

## ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Фаркова Михаила Александровича на тему «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»

Актуальность работы обуславливается необходимостью снижения сроков создания новых лекарственных препаратов, что в значительной части обеспечивается моделированием с применением высокопараллельных систем, обеспечивающих ускорение вычислений за счёт распараллеливания.

Целью проводимого исследования является разработка параллельных алгоритмов реализации численных методов оптимизации для повышения скорости их выполнения в гетерогенных вычислительных системах, использующих графические процессоры, а также решение с их помощью задачи молекулярного лиганд-белкового докинга.

К научным результатам относится разработка на основе известных математических методов и решений рассматриваемой задачи новых компоновок алгоритмов её решения, ориентированных на эффективное распараллеливание в гибридной вычислительной среде с включением графических процессоров с массовым, аппаратно реализованным параллелизмом.

Практическая значимость построенных алгоритмов параллельных вычислений достаточно убедительно представлена в автореферате таблицами сравнительных тестов разработанного на их основе программного обеспечения, которые демонстрируют преимущество предлагаемых алгоритмов и программ в скорости достижения искомого решения по сравнению с существующими программными пакетами.

Результаты работы доложены на конференциях различного уровня, опубликованы в 9 работах, 4 из которых – в изданиях рекомендованных ВАК.

В качестве наиболее существенных недостатков автореферата следует отметить:

- отсутствие формализованного представления структуры вычислительной среды с включением графических процессоров в контексте рассмотрения методов распараллеливания алгоритмов, что затрудняет понимание особенностей конкретного метода решения;

- в представлении результатов тестирования недостаточное внимание уделено сравнению построенных алгоритмов с известными по критерию близости получаемых результатов к точным решениям;
- отсутствие развёрнутых комментариев по поводу диапазона линейной масштабируемости скорости вычислений на основе предлагаемых решений при увеличении общего количества вычислительных ядер используемых графических ускорителей.

Указанные недостатки автореферата не носят принципиального характера, однако не позволяют, на наш взгляд, в полной мере раскрыть те особенности предложенных решений, которые привели к значительному ускорению вычислений, подтверждённому в ходе тестирования.

Диссертационная работа М.А. Фаркова отвечает требованиям ВАК к кандидатским диссертациям и соответствует паспорту специальности 05.13.17 - «Теоретические основы информатики».

Автор заслуживает присуждения учёной степени кандидата технических наук по указанной специальности.

Затуливетер Юрий Семёнович

20.03.17

К.т.н. (05.13.11 – «Математическое и программное обеспечение вычислительных машин, комплексов и компьютерных сетей», 05.13.15 – «Вычислительные машины и системы»), с.н.с.

Ведущий научный сотрудник,

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки

Институт проблем управления им. В.А. Трапезникова РАН

Почтовый адрес:

ул. Профсоюзная, д. 65, ИПУ РАН, лаб. 31, г. Москва, 117997.

Тел.: +7 (495) 334-92-09.

E-mail: zvt@ipu.rssi.ru

