
**Параллельные вычисления в компьютерном моделировании
методом Монте-Карло: исследование конформационных свойств
макромолекул на кластере**

Столяров Д. С.

*Петрозаводский государственный университет, ул. Ленина, 33,
Петрозаводск, 185910, Россия*
e-mail: stoden@petrsu.ru

Рабинович А. Л.

*Институт биологии КарНЦ РАН, ул. Пушкинская, 11, Петрозаводск,
185910, Россия*
e-mail: rabinov@krc.karelia.ru

Достижение новых результатов во многих научных областях в настоящее время сопряжено с проведением вычислительных работ больших объемов. Вследствие этого актуальной является задача повышения производительности подобных расчетов. Одним из методов, реализация которого требует, как правило, существенных вычислительных ресурсов и/или затрат процессорного времени, является имитационное компьютерное моделирование. Последнее все более широко применяется в научных исследованиях, в частности, при изучении равновесных и динамических свойств молекулярных систем различной природы.

В настоящей работе описано использование вычислительного кластера, организованного на базе сети рабочих станций, по одной из стандартных схем [1] с использованием ОС Scientific Linux и наиболее 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), взаимного расположения процессов (на одном физическом процессоре или на разных) [1]. Для реализации MPI применен программный пакет MPICH. Все вычислительные узлы кластера однородны, каждый узел имеет свою оперативную память.

Кластер использован для проведения компьютерных экспериментов с насыщенными углеводородными макромолекулами цепного строения методом Монте-Карло (МК) [2]. Цепные молекулы данного класса широко распространены в природе, например, как компоненты молекул фосфолипидов, образующих основу биомембран, и имеют важнейшее значение. Генерирование конформаций углеводородных молекул на компьютере в рамках МК-модели [2] осуществлялось в предположении о непрерывном изменении всех углов внутреннего вращения основной цепи рассматриваемой молекулы в полном диапазоне, от 0 до 360°.

При помощи стандартных функций передачи сообщений MPI [3] произведено распараллеливание ранее разработанной последовательной МК-программы. Использование в дальнейшем параллельного ее аналога позволило достигнуть существенного увеличения скорости расчетов, сократить время на генерирование представительных выборок конформаций молекул и увеличить реально достижимые в компьютерном эксперименте длины цепей изучаемых макромолекул. Проведено исследование степени эффективности процедуры распараллеливания и ее зависимости от количества узлов, используемых для вычислений. Изучены геометрические характеристики группы углеводородных олигомеров.

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

Литература

1. Сбитнев Ю. *Параллельные вычисления*, <http://linux-cluster.org.ru/>.
2. Rabinovich A. L. *Computerized theoretical study of local structural properties of polyene and polymethylene chains in solutions. The continuum model*, Makromolekulare Chemie **192**, No. **2** (1991), 359--375.
3. Антонов А. С. *Параллельное программирование с использованием технологии MPI*, Учебное пособие, М.: МГУ, 2004.