

Д. С. Столяров, А. Л. Рабинович (Петрозаводск, ПетрГУ; ИБ КарНЦ РАН). **Изучение конформационных свойств макромолекул методом Монте–Карло с использованием кластера.**

Актуальной задачей при проведении исследований в тех областях науки и техники, достижение результатов в которых сопряжено с вычислительными работами больших объемов, является поиск путей повышения производительности расчетов, снижения затрат процессорного времени. Типичный пример — применение компьютерного моделирования для имитации поведения изучаемой системы и расчета ее равновесных и/или динамических характеристик: как правило, для использования методов компьютерного моделирования требуются существенные вычислительные ресурсы.

В данной работе описано использование вычислительного кластера, созданного на базе сети рабочих станций. Кластер организован по одной из стандартных схем [1] с использованием ОС Scientific Linux и распространенной технологии программирования для параллельных компьютеров с распределенной памятью — MPI, которая предоставляет программисту единый механизм взаимодействия процессов внутри параллельно исполняемой задачи независимо от машинной архитектуры (однопроцессорные, многопроцессорные с общей или раздельной памятью) и взаимного расположения процессов (на одном физическом процессоре или на разных) [1]. Для реализации MPI был применен программный пакет MPICH.

Кластер использован для проведения серий компьютерного моделирования методом Монте–Карло (МК) [2] углеводородных макромолекул цепного строения, содержащих различное количество несопряженных двойных связей цис. Такие олигомерные цепи являются типичными компонентами молекул липидов; последние, в свою очередь, образуют основу различных природных мембранных структур. Генерирование конформаций углеводородных молекул осуществлялось в рамках МК-модели [2], в которой, в отличие от поворотно-изомерного приближения, используется непрерывное изменение всех углов внутреннего вращения основной цепи молекулы в полном диапазоне, от 0 до 360 град.

Произведено распараллеливание последовательной МК-программы, использованы стандартные функции передачи сообщений MPI [3]. Применение параллельного варианта программы позволило достигнуть существенного увеличения скорости расчетов, сократить время на генерирование представительных выборок конформаций молекул и/или увеличить реально достижимые в компьютерном эксперименте длины цепей изучаемых макромолекул. Изучена зависимость геометрических характеристик молекул от их химического строения.

Проведено исследование эффективности проведенного распараллеливания, ее зависимости от количества доступных узлов.

Работа поддержана РФФИ (проект 06-03-32211) и грантом НШ-306.2008.4 Президента РФ для ведущих научных школ.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Сбитнев Ю.* Параллельные вычисления. <http://linux-cluster.org.ru/>.
2. *Rabinovich A. L.* Makromolekulare Chemie, 1991, v. 192, № 2, p. 359.
3. *Антонов А. С.* Параллельное программирование с использованием технологии MPI: Учебное пособие. М.: МГУ, 2004.