

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА АСИНХРОННОЙ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОЙ ЭВОЛЮЦИИ ПРИ ИССЛЕДОВАНИИ СТРУКТУРЫ ОДНОСЛОЙНЫХ ВЕЗИКУЛ DMPC

Жабицкая Е.И.^{1,2}, Земляная Е.В.^{1,2}, Киселев М.А.²

¹Университет “Дубна”, Россия, Дубна

²Объединенный Институт ядерных Исследований, Россия, Дубна

Исследование структуры и свойств однослойных везикул играет важную роль в структурной биологии, биохимии и фармакологии. В работе [2] развит и успешно использован метод разделенных форм-факторов (SFF) для анализа структуры полидисперсных везикулярных систем по данным малоуглового рассеяния нейтронов (SANS).

В настоящей работе метод SFF адаптирован для моделирования структуры полидисперсной популяции однослойных везикул димиристоилфосфатидилхолина (DMPC) в 40% водном растворе сахарозы на основе данных малоуглового синхротронного рассеяния (SAXS), измеренных на установке A2 (DESY, Германия).

В работе обсуждаются результаты расчетов с разными моделями внутренней структуры бислоя. Показано, что учет флуктуаций внутренних параметров бислоя позволяет описать различия в глубине минимумов на экспериментальной кривой в области больших значений вектора рассеяния q . Фитирование параметров модели, определяющих структуру везикулярной системы, проводится с использованием параллельного алгоритма Асинхронной Дифференциальной Эволюции (АДЭ) [1, 3, 4].

Эффективность параллельной MPI-реализации алгоритма АДЭ тестировалось на LINUX-кластере ЛИТ ОИЯИ. Показано, что среднее время, затраченное на вычисления, падает практически линейно при росте числа задействованных вычислительных узлов N_{proc} . Ускорение вычислений (speed-up) с учетом возрастания необходимого количества вычислений функции при $N_{\text{proc}} = 128$ составило 98 ± 21 раз.

Литература.

1. E. I. Zhabitskaya, M. V. Zhabitsky. Asynchronous Differential Evolution. Lecture Notes in Computer Science, Springer, v. 7125, 2012, pp. 328–333.
2. M. A. Kiselev, E. V. Zemlyanaya, V. K. Aswal, R. H. H. Neubert. What can we learn about the lipid vesicle structure from the small-angle neutron scattering experiment? European Biophysics Journal, v. 35, No. 6, 2006, pp. 477–493.
3. E. I. Zhabitskaya, M. V. Zhabitsky. Решение оптимизационных задач на распределенных вычислительных системах с помощью алгоритма Асинхронной Дифференциальной Эволюции, Математическое Моделирование, Т. 24, No. 12, 2012, С. 33–37.
4. E. I. Zhabitskaya, M. V. Zhabitsky. Asynchronous Differential Evolution with Adaptive Correlation Matrix. Proceeding of the 15th Annual Conference on Genetic and Evolutionary Computation, ISBN: 978-1-4503-1963-8, USA, New York, 2013, pp. 455–462.