

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Фаркова Михаила Александровича
по теме «**Разработка алгоритмов выполнения молекулярного докинга
с использованием графических процессоров**»

на соискание учёной степени кандидата технических наук по специальности
05.13.17 «Теоретические основы информатики»

Исследование посвящено разработке алгоритмов выполнения численной оптимизации с использованием графических процессоров и решения с их помощью прикладной задачи молекулярного лиганд-белкового докинга. Тема диссертации является актуальной. Современные научные исследования требуют проведения всевозрастающего количества вычислительных экспериментов, осуществление которых невозможно без применения современных параллельных вычислительных систем. Для определённых задач можно добиться существенного повышения производительности и точности вычисления за счёт использования гетерогенных вычислительных систем, которые используют графические процессоры. Разработка алгоритмов для подобных систем зачастую требует существенных изменений в алгоритмах, разработанных для центрального процессора, либо разработке совершенно новых подходов, что обусловлено специфичной программно-аппаратной архитектурой.

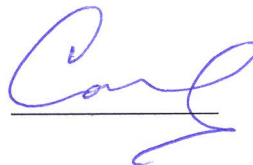
К научным результатам работы следует отнести:

- алгоритм выполнения метода дифференциальной эволюции на графических процессорах, который позволяет выполнять несколько процедур оптимизации одновременно;
- алгоритм вычисления сеток силовых полей на графических процессорах, ускоряющий решение задачи за счёт использования внутреннего параллелизма по данным, а также менеджер времени выполнения, который позволяет дополнительно ускорить процесс за счёт многопоточного управления процессом вычисления большого количества сеток силовых полей;
- алгоритм выполнения молекулярного лиганд-белкового докинга на графических процессорах, который использует два представленных выше алгоритма, позволяет обрабатывать несколько химических соединений одновременно на одном графическом процессоре, что ускоряет обработку больших баз химических соединений.

Практическая значимость работы подтверждена актами о внедрении результатов исследования на предприятиях.

К недостаткам автореферата следует отнести отсутствие результатов тестирования предлагаемого подхода к многопоточному управлению процессом вычисления сеток силовых полей.

Указанное замечание не снижает общий высокий уровень работы. Диссертация является законченной и целостной научной работой, выполненной по актуальной теме, и соответствует паспорту специальности 05.13.17 – «Теоретические основы информатики», а её автор заслуживает присуждения степени кандидата технических наук.



14.03.2017 г.

Соколов Валерий Анатольевич
доктор физ.-мат. наук, профессор,
зав. кафедрой теоретической информатики,
Ярославский государственный университет им. П.Г. Демидова
150003, г. Ярославль, ул. Советская, 14
e-mail: rectorat@uniyar.ac.ru
тел: (485)278-86-05
факс: (485)225-57-87

