

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ СРЕДА ДЛЯ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ НАНОСИСТЕМ

Назаренко К.М.¹, Надыкто А.Б.^{1,2}, Назаренко Е.С.¹, Марков П. Н.¹, Коробов Н. А.¹

¹Московский Государственный Технологический Университет «Станкин», 127055
Россия, г. Москва, Вадковский пер., д. 3а, e-mail: cmr.nazy@gmail.com

²State University of New York at Albany, 251 Fuller Rd., Albany, NY 12203, USA

В данной работе представлена разработанная в рамках программы Государственного Задания (проект 104, Министерство Науки и Образования РФ) вычислительная среда для высокопроизводительных распределенных вычислений. Особенностью данной вычислительной среды является ее полная адаптированность к неидеальным условиям эксплуатации и отсутствию у эксплуатирующих исследователей навыков системного администрирования и глубоких знаний ОС семейства UNIX. Целевым сегментом пользователей данной вычислительной среды являются группы исследователей, обладающие достаточным для проведения масштабных вычислений распределенным ресурсом, но не имеющие возможности содержать дорогостоящую прослойку специалистов в области стандартных программных пакетов и персонал, обслуживающий вычисления.

Вычислительная среда включает системы управления, мониторинга, конвертации данных и коррекции хода многомерной оптимизации, динамическую балансировку вычислений, а также программные инструменты анализа результатов и формирования отчетов. Оригинальная система управления вычислениями, входящая в состав вычислительной среды, состоит из двух основных компонентов: иерархии вычислительных узлов и системы управляющих CASE (Computer Aided Software Engineering) [1]-скриптов. При разработке данной вычислительной среды мы отказались от использования готовых программных продуктов и баз данных в пользу утилит текстового процессинга GNU таких как awk, sed, grep, входящих в состав операционных систем семейства UNIX, потому, что программы и пакеты, используемые для моделирования наносистем (Gaussian 09, Accelrys Materials Studio 2.5, Gromacs, и т. д.) используют текстовые форматы данных, что позволило реализовать множество простых и эффективных решений, основанных на использовании встроенных инструментов автоматической обработки текстовых файлов.

Особенностями данной вычислительной среды являются глубокая автоматизация вычислительных процессов; простая и удобная для пользователя система управления вычислениями, мониторинга, анализа, обработки и подготовки результатов; простота развертывания, диагностики, аварийного восстановления и эксплуатации; высокая отказоустойчивость, интегральная надежность и масштабируемость; низкая стоимость владения.

Литература.

1. Leblang, D. B., and Chase Jr, R. P. Computer-aided software engineering in a distributed workstation environment. In *ACM Sigplan Notices*. 19 (5). 104-112 (1984)