

ОТЗЫВ

официального оппонента **Кузнецова Александра Алексеевича** на диссертацию **Фаркова Михаила Александровича** на тему «Разработка алгоритмов выполнения молекулярного докинга с использованием графических процессоров» по специальности 05.13.17 – «Теоретические основы информатики»

Актуальность темы диссертации

Целью работы является разработка алгоритмов реализации численных методов оптимизации на базе гетерогенных вычислительных систем, использующих графические процессоры, и решение с их помощью задачи молекулярного лиганд-белкового докинга. Основной областью применения молекулярного докинга является разработка новых лекарств, что является актуальной проблемой и кроме того – высокоинтенсивной биоинформационной задачей, для решения которой применение высокопроизводительных вычислений позволит существенным образом ускорить процесс и снизить финансовые затраты.

Кроме того, актуальность исследования подчёркивает то, что область исследования входит в перечень критических технологий Российской Федерации (пункт 8 «Нано-, био-, информационные, когнитивные технологии»; пункт 18 «Технологии и программное обеспечение распределенных и высокопроизводительных вычислительных систем»).

Содержание диссертации

Диссертация состоит из введения, четырёх глав, заключения, списка использованных источников, списка терминов и определений и приложения. Список использованных источников включает 135 наименований.

Во введении обоснована актуальность, сформулированы цель и основные задачи исследования; приведены положения, выносимые на защиту; обоснована научная новизна; указаны данные об апробации диссертации.

В первой главе описана задача молекулярного лиганд-белкового докинга в контексте оптимизационной задачи. Исследованы существующие численные методы оптимизации, а также их использование в существующих решениях задачи молекулярного докинга. Существующие методы численной

оптимизации рассмотрены в контексте их возможной реализации на графических процессорах. Для исследования выбран метод дифференциальной эволюции в качестве метода оптимизации.

Во второй главе выделены недостатки существующих реализаций метода дифференциальной эволюции на графических процессорах и предложен новый алгоритм, который позволил повысить эффективность использования ресурсов графического процессора.

В третьей главе предложены алгоритмы вычисления сеток силовых полей на графических процессорах и выполнения молекулярного лиганд-белкового докинга с использованием графических процессоров.

В четвёртой главе приведены результаты тестирования разработанных алгоритмов.

В заключении сформулированы основные результаты диссертации.

В приложении содержатся акты о внедрении.

По теме диссертации опубликовано 9 работ, из них 4 в изданиях, рекомендованных ВАК, одна в издании, индексированном в Scopus. Получено два свидетельства о регистрации программ для ЭВМ.

Научная новизна исследований и практическая значимость полученных результатов

Автором разработан ряд алгоритмов, которые позволяют улучшить решение прикладной задачи.

- Предложен алгоритм выполнения метода дифференциальной эволюции, который использует графические процессоры и позволяет выполнять несколько процедур численной оптимизации одновременно на графическом процессоре. Разработанный алгоритм может быть использован для решения других прикладных задач, помимо молекулярного лиганд-белкового докинга, требующих интенсивных вычислений большого количества процедур оптимизации.

- Предложен алгоритм вычисления сеток силовых полей, позволяющий эффективно проводить высокоинтенсивные вычисления за счёт равномерной загрузки графических процессоров.

- Предложен алгоритм выполнения молекулярного лиганд-белкового докинга с использованием графических процессоров, использующий преимущества описанных выше алгоритмов. Предложенный алгоритм позволяет эффективно решать высокоинтенсивную задачу докинга.

Предложенные алгоритмы реализованы в виде комплекса программного обеспечения, который демонстрирует значительное ускорение решаемых задач по сравнению с существующими решениями, что обуславливает практическую значимость работы.

Достоверность результатов диссертации

Достоверность результатов диссертации обусловлена апробацией результатов диссертации на научных конференциях и публикациями в рецензируемых журналах. Автор комплексно подошёл к изучению существующих методов численной оптимизации и их применения в рамках прикладной области. Список использованных источников включает в себя большое количество статей по теме исследования, опубликованных в ведущих мировых рецензируемых изданиях. Проведено всестороннее сравнительное тестирование предложенных алгоритмов на различных вычислительных системах.

Замечания по диссертации

Следует отметить ряд замечаний по работе.

- Автореферат содержит информацию о том, что по результатам диссертационного исследования опубликовано 9 работ (4 в изданиях, рекомендованных ВАК), в то время как в рукописи значится 8 работ (3 в изданиях, рекомендованных ВАК). По всей видимости, это обусловлено тем, что последняя работа была опубликована уже после выставления рукописи диссертации на сайте.

- Утверждение на странице 26 «Метод Монте-Карло в общем случае демонстрирует достаточную низкую скорость сходимости по сравнению с альтернативными методами» следовало подкрепить ссылками.

- Разработанный алгоритм выполнения метода дифференциальной эволюции сравнивался с реализацией на центральном процессоре, но при этом не приводится деталей реализации.

- Выбор численного метода оптимизации для дальнейшего изучения следовало дополнить сравнением скорости сходимости различных методов.

- В диссертации не приведены оценки эффективности использования параллельным алгоритмом процессоров при решении задач (величина

эффективности определяет среднюю долю времени выполнения алгоритма, в течение которой процессоры реально задействованы для решения задачи).

При этом следует подчеркнуть, что указанные замечания не уменьшают значимость работы.

Заключение

Диссертация Фаркова Михаила Александровича является законченной научной работой, тема исследования которой является актуальной. В работе решена научная задача ускорения выполнения молекулярного лиганд-белкового докинга. Результаты исследования достоверны и подкреплены всесторонним тестированием и апробацией. Выводы работы обоснованы.

Диссертация соответствует пункту 12 («Разработка математических, логических, семиотических и лингвистических моделей и методов взаимодействия информационных процессов, в том числе на базе специализированных вычислительных систем») паспорта специальности 05.13.17 – «Теоретические основы информатики».

Считаю, что диссертация соответствует пункту 9 «Положения о порядке присуждения учёных степеней» постановления Правительства Российской Федерации от 24.09.2013 г. № 842, а её автор Фарков Михаил Александрович заслуживает присуждения учёной степени кандидата технических наук.

Профессор кафедры прикладной математики, ФГБОУ «Сибирский государственный аэрокосмический университет имени академика М.Ф. Решетнева», доктор физико-математических наук, доцент

20.03.2017

 Кузнецов Александр Алексеевич

660037, Красноярский край, г. Красноярск, проспект им. газеты Красноярский рабочий, 31, ФГБОУ ВО «Сибирский государственный аэрокосмический университет имени академика М.Ф. Решетнева». Тел. +7(902) 929-92-39, email: kuznetsov@sibsau.ru

Подпись Кузнецова Александра Алексеевича удостоверяю:

Секретарь Ученого совета ФГБОУ «Сибирский государственный аэрокосмический университет имени академика М.Ф. Решетнева»

Гончаров Александр



