

СВЕДЕНИЯ О РЕЗУЛЬТАТАХ ПУБЛИЧНОЙ ЗАЩИТЫ

Диссертационный совет: Д 212.125.04

Соискатель: Семенов Сергей Александрович

Тема диссертации: Технология программирования алгоритмов молекулярно-динамического моделирования наносистем на графических процессорах

Специальность: 05.13.11 – Математическое и программное обеспечение вычислительных машин, комплексов и компьютерных сетей

05.13.18 – Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ

Решение диссертационного совета по результатам защиты: На заседании 29 декабря 2017 года (протокол № 56) диссертационный совет пришел к выводу о том, что диссертация Семенова С.А. «Технология программирования алгоритмов молекулярно-динамического моделирования наносистем на графических процессорах» представляет собой законченную научно-квалификационную работу, которая соответствует критериям, установленным Положением о присуждении ученых степеней, утвержденным постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 года № 842, и принял решение присудить Семенову Сергею Александровичу ученую степень кандидата физико-математических наук.

Присутствовали: Наумов А. В. – *председатель*, Северина Н. С. – *ученый секретарь*, а также члены диссертационного совета: Битюков Ю. И., Борисов А. В., Бортаковский А. С., Босов А. В., Грумондз В. Т., Кан Ю. С., Кибзун А. И., Колесник С. А., Короткова Т. И., Котельников М. В., Красильников П. С., Красинский А. Я., Кузнецов Е. Б., Липатов И. И., Пантелеев А. В., Ревизников Д. Л., Семенихин К. В., Синицин В. И., Сиротин А. Н., Формалев В. Ф., Хрусталева М. М., Ципенко А. В.

Ученый секретарь диссертационного
совета Д 212.125.04, к.ф.-м.н., доцент

Н. С. Северина

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА Д 212.125.04,
СОЗДАННОГО НА БАЗЕ ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО
БЮДЖЕТНОГО ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО УЧРЕЖДЕНИЯ ВЫСШЕГО
ОБРАЗОВАНИЯ «МОСКОВСКИЙ АВИАЦИОННЫЙ ИНСТИТУТ
(НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ)»
ПО ДИССЕРТАЦИИ
НА СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ КАНДИДАТА НАУК

аттестационное дело № _____

решение диссертационного совета от 29.12.2017 № 56

О присуждении Семенову Сергею Александровичу, гражданину РФ,
ученой степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация «Технология программирования алгоритмов молекулярно-динамического моделирования наносистем на графических процессорах» 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» принята к защите «27» октября 2017 года, протокол № 54, диссертационным советом Д 212.125.04 на базе Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет)», Министерство образования и науки РФ, 125993, г. Москва, А-80, ГСП-3, Волоколамское шоссе, 4, приказы Минобрнауки РФ: о создании диссертационного совета № 714/нк от 02.11.2012, об изменении состава диссертационного совета № 628/нк от 07.10.2013, № 574/нк от 15.10.2014, № 1339/нк от 29.10.2015, № 710/нк от 21.06.2016, № 1403/нк от 01.11.2016, № 1017/нк от 20.10.2017.

Соискатель Семенов Сергей Александрович, 1986 года рождения, окончил в 2010 году факультет радиотехники и кибернетики государственного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Московский физико-технический институт (государственный университет)» (МФТИ) по специальности «Прикладные математика и физика».

В октябре 2013 года окончил аспирантуру в Федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего образования «Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет)».

Работает инженером на кафедре 806 «Вычислительная математика и программирование» ФГБОУ ВО «Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет)», Министерство образования и науки РФ.

Диссертация выполнена на кафедре 806 «Вычислительная математика и программирование» факультета «Информационные технологии и прикладная математика» в Федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего образования «Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет)», Министерство образования и науки РФ.

Научный руководитель – профессор кафедры 806 «Вычислительная математика и программирование» Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет)», доктор физико-математических наук, профессор Ревизников Дмитрий Леонидович.

Научный консультант – доцент кафедры 806 «Вычислительная математика и программирование» Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет)», кандидат физико-математических наук Сластуженский Юрий Викторович.

Официальные оппоненты:

1. Егоров Иван Владимирович, доктор физико-математических наук, профессор, член-корреспондент РАН, главный научный сотрудник Федерального государственного унитарного предприятия «Центральный аэрогидродинамический институт имени профессора Н.Е. Жуковского»;

2. Карпенко Антон Геннадьевич, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры гидроаэромеханики Санкт-Петербургского государственного университета.

дали положительный отзыв на диссертацию.

Ведущая организация – Федеральное государственное учреждение «Федеральный исследовательский центр Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша Российской академии наук» (Москва).

В положительном отзыве ведущей организации указано, что диссертационная работа представляет собой завершённую научно-квалификационную работу, в которой содержится решение актуальной задачи разработки математического и программного обеспечения современных специализированных вычислителей в области молекулярно-динамического моделирования.

Работа полностью удовлетворяет всем требованиям «Положения о порядке присуждения ученых степеней» и заслуживает положительной оценки, а ее автор, Семенов Сергей Александрович, заслуживает присуждения ему 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».

Отзыв на диссертацию официального оппонента, д.ф.-м.н., проф. Егорова Ивана Владимировича.

Отзыв положительный. Замечания по диссертационной работе:

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.

Отзыв на диссертацию официального оппонента, к.ф.-м.н. Карпенко Антона Геннадьевича.

Отзыв положительный. Замечания по диссертационной работе:

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

2. Не проанализировано влияние на производительность и возможность использования типа переменных `double`, который обеспечивает большую точность, но уменьшает производительность.

3. 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.

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

Отзыв на диссертацию ведущей организации.

Ведущая организация дала положительный отзыв на диссертацию. Отзыв подписан: заместителем директора по научной работе ИПМ им. М. В. Келдыша РАН, член-корреспондентом РАН, доктором физико-математических наук, профессором Тишкиным Владимиром Федоровичем. Отзыв утвержден директором ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, член-корреспондентом РАН, доктором физико-математических наук, профессором Аптекаревым Александром Ивановичем. Замечания по диссертации:

1. В главе 2, посвященной описанию способов программирования вычислительных алгоритмов на графических процессорах, рассматривается система классов, что позволяет проектировать программу на основе отдельных изменяемых, дополняемых модулей, но не показана зависимость между

удобством расширения программы и ее производительностью. Здесь было бы желательно добавить раздел, в котором следует провести сравнение времени решения одинаковой задачи в программе, составленной из процедур, и программе, составленной из классов объектов.

2. Для анализа вычислительной сложности приводится связь между выделяемой памятью и числом операций. В общем случае дополнительное выделение памяти не изменяет математического выражения решаемых уравнений или способа его численного решения на вычислительной машине. Поэтому следует явно указать, что именно число операций зависит от указанных в работе параметров, а дополнительная память позволяет проводить вычисления параллельно на P процессорах.

3. В главе 3 проводится сопоставление времени расчетов на разных графических процессорах, но не рассмотрены возможности масштабирования программного комплекса в явном виде на самые современные вычислители NVIDIA Tesla M60 и P40. Было бы целесообразно дать оценку масштабируемости предлагаемой в работе технологии использования GPU. Следует показать на практическом примере или обосновать, что с увеличением числа ядер GPU или изменением архитектуры платформы GPU можно было бы утверждать, что производительность вычислений в предлагаемом контексте также будет возрастать, причем, автоматически, без переписывания кода вычислительного ядра, а лишь изменяя программный интерфейс (коннектор) к аппаратному обеспечению (GPU) и низкоуровневому драйверу.

4. В главе 4 говорится, что, согласно моделированию и вычислениям доли суммарной энергии теплового импульса, поданного на образец от размера взятого интервала $[-x, x]$ для различных моментов времени, можно определить режим теплопроводности углеродных наноструктур. Было бы целесообразно пояснить, можно ли на основе решения дробно-дифференциального уравнения определить выражение для кривой, которая получается при откладывании доли энергии в зависимости от интервала суммирования вдоль графенового листа или нанотрубки.

На автореферат диссертации поступило 5 отзывов.

1. Акционерное общество «Т-Платформы».

Отзыв подписан заместителем директора по стратегическим проектам, кандидатом технических наук Александром Евгеньевичем Березко. Отзыв положительный. Замечания к автореферату:

1. В работе указана возможность увеличения количества вычислительных потоков, но из представленного описания не ясно, возможно ли масштабировать программное обеспечение на V-Class или A-Class вычислительные системы от Т-Платформы.

2. Из описания содержания третьей главы не ясно, что значит моделирование листа графена и какие значения времени расчетов отмечены в таблице 1.

2. Федеральное государственное бюджетное учреждение «Научно-технический институт межотраслевой информатики» (НТИМИ).

Отзыв подписан ученым секретарем, кандидатом технических наук Лукашовым Валерием Евгеньевичем. Отзыв положительный. Замечания к автореферату:

1. Отсутствуют ссылки на версии сравниваемых программных продуктов.

2. Из автореферата не ясно, что значит значение «р» на рисунке 6, при том что в тексте характеристика диффузии обозначена символом ρ .

3. Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова».

Отзыв подписан старшим научным сотрудником лаборатории вычислительных методов в химии химического факультета МГУ им. М.В. Ломоносова, кандидатом химических наук Шишовым Дмитрием Вениаминовичем. Отзыв положительный. Замечания к автореферату:

1. В качестве особенностей доступа к памяти в автореферате указывается аппаратная интерполяции, но не раскрывается, как она используется в представленном программном комплексе.

2. Архитектура видеокарт позволяет задавать трехмерные параметры запуска, но используется одномерная конфигурация вычислительных блоков. Хотелось бы получить объяснение такого выбора.

4. Национальный исследовательский центр «Курчатовский Институт».

Отзыв подписан ведущим научным сотрудником НИЦ «Курчатовский Институт», доктором физико-математических наук, старшим научным сотрудником Потаниным Евгением Петровичем. Отзыв положительный. Замечания к автореферату:

1. В тексте автореферата не отражена физическая связь между динамикой частиц и температурой образца.

2. Несмотря на достаточно подробный теоретический обзор, в работе отсутствуют сведения о модификациях потенциала Бреннера и его адаптации к различным наноструктурам.

5. Федеральный исследовательский центр «Информатика и управление» Российской Академии Наук.

Отзыв подписан научным сотрудником отдела математического моделирования гетерогенных систем научно-образовательного центра «Инновации и технологии создания наноматериалов» ВЦ РАН, кандидатом физико-математических наук Колбиным Ильей Сергеевичем. Отзыв положительный. Замечание к автореферату:

1. Было бы целесообразно затронуть вопрос масштабирования программного обеспечения на случай использования группы видеокарт.

Выбор официальных оппонентов обосновывается их компетентностью в области тем, затрагиваемых в диссертационном исследовании.

Официальный оппонент, д.ф.-м.н., проф. Егоров Иван Владимирович – автор более 200 научных работ, значительная часть которых посвящена численному моделированию динамики газа и в частности на супер-ЭВМ.

Официальный оппонент, к. ф.-м. н. Карпенко Антон Геннадьевич – автор более 5 публикаций на тему численного моделирования динамики газа на графических процессорах. В 2013 г. защитил диссертацию на тему «Численное решение задач гидроаэромеханики на графических процессорах».

Выбор ведущей организации – Федеральное государственное учреждение «Федеральный исследовательский центр Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша Российской академии наук» – обусловлен широким кругом

проводимых научных исследований в области математического и программного обеспечения вычислительных машин, комплексов и компьютерных сетей. Направления научной деятельности ИПМ им. М.В. Келдыша РАН включают математическое моделирование сложных явлений и конструкций, теорию численных методов, задачи теоретической и прикладной небесной механики, нелинейный анализ, системное обеспечение ЭВМ, системное прикладное обеспечение, распознавание образов, математическое моделирование биологических объектов и явлений, разработку и применение математических методов в биологических исследованиях, биоинформатику.

Соискатель имеет 11 опубликованных научных работ по теме диссертации, из них 6 работ в соавторстве. 4 работы опубликованы в изданиях из Перечня ведущих рецензируемых научных журналов и изданий.

Наиболее значимые научные работы соискателя по теме диссертации:

1. Семенов С.А. Использование графических процессоров в молекулярно-динамическом моделировании. // Электронный журнал труды МАИ, 2013, № 65, С. 1-6.

2. Семенов С.А. Реализация гибридного алгоритма молекулярно-динамического моделирования на графических вычислителях. // Научно-технический вестник Поволжья, 2013, № 6, С. 415-422.

3. Ревизников Д.Л., Семенов С.А. Особенности молекулярно-динамического моделирования наносистем на графических процессорах. // Программная инженерия, 2013, С. 31-35.

4. Семенов С.А., Ревизников Д.Л. Эффективное использование программируемых графических процессоров в задачах молекулярно-динамического моделирования. // Системы и средства информатики, 2017, № 4.

Диссертационный совет отмечает, что в выполненном диссертационном исследовании получены следующие **новые научные результаты:**

– **разработана** технология построения программных средств для молекулярно-динамического моделирования наносистем со сложными потенциалами межчастичного взаимодействия на графических процессорах;

– **разработаны** методы отображения вычислительных процессов на архитектуру видеокарт и методы размещения данных в памяти видеокарты, уменьшающие количество перекрестных запросов;

– **разработаны** методы наследования классов в технологии CUDA, обеспечивающие возможность оснащения программ новыми потенциалами межчастичного взаимодействия без модификации основного кода;

– **выполнена** реализация программного комплекса молекулярно-динамического моделирования наносистем на графических процессорах; реализованы методы взаимодействия между компонентами программного комплекса; разработана структура данных, используемых для хранения и передачи информации об атомах, позволяющая визуализировать результаты вычислительного процесса в реальном времени;

– **показана** эффективность разработанных подходов к повышению эффективности параллельных вычислений на графических процессорах на представительном ряде задач;

– **предложен** подход к математическому моделированию теплопроводности наносистем, основанный на сочетании методов молекулярной динамики и дробно-дифференциального исчисления, который позволяет исследовать процессы теплопереноса в различных режимах.

Теоретическая значимость исследования заключается в следующем:

– **предложен** подход к повышению эффективности параллельных вычислений на графических процессорах, включающий использование гибридной модели поиска соседних атомов, методы размещения данных в памяти видеокарты с целью минимизации конфликтов доступа при параллельном обращении, оптимальное распределение операций по вычислительным потокам, выделение дополнительной памяти для создания копий координат взаимодействующих атомов;

– **дана** оценка вычислительной сложности алгоритмов;

– **разработан** подход к взаимодействию методов различных масштабов в описании теплопроводности наносистем, позволяющий определять параметры макроскопической модели по данным молекулярно-динамического моделирования.

Практическая значимость работы заключается в том, что в ходе диссертационного исследования разработан программный комплекс молекулярно-динамического моделирования наносистем на графических процессорах на основе разработанной технологии программирования. Разработанные в диссертации методы и средства математического моделирования имеют высокую значимость с точки зрения перспектив их применения для исследования диффузионных и тепловых процессов в наносистемах. Результаты работы могут быть использованы при составлении образовательных курсов по методам программирования для графических процессоров и математическому моделированию наносистем.

Рекомендации для использования результатов. Результаты исследования могут использоваться, чтобы повысить эффективность разработки программного обеспечения для моделирования динамических систем на графических процессорах, адаптировать и расширять уже существующие программные модули, осуществлять интеграцию разрабатываемых программных средств с имеющимися программными комплексами.

Оценка **достоверности** результатов исследования выявила, что результаты, представленные в диссертационной работе, получены путем корректного использования математического аппарата с использованием обоснованных методов исследования, соответствующих поставленной задаче. Достоверность результатов подтверждается экспериментальной проверкой работы созданного программного обеспечения, проведением моделирования, а также практическим использованием разработанного комплекса для известных параметров наноструктур.

Личный вклад соискателя состоит в разработке методов построения программного обеспечения для молекулярно-динамического моделирования наносистем на графических процессорах, подходов к повышению эффективности параллельных вычислений на графических процессорах, методов отображения вычислительных процессов на архитектуру видеокарт, методов размещения данных в памяти видеокарты с целью минимизации количества перекрестных запросов, методов наследования классов в

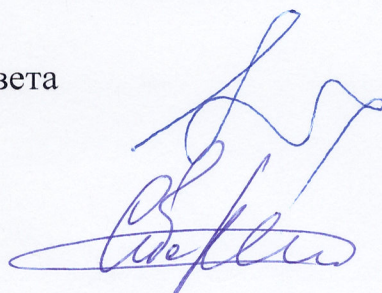
технологии CUDA, обеспечивающих возможность оснащения программ новыми потенциалами межчастичного взаимодействия без модификации основного кода. Автором исследованы процессы теплопроводности в наноструктурах, получены распределения температуры по образцам во времени, которые описаны на макроуровне с использованием уравнения аномальной теплопроводности, определены параметры соответствующих дробно-дифференциальных уравнений.

Диссертационный совет считает, что диссертационная работа Семенова Сергея Александровича является самостоятельно выполненной, завершенной научно-квалификационной работой, в которой содержится решение актуальной задачи создания технологии программирования алгоритмов молекулярно-динамического моделирования наносистем на графических процессорах. **Диссертация удовлетворяет пункту 9 постановления Правительства РФ №842 от 24.09.2013 «О порядке присуждения ученых степеней».**

На заседании «29» декабря 2017 года диссертационный совет принял решение присудить Семенову С. А. ученую степень кандидата физико-математических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 24 человек, из них 9 докторов наук по специальности 05.13.11 «Математическое и программное обеспечение вычислительных машин, комплексов и компьютерных сетей», 5 докторов наук по специальности 05.13.18 «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ», участвовавших в заседании, из 30 человек, входящих в состав совета, проголосовали: за 24, против 0, недействительных бюллетеней 0.

Зам. председателя диссертационного совета
Д 212.125.04, д.ф.-м.н., профессор



А. И. Кибзун

Ученый секретарь диссертационного
совета Д 212.125.04, к.ф.-м.н., доцент

Н. С. Северина

29 декабря 2017 г.