

ОТЗЫВ НА АВТОРЕФЕРАТ

диссертации **Фаркова Михаила Александровича**

на тему «**Разработка алгоритмов выполнения молекулярного докинга с использованием графических процессоров**»,

представленной на соискание ученой степени кандидата технических наук по специальности 05.13.17 – «Теоретические основы информатики»

Актуальность исследования. Применение графических процессоров в составе гетерогенных вычислительных систем уже больше десятилетия позволяет эффективно решать сложные научные задачи за счет специальной аппаратной архитектуры, ориентированной на параллелизм по данным. Аппаратные и, как следствие, программные особенности графических процессоров помимо предлагаемых достоинств, накладывают существенные ограничения на круг задач, которые могут быть эффективно решены с их помощью. Поэтому проводимое исследование по выбору численных методов оптимизации для эффективной реализации на графических процессорах и разработка алгоритмов для решений с их помощью прикладных задач является актуальной.

Научная новизна. К основным научным результатам следует отнести несколько алгоритмов, разработанных для графических процессоров, которые демонстрируют ускорение по сравнению с существующими решениями. Автором предложен новый алгоритм реализации численного метода оптимизации – метода дифференциальной эволюции, на графических процессорах, который позволяет добиться ускорения в задачах, требующих выполнения большого числа процедур оптимизации, за счет параллельной декомпозиции задачи, которая позволяет осуществлять процедуру оптимизации на одном мультипроцессоре графического процессора, даже для функций большого числа переменных. Также, автором предложен алгоритм, позволяющий ускорить вычисление сеток силовых полей с использованием графических процессоров. Кроме того, автором разработан алгоритм выполнения молекулярного лиганд-белкового докинга, демонстрирующий повышение производительности при обработке больших баз химических соединений.

Практическая значимость. Практическая значимость работы обусловлена полученными актами о внедрении, а также свидетельствами о регистрации программ для ЭВМ.

Замечания по автореферату. В автореферате следовало более детально обосновать выбор метода дифференциальной эволюции, исходя из требований, предъявляемых со стороны графических процессоров.

Заключение. Исходя из изложенного и рассмотрения автореферата диссертация, представленная к защите, является законченной научной работой и соответствует паспорту специальности 05.13.17 (Теоретические основы информатики), а ее автор, Фарков Михаил Александрович, заслуживает присуждения ученой степени кандидата технических наук.

Заведующий кафедрой
«Технологии программирования»
Санкт-Петербургского национального
исследовательского университета
информационных технологий, механики
и оптики, докт. техн. наук, профессор

Анатолий Абрамович Шалыто

21.03.2017



С. С. Суров, С. А.

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования «Санкт-Петербургский национальный
исследовательский университет информационных технологий, механики и
оптики» (Университет ИТМО)

197101, Санкт-Петербург, кронверкский проспект, д.49.
Тел. (812) 2324620, E-mail: shalyto@mail.ifmo.ru