

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Леонида Алексеевича Столбова
«Разработка подходов к виртуальному скринингу противовирусных соединений с учетом гетерогенности информации»,
представленной на соискание ученой степени кандидата биологических наук
по специальности 1.5.8. – «Математическая биология, биоинформатика»

Актуальность поиска новых противовирусных соединений очевидна, поскольку вирусные инфекции являются перманентной угрозой человечеству вследствие недостаточной эффективности и безопасности имеющихся препаратов, а также возникновения к ним резистентности из-за появления новых вариантов вируса в ходе лекарственной терапии. Пандемия COVID-19, вызванная новым коронавирусом SARS-CoV-2, ярко высветила имеющиеся проблемы и продемонстрировала необходимость расширения проводимых в данной области исследований.

Несмотря на то, что в настоящее время компьютерные методы широко применяются на разных стадиях фармацевтических исследований и разработок, их использование на ранних стадиях пандемии COVID-19 столкнулось со значительными проблемами. Эти проблемы в значительной степени обусловлены гетерогенностью информации, которая может быть использована при формировании обучающих выборок с целью применения различных методов машинного обучения.

Диссертационная работа Столбова Л.А. посвящена разработке новых методов построения классификационных зависимостей «структура-активность», которые позволяют эффективно использовать доступную в литературе гетерогенную информацию по структуре и активности противовирусных соединений.

Диссертантом проделан большой объем работы, направленной на сбор, анализ и предобработку имеющихся данных, что позволило сформировать обучающие и тестовые выборки, на основе которых выполнено сопоставление эффективности ранее разработанных методов и предложенных автором новых

подходов на основе самосогласованной логистической и экстремальной классификации. Убедительно продемонстрировано преимущество новых методов, как на примере искусственно сгенерированных данных, так и имеющихся в литературе сведений по исследованию ингибиторов основных мишеней ВИЧ-1 и SARS-CoV-2. Показано повышение эффективности виртуального скрининга с использованием разработанных диссертантом методов, что позволяет существенно снизить финансовые и временные затраты при поиске новых противовирусных соединений. На соответствующую компьютерную программу получено регистрационное свидетельство Роспатента, а также создан свободно доступный в Интернете веб-сервис по прогнозу антиретровирусной активности химических соединений.

По-видимому, некоторым недостатком диссертационной работы является отсутствие анализа применимости разработанных автором методов к другим вирусам, помимо ВИЧ-1 и SARS-CoV-2 (например, хантавирусам и т.д.). Однако это замечание следует рассматривать скорее как пожелание на будущее, поскольку актуальность проблематики поиска новых противовирусных соединений будет сохраняться в ближайшие годы.

Автореферат диссертационной работы Столбова Л.А. хорошо оформлен и практически не содержит опечаток. Основные результаты опубликованы в шести публикациях в международных научных журналах, а также представлены и обсуждены на ряде российских и международных конференций и симпозиумов.

Таким образом, можно заключить, что работа Столбова Л.А. соответствует требованиям п. 9 «Положения о порядке присуждения ученых степеней», утвержденным Постановлением правительства Российской Федерации от 24.09.2013 г. №842 (в редакции Постановления от 01.10.2018 с изменениями от 20.03.2021 №426), а ее автор заслуживает присуждения

ученой степени кандидата биологических наук по специальности 1.5.8. –
«Математическая биология, биоинформатика».

Д.м.н., проф., член-корр. РАН, директор института
медицины и психологии НГУ

E-mail: decan@medf.nsu.ru

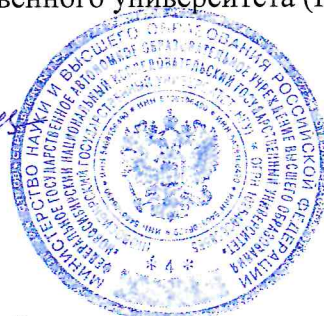
Покровский Андрей Георгиевич

Подпись А.Г. Покровского заверяю

Ученый секретарь Новосибирского государственного университета (НГУ)

К.х.н., доцент

Тарабан Елена Анатольевна



Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего
образования «Новосибирский национальный исследовательский государственный
университет», НГУ, 630090, Новосибирская область, г. Новосибирск, ул. Пирогова, 2