

ОЦЕНКА ВРЕМЕННЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ ЭКСПЕРИМЕНТОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИХ МЕТОДОВ

Федосов М.Е., Коробов Н.А., Назаренко К.М.

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

В работе представлен инструментарий статистического анализа эффективности обработки вычислительных заданий при проведении математического моделирования молекулярных и наносистем квантово-химическими методами. Разработанное ПО позволяет систематизировать данные о затраченном вычислительном времени, произвести его учет и получить предварительные оценки сложности вычислительных заданий.

При изучении структуры и свойств молекулярных систем с использованием ТФП время, затрачиваемое на единичный цикл оптимизации их геометрий, определяется числом атомов, выбором функционала плотности и набора волновых функций. Однако при проведении вычислительных экспериментов с использованием пакета Gaussian 09 время, затрачиваемое на моделирование идентичных по составу изомеров молекулярных структур, существенно отличается, поскольку зависит как от числа циклов оптимизации, так и от числа перезапусков неудачно завершившихся вычислительных заданий, т.е. параметров, определяемых первоначальным дизайном наносистемы. Не последнюю роль в этом процессе играет производительность используемого вычислительного узла, организация его системного ПО и число задействованных процессорных ядер [1].

Разработанный нами алгоритм извлекает информацию из файлов с выгрузками результатов моделирования молекулярных структур пакетом Gaussian 09 и позволяет получить распределение числа циклов и попыток оптимизации, построить доверительный интервал для времени обработки вычислительного задания в зависимости от химического состава моделируемой молекулярной структуры.

Реализация данного алгоритма с использованием языка Java может применяться на ЭВМ с различной архитектурой и системным ПО. Программа используется в Лаборатории Моделирования Молекулярных и Наносистем МГТУ «СТАНКИН» при балансировке расписаний обработки вычислительных заданий.

Разработка велась в рамках Государственного Задания (проект 104, Министерство Науки и Образования РФ).

Литература.

1. Назаренко К. М., Коробов Н. А., Надыкто А. Б., Кириллова Л. Н. Комплексное исследование производительности проблемно-ориентированных вычислительных GRID-систем для моделирования наноструктур и наноматериалов. // Вестник компьютерных и информационных технологий. 2016. № 8. С. 22 – 28.