

ОТЗЫВ НАУЧНОГО РУКОВОДИТЕЛЯ

о младшем научном сотруднике
лаборатории структурно-функционального конструирования лекарств
Федерального государственного научного учреждения
«Научно-исследовательский институт биомедицинской химии
имени В. Н. Ореховича» (ИБМХ)
Столбове Леониде Алексеевиче

Столбов Леонид Алексеевич приступил к выполнению диссертационной работы на тему «Разработка подходов к виртуальному скринингу противовирусных соединений с учетом гетерогенности информации» в качестве соискателя ученой степени кандидата биологических наук по специальности «1.5.8. – математическая биология, биоинформатика» в 2019 году.

В ходе выполнения диссертационной работы Л. А. Столбов проявил себя как умелый, добросовестный, ответственный и трудолюбивый исследователь, способный четко определить и сформулировать цели и задачи исследования, определять необходимые методы исследования и глубоко анализировать полученные результаты. За это время он освоил компьютерные методы анализа «структура-активность» в применении к различным практически важным задачам, приобрел навыки программирования в C++, R, web-технологии, изучил известные подходы к компьютерному конструированию лекарств.

Диссертационная работа Л. А. Столбова посвящена разработке и валидации методов виртуального скрининга противовирусных соединений на основе анализа зависимостей «структура-активность» в гетерогенных массивах данных. В ходе работы соискателем были разработаны процедура извлечения из доступных источников и обработки информации о биологически активных веществах для формирования выборки данных об антиретровирусных и антикоронавирусных соединениях, алгоритмы самосогласованной логистической (SCLC) и экстремальной (SCEC) классификации и их программная реализация. На основе сформированных Л. А. Столбовым выборок получены количественные зависимости «структура-активность» для ингибиторов белков ВИЧ-1 и классификационные зависимости «структура-активность» для ингибиторов белков ВИЧ-1 и SARS-CoV-2, обладающие хорошей точностью и предсказательной способностью. Создан свободно доступный веб-сервис AntiHIV Pred, позволяющий получить прогноз активности на основе структурной формулы соединения для каждой из мишеней ВИЧ-1.

В процессе работы над диссертацией соискателем отобрана и проанализирована релевантная области исследования литература, проведен комплекс исследований *in silico*, полученные им результаты обладают новизной и практической значимостью. По материалам диссертации опубликовано 20 работ в российских и международных научных изданиях, в том числе 6 статей в рецензируемых научных журналах, входящих в перечень, рекомендованный ВАК, и 14 публикаций в трудах конференций. Получено свидетельство Федеральной службы по интеллектуальной собственности о регистрации программы для ЭВМ SARMATH № RU2022662930 от 07.07.2022 г. За время работы над диссертацией Леонид Алексеевич Столбов продемонстрировал существенный профессиональный рост, стал зрелым и квалифицированным специалистом, ответственно и творчески выполняющим порученную ему работу, способным самостоятельно ставить и решать актуальные научные задачи по широкому кругу проблем математической биологии и биоинформатики.

Научный руководитель:

доктор биологических наук, профессор, член-корреспондент РАН
главный научный сотрудник, заведующий Отделом биоинформатики и
Лабораторией структурно-функционального конструирования лекарств

В. В. Пороиков

Научный консультант:

кандидат физико-математических наук
ведущий научный сотрудник Лаборатории структурно-функционального
конструирования лекарств

Д. А. Филимонов

Федеральное государственное бюджетное научное учреждение
«Научно-исследовательский институт биомедицинской химии
имени В. Н. Ореховича»

119121, г. Москва, ул. Погодинская, д. 10, стр. 8

Тел.: +7 499 246-09-20; +7 499 255-30-29

E-mail: vladimir.poroikov@ibmc.msk.ru; dmitry.filimonov@ibmc.msk.ru

Подпись

заверяю

Ученый секретарь ИБМХ к.х.н. Карпова Е.А.

