

2. *Farmer J. D., Sidorowich J. J.* Predicting chaotic time series // *Phys.Rev.Lett.* 1987. V. 59. P. 845–848.
3. *Casdagli M.* Nonlinear prediction of chaotic time series // *Physica D.* 1989. V. 35. P. 335–356.
4. *Лутковский В.М.* Нейронные сети. Минск. БГУ. 2003. 99 с.

ПОСТРОЕНИЕ СИСТЕМЫ РАСПРЕДЕЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ДИНАМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ В МОЛЕКУЛЯРНЫХ СИСТЕМАХ

Е. И. Хацук

ВВЕДЕНИЕ

Прогресс в области компьютерного моделирования открыл новые возможности для проведения исследований систем высокой сложности. Эти системы характеризуются значительным числом взаимодействующих компонентов (в свою очередь являющихся подсистемами), многообразием связей между своими компонентами, нелинейностью поведения и, как следствие, сложностью прогнозирования. Моделирование таких систем требуют для исполнения все большее и большее количество вычислительных ресурсов, которые может предоставить только мультипроцессорная и распределенная вычислительная техника. Именно поэтому достаточно актуальным является построение системы распределенного моделирования.

Одним из примеров таких систем являются молекулярные системы, моделирование которых требует большой вычислительной мощности. В данной работе рассмотрен метод молекулярной динамики, в основе которого лежит численный расчет траекторий движения частиц. Этот подход позволяет рассчитать любое свойство системы, как термодинамическое, так и кинетическое, таким образом, предоставляя исчерпывающую информацию о системе.

Целью данной работы являлась разработка системы распределенного моделирования динамических процессов в молекулярных системах.

Одним из свойств моделирования молекулярной динамики является высокий параллелизм. Это позволяет успешно применять параллельные технологии для их обчёта. Являясь наиболее универсальным подходом, распределенное моделирование, в то же время предъявляет максимально высокие требования к скорости передачи данных между узлами кластера. Только в случае, когда обчёт модели занимает значительное время (от нескольких секунд) удастся получить выигрыш по скорости.

1. ПАРАДИГМА ПРЕДЛАГАЕМОЙ СИСТЕМЫ

Система создана для организации параллельного моделирования на компьютерах под операционными системами Windows NT/XP, соединенных в локальную сеть.

Контейнер модели представляется файловым архивом Java (jar-файл). Помимо самой модели, этот файл содержит также различную служебную информацию: версию файла, описание модели и её параметров, пределы допустимых значений параметров модели и их количество.

Система работает по следующему принципу (рис. 1): в локальной сети запускается определенное количество вычислительных серверов. На одном из компьютеров запускается клиент, который будет управлять моделированием.

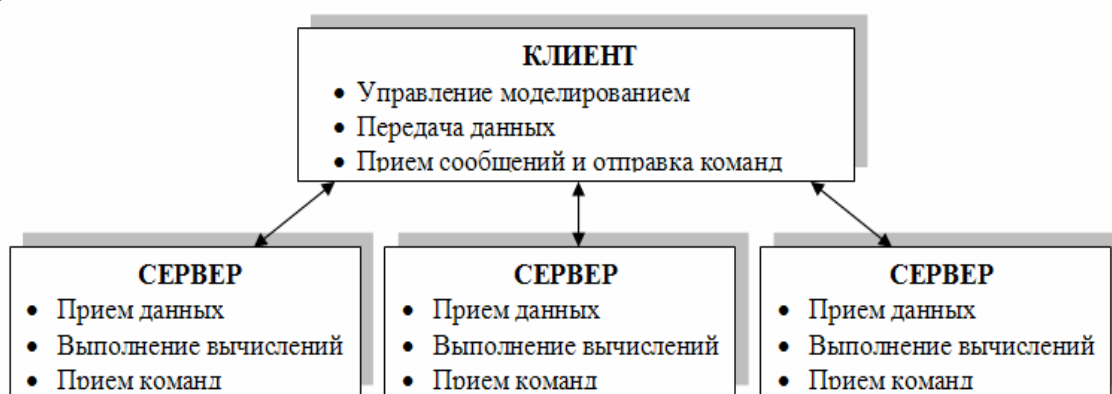


Рис. 1. Структурная схема системы

Для начала моделирования пользователю необходимо выполнить следующие операции: сканирование сети в поисках работающих серверов; загрузка динамически компонуемой библиотеки, реализующей модель; задание параметров для каждого сервера.

Как клиентская, так и серверная часть приложения являются многопоточными. При обмене данными клиент работает с каждым сервером в отдельном потоке.

Файл модели должен реализовывать набор строго определенных функций, предоставляющий пользователю информацию о системе, о количестве входных и выходных данных, а также функции для проверки корректности входных параметров.

2. МОДЕЛИРОВАНИЕ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Сущность метода молекулярной динамики заключается в расчете на компьютере траекторий движения частиц, моделирующих конкретный физический объект – обычно отдельную крупную молекулу, жидкость или твердое тело. Специфика любой системы выражается в форме по-

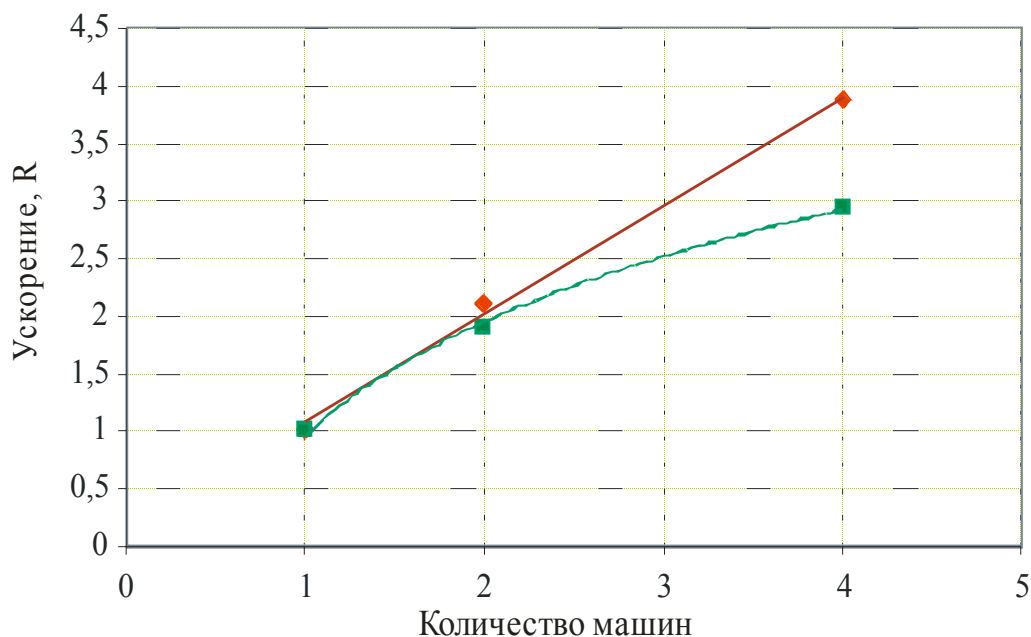


Рис. 3. Ускорение обчета модели в ЛВС

Точками отображены значения, полученные на практике, линиями – гладкая аппроксимация экспериментальных точек

тенциалов и сил межчастичного взаимодействия. Знание траекторий каждой частицы в модели объекта – это исчерпывающая информация, которую невозможно получить ни в каком эксперименте с реальным веществом.

Поэтому метод молекулярной динамики в принципе позволяет рассчитать любое свойство системы – как термодинамическое (например, энергию, давление, энтропию), так и кинетическое (коэффициенты диффузии, частоты колебаний атомов).

Применение параллельных вычислений в первую очередь связано со сложностью обработки большого количества частиц и из-за наличия сложных взаимодействий между ними. В настоящее время моделируются системы от нескольких сотен до нескольких тысяч частиц, что требует применение вычислительной техники высокой мощности.

Необходимо отметить, что на основе использованного в работе алгоритма Верле в скоростной форме [1, 2] возможно создание параллельного алгоритма. Суть его сводится к передаче конфигурации системы в данный момент (координат, скоростей и ускорений частиц) на сервер. Сервер в свою очередь будет рассчитывать ускорения для выделенных ему частиц.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ ТЕСТИРОВАНИЯ СИСТЕМЫ

Для оценки эффективности системы был проведён следующий вычислительный эксперимент. В эксперименте использовались 5 ПК класса Pentium IV (4 сервера и клиент), объединённых в локально-вычислительную сеть (ЛВС) под управлением Windows XP. Скорость передачи данных в сети составляла 100 Мбит/с.

Итоговое тестирование системы проводилось на нагрузочной модели. В ходе эксперимента варьировался параметр нагрузки модели, в результате получены две характеристики соответствующие различным загруженностям серверов.

В качестве параметра оценки эффективности системы было выбрано ускорение, т.е. отношение времени необходимого для получения результата на одном компьютере к времени получения результата при вычислениях в сети. Полученное в результате эксперимента поведение ускорения удовлетворяет закону Амдала.

Литература

5. *Rapaport D. C.* The art of molecular dynamics simulation. Cambridge, 2004.
6. *Гулд Х., Табончик Я.* Компьютерное моделирование в физике. М., 1990.

РАЗРАБОТКА БАЗЫ ДАННЫХ ЭЛЕКТРОННЫХ ДОКУМЕНТОВ

А. С. Хилько

ВВЕДЕНИЕ

Электронная библиотека – особый вид информационных систем, снабженных программным интерфейсом поиска и дистанционного доступа к информации, в которых документы хранятся в электронной, «оцифрованной» форме, и могут быть прочитаны с помощью современных средств коммуникации. Характерной чертой электронных библиотек является наличие единого механизма доступа к разнородной информации, хранящейся в базе данных: текстовой, графической, звуковой и видео.

Главная цель любой электронной библиотеки: собрать, сохранить и предоставить к использованию данную информацию.

Эта система должна быть быстрым решением возникающих проблем и предусматривать как индивидуальные вопросы, так и групповые. Эти решения позволяют организовать управление жизненным циклом информации организации так, чтобы получить максимальную отдачу от использования информации и одновременно минимизировать совокупную стоимость владения в любой момент ее жизненного цикла. Представить общую рабочую базу, содержащую отчеты, документацию, полез-