



Թեմայի արդիականությունը հիմնավորված է ընդարձակ և բարդ քիմիական տարածքը ուսումնասիրելու համար մասշտաբային և ծախսարդյունավետ մեթոդների հրատապ անհրաժեշտությամբ, մասնավորապես դեղերի հայտնաբերման և նյութագիտության ոլորտներում: Մոլեկուլային տվյալների ստեղծման ավանդական փորձարարական և հաշվողական մեթոդները կամ չափազանց ծախսատար են, կամ հաշվարկային առումով ինտենսիվ, ինչը սահմանափակում է դրանց մասշտաբայնությունը: Բաշխված հաշվարկների և ակտիվ ուսուցման համադրությամբ՝ այս աշխատանքը հնարավորություն է ընձեռում արդյունավետորեն ստեղծել բարձրորակ քվանտային քիմիական տվյալների բազաներ և ճշգրիտ հասկությունների կանխատեսման մոդելներ: Այս առաջընթացները ուղղակիորեն նպաստում են մոլեկուլային մոդելավորման համար արհեստական բանականությամբ աշխատող գործիքների մշակմանը՝ արագացնելով նորարարությունները քիմիայի, դեղագիտության և հարակից ոլորտներում:

Ատենախոսությունում առաջարկված մեթոդները փորձարկվել են բազմազան, խնամքով ընտրված քվանտային քիմիական տվյալների բազաների վրա՝ խիստ ուսուցման/վավերացման/փորձարկման բաժանումներով: Բացի այդ, մշակված մոդելների և գործիքների կատարողականությունը համեմատվում է գոյություն ունեցող առաջատար մոտեցումների հետ՝ հետևողականորեն ցուցաբերելով բարձր ճշգրտություն, արդյունավետություն և կայունություն: Այս մանրակրկիտ վավերացման գործընթացը հաստատում է ստացված գիտական արդյունքների հիմնավորությունն ու կիրառելիությունը:

Ատենախոսությունում ներկայացված են հետևյալ հիմնական նորույթները:

1. SDDF հարթակը, որը հնարավորություն է ընձեռում լայնածավալ քվանտային քիմիական տվյալների ստեղծման՝ օգտագործելով կամավոր հաշվարկներ, ինչը զգալիորեն նվազեցնում է DFT հաշվարկների ժամանակն ու ծախսերը: Նրա մոդուլային կառուցվածքը թույլ է տալիս հեշտությամբ հարմարվել տարբեր մոլեկուլային հասկությունների՝ դարձնելով այն հզոր գործիք հաշվարկային քիմիայի բազմազան խնդիրների համար:

2. Ակտիվ ուսուցման ինտեգրումը հնարավորություն է տալիս խելացիորեն ընտրել մոլեկուլային կոնֆորմացիաներ՝ հիմնվելով անորոշության և կանխատեսման սխալի վրա՝ ապահովելով, որ միայն առավել պոտենցիալով նմուշները ընտրվեն DFT-ի ծախսատար պիտակավորման համար:

3. Առաջարկված FlashRMSD գործիքը ապահովում է արագ և հուսալի RMSD հաշվարկներ՝ գերազանցելով գոյություն ունեցող գործիքներին, հատկապես սիմետրիկ մոլեկուլների մշակման դեպքում:

4 Աշխատանքը տրամադրում է բաց հասանելի, բարձրորակ տվյալների հավաքածուներ մոլեկուլային կոնֆորմացիոն էներգիաների վերաբերյալ՝ խիստ կառուցվածքային բաժանմամբ՝ ապահովելով մոդելների գնահատման հուսալիությունը: Այս տվյալների հավաքածուները ծառայում են որպես արժեքավոր չափորոշիչներ գիտական համայնքի համար՝ հնարավորություն ընձեռելով վերարտադրել հետազոտությունները և խթանել մոլեկուլային մեքենայական ուսուցման հետագա առաջընթացը:

Ատենախոսության արդյունքները, մշակված մեթոդները, ալգորիթմական և ծրագրային գործիքները կարող են օգտագործվել դեղագործական, կենսատեխնոլոգիական և արհեստական բանականությամբ առաջնորդվող քիմիական ընկերություններում:

Աշխատանքը կազմված է ներածությունից, չորս գլուխներից և եզրակացությունից:

Աշխատանքում ստացված հիմնական արդյունքները տպագրված են: Մեղմագիրն ամբողջությամբ արտացոլում է ատենախոսության բովանդակությունը:

Ատենախոսության վերաբերյալ կարող ենք նշել հետևյալ դիտողությունները՝

- Տեքստում կան ուղղագրական և քերականական աննշան սխալներ:
- Կամավոր հաշվարկների վրա հիմնվելը բերում է սարքավորումների կատարողականության և հուսալիության փոփոխականություն, ինչը կարող է ազդել լայնածավալ տվյալների ստեղծման հետևողականության և արագության վրա:
- Չնայած ակտիվ ուսուցման կիրառմանը, սկզբնական փուլը դեռևս կախված է ծախսատար DFT հաշվարկներից, ինչը սահմանափակում է մասշտաբայնությունը, երբ կիրառվում է զգալիորեն ավելի մեծ կամ բարդ մոլեկուլային համակարգերի վրա:

Ամփոփելով ասվածը, գտնում ենք, որ Վահագն Նորիկի Ալթունյանի «Մեքենայական ուսուցման և բաշխված հաշվարկային մոտեցումներ քվանտային քիմիական տվյալների ստեղծման և մոլեկուլային հատկությունների կանխատեսման համար» թեմայով թեկնածուական ատենախոսությունը բավարարում է Ե.13.05 «Մաթեմատիկական մոդելավորում, թվային մեթոդներ և ծրագրերի համալիրներ» մասնագիտությամբ տեխնիկական գիտությունների թեկնածուի գիտական աստիճանի

հայցման ներկայացվող աշխատանքների նկատմամբ ՀՀ ԲԿԳԿ-ի բոլոր պահանջներին,  
իսկ Վահագն Լորիկի Ալթունյանը արժանի է հայցվող գիտական աստիճանի շնորհմանը:

Հայ-ռուսական համալսարանի,

Համակարգային ծրագրավորման ամբիոնի վարիչ,

Ֆիզ.-մաթ. գիտությունների թեկնածու, դոցենտ

Ս.Ս.Սարգսյան

Ֆիզ.-մաթ. գիտությունների թեկնածու Ս.Սարգսյանի ստորագրությունը հաստատում եմ՝

Հայ-ռուսական համալսարանի

գիտական քարտուղար,

բանասիրական գիտությունների թեկնածու:



Ռ.Ս. Կասաբաբովա