

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Тинькова Олега Викторовича
«Количественная оценка влияния структуры на токсичность, липофильность и растворимость в воде экологически опасных органических соединений»
на соискание ученой степени кандидата химических наук
по специальности 02.00.03 – Органическая химия

Диссертация посвящена решению одной из наиболее важных и актуальных проблем современной органической химии, токсикологии и экологии – оценке *in silico* токсических свойств и показателей ADME экологически опасных органических веществ и разработке новой компьютерной методологии внеэкспериментального скрининга экологической опасности химических соединений. В настоящее время предварительная оценка вредных свойств вновь синтезируемых веществ является одним из магистральных направлений органической химии. Важнейшим элементом такой оценки является прогноз методами *in silico* показателей ADMET.

Исследование носит фундаментально-прикладной характер. Работу отличает корректно поставленная цель, грамотно сформулированные задачи, адекватно подобранные методы исследования. Бесспорны научная новизна и практическая значимость полученных результатов.

При выполнении исследования автор самостоятельно разработал новый комбинированный подход к оценке токсичности, липофильности и растворимости, основанный на сочетании симплексного представления молекулярной структуры и современных методов анализа многомерных данных и машинного обучения. При этом для расчета прогнозных зависимостей использованы наиболее результативные методы data mining, такие как регрессия на скрытых переменных PLS, метод опорных векторов SVM, метод случайного леса RF и метод градиентного бустинга GBM, совокупно с методами консенсусного прогноза и определения области применимости полученных QSAR/QSPR зависимостей.

Проведенное исследование характеризуется тщательностью подготовки исходного материала: самостоятельно создана верифицированная база данных о структуре и свойствах 2067 вредных органических соединений, на ее основе сформированы представительные обучающие выборки – 45 выборок по острой токсичности, 9 выборок по репродуктивной токсичности, 2 выборки по липофильности и растворимости в воде.

Необходимо отметить профессиональное использование современных

