



УТВЕРЖДАЮ

Директор ИПМ им. М.В.Келдыша РАН,
член-корреспондент РАН



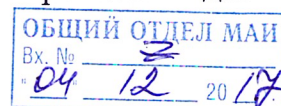
ОТЗЫВ

ведущей организации на диссертацию 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 темы исследования

Диссертационная работа посвящена разработке технологии программирования алгоритмов молекулярно-динамического моделирования углеродных наноструктур на графических процессорах.

Актуальность диссертационной работы обусловлена, в первую очередь, отсутствием известных отечественных программных комплексов или программных модулей молекулярно-динамического моделирования для



решения задач на графических процессорах, которые имеют существенное преимущество при решении такого класса высокопроизводительных задач и являются современной тенденцией в области построения вычислительных систем.

При создании программного обеспечения для графических процессоров возникает ряд сложных математических и технических задач, связанных с организацией параллельных потоков вычислений. В работе предлагается специальная организация памяти для исключения зависимости между взаимодействующими процессами. Для определения сложности вычислений предлагается анализ с точки зрения количества операций с ячейками памяти.

Важным инструментом моделирования является отображение результатов, поэтому в программе представлен способ визуализации структур и процессов в реальном времени. По предложенной технологии разработан программный комплекс, с помощью которого решена задача распространения тепла в графеновых листах и нанотрубках. Эта задача привлекает внимание учёных и исследователей последние 25 лет и до сих пор окончательно не решена.

Структура диссертации

Диссертация состоит из введения, 4 глав, заключения, глоссария и списка использованных источников.

Во введении сформулированы основные цели и задачи диссертационной работы, обоснована её актуальность, отмечены новизна, практическая и теоретическая значимость полученных результатов.

В главе 1 дан краткий обзор методов молекулярной динамики, потенциалов межчастичного взаимодействия. Приведены конечно-разностные схемы аппроксимации дифференциального уравнения движения, которые подходят для реализации на графических процессорах. Подробно рассмотрена структура потенциала, который соответствует рассматриваемым

наносистемам. Рассмотрены методы термостатирования для задания и поддержания температуры моделируемой системы.

Глава 2 посвящена описанию способов реализации алгоритмов молекулярно-динамического моделирования на графических процессорах. Представлены методы разработки программ для молекулярно-динамического моделирования на графических процессорах. Представленная технология программирования алгоритмов молекулярной динамики обеспечивает эффективное исполнение на видеокартах.

Предложены подходы к повышению эффективности параллельных вычислений на графических процессорах. Применение гибридной техники представления пространства и определения ближних соседей для каждого атома позволяет исключить конфликты при обращениях к памяти и обеспечивает вычислительную сложность $O(N)$ в наиболее затратных по времени этапах молекулярно-динамического моделирования. Использование большого количества вычислительных потоков позволяет ускорить решение задачи за счёт распараллеливания.

В главе 3 приводятся примеры различных вычислительных экспериментов, которые показывают преимущество вычислений на графических процессорах по сравнению с вычислениями на центральных процессорах.

Проведено сравнение времени решения методом молекулярно-динамического моделирования задачи теплопереноса в листе графена с использованием разработанной программы на различных графических процессорах, показано преимущество видеокарт с большей тактовой частотой вне зависимости от производительности центрального процессора.

Показано, что возможен общий прирост скорости моделирования при оптимальном выборе количества вычислительных потоков.

В главе 4 представлены результаты численного моделирования распространения тепла из центрального источника. Детально исследованы способы определения ширины теплового импульса и предложен новый

способ, который позволяет получить необходимую информацию из зашумлённых данных. Определены режимы теплопроводности, и для аномального режима проведено сопряжение вычисленных коэффициентов с решением дробно-дифференциального уравнения теплопроводности.

В заключении сформулированы основные итоги диссертационного исследования.

Научная новизна

Новыми научными результатами, полученными в диссертационной работе, являются:

технология программирования алгоритмов молекулярно-динамического моделирования на графических процессорах, которая позволила создать программное обеспечение для получения характеристик углеродных наноструктур;

результаты измерений скорости решений различных задач на графических процессорах, показывающие эффективность применённых подходов представления пространства и вычисления межчастичных потенциалов;

результаты численного решения задачи распространения теплового импульса из центрального источника вдоль листа графена и нанотрубки, алгоритм согласования микро- и макроописания данного явления.

Практическая значимость

Результаты диссертационной работы могут быть использованы при создании программных комплексов, использующих в качестве основных или дополнительных вычислителей графические процессоры. Организация этапов проектирования и сборки построена таким образом, что минимизирует количество сбойных программных модулей, упрощает поиск ошибок, позволяет расширять программу, добавляя новый функционал.

Результаты диссертационной работы могут быть использованы в ИПМ им.

М.В.Келдыша РАН, ИВМ РАН, ОИВТ РАН, МГУ им. М.В.Ломоносова, МФТИ и других организациях, занимающихся моделированием молекулярной динамики на вычислительных системах с массовым параллелизмом.

Достоверность результатов

Диссертационное исследование основано на применении известных и отработанных технологий и инструментов параллельного программирования, что обеспечивает долгосрочную многоплатформенную поддержку от разработчиков аппаратного обеспечения. Программное обеспечение апробировано на широком спектре задач молекулярной динамики. Достоверность полученных результатов подтверждается с помощью тщательной верификации численных результатов на основе сравнения с известными результатами других авторов и существующими экспериментальными данными.

Публикации результатов работы

Результаты диссертационной работы представлялись на Российских и международных конференциях по тематике исследования, опубликованы в научных изданиях, рекомендованных ВАК РФ.

Автореферат полностью отражает основное содержание диссертации.

Замечания по работе

По диссертационной работе можно сделать следующие замечания:

1. В главе 2, посвящённой 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 её

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 расчётов 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, причём, 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.

Заключение

Диссертация Семенова С. А. является завершённой научно-квалификационной работой, в которой содержится решение актуальной задачи разработки математического и программного обеспечения современных специализированных вычислителей в области молекулярно-динамического моделирования.

Результаты работы достаточно полно отражены в публикациях научных изданий. Используемые в работе методы обоснованы и соответствуют целям решаемых задач.

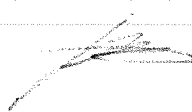
Автореферат соответствует содержанию текста диссертации.

Перечисленные замечания не влияют на общую положительную оценку рассматриваемой диссертационной работы, представляющей собой законченное и выполненное на высоком уровне исследование, содержащее решение актуальной научно-технической проблемы.

Работа полностью удовлетворяет всем требованиям Постановления Правительства РФ от 24 сентября 2013 г. № 842 «О порядке присуждения учёных степеней» и заслуживает положительной оценки, 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».

Диссертационная работа обсуждалась на научном семинаре ИПМ им. М. В. Келдыша РАН «15» ноябрь 2017.

Зам. директора по научной работе
ИПМ им. М. В. Келдыша РАН,
член-корреспондент РАН, д.ф.-м.н.,
профессор



Тишкин В.Ф.