

ОТЗЫВ*

**на автореферат диссертации Фаркова Михаила Александровича
по теме: «Разработка алгоритмов выполнения молекулярного докинга с
использованием графических процессоров», представленной на
соискание учёной степени кандидата технических наук**

Отображение различных алгоритмов на архитектуры компьютеров, включающих в себя графические процессоры, является актуальной задачей важной для практических применений, т.к. это позволяет во многих случаях получить значительный прирост в производительности вычислений.

Автором диссертации сформулированы критерии выбора методов численной оптимизации с точки зрения особенностей программно-аппаратной архитектуры на основе графических процессоров и сделан аргументированный выбор в пользу реализации на графических процессорах метода дифференциальной эволюции. В работе рассмотрены существующие подходы к реализации метода дифференциальной эволюции на графических процессорах, выделены их недостатки и предложен новый алгоритм, который позволяет их преодолеть. На основе данного алгоритма разработан подход к решению задачи молекулярного лиганд-белкового докинга на графических процессорах, который помимо адаптированного алгоритма выполнения оптимизации, также включает в себя разработанный автором подход к вычислению сеток межмолекулярного взаимодействия. Итоговый алгоритм реализован в виде законченного программного пакета, для которого получено свидетельство о регистрации программ для ЭВМ в Федеральном институте промышленной собственности.

Замечание. Целесообразно, чтобы в автореферате было приведено больше данных относительно тестирования алгоритмов на производительность.

Указанное замечание не уменьшает значимость работы. Считаю, что диссертация является законченной научно-квалификационной работой,

удовлетворяющей требованиям ВАК и соответствующей паспорту специальности 05.13.17, а её автор заслуживает присуждения учёной степени кандидата технических наук.

Мурзин Федор Александрович

20.03.2017

дата

Мурзин
ПОДПИСЬ

Кандидат физико-математических наук
Заместитель директора по научной работе
ОРГАНИЗАЦИЯ

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт систем информатики им. А.П. Ершова Сибирского отделения
Российской академии наук (ИСИ СО РАН)

e-mail: murzin@iis.nsk.su

тел: (383) 330-70-68

факс: (111) 332-34-94

Подпись Мурзина Ф.А. заверяю:

Ученый секретарь
(должность)

Промский А.В.
(ФИО)



630090, г. Новосибирск, пр.Академика Лаврентьева, 6