

ПАРАЛЛЕЛЬНЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ В РАСЧЕТАХ СВОЙСТВ КОМПОНЕНТОВ ЛИПИДНЫХ МОЛЕКУЛ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО

¹Столяров Д.С., ¹Журкин Д.В., ²Рабинович А.Л.

¹ГОУ ВПО "Петрозаводский государственный университет", г. Петрозаводск

²Учреждение Российской академии наук Институт биологии Карельского научного центра РАН, г. Петрозаводск

¹Столяров Д.С.

¹Журкин Д.В.

²Рабинович А.Л.

¹ГОУ ВПО

"Петрозаводский

государственный

университет"

²Учреждение Российской

академии наук Институт

биологии Карельского

научного центра РАН

В ряду молекулярных объектов живой и неживой природы важное место занимают молекулы цепного строения. Так, углеводородные цепи входят в состав липидов биомембран. Эффективным теоретическим методом исследования их свойств является метод Монте-Карло. Для того чтобы получить оценку средних величин исследуемой молекулярной системы данным методом, требуется выполнить расчет сумм, зависящих от набора случайных значений координат точки в конфигурационном пространстве системы (для цепной молекулы во внутренних переменных – это набор валентных связей, валентных углов, углов внутреннего вращения); значения координат генерируются с некоторой плотностью вероятности. Если их количество велико, то расчеты могут потребовать больших затрат процессорного времени. Существенное ускорение вычислений достигается применением технологий параллельного программирования. В данной работе это реализовано для двух вариантов простой выборки при генерировании методом Монте-Карло непрерывного спектра конформаций углеводородных молекул в полноатомном приближении.

В первом варианте простой выборки углы внутреннего вращения вокруг всех простых связей С-С выбирали равновероятно в диапазоне от 0 до 360°, а валентные связи и валентные углы – вблизи значений, отвечающих равновесным параметрам (с равновероятными случайными отклонениями в определенных пределах).

Во втором варианте простую выборку проводили в два этапа: (1) величины всех валентных связей и углов молекулы полагали равными их равновесным значениям, углы внутреннего вращения вокруг всех простых связей С-С выбирали равновероятно в диапазоне от 0 до 360°; (2) производили пересчет внутренних координат всех атомов данной конформации в единую декартову систему координат, а затем осуществляли случайные смещения (в определенных диапазонах) каждого атома молекулы по всем трем его декартовым координатам. В итоге варьировались и величины валентных углов, и взаимные расположения плоскостей, которым они принадлежали.

Для ускорения расчетов для обоих вариантов простой выборки разработана программа, позволяющая создавать набор параллельных процессов. Едиными являлись операции ввода и вывода, предварительных и окончательных расчетов. В каждом процессе для генерирования случайных конформаций молекулы использовалась своя последовательность псевдослучайных чисел; данные, полученные в ходе каждого параллельного процесса, использовались для расчета средних характеристик заданной молекулы. Программа разработана в рамках технологии параллельного программирования MPI – Message Passing Interface. Используются процедуры MPI_INIT() - для инициализации параллельной части программы; MPI_FINALIZE() - для завершения параллельной части приложения; MPI_COMM_RANK() – для определения номера процесса в коммуникаторе; MPI_REDUCE() – для суммирования элементов массивов, значения которых рассчитаны в ходе разных процессов.

Программа применена для расчета свойств липидных цепей, содержащих от 6 до 16 углеродных атомов, – расстояний и квадратов расстояний между концами, флуктуаций размеров, теплоемкости, средних энергий. Расчеты проведены при разных температурах на кластере КарНЦ РАН (10 узлов; в узле два 4-ядерных процессора Xeon 2.67 HGz). Программа позволяла за ~100 часов генерировать ~1010 несамопересекающихся конформаций со строгим учетом химической структуры молекулярной цепи в рамках силового поля CHARMM27, что обеспечивало высокую точность расчетов.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект 10-03-00201a), программы Президента РФ "Ведущие научные школы" НШ-3731.2010.4, Swedish Institute Visby programme 00961/2008, 00675/2009.