

Изобарическое моделирование молекулярных жидкостей методом Монте-Карло с использованием параллельных вычислений

А.В. Теплухин

Институт математических проблем биологии РАН, г. Пущино

Характеристики молекулярных систем, состоящих из нескольких тысяч атомов, легко рассчитываются на обычных персональных компьютерах. Однако при моделировании полимеров приходится использовать элементарные ячейки очень большого объема. Количество атомов в таких моделях может достигать нескольких миллионов. Использование последовательных алгоритмов для решения этих задач становится крайне неэффективным не только из-за роста объемов вычислений при выполнении расчетов, но и в связи с необходимостью размещения очень больших массивов данных в оперативной памяти компьютера. Обычно расчеты таких молекулярных систем выполняют на многопроцессорных комплексах с использованием параллельных вычислений.

Возможность моделирования при заданном постоянном давлении (изобарический NpT-ансамбль) особенно важна на этапе задания начальной конфигурации изучаемой молекулярной системы, так как при отсутствии готовых наборов координат атомов размещение в заданном объеме сотни тысяч молекул или их фрагментов без взаимных перекрытий будет практически невыполнимо. Используя режим NpT-ансамбля, можно «собрать» систему в ячейке значительно большего размера, и на начальной стадии моделирования она быстро релаксирует к естественной плотности.

Программное обеспечение для реализации NpT-ансамбля разработано на основе предложенного ранее [1] подхода для молекулярного моделирования методом Монте-Карло (выборка по Метрополису, «обрезанные» атом-атомные потенциальные функции, периодические граничные условия) в режиме NVT-ансамбля (при постоянном объеме). Для моделирования тепловых флуктуаций объема в алгоритм был включен новый блок, содержащий вызовы коллективных MPI-функций для обменов межпроцессорными сообщениями (gather/scatter, reduce). При этом, благодаря высокой доле арифметических операций на этапе «монтекарловских» испытаний для индивидуальных молекул, общее время счета возросло незначительно.

Расчеты структурных (радиальные функции распределения) и термодинамических (плотность, изобарно-изотермические: теплоемкость, сжимаемость и коэффициент теплового расширения) характеристик жидкого бензола и воды при атмосферном давлении и комнатной температуре выполнялись на 512 ядрах суперкомпьютера МВС100К МСЦ РАН (www.jssc.ru). Моделируемые системы содержали свыше 1 миллиона атомов. Рассчитанные значения оказались в хорошем согласии с экспериментальными данными.

1. Теплухин А.В. Многопроцессорное моделирование гидратации мезоскопических фрагментов ДНК. // Матем. моделир. – 2004. – т.16, № 11. – С. 15-24.