

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА Д 212.099.22 на базе  
федерального государственного автономного образовательного учреждения  
высшего образования «Сибирский федеральный университет»,  
Министерство образования и науки Российской Федерации  
ПО ДИССЕРТАЦИИ НА СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ КАНДИДАТА НАУК

аттестационное дело № \_\_\_\_\_

решение диссертационного совета от **07.04.2017** г. № **3**

О присуждении Фаркову Михаилу Александровичу, гражданину Российской Федерации, ученой степени кандидата технических наук.

Диссертация «Разработка алгоритмов выполнения молекулярного докинга с использованием графических процессоров» по специальности 05.13.17 - Теоретические основы информатики принята к защите 17.01.2017 протокол №3.2 диссертационным советом Д 212.099.22 на базе Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Сибирский федеральный университет», Министерство образования и науки Российской Федерации, 660041, пр. Свободный, 79, г. Красноярск. Приказ о создании диссертационного совета Д 212.099.22 № 97/нк от 09.02.2015 г.

Соискатель Фарков Михаил Александрович, 1989 года рождения, в 2011 году окончил Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Сибирский федеральный университет». В 2014 г. окончил аспирантуру ФГАОУ ВПО «Сибирский федеральный университет». Работает начальником отдела биллинг-систем Общества с ограниченной ответственностью «Мобилфон», г. Красноярск.

Диссертация выполнена на кафедре вычислительной техники ФГАОУ ВО «Сибирский федеральный университет», Министерство образования и науки Российской Федерации.

Научный руководитель – доктор технических наук, профессор Легалов Александр Иванович, ФГАОУ ВО «Сибирский федеральный университет», кафедра вычислительной техники, заведующий кафедрой.

Официальные оппоненты:

Кузнецов Александр Алексеевич – доктор физико-математических наук, доцент, ФГБОУ ВО «Сибирский государственный аэрокосмический университет имени академика М.Ф. Решетнева», кафедра прикладной математики, профессор.

Снытников Алексей Владимирович – кандидат физико-математических наук, ФГБУН «Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН», лаборатория параллельных алгоритмов решения больших задач, научный сотрудник.

Ведущая организация ФГБНУ «Федеральный исследовательский центр «Красноярский научный центр Сибирского отделения Российской академии наук», г. Красноярск, в своем положительном заключении, подписанном Садовским Михаилом Георгиевичем, доктором физико-математических наук, ведущим научным сотрудником отдела вычислительной математики Института вычислительного моделирования СО РАН – обособленного подразделения ФИЦ КНЦ СО РАН, указала, что диссертация соответствует критериям, установленным п.9 «Положения о порядке присуждения ученых степеней».

Соискатель имеет 15 опубликованных работ, в том числе по теме диссертации 9 работ, опубликованных в рецензируемых научных изданиях – 4 работы. Наиболее значимые работы:

1. Farkov, M. Calculation of force field grids for molecular docking using GPU / M. Farkov // **Journal of Siberian Federal University. Biology.** – 2014. – Т.7, № 1. – С. 4-13.

2. Фарков, М.А. Улучшение реализации метода дифференциальной эволюции на графических процессорах / М.А. Фарков, А.И. Легалов // **Вестник Сибирского государственного аэрокосмического университета имени академика М.Ф. Решетнева.** – 2014. – Т. 3, № 55. – С. 157-161.

3. Фарков, М.А. Применение методов оптимизации для выполнения молекулярного докинга на графических процессорах / М.А. Фарков, А.И. Легалов // **Моделирование и анализ информационных систем.** – 2014. – Т. 21, № 5. – С. 93-101.

4. Farkov, M.A. Application of Numerical Optimization Methods to Molecular Docking on Graphics Processing Units / M.A. Farkov, A.I. Legalov // **Automatic Control and Computer Sciences.** – 2016. – Т.50, №7. – С. 471-476.

На автореферат дали отзывы:

1. Гергель В.П. – д-р техн. наук, профессор, ННГУ (г. Нижний Новгород) с 2 замечаниями; 2. Дорофеев А.С. – канд. техн. наук, доц. и Ипполитов А.А. – канд. техн. наук, доц., ИрННТУ (г. Иркутск) с 2 замечаниями; 3. Затуливетер Ю.С. – канд. техн. наук, ИПУ РАН (г.Иркутск)с 3 замечаниями; 4. Соколов В.А. – д-р физ.-мат. наук, проф., Яр ГУ (г.Ярославль) с 1 замечанием; 5. Шалыто А.А. – д-р техн. наук, проф., Университет ИТМО (г.Санкт-Перербург) с 1 замечанием; 6. Водяхо А.И. – д-р техн. наук, проф., СПбЭТУ «ЛЭТИ» (г.Санкт-Перербург) с 1 замечанием; 7. Мурзин Ф.А. – канд. физ.-мат. наук, ИСИ СО РАН г.Новосибирск) с 1 замечанием.

Все отзывы положительные, актуальность, научная новизна и практическая значимость работы не ставятся под сомнение. Замечания касаются того, что в автореферате недостаточно подробно описано разработанное программное обеспечение, а также отсутствует развёрнутое описание масштабируемости предложенных решений. Также замечания касаются недостаточно подробного описания процедуры тестирования предложенных алгоритмов. Ряд замечаний носит рекомендательно-дискуссионный характер.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается сферой их научных интересов, широко известными результатами и опытом деятельности в области разработки алгоритмов для решения прикладных задач с использования высокопроизводительных вычислительных систем, в том числе использующих графические процессоры, что подтверждается их научными публикациями.

**Диссертационный совет отмечает,** что на основании выполненных соискателем исследований: *разработан* алгоритм реализации метода дифференциальной эволюции на графических процессорах; *предложен* алгоритм выполнения молекулярного лиганд-белкового докинга с использованием графических процессоров, позволяющий повысить эффективность выполнения скрининга баз химических соединений; *предложен* алгоритм вычисления сеток межмолекулярного взаимодействия с использованием графических процессоров; *доказана* эффективность использования представленных алгоритмов для решения задачи молекулярного лиганд-белкового докинга.

**Теоретическая значимость исследования** обоснована тем, что *изложены* вопросы, касающиеся адаптации численных методов оптимизации к специфическим программно-аппаратным требованиям графических процессоров; *проведена модернизация* существующих алгоритмов выполнения численной оптимизации с использованием метода дифференциальной эволюции на графических процессорах; *доказана* эффективность применения предложенных в работе алгоритмов вычисления сеток межмолекулярного взаимодействия, выполнения множества процедур оптимизации и выполнения молекулярного лиганд-белкового докинга с использованием гетерогенных вычислительных систем, в состав которых входят графические процессоры.

**Значение полученных соискателем результатов исследования для практики** подтверждается тем, что *показана* эффективность разработанных алгоритмов по сравнению с алгоритмами, использующими только возможности центрального процессора; *разработаны и использованы* программы для вычисления сеток межмолекулярного взаимодействия, а также выполнения молекулярного лиганд-белкового докинга.

**Оценка достоверности результатов исследования** выявила: для *экспериментальных исследований* применялись различные конфигурации аппаратного обеспечения, позволяющие всесторонне оценить универсальность, масштабируемость и эффективность предлагаемых алгоритмов в различном окружении; *использованы* для подтверждения работоспособности предложенного алгоритма выполнения метода дифференциальной эволюции на графических процессорах тестовые функции, традиционно применяющиеся для тестирования сходимости численных методов оптимизации; *установлено* качественное и количественное совпадение результатов представленных автором с результатами в независимых работах по данной тематике; для оценки точности предложенного алгоритма выполнения молекулярного лиганд-белкового докинга *использованы* модели пар белок-лиганд, полученные точными средствами кристаллографии, загруженные из общедоступных баз данных и широко применяемые для оценки точности подобных алгоритмов.

**Личный вклад** соискателя состоит в том, что лично автором предложены алгоритмы вычисления сеток межмолекулярного взаимодействия с использованием графических процессоров, выполнения множества процедур численной оптимизации с использованием метода дифференциальной эволюции на графических процессорах, выполнения молекулярного лиганд-белкового докинга с использованием графических процессоров. Соискателем лично выполнены все работы по созданию программ для ЭВМ, проведены все экспериментальные исследования. Соискатель непосредственно участвовал в постановке задач исследования, подготовке публикаций по теме исследования.

Диссертация является завершённой научно-квалификационной работой, в которой решена важная научно-техническая задача разработки алгоритмов реализации одного из методов численной оптимизации – метода дифференциальной эволюции на графических процессорах и эффективного осуществления с их помощью молекулярного лиганд-белкового докинга, что имеет существенное значение для развития биоинформационных технологий, направленных на создание новых химических соединений и лекарственных препаратов, а также повышения скорости и точности выполнения прикладных исследований, требующих интенсивного применения численных методов оптимизации.

На заседании 07.04.2017 года диссертационный совет принял решение присудить Фаркову М.А. ученую степень кандидата технических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 17 человек, из них 6 докторов наук по специальности 05.13.17 - Теоретические основы информатики, участвовавших в заседании, из 22 человек, входящих в состав совета, проголосовали: за присуждение ученой степени кандидата технических наук – 17, против – 0, недействительных бюллетеней – 0.

Председатель диссертационного совета

Учёный секретарь диссертационного совета

07 апреля 2017 г.



Г.М. Цибульский

Л.И. Покидышева