

Отзыв официального оппонента

на диссертацию *Фаркова Михаила Александровича*

на тему «*Разработка алгоритмов выполнения молекулярного докинга с использованием графических процессоров*», представленную на соискание учёной степени кандидата технических наук по специальности 05.13.17 – «Теоретические основы информатики»

Актуальность исследования

Графические процессоры предоставляют значительные вычислительные ресурсы, однако их специфическая аппаратная архитектура налагает ограничения на класс алгоритмов, которые могут быть на них реализованы, а также требует существенных переработок алгоритмов или разработки новых, которые могут эффективно использовать возможности графических процессоров. Кроме того, необходимо отметить высокую актуальность прикладной задачи, рассматриваемой в диссертации, а именно молекулярного докинга, представляющего собой компьютерное моделирование взаимодействия молекул, основной областью применения которого является разработка лекарственных препаратов. В этом свете актуальность области исследования не вызывает сомнений.

Содержание

Объём диссертации равен 114 страниц. Рукопись включает 23 рисунка, 11 таблиц и 53 формулы. Список использованных источников насчитывает 135 наименований. Работа состоит из введения, четырёх глав, заключения, список терминов и определений, приложения.

Основные научные результаты

Автором исследования получены следующие новые научные результаты:

1. Соискателем предложен альтернативный подход к параллельной декомпозиции выполнения дифференциальной эволюции на графическом процессоре. Предложенный подход призван увеличить количество

одновременно выполняемых процедур оптимизации, а также обеспечить автономность их выполнения по отношению к центральному процессору, что позволяет эффективно балансировать нагрузку (выполняемые процедуры оптимизации) при обработке больших наборов данных, и таким образом, повысить скорость счета. Предложенная соискателем методика организация вычислений на GPU является существенным шагом вперед по сравнению с аналогичными работами, и более того, представляет собой важный пример того, как архитектура графических процессоров может быть использована для оптимизации вычислительных алгоритмов.

2. Предложен алгоритм вычисления сеток межмолекулярного взаимодействия с использованием графического процессора. Алгоритм использует параллелизм по данным в решаемой задаче и эффективно распределяет вычисления по всем доступным вычислителям графического процессора, что имеет исключительно важное значение для реализации любого, не только рассмотренного алгоритма на GPU.

3. Предложен алгоритм решения задачи молекулярного лиганд-белкового докинга на графических процессорах. Разработанное решение использует возможности двух ранее предложенных алгоритмов для ускорения вычислений, что принципиально важно для решения прикладной задачи. Успешное применение разработанных алгоритмов для решения прикладной задачи демонстрирует их практическую значимость.

Достоверность результатов диссертации

Достоверность результатов подтверждена публикациями в рецензируемых научных изданиях, рекомендованных ВАК (в том числе индексируемых в Scopus). Также основные результаты озвучены на всероссийских и международных научных конференциях. Всего опубликовано 8 работ, из них 3 в изданиях, рекомендованных ВАК. Получено два свидетельства о регистрации программ для ЭВМ в Федеральном институте промышленной собственности (Роспатент).

Практическая значимость результатов исследования

Практическая значимость результатов выражается в том, что предложенные программные средства позволяют существенным образом ускорить решения как прикладной задачи (молекулярного докинга), так и других задач. В частности, задач, требующих выполнения большого количества процедур оптимизации, а также вычисления сеток попарных потенциалов, в различных прикладных областях физики, таких, как физика полупроводников, физика газового разряда в присутствии примесей, физическая химия, газодинамика а также все приложения метода молекулярной динамики. Практическую значимость результатов исследования подчёркивает успешное внедрение результатов исследования на производстве, что подтверждено двумя актами о внедрении.

Замечания по диссертации

К диссертации есть несколько замечаний.

1. Используемый в диссертации подход молекулярного докинга (в частности, расчет ван-дер-Ваальсовых взаимодействий) близко к методу молекулярной динамики, а полученные результаты, в особенности, вычисление сеток попарных потенциалов являются актуальными для этого широко используемого метода. В связи с этим необходимо дать краткий обзор сходств и различий метода молекулярного докинга и молекулярной динамики и очертить круг задач, решаемых в рамках того и другого метода.

2. Предлагаемый подход к параллельной декомпозиции задачи выполнения метода дифференциальной эволюции подразумевает создание нитей графического процессора в количестве большем чем физическое количество элементарных вычислителей в пределах одного мультипроцессора, что должно сглаживаться за счёт диспетчеризации групп нитей со стороны графического процессора, однако для подтверждения этого следовало включить результаты загрузки мультипроцессоров (осцирапсу).

3. На странице 34 в части описания объёма требуемой памяти для каждого вектора метода дифференциальной эволюции приводится формула для вычисления объёма $(D+1)*NP*sizeof(float)$, при этом пояснения переменных D

и NP в пределах раздела не даны. Кроме того, необходимо пояснить, какими могут быть значения этого объема в практически важных случаях.

4. Учитывая известные (например, из таблицы 4.8) данные о конфигурации графического процессора Tesla K20, следует пояснить незначительное различие по фактически достигнутой производительности между ним и значительно менее мощным Tesla M2090 (таблица 4.4).

5. Данные по производительности, приведенные в главе 4, приведены в различном формате, иногда это ускорение относительно одного ядра CPU, иногда нескольких, или время выполнения. Таблицы снабжены исчерпывающими пояснениями, тем не менее, для улучшения читаемости целесообразно было бы привести данные по ускорению к единому формату.

Заключение

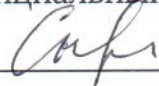
Несмотря на указанные замечания диссертация Фаркова Михаила Александровича обладает внутренним единством и является законченной научно-квалификационной работой.

Основным достоинством данной диссертации является то, что это работа, посвященная созданию эффективных алгоритмов решения важной практической задачи на графических процессорах. Оппонент выражает надежду, что работа Фаркова М.А. поможет развеять скептицизм специалистов в области физики, химии и биологических наук по отношению к использованию графических процессоров.

Тема диссертации является актуальной. Результаты работы подкреплены тестированием, апробированы на научно-практических конференциях и опубликованы в рецензируемых изданиях. Диссертация соответствует пунктам 12 («Разработка математических, логических, семиотических и лингвистических моделей и методов взаимодействия информационных процессов, в том числе на базе специализированных вычислительных систем») и 14 («Разработка теоретических основ создания программных систем для новых информационных технологий») паспорта специальности 05.13.17 – «Теоретические основы информатики».

Диссертация соответствует требованиям п.9 «Положения о порядке присуждения учёных степеней» постановления Правительства Российской Федерации от 24.09.2013 г. № 842, а соискатель Фарков Михаил Александрович заслуживает присуждения учёной степени кандидата технических наук.

Официальный оппонент



Снытников Алексей Владимирович

20 марта 2017

Научный сотрудник лаборатории параллельных алгоритмов решения больших задач.

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт вычислительной математики и математической геофизики Сибирского отделения РАН. 630090, г.Новосибирск, пр.Лаврентьева 6, тел. +7(383) 3309665
эл.почта snytav@ssd.sccc.ru

Кандидат физико-математических наук. 05.13.18 - математическое моделирование, численные методы и комплексы программ. Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт вычислительной математики и математической геофизики Сибирского отделения РАН.

630090, г.Новосибирск, пр.Лаврентьева 6, тел.: +7 (383) 330 83 53 Факс: +7 (383) 330 87 83, +7 (383) 330 66 87

E-mail: contacts@sscc.ru

Подпись Снытнникова Алексея Владимировича удостоверяю:

Ученый секретарь Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института вычислительной математики и математической геофизики

Сибирского отделения РАН





Марченко Михаил Александрович