

ОТЗЫВ на автореферат
диссертации на соискание ученой степени кандидата
физико-математических наук Сулимова Алексея Владимировича
на тему: «Молекулярный докинг: математические модели,
суперкомпьютерная реализация и их применение для разработки лекарств»
по специальности 1.1.10 – «Биомеханика и биоинженерия»

Диссертационная работа Сулимова Алексея Владимировича посвящена разработке методов и программ докинга, методики виртуального суперкомпьютерного скрининга больших баз данных с помощью докинга и их применению для поиска ингибиторов различных белков-мишеней, включая чрезвычайно важные мишени коронавируса SARS-CoV-2, вызвавшего пандемию COVID-19. Использование суперкомпьютеров в данной работе не ограничивается только перебором больших баз данных молекул-кандидатов с целью поиска ингибиторов нужных белков-мишеней, но и применением суперкомпьютерных многопроцессорных вычислительных ресурсов для докинга одной молекулы с целью повышения точности докинга. Повышение точности докинга в настоящее время является одной из важнейших задач применения молекулярного моделирования на ранней стадии разработки лекарств, и решение этой задачи должно привести к существенному повышению эффективности рациональной разработки новых лекарств.

В данной работе особое внимание привлекает разработка программного комплекса SOL-P, с помощью которого осуществляется многопроцессорный докинг с помощью нового метода глобальной оптимизации, основанного на разложении многомерных массивов в тензорные произведения. Разложение в тензорные произведения и связанные с ним новые методы тензорного анализа начинают постепенно использоваться в разнообразных областях компьютерного моделирования, и данная работа показывает высокую эффективность такого подхода при использовании в докинге: показано, что с помощью SOL-P можно успешно провести докинг гибких молекул с большим числом внутренних вращательных степеней свободы – до 25 включительно, с чем не могут справиться программы докинга, основанные на генетическом алгоритме глобальной оптимизации.

В качестве замечания хотелось бы отметить следующее. Одно из положений, выносимых на защиту, связано с новым суперкомпьютерным программным

комплексом прямого докинга SOL-P, описанным в главе 4 диссертации и соответствующем разделе автореферата. Однако программный комплекс (в отличие, например, от метода или модели), является цифровым объектом техники и технологий, и требует соответствующего описания (как организован, на каких технологиях реализован, каковы его технические характеристики, в первую очередь – производительность). К сожалению, в автореферате данные сведения отсутствуют – вместо них описаны исключительно (а) вычислительные процедуры и (б) характеристики получаемых результатов, а схема на рис. 2 является не блок-схемой программного комплекса, а укрупненной схемой алгоритма решения задачи, не отражающей особенности ее (супер)компьютерной реализации.

Указанное замечание не снижает общую ценность диссертации, которая отвечает требованиям, установленным Московским государственным университетом имени М.В. Ломоносова к работам подобного рода. Содержание диссертации соответствует паспорту специальности 1.1.10 – «Биомеханика и биоинженерия» (по физико-математическим наукам), а также критериям, определенным п.п. 2.1-2.5 Положения о присуждении ученых степеней в Московском государственном университете имени М.В. Ломоносова, а также оформлена, согласно приложениям № 5, 6 Положения о 4 диссертационном совете Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова. Соискатель Сулимов Алексей Владимирович заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.1.10 – «Биомеханика и биоинженерия».

Доктор технических наук, директор научно-исследовательского института наукоемких компьютерных технологий, профессор «Национального исследовательского университета ИТМО»,
Бухановский Александр Валерьевич

30 мая 2022 года

Контактные данные:

тел.: +7 (812) 909-31-56, e-mail: avbukhanovskii@itmo.ru

Специальность, по которой защищена диссертация:

05.11.16 – «Информационно-измерительные и управляющие системы»
(приборостроение)

Адрес места работы: 197101, г. Санкт-Петербург, Кронверкский пр., д. 49

Подпись заверена

МП