

ОПТИМИЗАЦИОННЫЙ МОНИТОРИНГ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ МОЛЕКУЛЯРНЫХ КЛАСТЕРОВ

Винников А.В., Коробов Н.А., Назаренко К.М.

Московский Государственный Технологический Университет «СТАНКИН»,
Россия, 127055 г. Москва, Вадковский пер., д. 3а,
Тел: (499) 972-55-00,
E-mail: santystyle@mail.ru

При исследовании молекулярных кластеров требуется одновременность завершения обработки вычислительных заданий, что продиктовано необходимостью сравнения термодинамических свойств изомеров. Систематизация сведений о затратах вычислительного времени позволяет повысить эффективность исследований. В работе развивается инструментарий статистического анализа временных характеристик вычислительных экспериментов, проводимых с использованием квантово-химических методов[1].

Разработан встраиваемый модуль Вычислительной Среды[2], позволяющий получить интервальные оценки времени обработки вычислительных заданий, на основе которых может быть произведен выбор параметров автоматических средств генерирования исходных геометрий изучаемых структур.

Модуль является универсальным средством постмониторинга масштабных вычислительных экспериментов, с использованием как различного проблемно-ориентированного ПО, так и гетерогенных комплексов ЭВМ. Разработка используется в Лаборатории Молекулярного Моделирования Наноструктурных Систем МГТУ «СТАНКИН» для балансировки вычислительной нагрузки. Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки РФ, проект № 1.7706.2017/БЧ, и РФФИ, грант № 15-08-4969а.

Литература.

1. Федосов М.Е., Коробов Н.А., Назаренко К.М. Оценка временных характеристик вычислительных экспериментов с использованием квантово-химических методов. // Двадцать четвертая международная конференция Математика Компьютер Образование.2017.с.43.
2. 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.