

## ОТЗЫВ

*научного консультанта о работе аспиранта Семенова Сергея Александровича по диссертации «Технология программирования алгоритмов молекулярно-динамического моделирования наносистем на графических процессорах», представленной к защите на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук по специальностям 05.13.11 «Математическое и программное обеспечение вычислительных машин, комплексов и компьютерных сетей» и 05.13.18 «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ».*

Диссертационная работа С.А. Семенова направлена на решение актуальной задачи разработки технологии программирования алгоритмов молекулярной динамики на графических процессорах, которая позволяет создать программный комплекс для моделирования теплопроводности углеродных наноструктур. Автором проведена полномасштабная исследовательская работа, включающая выбор и модификацию методов молекулярной динамики, способов геометрического построения наноуглеродов, потенциалов межчастичного взаимодействия и методов термостатирования. Рассмотрена архитектура графических процессоров и методы оптимального отображения на неё процессов параллельных вычислений. Далее работа автора демонстрирует технику программирования эффективных алгоритмов молекулярно-динамического моделирования углеродных наноструктур на видеокартах; на её основе разработан программный комплекс, включающий в себя возможности визуализации результатов в реальном времени. Проведена серия компьютерных экспериментов, показывающих высокую производительность полученного распараллеливания вычислений на графических процессорах по сравнению с обычными.

С использованием разработанного комплекса программ автором осуществлено проведение широкомасштабного вычислительного эксперимента, позволившего выявить ряд важных закономерностей у процессов теплопереноса в углеродных наноструктурах (на примере листов графена и нанотрубок), в первую очередь – в зависимости от начальной температуры структуры. Заметная часть работы была посвящена разработке и применению методов анализа полученных распределений температур по образцу с целью идентификации возникающих в этих наноструктурах режимов теплопроводности в условиях повышенной зашумлённости результатов.

Во время работы над диссертацией С.А. Семеновым внимание было также уделено возможности применения дробно-дифференциального исчисления для более точного

описания процесса теплопереноса в углеродных наноструктурах по сравнению с классическим уравнением теплопроводности. Эта проблема особенно актуальна для случаев с экстремально низкой начальной температурой образца, когда наблюдаются аномальные режимы распространения тепла. Они, тем не менее, могут быть достаточно точно описаны на макроуровне уравнением теплопроводности с частной дробной производной по пространству, порядок которой определён анализом полученного в ходе вычислительного эксперимента распределения температуры по образцу во времени. Таким образом возможно сопоставление результатов микромасштабного моделирования с макроскопическим описанием аномальной теплопроводности на основе дробно-дифференциальных уравнений для всего спектра исследуемых начальных температур наноструктуры.

Таким образом, С.А. Семенову удалось получить целый ряд новых научных результатов как в области разработки технологии программирования алгоритмов для графических процессоров, так и по результатам компьютерного моделирования наносистем, проведённого с использованием программного комплекса, созданного на основе разработанной технологии.

Результаты диссертационной работы С.А. Семенова регулярно докладывались на национальных и международных научных конференциях и публиковались в различных научных изданиях.

В целом за время работы над диссертацией С.А. Семенов проявил высокую научную квалификацию, способность самостоятельно проводить сложную исследовательскую работу и уверенное владение аппаратом численного моделирования и современными методами и средствами программирования.

Представленная диссертационная работа удовлетворяет требованиям ВАК, предъявляемым к кандидатским диссертациям, 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» и 05.13.18 «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ».

Научный консультант,  
доцент каф. вычислительной математики  
и программирования ФГБОУ ВО МАИ (НИУ),  
кандидат физико-математических наук

Подпись доц. Сластуженского Ю.В. достоверно  
Декан факультета «Информационные технологии и  
прикладная математика» ФГБОУ ВО МАИ (НИУ)



*Сластуженский Ю.В.* Сластуженский Ю.В.

Крылов С.С.