

Отзыв

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

Диссертационная работа Семенова С.А. направлена на создание методов разработки программного обеспечения для молекулярно-динамического моделирования наносистем с использованием графических процессоров. Данное направление находится в русле современных тенденций к использованию видеокарт для высокопроизводительных вычислений в задачах математического моделирования. Графические карты имеют собственную архитектуру вычислителей, которые объединяются в блоки и grids. Изначально они были рассчитаны на обработку видео и операции с матрицами. Для выполнения задач общего назначения требуется адаптация вычислительных моделей под многопоточную систему исполнения и разноуровневую систему памяти.

Применение графических процессоров открывает новые возможности в плане математического моделирования наносистем. Так, например, для проведения массивных параллельных расчётов структур, состоящих из десятков миллионов структурных элементов, достаточно оснащение персонального компьютера соответствующей видеокартой.

В ходе работы над диссертацией С.А. Семеновым был решен целый ряд сложных и актуальных задач. На основе значительного количества современных источников был проведен подробный анализ существующих алгоритмов молекулярно-динамического моделирования и возможности их адаптации для применения на графических процессорах. Выработаны базовые принципы построения программного обеспечения, ориентированного на высокопроизводительные вычисления. Разработаны эффективные методы работы с памятью видеокарты, обеспечивающие минимизацию количества перекрестных запросов. Особое внимание было уделено повышению

производительности параллельных вычислений на графических процессорах. Параллельное исполнение программы реализуется за счёт разбиения пространства моделирования на ячейки, составления и обновления списка соседних атомов с целью минимизации коллизий памяти, распределения операций по вычислительным потокам и выделения дополнительной памяти для создания копий координат взаимодействующих атомов.

Важным практическим итогом работы стало создание авторского комплекса программ для молекулярно-динамического моделирования наносистем на графических процессорах. По ряду показателей разработанный комплекс превосходит известные аналоги и позволяет расширить класс решаемых задач.

Значительная часть работы посвящена разработке методов математического моделирования теплопроводности наносистем. Результаты проведенных с использованием авторского комплекса программ вычислительных экспериментов свидетельствуют об аномальном характере процессов теплопроводности в углеродных наноструктурах. На основе полученных результатов проведено сопряжение результатов молекулярно-динамического моделирования с макроскопической моделью, задаваемой дробно-дифференциальным уравнением теплопроводности.

Таким образом, активная исследовательская работа в сочетании с уверенным владением методами и средствами программирования и компьютерного моделирования позволили диссертанту получить целый ряд новых результатов, обладающих научной и практической ценностью.

Следует особо отметить, что за годы обучения в аспирантуре С.А. Семеновым был разработан и прочитан специальный курс «Программирование графических процессоров». В настоящее время данный курс читается на регулярной основе студентам факультета «Информационные технологии и прикладная математика» МАИ. Таким образом, факультет получил возможность готовить специалистов, владеющих современными методами высокопроизводительных вычислений.

Результаты диссертационной работы регулярно докладывались на национальных и международных научных конференциях и симпозиумах, опубликованы в научных изданиях.

В целом за время работы над диссертацией Семенов С.А. проявил высокую научную квалификацию, способность самостоятельно ставить и решать сложные исследовательские задачи, уверенное владение современным аппаратом

разработки программных систем и численного моделирования.

Представленная диссертационная работа удовлетворяет требованиям ВАК, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а её автор, Семенов С.А., заслуживает присуждения ему учёной степени кандидата физико-математических наук по специальностям 05.13.11 «Математическое и программное обеспечение вычислительных машин, комплексов и компьютерных сетей» и 05.13.18 «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ».

Научный руководитель,
профессор каф. вычислительной математики
и программирования ФГБОУ ВО МАИ (НИУ),
доктор физико-математических наук, профессор

Ревизников Д.Л.

Подпись проф. Ревизникова Д.Л. удостоверяю.
Декан факультета «Информационные технологии и
прикладная математика»
ФГБОУ ВО МАИ (НИУ)

Крылов С.С.