

ОТЗЫВ

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

Текущее состояние противодействию инфекции иммунодефицита человека и пандемия COVID-19, причиной которой является вирус SARS-CoV-2 подчеркивают актуальность разработки новых антивирусных соединений. Как следует из автореферата Столбова Л.А. основными стимулами поиска новых ингибиторов вирусных мишеней являются недостаточная эффективность и безопасность существующих препаратов, появление новых резистентных штаммов.

Ранние этапы пандемии COVID-19 проявили и недостатки существующих методов компьютерного конструирования лекарств. В автореферате автор фокусирует внимание на одной из таких проблем, а именно использования гетерогенных данных, полученных для различных химических классов и в различных экспериментальных условиях для использования в прогностических моделях.

В диссертационной работе Столбов Л.А. ставит целью разработку новых методов построения классификационных моделей «структура-активность», которые позволяют использовать преимущества агрегации различных доступных данных по структуре и активности ингибиторов вирусных ферментов и существенно сократить нежелательные эффекты, связанные с их гетерогенностью.

Диссертантом проделан большой объем работы, направленной, на сбор, анализ и подготовку имеющихся в свободном доступе данных, разработку методов самосогласованного логистического и экстремального классификаторов, сравнение новых методов с известными ранее подходами. Диссертантом показаны преимущества новых методов, на примере различных

данных проведена валидация методов, на основе имеющихся в литературе и базах данных сведений об ингибиторах основных мишеней ВИЧ-1 и SARS-CoV-2, проведено сравнение с существующими подходами. Особое внимание уделено применению новых методов для проведения виртуального скрининга с использованием разработанных диссертантом методов и подчеркнута их возможность ранжировать соединения. Диссертантом получено свидетельство на регистрацию программы ЭВМ Роспатента. На основе построенных моделей создан свободно доступный в Интернете веб-сервис AntiHIV Pred, предоставляющий возможности использования проделанных разработок широкому кругу исследователей.

В работе рассматривается применение разработанных автором методов к разработке противовирусных препаратов и отсутствует анализ применимости методов к иным терапевтическим областям, таких как исследование токсичности и прогноз фармакокинетических свойств. Однако, в силу актуальности поиска новых противовирусных фармакологических агентов, это замечание не является принципиальным и представляет собой рекомендацию относительно возможности расширения области применения новых методов.

Автореферат диссертационной работы Столбова Л.А. отражает основное содержание работы, выводы научно обоснованы, положения, выносимые на защиту, убедительно подтверждены. Основные результаты опубликованы в шести публикациях в международных научных журналах, а также представлены и обсуждены на ряде российских и международных конференций и симпозиумов.

Всё вышеуказанное позволяет сделать заключение, 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».

Ведущий научный сотрудник ООО «Эм энд Эс десижанс»,
Руководитель центра математического моделирования в разработке лекарств
ПМГУ им. Сеченова,
Доцент НТУ «Сириус»,
Кандидат биологических наук
(03.00.28 – Биоинформатика, 2009 г.),



Песков
Кирилл Витальевич

ООО «Эм энд Эс десижанс»

Почтовый адрес: 119530, г. Москва, Очаковское шоссе, дом 28, стр. 2, пом. I,
ком. 39, телефон: 8-916-921-70-99, E-mail: kirill.peskov@msdecisions.ru

10 октября 2022 года

Подпись Пескова К.В. заверяю:

Директор ООО «Эм энд Эс десижанс»



Косинский Ю.А.