

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Фаркова М.А. на тему «Разработка алгоритмов выполнения молекулярного докинга с использованием графических процессоров», представленная на соискание учёной степени кандидата технических наук по специальности 05.13.17 – «Теоретические основы информатики»

В работе рассматривается вопрос разработки алгоритмов реализации метода дифференциальной эволюции с использованием графических процессоров, а также решения на его основе прикладной задачи молекулярного докинга. Актуальность исследования не вызывает сомнений. Численные методы оптимизации, к которым относится метод дифференциальной эволюции, имеют широкую применимость для решения разнообразных задач, в том числе имеющих высокую вычислительную интенсивность.

К основным научным результатам работы относятся:

1. Алгоритм реализации метода дифференциальной эволюции, учитывающий особенности графических процессоров.
2. Алгоритм расчёта силовых полей межмолекулярного взаимодействия на основе вычисления сеток, адаптированный для графических процессоров.
3. Алгоритм решения задачи молекулярного докинга с использованием графических процессоров.

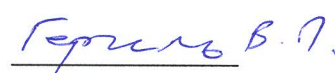
Практическая значимость работы подтверждена актами о внедрении и свидетельствами о регистрации программ для ЭВМ. Достоверность полученных результатов обусловлена публикациями в рецензируемых научных изданиях, рекомендованных ВАК.

Следует отметить несколько замечаний по работе. Не совсем понятно почему соискатель использовал функцию Экли для 100 параметров при сравнительном тестировании производительности различных решений, хотя она показала не эталонную сходимость для разработанного алгоритма. Помимо этого, соискателю следует пояснить почему при сравнительном

тестировании скорости вычисления сеток не производилось сравнение с программой AutoDock Vina, хотя в автореферате указано, что это наиболее быстрое существующее программное обеспечение.

Несмотря на указанные замечания, следует заключить, что исследование выполнено на высоком качественном уровне. Результаты работы имеют очевидное прикладное применение в различных отраслях науки. Диссертация соответствует паспорту специальности, а соискатель, Фарков Михаил Александрович, заслуживает присуждение учёной степени кандидата технических наук.

Гергель Виктор Павлович



Директор Института информационных технологий, математики и механики, доктор технических наук, профессор

Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования

Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им Н.И. Лобачевского,

603950, г. Нижний Новгород, пр. Гагарина, 23 Тел: (831)-462-33-56

Сайт: www.unn.ru E-mail: gergel@unn.ru

Докторская диссертация защищена

по специальности 05.13.12 - Системы автоматизации проектирования (по отраслям)

21.03.2017

