

# ИССЛЕДОВАНИЕ ИНТЕГРАЛЬНОЙ ЭФФЕКТИВНОСТИ СИСТЕМЫ "ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЙ КОМПЛЕКС + ПРИКЛАДНОЕ ПО ДЛЯ АТОМНО-МОЛЕКУЛЯРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ НАНО-СИСТЕМ И НАНОМАТЕРИАЛОВ"

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

Московский Государственный Технологический Университет «Станкин», 127055  
Россия, г. Москва, Вадковский пер., д. 3а, e-mail: [kor.nik.an@yandex.ru](mailto:kor.nik.an@yandex.ru)

Проведен анализ интегральной эффективности системы "вычислительный комплекс + прикладное ПО" на примере высокопроизводительной гетерогенной Grid-системы [1] и комплекса программ для квантово-химического моделирования молекулярных и нано-систем Gaussian 09 [2], определены коэффициенты эффективности параллелизации этого пакета. Получены оценки эффективности различных многопроцессорных режимов вычислений, реализуемых под управлением как реальных, так и виртуальных ОС для различных средств виртуализации. В ходе работы выявлены нелинейный характер роста производительности платформ, основанных на процессорах одной серии, в зависимости от тактовой частоты (Рис. 1а), а также полная непригодность стандартных тестов (GeekBench, Cinebench, wPrime, ScienceMark) для оценки реальной производительности системы "вычислительный комплекс-прикладное ПО для моделирования молекулярных и нано-систем".

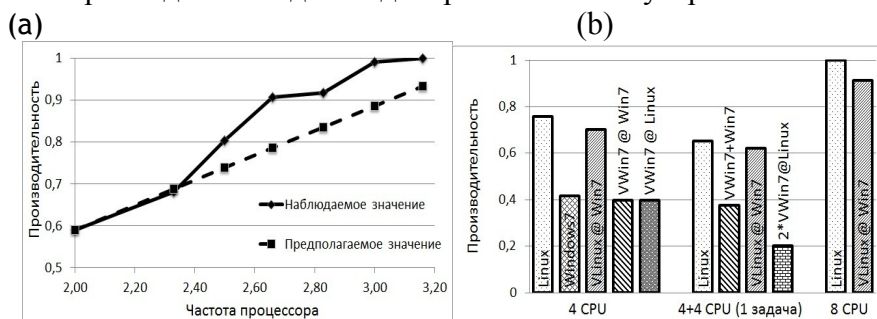


Рис. 1. Производительность вычислительных узлов с различной тактовой частотой процессоров (а) и (б) различные ОС (в том числе и виртуальные).

В работе получена ценная информация, позволяющая выбрать оптимальную стратегию утилизации процессорного времени, и выработаны практические рекомендации для оценки производительности имеющихся и проектирования новых проблемно-ориентированных вычислительных комплексов.

## Литература.

1. Назаренко К. М., Назаренко Е. С., Коробов Н. А. Эффективные алгоритмы централизованного управления многопроцессорными вычислительными комплексами // XXII-ая конференция серии «Математика. Компьютер. Образование.», 2015 г., тезисы, стр.213
2. Gaussian 09, Revision D.01 Frisch, M.J., et al., Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2009.