

ОРГАНИЗАЦИЯ КОНВЕЙЕРНОЙ ОБРАБОТКИ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ ЗАДАНИЙ КОНФОРМАЦИОННОГО ПОИСКА

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

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

Предложенная в [1] многоуровневая схема конформационного поиска предполагает обработку вычислительных заданий, отбор которых требует сравнения всей совокупности результатов моделирования молекулярных структур на каждом уровне. На финальном этапе ее получения вариативность сложности заданий приводит к высвобождению вычислительных ресурсов.

Нами предлагается конвейерная организация конформационного поиска, предполагающая динамическое выполнение вычислительных заданий следующего уровня. В качестве параметров алгоритмов предиктивного анализа промежуточных результатов могут выступать их ориентировочные значения, указанные исследователем-специалистом в предметной области, рейтинги стабильности уже обработанных изомеров, доля завершенных заданий. При обнаружении более стабильных изомеров производится их приоритетная обработка, организованная без потерь вычислительного времени [2]. За счет более плотной утилизации ресурсов, достигаемой путем выявления и упреждающего выполнения потенциально наиболее перспективных исходных данных, получаемых на незавершенном этапе, повышается эффективность исследования молекулярных кластеров.

Дополнительные вычислительные ресурсы также могут быть высвобождены в результате приостановки заданий с низкой динамикой оптимизации, оцениваемой [3] путем статистического анализа показателей сходимости (число шагов, число попыток перезапуска, внутренних параметров шага оптимизации).

Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки РФ, проект № 1.6198.2017/6.7, и РФФИ, грант № 18-11-00247 от 20.04.18.

Литература.

1. Коробов Н. А., Назаренко К.М., Назаренко Е. С., Марков П. Н. Мультипрограммная схема конформационного поиска молекулярных кластеров – Тезисы докладов XXV международной конференции «Математика. Компьютер. Образование», 2018, с. 66.
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.
3. Броцкий К. А., Назаренко К. М. Повышение эффективности вычислительных экспериментов молекулярного моделирования методом скоринга. - XVI Научно-практическая техническая конференция «Исследуем и проектируем», г. Москва, 2019.