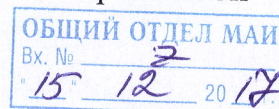


## ОТЗЫВ

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»

В диссертационном исследовании рассматривается технология программирования алгоритмов молекулярной динамики на графических процессорах для решения различных задач, связанных с наносистемами. Автор предложил подход эффективного создания программного комплекса на графических процессорах, реализовал его, и с помощью разработанного программного обеспечения решил актуальную задачу теплопроводности углеродных наноструктур, таких как вытянутый лист графена и протяженная нанотрубка. В качестве дополнительного обоснования полученного эффекта аномальной теплопроводности решена дробно-дифференциальная математическая модель, и проведено сопряжение микро и макро подходов к описанию явления переноса тепла в наносистемах.

Первая глава диссертации посвящена описанию алгоритмов молекулярно-динамического моделирования, и дана постановка задачи их реализации на графических процессорах. Во второй главе представлена технология создания программ молекулярно-динамического моделирования различных наноструктур с использованием потенциала Бреннера. Предлагается метод реализации численных алгоритмов решения уравнений движения, в которых используется явная разностная схема, и один временной



шаг реализуется так, чтобы не возникало ветвлений кода. Представленная технология выбора алгоритмов молекулярной динамики обеспечивает эффективное исполнение на видеокартах. В третьей главе с использованием разработанного программного комплекса проведено моделирование отдельных известных углеродных структур, и вычислены их параметры. Результаты моделирования соответствуют результатам, полученным с использованием программного комплекса LAMMPS, а полученные значения параметров совпадают с параметрами использованного потенциала. Кроме того они близки к значениям, полученным в других программных комплексах и лабораторных экспериментах. При этом следует отметить преимущества разработанного комплекса по скорости и точности моделирования. Четвертая глава посвящена прикладной задаче определения коэффициентов теплопроводности углеродных наноструктур. Результаты молекулярно-динамического (микроскопического) моделирования распространения тепла в исследуемых образцах (листы графена и нанотрубки) свидетельствуют о том, что рассматриваемые процессы проявляют аномальный характер, причем степень аномальности (или её отсутствие) зависит от заданных начальных температур наноструктур.

Результаты, полученные в диссертационной работе, являются новыми, имеют теоретическое и прикладное значение. Весьма перспективно применение молекулярной динамики, описанной в работе, в молекулярной биологии. В автореферате диссертации подробно обоснованы актуальность, новизна и практическая значимость работы, четко сформулированы цели и задачи диссертационного исследования. Автореферат диссертации дает полное представление о ее содержании и уровне.

По автореферату имеются следующие замечания:

1. В тексте автореферата не отражена физическая связь между динамикой частиц и температурой образца.

2. Несмотря на достаточно подробный теоретический обзор, в работе отсутствуют сведения о модификациях потенциала Бреннера и его адаптации к различным наноструктурам.

Указанные недостатки не снижают общей положительной оценки диссертационной работы, соответствующей всем требованиям, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата наук. Считаю, что ее автор Семенов Сергей Александрович 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».

Сведения о составителе отзыва

ФИО: Потанин Евгений Петрович

Ученая степень: доктор физико-математических наук

Ученое звание: старший научный сотрудник

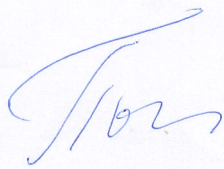
Почтовый адрес: Россия 127204, Москва, 9-ая Северная линия, дом 21

Телефон: 499 196-77-28

Адрес электронной почты: [Potanin\\_EP@nrcki.ru](mailto:Potanin_EP@nrcki.ru)

Наименование организации: Национальный исследовательский центр  
«Курчатовский Институт»

Должность: ведущий научный сотрудник



Подлинность подписи  
*Потанин Е.П.*  
подтверждаю

Директор Департамента  
по общим, кадровым и  
социальным вопросам



*[Signature]*  
С.В. Андрущук

06.12.2017

26.12.17.  
Уч. совет.