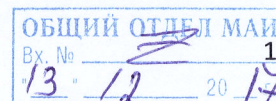


ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертацию Семенова Сергея Александровича «Технология программирования алгоритмов молекулярно-динамического моделирования наносистем на графических процессорах», представленной на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук по специальностям 05.13.11 «Математическое и программное обеспечение вычислительных машин, комплексов и компьютерных сетей», 05.13.18 «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ».

Диссертация Семенова С. А. посвящена разработке методов программирования алгоритмов молекулярной динамики на графических процессорах и созданию соответствующего программного комплекса. Такие системы получили широкое распространение, так как имеют множество вычислительных ядер и низкое энергопотребление, но не полностью оснащены программным обеспечением ввиду того, что эта технология появилась относительно недавно. Это обуславливает **актуальность темы** диссертационной работы. В настоящее время вычислительные системы достигли предела производительности одного ядра, поэтому разработчики перешли к многоядерным моделям процессоров. Благодаря сопутствующему спросу на игровые ускорители таким производителям как NVIDIA удалось развить линейку графических и гибридных вычислителей. На серийных серверных, персональных настольных, мобильных вычислителях в первую очередь решались задачи графики, однако в дальнейшем появились успешные реализации вычислительных процедур для решения других задач. Одной из перспективных областей применения графических процессоров является молекулярно-динамическое моделирование. При этом важной задачей является возможность интеграции программных модулей с имеющимися программными комплексами и технологичность разработки, которая позволит объединять наработки отдельных исследовательских групп в одну систему.

В диссертационной работе Семенова С. А. получен **ряд новых научных результатов**. К ним относятся: методы отображения вычислительных процессов на архитектуру видеокарт, способы наследования классов в технологии CUDA, обеспечивающие возможность быстрого оснащения программ новыми потенциалами межчастичного взаимодействия, подходы к масштабированию программных комплексов на современные вычислители NVIDIA, что обеспечивает возможность увеличения производительности вычислений без изменения кода, методы повышения эффективности распараллеливания вычислений на графических процессорах, использование гибридной модели расчётной области,



методы размещения данных в памяти видеокарты с целью минимизации конфликтов доступа при параллельном обращении, оценки вычислительной сложности алгоритмов, методы математического моделирования аномальных режимов теплопроводности наносистем.

Практическая ценность работы состоит в том, что построенный в результате исследования программный комплекс может использоваться в качестве примера построения аналогичных проектов для решения задач, как молекулярной динамики, так и других задач динамики частиц. Представленная технология позволяет осуществить единый подход к созданию программного обеспечения на графических процессорах с учетом требований каждой отдельной задачи без трудоемкой разработки полного цикла.

Общая характеристика работы. Рецензируемая работа состоит из введения, четырех глав, заключения, глоссария, списка литературы.

Во **введении** сформулирована цель и задачи работы, обоснована актуальность исследования, научная новизна, практическая ценность, описана структура работы, сформулированы основные результаты, выносимые на защиту, приведены данные о научных конференциях, на которых докладывались основные результаты.

В **первой главе** на основе анализа методов молекулярной динамики обосновывается выбор разностной схемы интегрирования, потенциала межчастичного взаимодействия, геометрических аспектов, актуальных для решения поставленных задач. Рассмотрены возможности GPU применительно к эффективной реализации параллельных алгоритмов. Отмечено, что использование технологии CUDA позволяет реализовывать процедуры, которые могут выполнять одновременно множество независимых потоков.

Вторая глава посвящена описанию реализации алгоритмов молекулярно-динамического моделирования на графических процессорах. Основные результаты данной главы следующие.

Предложены подходы к повышению эффективности параллельных вычислений, включающие использование гибридной модели поиска ближних частиц. Применение такой модели позволяет достичь одновременно и вычислительной сложности $O(N)$ в наиболее затратной по времени части программного комплекса, и независимости параллельных потоков по памяти. Общие положения отображения вычислительной модели на графические вычислители создают основу технологии программирования алгоритмов молекулярно-динамического моделирования для их эффективной реализации на видеокартах. Для оптимизации вычислений сложных многочастичных потенциалов процедура расчета разбивается на составные части таким образом, чтобы задействовать параллельные потоки и аппаратные возможности.

Для организации программного проекта предлагается новый для графических процессоров подход, представляющий собой инкапсуляцию процедур в классы.

Проведено теоретическое исследование оценки вычислительной сложности реализованных алгоритмов и требуемых затрат памяти в зависимости от количества атомов и используемого числа процессоров.

Следует также отметить разработанную систему визуализации, которая дает возможность в реальном времени видеть влияние заданных начальных условий на процесс моделирования и при необходимости изменять их, не дожидаясь окончательных результатов моделирования.

В третьей главе описываются результаты вычислительных экспериментов, выполненных на программном обеспечении, разработанном в рамках предлагаемой технологии. Показана эффективность реализации молекулярно-динамического моделирования со сложным потенциалом межчастичного взаимодействия на видеокартах.

С использованием разработанного программного комплекса проведено моделирование отдельных известных углеродных структур и вычислены их параметры. Результаты моделирования соответствуют результатам, полученным с использованием программного комплекса LAMMPS, а полученные значения параметров совпадают как с параметрами использованного потенциала, так и близки к значениям, полученным в других программных комплексах и лабораторных экспериментах. При этом следует отметить преимущества разработанного комплекса по скорости и точности моделирования.

Проанализировано влияние архитектуры GPU NVIDIA на скорость вычислений различных задач. Выявлено преимущество перед CPU. Показано, что для эффективных вычислений необходимо учитывать архитектуру графических процессоров и разбивать данные для размещения в различных видах памяти.

Проведено сравнение скорости вычисления потенциалов на разных моделях пространства, показано преимущество гибридной модели по сравнению с ячеистой моделью пространства.

Четвертая глава посвящена вопросам молекулярно-динамического моделирования теплопроводности углеродных наноматериалов. Особое внимание уделено аномальным режимам теплопроводности графеновых листов и нанотрубок. Предложены методы описания аномальных режимов с использованием молекулярно-динамической модели и подробно - дифференциальных уравнений. Результаты, полученные в данной главе, вносят существенный вклад в развитие методов математического моделирования и соответствуют паспорту специальности 05.13.18.

Достоверность результатов работы обеспечена корректностью применяемой математической модели, тестированием программного обеспечения на

представительном ряде задач, сравнением результатов моделирования и известными экспериментальными и расчетными данными.

Замечания. Работа выполнена на высоком уровне, однако не лишена недостатков, среди которых можно отметить следующие:

1. Обзор исследований по применению графических процессоров в научных исследованиях очень краток. Не приведены примеры трудностей, с которыми столкнулись разработчики подобных программных систем.

2. В работе имеются незначительные опечатки, например в формуле 1.98 на стр. 47 вместо a_{cc} должно быть a .

3. В работе все расчеты выполнены с одинарной точностью, то есть с использованием типа переменных float. Не проанализирована возможность и необходимость использования типа переменных double, а так же влияние на производительность.

4. Из рисунка 3.14 не ясно, какие вычисления проводились в программе LAMMPS. Было бы целесообразно привести зависимость затраченного времени от числа ядер графических процессоров, для CPU варьировалось количество ядер от 1 до 30, тогда как для GPU рассмотрен лишь вариант 448 ядер.

5. Хотелось бы видеть обоснование представленного распределения математических операций по вычислительным потокам, так как видеокарты позволяют задавать двух- и трёхмерные конфигурации гридов.


6. В работе показано, что на данном алгоритме расчета молекулярной динамики одна видеокарта 2011 года примерно эквивалентна 32-м ядрам ЦПУ. На сегодняшний день сменилось уже несколько поколений видеокарт и технология продолжает стремительно развиваться, в то время как для ЦПУ есть мало направлений развития. Хотелось бы видеть использования алгоритма на более современных ГПУ.

Указанные замечания не влияют на общую положительную оценку работы. Диссертация выполнена на высоком научном уровне и содержит решение важной и сложной задачи, связанной с программированием для графических процессоров. Результаты диссертации С. А. Семенова представлены в публикациях журналов из перечня, рекомендуемого ВАК, и должным образом отражены в автореферате.

По результатам рассмотрения диссертации Семенова С. А. сделано следующее **заключение**.

Диссертация соответствует паспортам специальностям 05.13.11, 05.13.18 и отвечает всем требованиям п. 9 «Положения о порядке присуждения ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842, а ее автор, Семенов С. А., заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальностям 05.13.11 «Математическое и программное обеспечение вычислительных машин, комплексов и компьютерных сетей», 05.13.18 «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ».

Карпенко Антон Геннадьевич,
доцент кафедры гидроаэромеханика
Санкт-Петербургского государственного
университета, к.ф.-м.н.



ПОДПИСЬ

Название организации: ФГБОУ ВО «Санкт-Петербургский государственный университет»

Адрес организации: 198504, Россия, Санкт-Петербург, Старый Петергоф, Университетский проспект, дом 28.

Телефон: 89045509884

E-mail : aspera.2003.ru@mail.ru

Личную подпись заверяю

НАЧАЛЬНИК ОТДЕЛА КАДРОВ №3

Н. И.



Документ подготовлен
в порядке исполнения
трудовых обязанностей

15.12.2017 *Григорьев*