

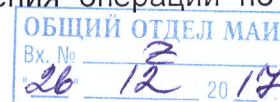
ОТЗЫВ

на автореферат диссертационной работы Семенова Сергея Александровича «*Технология программирования алгоритмов молекулярно-динамического моделирования наносистем на графических процессорах*», представленной 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».

Диссертационная работа Семенова С.А. посвящена решению актуальной задачи создания технологии разработки программного обеспечения для молекулярно-динамического моделирования на графических процессорах.

Использование ядер графических карт в качестве вычислителей общего назначения позволяет существенно расширить возможности компьютерных систем, и в настоящее время графические процессоры становятся неотъемлемой частью высокопроизводительных вычислительных комплексов. Одной из перспективных областей применения таких систем является молекулярно-динамическое моделирование. Известны разработки специальных компьютеров для решения задач данного класса. Графические карты за счет высокой производительности и относительной доступности открывают новые возможности в этом плане. Успешность реализации подобных проектов во многом зависит от технологичности разработки программного обеспечения и возможности адаптации имеющихся программных продуктов для их реализации на графических процессорах. В диссертационной работе предлагается комплекс эффективных решений в данном направлении.

С целью повышения производительности вычислений на GPU автором предложены и реализованы методы, позволяющие сократить количество запросов в глобальную память, уменьшить число ветвлений, выполнить подбор оптимальной загрузки мультипроцессоров. Следует отметить подходы к разбиению пространства, составлению и обновлению списка соседних атомов с целью минимизации коллизий памяти, алгоритмы распределения операций по



вычислительным потокам и выделения дополнительной памяти для создания копий координат взаимодействующих атомов.

Важным научным результатом диссертационной работы является разработка нового подхода к математическому моделированию теплопереноса в низкоразмерных наноструктурах, основанного на сочетании молекулярно-динамического моделирования и макроописания процесса с использованием дробно-дифференциального уравнения переноса. Это позволяет идентифицировать и моделировать аномальные режимы теплопроводности, реализуемые в рассматриваемых наноструктурах при низких температурах.

По автореферату можно сделать следующее замечание: было бы целесообразно затронуть вопрос масштабирования программного обеспечения на случай использования группы видеокарт.

В целом, судя по автореферату, диссертация Семенова С.А. является завершённой научно-исследовательской работой, посвящённой актуальной задаче, соответствует требованиям Положения о порядке присуждения учёных степеней, а её автор 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».

Научный сотрудник отдела математического моделирования
гетерогенных систем Вычислительного центра им. А.А. Дородницына
Российской академии наук Федерального исследовательского центра
«Информатика и управление» Российской академии наук, к. ф-м. н.

Колбин И.С.

Подпись Колбина И.С. заверяю



26.12.17
Уч. совет.