

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации, представленной на соискание 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»

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

Автор диссертации: Семенов Сергей Александрович

В предлагаемом диссертационном исследовании поднимаются вопросы создания технологии программирования алгоритмов молекулярной динамики на графических процессорах, которая позволит разработчикам без труда проектировать сложные программные комплексы, сосредоточившись на реализации новых функций. Класс решаемых задач, рассматриваемый автором, является важным с практической точки зрения, так как полученные результаты свидетельствуют об эффективном применении современных специальных высокопроизводительных вычислителей.

В начале работы дается обзор алгоритмам молекулярной динамики и обосновывается их выбор для дальнейшей реализации на графических процессорах. В первую очередь выписано уравнение движения и численный метод его решения, который позволяет проводить вычисления параллельно. Далее показаны способы размещения данных в памяти и отображения вычислительных потоков на архитектуру видеокарт, что позволяет ускорить

выполнение программы в десятки раз по сравнению с ее работой на центральном процессоре. При решении представительных задач определены приемы реализации разностной схемы, сложных потенциалов межчастичного взаимодействия, структур данных, наследования, визуализации вычислений. Данные задачи являются важными элементами проектирования программного обеспечения и в общем случае требуют специального математического описания. Далее в работе проведены серии компьютерных экспериментов, проанализирована эффективность параллельных вычислений, что позволяет сделать вывод о том, что гибридные вычислительные системы востребованы и будут использоваться в ближайшее время. По результатам проведенных численных экспериментов решена практическая задача определения коэффициента теплопроводности углеродных наноструктур при различных температурах.

Замечания по автореферату:

1. В работе указана возможность увеличения количества вычислительных потоков, но из представленного описания не ясно, возможно ли масштабирование программного обеспечения на вычислительные системы V-Class или A-Class разработки и производства АО «Т-Платформы».

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

Указанные недостатки не снижают общей положительной оценки диссертационной работы. Полученные результаты являются новыми, полностью принадлежат автору и имеют перспективы прикладного применения в ближайшее время. Все это в совокупности позволяет утверждать, что диссертация выполнена на высоком научном уровне и является законченной научно-квалификационной работой, а ее автор

Семенов С. А. 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».

Заместитель директора
по стратегическим проектам
АО «Т-Платформы», к.т.н.



А.Е. Березко

Подпись Березко А.Е.

уверено.

Директор по персоналу Алямова Е.М.

18.12.2017