

СТАТИСТИЧЕСКОЕ ОЦЕНИВАНИЕ ПОКАЗАТЕЛЕЙ ПРОИЗВОДИТЕЛЬНОСТИ КОНФОРМАЦИОННОГО ПОИСКА

Коробов Н.А., Назаренко Е.С., Назаренко К.М., Марков П.Н., Надыкто А.Б.,
Уварова Л.А.

Московский Государственный Технологический Университет «СТАНКИН»
Россия, 127055, г. Москва, ул. Вадковский пер. 1,
Тел.: (+7 499)972-95-00; e-mail: cmr.nazy@gmail.com

Целью данной работы является получение количественной оценки производительности вычислительных Grid-систем и определение оптимальной стратегии утилизации процессорного времени при моделировании структуры и свойств молекулярных кластеров.

Вычислительная сложность конформационного поиска [1] определяется временем обработки всех начальных конфигураций. При использовании Grid-систем момент завершения последнего задания зависит от равномерности балансировки, которая определяется точностью оценок вычислительной сложности экспериментов и текущей производительности задействованных ЭВМ.

В результате исследования установлено, что:

- вычислительная сложность каждого шага оптимизации геометрической конфигурации молекулярной структуры с использованием пакета Gaussian 09 практически одинакова, и время его выполнения может служить показателем производительности используемых ЭВМ;

- число шагов оптимизации идентичных исходных данных существенно варьируется и не может являться точным критерием качества используемых начальных условий;

- затраты вычислительного времени на обработку заданий конформационного поиска молекулярных кластеров атмосферного происхождения допускают лишь интервальное оценивание;

- проведение масштабных вычислительных экспериментов конформационного поиска следует организовывать с использованием длинных очередей заданий, беспорядочно дублируя их для повышения надежности эксплуатации Grid-систем;

- высокая производительность достигается за счет динамической балансировки путем отмены выполненных расчетов по показаниям мониторинга результатов.

Работа выполнена при поддержке РФФ, грант № 18-11-00247-П от 21.04.21.

Литература.

1. Анализ технических условий проведения вычислительных экспериментов конформационного поиска. Коробов Н.А., Марков П.Н., Назаренко Е.С., Назаренко К.М., Надыкто А.Б. В книге: Моделирование нелинейных процессов и систем. Материалы пятой международной конференции. 2021. С. 215-217.