

ПРОТОКОЛ № 54
заседания диссертационного совета Д 212.125.04 от 27.10.2017 г.

Присутствовали на заседании 20 членов совета из 30:

№	Фамилия И.О.	Ученая степень, шифр специальности в Совете
1	Наумов А. В.	д.ф.-м.н., 05.13.11
2	Кибзун А. И.	д.ф.-м.н., 05.13.01
3	Северина Н. С.	к.ф.-м.н., 05.13.18
4	Бардин Б. С.	д.ф.-м.н., 05.13.18
5	Битюков Ю. И.	д.т.н., 05.13.11
6	Борисов А. В.	д.ф.-м.н., 05.13.01
7	Бортаковский А. С.	д.ф.-м.н., 05.13.01
8	Кан Ю. С.	д.ф.-м.н., 05.13.11
9	Короткова Т. И.	д.ф.-м.н., 05.13.11
10	Красильников П. С.	д.ф.-м.н., 05.13.18
11	Красинский А. Я.	д.ф.-м.н., 05.13.18
12	Кузнецов Е. Б.	д.ф.-м.н., 05.13.01
13	Кузнецова Е. Л.	д.ф.-м.н., 05.13.18
14	Пантелеев А. В.	д.ф.-м.н., 05.13.01
15	Ревизников Д. Л.	д.ф.-м.н., 05.13.11
16	Семенихин К. В.	д.ф.-м.н., 05.13.01
17	Синицин В. И.	д.ф.-м.н., 05.13.11
18	Сиротин А. Н.	д.ф.-м.н., 05.13.01
19	Формалев В. Ф.	д.ф.-м.н., 05.13.11
20	Ципенко А. В.	д.т.н., 05.13.18

Повестка дня: о приеме к защите диссертационной работы Семенова Сергея Александровича на тему «Технология программирования алгоритмов молекулярно-динамического моделирования наносистем на графических процессорах», представленной на соискание 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».

Слушали: доцента Наумова А. В., председателя экспертной комиссии диссертационного совета по диссертационной работе Семенова Сергея Александровича на тему «Технология программирования алгоритмов

молекулярно-динамического моделирования наносистем на графических процессорах», представленной на соискание 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».

Экспертная комиссия полагает:

- диссертационная работа Семенова Сергея Александровича на тему «Технология программирования алгоритмов молекулярно-динамического моделирования наносистем на графических процессорах» является законченной научной работой и отвечает требованиям Положения о порядке присуждения ученых степеней, утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842;
- результаты диссертации полностью отражены в 11 печатных работах автора, из которых 4 работы опубликованы в журналах, входящих в Перечень ведущих рецензируемых научных журналов и изданий;
- содержание автореферата полностью соответствует диссертации;
- диссертация соответствует профилю специальности 05.13.11 – «Математическое и программное обеспечение вычислительных машин, комплексов и компьютерных сетей» и 05.13.18 – «Математическое и программное моделирование, численные методы и комплексы программ» и может быть принята к защите на заседании диссертационного совета Д 212.125.04.

Автором получены следующие результаты:

1. Представлена технология создания программного обеспечения для специализированного вычислительного комплекса, который моделирует наносистемы с учётом сложного потенциала межчастичного взаимодействия. Данная технология позволяет масштабировать программное обеспечение на современные вычислители, в которые входят ускорители NVIDIA Tesla P40 и

M60, что позволит увеличивать производительность вычислений без изменения кода. Разработаны методы отображения вычислительных процессов на архитектуру видеокарт, способы наследования классов в технологии CUDA, обеспечивающие возможность оснащения программ новыми потенциалами межчастичного взаимодействия без модификации основного кода.

2. Предложены подходы к повышению эффективности работы параллельных потоков для данного типа вычислителей, в которых предлагается использовать гибридную модель представления расчётной области и поиска соседних атомов, методы размещения данных в памяти видеокарты с целью минимизации конфликтов доступа при параллельном обращении. Дана оценка вычислительной сложности алгоритмов. На представительном ряде задач показана эффективность разработанных подходов.

3. На основе разработанной технологии программирования создан комплекс программ молекулярно-динамического моделирования наносистем. Разработаны методы и средства визуализации результатов вычислительного процесса в реальном времени, показаны методы взаимодействия программного обеспечения на специализированных вычислителях с имеющимися программными комплексами молекулярно-динамического моделирования на универсальных вычислителях.

4. С использованием разработанного программного обеспечения исследованы вопросы моделирования теплопроводности углеродных наносистем. Для описания аномальных режимов теплопроводности предложен подход, основанный на сочетании методов молекулярной динамики и дробно-дифференциального исчисления. Представлен алгоритм определения параметров макроскопической модели по данным молекулярно-динамического моделирования. Таким образом, установлена связь между различными масштабами в описании аномальной теплопроводности.

Перечисленные результаты являются новыми.

Выступили: член совета, д.т.н. по специальности 05.13.11, доцент Битюков Ю. И.; член совета, д.ф.-м.н. по специальности 05.13.18, доцент Кузнецова Е. Л.

Постановили:

1. Принять к защите диссертационную работу Семенова С. А. на тему «Технология программирования алгоритмов молекулярно-динамического моделирования наносистем на графических процессорах», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 05.13.11 – «Математическое и программное обеспечение вычислительных машин, комплексов и компьютерных сетей», 05.13.18 – «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ».

2. Утвердить в качестве официальных оппонентов по диссертационной работе Семенова С. А. следующих специалистов:

Егорова Ивана Владимировича, доктора физико-математических наук, профессора, член-корреспондента РАН, главного научного сотрудника ГНЦ ФГУП «Центральный аэрогидродинамический институт имени профессора Н.Е. Жуковского»;

Карпенко Антона Геннадьевича, кандидата физико-математических наук, доцента математико-механического факультета ФГБОУ ВО «Санкт-Петербургский государственный университет».

3. Утвердить в качестве ведущей организации Федеральное государственное учреждение «Федеральный исследовательский центр Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша Российской академии наук».

4. Назначить дату защиты 29 декабря 2017 г.

5. Разрешить печать на правах рукописи автореферата, отвечающего требованиям Положения о порядке присуждения ученых степеней.

6. Утвердить дополнительный список рассылки автореферата, оформленного в соответствии с требованиями Положения о порядке присуждения ученых степеней.

Результаты голосования по вопросу принятия к защите диссертационной работы Семенова С. А. «Технология программирования алгоритмов молекулярно-динамического моделирования наносистем на графических процессорах»: «за» – 20, «против» – нет, «воздержалось» – нет.

Председатель диссертационного совета

Д 212.125.04, д.ф.-м.н., доцент

А. В. Наумов

Ученый секретарь диссертационного совета

Д 212.125.04, к.ф.-м.н., доцент

Н. С. Северина