

## ЭФФЕКТИВНЫЕ СРЕДСТВА АВТОМАТИЗАЦИИ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ МОЛЕКУЛЯРНЫХ И НАНОСИСТЕМ

Назаренко К.М., Назаренко Е.С., Марков П. Н., Коробов Н. А.

Московский Государственный Технологический Университет «Станкин», 127055  
Россия, г. Москва, Вадковский пер., д. 3а, тел: (499) 972-55-00, e-mail:  
cmr.nazy@gmail.com

В работе представлен набор программ, повышающих производительность вычислительных комплексов при проведении математического моделирования молекулярных и наносистем квантово-химическими методами. Разработанное ПО дополняет описанную в работе [1] систему подготовки и обработки данных. В состав комплекса программ входят: системы проблемно-ориентированного мониторинга, трехуровневой балансировки вычислительной нагрузки, модуль сжатия получаемой в ходе вычислительных экспериментов информации и средство автоматической разработки первоначальных конфигураций изомеров молекулярных структур.

Система проблемно-ориентированного мониторинга позволяет в режиме реального времени следить за выбранными исследователями показателями вычислительных экспериментов и их предварительными результатами (геометрии, термодинамики) моделирования и производить оперативную коррекцию работы.

Система балансировки обеспечивает составление расписаний выполнения вычислительных заданий, перезапуск неудачно завершенных заданий на свободных узлах и разгрузку отстающих от графика выполнения ЭВМ. Такая трехуровневая балансировка позволяет повысить одновременность завершения обработки вычислительных заданий проекта, даже с учетом практической невозможности предварительной оценки их вычислительной сложности.

Модуль сжатия результатов позволяет снизить объем хранимой и передаваемой по сети информации в 12 раз, что сокращает время анализа обработанных данных.

Средство автоматической подготовки исходных геометрий изомеров молекулярных структур (guess geometries) позволяет оперативно подготовить широкий набор их конфигураций. Генерация управляется путем выбора шага сетки, ориентации молекул-компонентов реакции и допустимых дистанций между ними.

Данные алгоритмы успешно внедрены в Лаборатории Моделирования Молекулярных и Наносистем МГТУ «СТАНКИН» и используются при моделировании структуры, свойств и механизмов образования молекулярных кластеров в атмосфере Земли. Программы разработаны в рамках Государственного Задания (проект 104, Министерство Науки и Образования РФ, рук. д.ф.-м.н. Надыкто А.Б.).

### Литература.

1. Назаренко К. М., Назаренко Е.С., Надыкто А.Б., Кириллова Л. Н. Вычислительная среда для компьютерного моделирования наносистем. Система подготовки и обработки данных. // *Вестник компьютерных и информационных технологий*. 2016. № 10. С. 17 – 23.