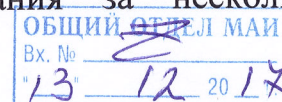


## ОТЗЫВ ОФИЦИАЛЬНОГО ОППОНЕНТА

на диссертационную работу Семенова Сергея Александровича «Технология программирования алгоритмов молекулярно-динамического моделирования наносистем на графических процессорах», представленную 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».

### Актуальность проблемы

Одной из современных тенденций развития численного моделирования является создание универсальных подходов, способных интегрировать в себя различные методы решения комплексных физических задач, возникающих на стыке научных направлений. Молекулярно-динамическое моделирование представляет собой мощное универсальное средство исследования широкого класса сложных систем и процессов. При этом для адекватного воспроизведения свойств реальных объектов требуется значительное количество моделирующих частиц, что связано с высокими вычислительными затратами. В то же время ограниченный радиус действия сил в таких системах обуславливает богатые возможности в плане распараллеливания вычислений. Широкий круг приложений молекулярно-динамического моделирования в сочетании со спецификой организации вычислительного процесса стимулировали разработку специальных проблемно-ориентированных аппаратных средств. История развития специализированных компьютерных систем для молекулярно-динамического моделирования продолжается несколько десятков лет, в ней принимают участие такие производители, как AT&T, Hitachi, SGI Japan. Разработанные системы имеют множество ядер, выделенные каналы передачи данных, разделяемую память, что позволяет уменьшить время на пересылку информации и выполнять один шаг интегрирования за несколько



микросекунд для десятков и сотен тысяч атомов. Для последнего десятилетия характерно активное развитие видеокарт и все более широкое их использование для высокопроизводительных вычислений. Особые возможности открываются в плане применения распараллеливания вычислений на графических процессорах в задачах молекулярно-динамического моделирования. Такой подход требует разработки специализированного математического и программного обеспечения. Это обуславливает актуальность темы диссертационного исследования.

### **Достоверность, научная новизна и практическая значимость результатов**

*Достоверность* полученных результатов подтверждается с помощью тщательной верификации численных результатов и их валидации на основе сравнения с существующими экспериментальными данными, а также сравнением с результатами, полученными с использованием известных программных комплексов молекулярно-динамического моделирования.

*Научную новизну* диссертационной работы составляют:

В плане специальности 05.13.11. - технология построения программных средств для молекулярно-динамического моделирования наносистем со сложными потенциалами межчастичного взаимодействия на графических процессорах, способы наследования классов в технологии CUDA, обеспечивающие возможность оснащения программ новыми потенциалами межчастичного взаимодействия без модификации основного кода, методы размещения данных в памяти видеокарты с целью минимизации конфликтов доступа при параллельном обращении, оптимальное распределение операций по вычислительным потокам.

В плане специальности 05.13.18 - методы повышения эффективности параллельных вычислений на графических процессорах, использование гибридной модели расчётной области, новые подходы к математическому моделированию теплопроводности наноструктур на основе молекулярно-

динамического моделирования, методы макроскопического описания аномальных режимов теплопроводности с использованием дробно-дифференциальных уравнений.

**Практическая значимость** работы состоит в том, что полученные результаты могут использоваться как для построения учебных курсов, так и для создания новых программ моделирования наносистем. Представленный формат реализации программных комплексов в виде модульной платформы и набор методов повышения эффективности вычислительных алгоритмов дают конечным пользователям практический инструмент, который можно использовать для решения широкого круга прикладных задач.

### **Замечания по работе**

По содержанию диссертации можно высказать ряд замечаний:

1. В работе сделан акцент на специфике реализации потенциала Бреннера второй модификации на графических процессорах. Данный потенциал позволяет описывать поведение широкого класса наносистем. Однако им далеко не исчерпывается круг сложных потенциалов межчастичного взаимодействия. В этой связи можно отметить, например, семейство потенциалов погруженного атома. Расширение круга введенных в рассмотрение потенциалов позволило бы говорить о большей универсальности предлагаемых в работе подходов.

2. В главе 4 рассмотрен лишь один способ измерения коэффициента теплопроводности, связанный с подачей теплового импульса по центру образца и последующем анализе нестационарного профиля температуры. Представляется целесообразным рассмотреть и другие способы, в частности, связанные с созданием перепада продольного температуры в образце и измерения теплового потока. Такой способ также может быть проанализирован с помощью молекулярно-динамического моделирования.

3. По работе имеется ряд замечаний редакционного характера, на которые указано автору.

## Заключение

Указанные замечания не влияют на общую положительную оценку диссертации. В целом работа представляет завершённое практически значимое научное исследование, выполненное на высоком теоретическом и прикладном уровне. Текст диссертации написан понятным языком и даёт полное представление о поставленных задачах и достигнутых результатах.

Автореферат полностью отражает содержание диссертации. Результаты исследования прошли достаточную апробацию на конференциях и семинарах различного уровня. По работе имеется достаточное количество публикаций в журналах из перечня ВАК.

Диссертационная работа «Технология программирования алгоритмов молекулярно-динамического моделирования наносистем на графических процессорах» отвечает всем требованиям, предъявляемым ВАК к кандидатским диссертациям, а её автор - Семенов Сергей Александрович, заслуживает присуждения ему 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».

### Официальный оппонент:

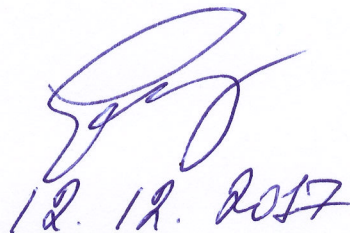
Главный научный сотрудник, доктор физико-математических наук, профессор, член-корреспондент РАН.

ФГУП «Центральный аэрогидродинамический Институт имени профессора Н.Е. Жуковского».

140180 г. Жуковский, Московская обл.  
ул. Жуковского, 1, тел. 8-495-5564205.  
тел. 8-495-5564172

e-mail: [ivan.egorov@tsagi.ru](mailto:ivan.egorov@tsagi.ru)  
web-сайт <http://www.tsagi.ru>

Иван Владимирович Егоров



12.12.2017

Подпись И.В. Егорова заверяю:

Ученый секретарь Ученого совета  
ЦАГИ

Доктор технических наук, доцент

С.А. Таковицкий

« 12 »

12

2017 г.



*И.В. Егоров*

15.12.2017г