



МИНОБРНАУКИ РОССИИ

федеральное государственное
бюджетное учреждение
"Научно-технический институт
межотраслевой информации"
(НТИМИ)

Зорге ул, д. 22, корп. 1,2, г. Москва, 125252
Тел. 8(499)943-30-41, Тел./факс 8(499)943-13-08,
Факс 8(499)943-13-06
E-mail: irahar@mail.ru, irisha@a5.kiam.ru
ИНН/КПП 7714039292/771401001
ОГРН 1027739145610

от 201 г. № _____

На № _____ от _____

Утверждаю

Председатель НТС НТИМИ



С.В. Безпрозванных
2017г.

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».

Область исследований по молекулярно-динамическому моделированию наносистем является востребованной и активно развивающейся на сегодняшний день. Существует достаточно большое количество программных решений для выполнения на универсальных процессорах, одновременно разработка методов и средств для решения задач моделирования на графических процессорах активно ведётся в научно-исследовательских лабораториях, а также коммерческих компаниях и отдельными разработчиками открытого программного обеспечения.

Диссертационная работа Семенова С. А. посвящена разработке технологии программирования молекулярно-динамического моделирования наносистем на графических процессорах. Следует отметить актуальность такой постановки задачи, поскольку созданные программные решения возможно запускать на персональных компьютерах.



Научная новизна, в частности, состоит в разработке новых подходов и средств для программирования задач молекулярно-динамического моделирования на графических процессорах. Предложенные методы позволяют повысить производительность вычислений и получить необходимые результаты в течение рабочего дня.

Достоверность полученных результатов подтверждается имеющимся в работе обоснованием предложенных методов, а также успешной практической реализацией и тестированием разработанных программных решений. Практическая значимость диссертации состоит в разработке на основе предложенных методов и средств программного комплекса молекулярно-динамического моделирования на графических процессорах.

Результаты проведенных исследований опубликованы в 11 работах, включая статьи в журналах из перечня рецензируемых научных изданий ВАК.

Материал хорошо структурирован и изложен грамотным научным языком, обозначен личный вклад автора в результаты исследований, выводы аргументированы. При этом есть несколько замечаний по содержанию автореферата:

- отсутствуют ссылки на версии сравниваемых программных продуктов;
- из автореферата не ясно, что значит значение p'' на рисунке 6, притом, что в тексте характеристика диффузии обозначена символом p .

Замечания носят скорее рекомендательный характер и не снижают оценку работы. В целом, судя по автореферату и публикациям, диссертация «Технология программирования алгоритмов молекулярно-динамического моделирования наносистем на графических процессорах» является законченной научно-исследовательской работой, имеющей научное, методическое и прикладное значение. Работа соответствует требованиям Положения о порядке присуждения учёных степеней, а её автор, С. А. Семенов, 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».

Ученый секретарь, к.т.н.

В.Е. Лукашов

18.12.2017