

ОТЗЫВ

на автореферат кандидатской диссертации «Разработка алгоритмов выполнения молекулярного докинга с использованием графических процессоров», представленной Фарковым Михаилом Александровичем на соискание учёной степени кандидата технических наук по специальности 05.13.17 – «Теоретические основы информатики»

Высокопроизводительные вычисления и вычислительные системы – одна из наиболее актуальных тем как в информационных технологиях, так и во многих прикладных областях. Сегодня использование гетерогенных систем, включающих в себя графические процессоры и ПЛИС, требует изменения существующих алгоритмов, написанных в рамках традиционной парадигмы, с целью повышения их производительности.

Представленная работа посвящена адаптации алгоритмов оптимизации к специфичным требованиям графического процессора и решения с их помощью практической задачи. Автором выделены специфические требования, которые предъявляются к алгоритмам со стороны графического процессора. Исследованы существующие подходы к выполнению численной оптимизации на предмет их соответствия обозначенным требованиям. В качестве перспективного для реализации на графических процессорах выбран метод дифференциальной эволюции. В работе предложен новый алгоритм реализации метода дифференциальной эволюции с использованием графических процессоров, который наряду с разработанным подходом к вычислению сеток межмолекулярного взаимодействия использовался для разработки алгоритма выполнения молекулярного лиганд-белкового докинга.

Следует отметить практическую значимость проделанной работы. Предложенные алгоритмы реализованы в качестве законченного программного обеспечения, для которого имеются свидетельства о регистрации программ для ЭВМ. Применимость результатов диссертации подтверждается актами о внедрении.

Основные результаты исследования апробированы на всероссийских и международных конференциях, а также опубликованы в периодических изданиях, в том числе рекомендованных ВАК и индексируемых Scopus, что позволяет судить о высокой квалификации автора в исследуемой области.

По результатам ознакомления с авторефератом диссертации сформулированы следующие замечания:

- 1) На стр. 12-14 автореферата автор приводит показатели времени решения вычислительной задачи с помощью созданного алгоритма в различных условиях. Во всех случаях достигнуто существенное ускорение, что, безусловно, следует считать весьма значимым результатом. Вместе с тем, указанные временные отрезки находятся в

диапазоне от нескольких секунд до нескольких тысяч секунд и получены на некоторых тестовых наборах, имеющих, вероятно, синтетическое происхождение. Однако не приводятся сведения о характерном времени решения реальных вычислительных задач и его снижении, позволяющие судить о фактическом повышении производительности труда работающего с созданным ПО исследователя при выполнении моделирования химических соединений.

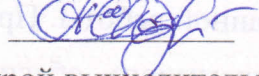
2) В автореферате скупо описан созданный в ходе работы и представленный в числе её основных результатов программный комплекс – в частности, не указано, является ли он самостоятельным приложением, либо реализован в виде некоторого пакета расширения для существующих проблемно-ориентированных программных средств.

Перечисленные замечания не снижают высокой теоретической, научной и практической ценности представленной работы, выполненной на актуальную тему и содержащей научную новизну.

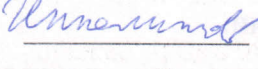
Считаем, что диссертация Фаркова Михаила Александровича соответствует паспорту специальности 05.13.17 – «Теоретические основы информатики» и требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а её автор – заслуживает присуждения учёной степени кандидата технических наук по специальности 05.13.17 – «Теоретические основы информатики».

20.03.2017

ФГБОУ ВО «Иркутский национальный исследовательский технический университет»; 664074, г. Иркутск, ул. Лермонтова, 83; <http://www.istu.edu>

 Доробайков Андрей Сергеевич, к.т.н., доцент, заведующий кафедрой вычислительной техники

тел.: 40-51-63, e-mail: dorbaik@istu.edu

 Ипполитов Александр Александрович, к.т.н., доцент кафедры вычислительной техники.

тел.: 40-51-07, e-mail: ippolitow@mail.ru

