

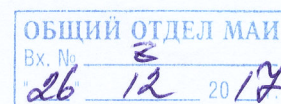
ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Семенова Сергея Александровича «Технология программирования алгоритмов молекулярно-динамического моделирования наносистем на графических процессорах», 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».

Диссертационная работа Семенова С. А. посвящена разработке и апробации технологии программирования алгоритмов молекулярно-динамического моделирования наносистем на графических процессорах. В работе была представлена поэтапная инструкция создания программного комплекса на основе инструментов CUDA и требований масштабируемости и легкости реализации сложных потенциалов межатомного взаимодействия. Далее, с использованием созданного программного обеспечения проведена серия вычислительных экспериментов на углеродных наноструктурах для определения режимов теплопроводности.

В ходе выполнения работы Семенов С. А. перенес удачную модель проектирования программных комплексов на архитектуру графических вычислителей, что позволяет в рамках стандартных подходов создавать новые модули, реализующие алгоритмы молекулярной динамики, на естественно подходящие для этого видеокарты. Ранее для этого требовались усилия целых команд разработчиков, а в рамках предлагаемой технологии разработка полностью готового программного продукта по силам индивидуальным исследователям. Благодаря примененным способам разделения вычислений функций, входящих в потенциал взаимодействия, большое число ядер эффективно используются для моделирования наноструктур.

Представленное исследование влияния разных параметров инициализации видеокарт, их технических характеристик, различных операционных систем и версий драйверов позволило в деталях изучить направления оптимизации математического обеспечения. Было показано, каким образом организуется бесконфликтный доступ к памяти, что позволяет сделать утверждение о достижении вычислительной сложности $O\left(\frac{N}{P}\right)$.



Работа выполнена на высоком уровне. По результатам работы было опубликовано 4 статьи в журналах из списка ВАК. Автор также выступал с докладами на ряде международных конференций.

В качестве замечаний можно отметить следующее:

- 1) в качестве особенностей доступа к памяти в автореферате указывается аппаратная интерполяция, 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.

Указанные недостатки не снижают значимости проведенного научного исследования. Диссертационная работа выполнена на высоком научном уровне, отвечает требованиям Положения о порядке присуждения ученых степеней, а её автор, С. А. Семенов, 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».

Шишов Дмитрий Вениаминович

Кандидат химических наук, старший научный сотрудник лаборатории вычислительных методов в химии химического факультета МГУ им М. В. Ломоносова

119991, Москва, Ленинские горы, дом 1, строение 3, ГСП-1, МГУ, химический факультет.

Тел +7 9261416226, email dima@stud.chem.msu.ru

Подпись Шишова Дмитрия Вениаминовича заверяю:



26.12.17
уч. совет.