

## ОТЗЫВ

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

Целью работы является разработка алгоритмов реализации численных методов оптимизации на графических процессорах и решения с их помощью прикладной задачи молекулярного лиганд-белкового докинга, что говорит об актуальности исследования, так как, помимо решения сугубо практической прикладной задачей, автором исследования поставлена цель разработать алгоритм, который, за счёт использования параллельных возможностей современных графических процессоров, позволит повысить эффективность выполнения численной оптимизации, что является неотъемлемой частью решения широкого круга задач в различных прикладных областях.

В качестве научных результатов автором приводятся: алгоритм выполнения метода дифференциальной эволюции на графических процессорах, который позволяет добиться ускорения за счёт выполнения большого количества процедур оптимизации на одном графическом процессоре, за счёт изменения параллельной декомпозиции задачи, что отличает приведённое решение от существующих подходов; алгоритм вычисления сеток силовых полей на графических процессорах, который позволяет ускорить вычисление попарных потенциалов за счёт проецирования задачи на большое количество вычислителей графического процессора; алгоритм выполнения молекулярного лиганд-белкового докинга, который позволяет повысить скорость обработки больших баз химических соединений (скрининг).

Результаты работы апробированы на конференциях различного уровня, а также опубликованы в 4 издания, рекомендованных ВАК. Практическую

значимость работы подтверждают свидетельства о регистрации программ для ЭВМ, а также акты внедрения на предприятиях.

Для упрощения понимания предлагаемого алгоритма выполнения метода дифференциальной эволюции на графических процессорах в автореферате следовало привести его блок-схему, либо uml-диаграмму.

Указанный недочёт не снижает значимость проделанной работы. Диссертация отвечает требованиям ВАК о присуждении учёных степеней и соответствует паспорту специальности 05.13.17. Считаю, что Фарков Михаил Александрович заслуживает присуждения учёной степени кандидата технических наук.

Водяхо Александр Иванович  
Профессор кафедры вычислительной техники  
Санкт-Петербургского государственного  
электротехнического университета (ЛЭТИ)  
им.В.И.Ульянова (Ленина)  
т. (812) 234 25 03, aivodyaho@mail.ru  
д.т.н.,проф.

А.И.Водяхо

Подпись А.И. Водяхо заверяю:

Начальник отдела диссертационных советов

Русяева Т.Л.

20 марта 2017 г.



197376, г. Санкт-Петербург, ул. Профессора Попова, д. 5,  
Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет