европу и Северную Африку». Отличается по регионам - Мексика, и не указаны страны (географические регионы) Европы.

Фраза «С целью расширения фармакологического потенциала растений Бразилии, по просьбе бразильских коллег...» - не корректна - видимо «...расширения исследования фармакологического потенциала...», а не просто расширения потенциала. Имена, ссылки, роль бразильских коллег тоже не уточняются в автореферате.

Отметим большой раздел благодарности все коллегам и организациям, участвовавшим в этой действительно большой работе, отмеченные сносками источники данных. Личный вклад автора в работу подробно показан, и не вызывает сомнений.

В целом, сделанные замечания не уменьшают научную значимость выполненной работы. Выводы, сделанные в диссертационной работе, полностью соответствуют результатам. Достоверность и качество работы подтверждаются статьями в рецензируемых научных журналах по списку ВАК, апробацией работы на научных конференциях

По итогам анализа автореферата можно заключить, что диссертационное исследование Ионова Никиты Сергеевича «Разработка информационно-вычислительной платформы для оценки фармакологического потенциала фитокомпонентов лекарственных растений», представленное на соискание учёной степени кандидата биологических наук по специальности 1.5.8. – Математическая биология, биоинформатика, полностью соответствует критериям п.п. 9–14 «Положения о порядке присуждения ученых степеней»,

утвержденного постановлением Правительства РФ от 24 сентября 2013 года № 842 (с соответствующими изменениями в редакции постановлений Правительства РФ от 2016, 2017 и 2018 г.), предъявляемым к диссертациям, представленным на соискание степени кандидата наук. Соискатель, Никита Сергеевич Ионов, заслуживает присуждения ученой степени кандидата биологических наук по специальности 1.5.8 – «Математическая биология, биоинформатика».

д.б.н., профессор РАН

Юрий Львович Орлов

06.11.2024г.

Профессор кафедры информационных технологий и обработки медицинских данных
Центра цифровой медицины
Института цифрового биодизайна и моделирования живых систем
Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего
образования Первый Московский государственный медицинский университет имени
И.М.Сеченова Министерства здравоохранения Российской Федерации (Сеченовский
Университет)

Сведения:

Контактные данные:

тел.: +7(495)6091400, e-mail: y.orlov@sechenov.ru

Адрес места работы:

119048, Москва, ул. Трубецкая, д. 8, стр. 2, ФГАОУ ВО Первый МГМУ им. И.М. Сеченова
Минздрава России (Сеченовский Университет)

Тел./факс +7(499)2480181; rektorat@sechenov.ru; <https://www.sechenov.ru/contacts/>

