

с МГ, получавшие СИ любистока лекарственного в дозе 100 мг/кг, однократно. МГ вызывали путем введения варфарина, производства Nuscamed, рег. № ПН013469/01, серия 187393, в дозе 0,43 мг/кг перорально в течение 3 дней. На 4 день от начала опыта брали кровь из подязычной вены животного и проводили изучение на коагулографе Н 330. Полученные результаты оценивались относительно стандарта и стандартных методов статистики.

Результаты исследования. Продолжительность свертывания крови животных, получавших варфарин в дозе 0,43 мг/кг, достоверно увеличивается по сравнению с контрольной группой животных, что свидетельствует о моделировании гипокоагуляции.

В контрольной группе время начала свертывания в среднем составляло 56 секунд, время от начала и до конца свертывания 183 секунд. Общая продолжительность свертывания составляла 100 секунд. У опытной группы время начала свертывания в среднем составляло 40 секунд. Общая продолжительность свертывания составляла 183 секунды. СИ любистока лекарственного существенно увеличивало время начала свертывания и достоверно уменьшало общее время свертывания крови при МГ.

Выводы. Экстракт любистока лекарственного обладает гемостатической активностью.

Список литературы

1. Биологическая активность соединений, полученных синтетическим путем / М.Н.Ивашев [и др.] // Фундаментальные исследования. – 2012. – № 7. – Ч.2. – С. 441-444.
2. Влияние ГАМК и пирасетама на мозговое кровообращение и нейрогенные механизмы его регуляции /

М.Н.Ивашев [и др.] // Фармакология и токсикология. – 1984. – № 6. – С. 40-43.

3. Зацепина, Е.Е. Исследование репаративной активности экстракта жирного масла шиповника при моделированном ожоге у крыс / Е.Е. Зацепина, А.В. Сергиенко, М.Н. Ивашев // Успехи современного естествознания. – 2013. – № 3. – С. 122-123.

4. Корочинский, А.В., Определение раздражающего действия и острой токсичности иммобилизованных форм бактерий / А.В. Корочинский, И.А. Савенко, А.В. Сергиенко, М.Н. Ивашев // Биомедицина, 2010. – Т.1 – № 1. – С. 97-99.

5. Мальков, И.В. Аминокaproновая кислота – противовоспалительное средство без иммунотоксического побочного эффекта / И.В. Мальков, А.В. Сергиенко, М.Н. Ивашев // Аллергология и иммунология. – 2006. – Т. 7. – № 3. – С. 437а-437.

6. Поиск и изучение лекарственных средств, влияющих на воспалительный процесс / А.В. Сергиенко // Автореферат диссертации на соискание ученой степени доктора биологических наук / Научно-исследовательский институт фармакологии РАМН. Москва, 2006.

7. Савенко, А.В. Результаты макроморфологического исследования состояния внутренних органов крыс при длительном применении масляного экстракта плодов пальмы сабаль / А.В. Савенко, И.А. Савенко, А.В. Сергиенко, М.Н. Ивашев // Международный журнал экспериментального образования. – 2013. – № 3. – С. 14.

8. Савенко, И.А. Возможность применения ветеринарного препарата в экспериментальной фармакологии / И.А.Савенко [и др.] // Фундаментальные исследования. – 2012. – № 5. – Ч. 2. – С. 422.

9. Сергиенко, А.В. Экспериментальное изучение общей токсичности и анаболической активности масляного раствора поливитаминного комплекса А, D3, Е / А.В. Сергиенко, А.Б. Саморядова, М.Н. Ивашев // Депонированная рукопись № 322-В2003 18.02.2003.

10. Сергиенко, А.В. Суппозитории индометацина с глюкозамином – новое противовоспалительное средство / А.В. Сергиенко // Фармация. – 2005. – № 6. – С. 31-32.

11. Сергиенко, А.В. Протекторы тканевого метаболизма в экспериментальной фармакологии / А.В. Сергиенко, А.С. Махмуд, М.Н. Ивашев // Аллергология и иммунология. – 2006. – Т.7. – № 3. – С. 439а.

12. Сергиенко, А.В. Клиническая фармакология ацетилцистеина / А.В. Сергиенко, М.Н. Ивашев // Успехи современного естествознания. – 2013. – № 5. – С. 116-117.

«Современные наукоемкие технологии»,

*Испания-Франция (Барселона – Коста Брава – Ницца – Монако – Сан Ремо – Канны),
27 июля – 3 августа 2013 г.*

Физико-математические науки

РАЗРАБОТКА МЕТОДОВ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ДЛЯ ВЫСОКОПРОИЗВОДИТЕЛЬНЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ В МНОГОЧАСТИЧНЫХ СИСТЕМАХ

Трунов А.С., Воронова Л.И., Воронов В.И.

Российский государственный гуманитарный университет, Москва, e-mail: voronova2001@mail.ru

Одним из приоритетных направлений современной науки является создание новых металлических материалов с заранее заданными свойствами.

В настоящее время в этой области широко применяется компьютерное моделирование (КМ), в том числе метод молекулярной динамики, позволяющий определять целый комплекс свойств (структурные, термодинамические,

транспортные) и исследовать взаимосвязи наноструктуры и физико-химических свойств.

При МД-моделировании полимеризующихся расплавов критически важными являются размер моделируемой системы и длительность КМ. Большие значения вязкости, резко увеличивают время моделирования, поскольку накопление данных необходимых для изучения транспортных свойств, осуществляется очень медленно. Большая кривизна потенциальных функций около минимума требует очень малого шага интегрирования уравнений движения для сохранения устойчивости, что ограничивает интервал моделирования системы в состоянии термодинамического равновесия пикосекундами. Сложный характер межчастичного (ионно-ковалентного) взаимодействия требует больших временных затрат на выполнение электростати-

ческого суммирования и учета влияния ближнего окружения.

Для получения с помощью КМ результатов, обладающих практической значимостью, необходимы разработка новых подходов, существенно увеличивающих адекватность моделей и, прежде всего, разработка и внедрение новых методов высокопроизводительных вычислений.

Для решения проблемы существенного увеличения размерности моделей полимеризующихся систем в рамках ограниченных временных и вычислительных ресурсов необходимо решить задачу разработки математических и вычислительных моделей и методов для высокопроизводительных вычислений коррелированных систем N-частиц, со сложным многочастичным взаимодействием, содержащих 105-107 частиц.

Решением этой задачи является разработанная модель неоднородных дескрипторов для распределенного МД-моделирования коррелированной системы N-частиц. Основными элементами модели, обеспечивающими возможность распределения расчетов без детализации всех взаимодействий между частицами, являются объект и дескриптор. Под объектом понимается некоторая совокупность описаний частиц исходной системы, а также отношений между ними, выделяемая по определенным правилам и обеспечивающая возможность декомпозиции системы для распределения и распараллеливания расчетов.

Объекты идентифицируются с помощью неоднородных дескрипторов, которые содержат разнотипные элементы описания выделенного объекта необходимые для распределения расчетов.

Таким образом, система – это совокупность объектов, описываемых неоднородными дескрипторами, расчет которых можно распределять по отдельным вычислителям, комбинируя полученные результаты по определенной схеме.

Оба класса предполагают возможность параллельного расчета дескрипторов на разных вычислителях. Однако, если одночастичные дескрипторы можно произвольно распределять по вычислителям, то агрегаторы (содержат элементы, описывающие перекрестные отношения разных

порядков между одночастичными дескрипторами и/или агрегаторами) являются «зависимыми» от одночастичного дескриптора и рассчитываются на том же вычислительном устройстве, где и «родительский» одночастичный дескриптор.

На основе модели неоднородных дескрипторов коррелированной системы N-частиц разработана модель распределенных вычислителей, которая подразумевает параллельный расчет отношений между объектами системы, описываемых одночастичными дескрипторами, а так же двухчастичными и трехчастичными агрегаторами.

Для построения вычислительной модели используются Master/slave, которая предусматривает централизованное управление подчиненными вычислителями (slave) главным вычислителем (master)[4].

Задача главного вычислителя – разделение множества дескрипторов на подмножества, которые передаются для расчета на подчиненные вычислители (в дальнейшем будут называться вычислители), прием данных и обработка результатов расчетов. Вся совокупность вычислителей реализует на графическом или центральном процессоре параллельный расчет значений элементов дескрипторов.

Существенного увеличения вычислительных мощностей для проведения КМ этого класса моделей можно добиться, используя комбинированный подход для реализации расчетов, с использованием технологий Message Passing Interface (MPI) и Compute Unified Device Architecture (CUDA).

Для реализации модели распределенных вычислителей разработаны методы высокопроизводительных вычислений для моделей: с распределенной и общей памятью.

Тестирование реализованных методов производилось на кластере состоящем из 16 вычислителей Intel Core 2 Duo E6800, а так же на видеокарте GEFORCE GTS 450.

Ниже представлены результаты расчетов коррелированной системы N-частиц, с использованием технологии MPI.

В табл. 2 представлены результаты расчетов коррелированной системы N-частиц, с использованием технологии CUDA.

Таблица 1

Время расчета коррелированной системы N-частиц, технология MPI

Кол-во частиц	10240	50176	250880	401408	Время расчета (в секундах)
	Кол-во вычислителей				
2		0,29	7,89	101	361
4		0,23	7,6	76	217
8		0,15	5,1	49	137
16		0,02	4,2	28	71

Таблица 2

Время расчета коррелированной системы N-частиц, технология CUDA

Кол-во частиц	10240	50176	250880	401408
Время расчета (в секундах)	0,02	0,14	3,53	9,1

Таким образом, внедрение разработанных методов высокопроизводительных вычислений в программный комплекс ИИС «MD-SLAG-MELT» предоставит широкому кругу исследователей возможность удаленного доступа к проведению компьютерного эксперимента и физико-химическим результатам, обладающим прогнозными возможностями. Полученные результаты могут быть использованы в таких областях как физическая химия, теория металлургических процессов, черная и цветная металлургия, компьютерное материаловедение.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации, проект № 14.132.21.1792.

Список литературы

1. Воронова Л.И., Трунов А.С. Оптимизация параллельного алгоритма подсистемы распределенного молекулярно-динамического моделирования // Межотраслевая информационная служба, № 3, 2011, с.1-12.
2. Воронова Л.И., Григорьева М.А., Воронов В.И. Разработка методов компьютерного моделирования наноструктуры многокомпонентных расплавов // Фундаментальные исследования, № 8-3, 2011, с. 617-622.
3. Воронова Л.И., Григорьева М.А. Разработка информационной модели физико-химических свойств расплава для исследовательского программного комплекса MD-SLAGMELT // Межотраслевая информационная служба, № 2, 2011, с.30-36.
4. Воронова Л.И., Григорьева М.А., Воронов В.И., Трунов А.С. Программный комплекс «MD-SLAG-MELT» для моделирования наноструктуры и свойств многокомпонентных расплавов // Расплавы, № 2, 2013, с.1-16.
5. Баканов В.М., Осипов Д.В. Введение в практику разработки параллельных программ в стандарте MPI. – М.: Московская государственная академия приборостроения и информатики, 2005. – 65 с.

**«Высшее профессиональное образование.
Современные аспекты международного сотрудничества»,
Испания (Майорка), 16-23 августа 2013 г.**

Физико-математические науки

О ХАРАКТЕРЕ КОЛЕБАНИЙ МОЛЕКУЛ В ЖИДКОСТЯХ

Павлов А.М.

*РГП на ПХВ «Восточно-Казахстанский
государственный университет им. С. Аманжолова»,
Усть-Каменогорск, e-mail: amravlov@mail.ru*

В жидкостях наблюдается ближний порядок. Следовательно, молекулы или атомы совершают в основном колебательное движение около положения равновесия, которое время от времени меняется. Чтобы определить период и частоту колебаний необходимо найти потенциальную энергию молекулы, обусловленную её взаимодействием с ближайшими соседями. Для определения этой энергии воспользуемся моделью, аналогичной модели самосогласованного поля в атомной физике. Эта идея принадлежит Леннард-Джонсу и Девоншайру, и развита Я.И. Френкелем [2].

Суть этой идеи заключается в том, что задача о движении N взаимодействующих частиц заменяется задачей о движении каждой из них в поле, создаваемом остальными N-1 частицами. Поле, создаваемое этими N-1 частицами можно считать сферически симметричным, а сами частицы закрепленными в своих положениях равновесия, т.е. в узлах кристаллической решетки.

Получается, что каждый атом жидкости (или молекула) находится в сферической ячейке радиуса a, близкого к среднему расстоянию между соседними частицами в решетке с координатным числом v и определяемого из условия, чтобы объём, приходящийся на одну частицу V/N , совпадал с тем, который соответствует кристаллическому состоянию.

Если считать атомы твёрдыми шариками с диаметром a, то при их плотной упаковке в гранцентрированной кубической решётке с числом n=12 ребро ячейки равно $a\sqrt{2}$ и содержит 4 атома. Тогда объём, приходящийся на один атом

$$v = \frac{V}{N} = \frac{(a\sqrt{2})^3}{4} = \frac{a^3}{\sqrt{2}}.$$

В то время как объём сферической ячейки радиуса a равен $\frac{4\pi a^3}{3}$, что несколько больше v. Тем не менее, будем считать объём ячейки равным $v = \frac{a^3}{\sqrt{2}}$.

Пусть молекула A зафиксирована в своём положении равновесия, а молекула B может занимать любое положение на сфере радиуса $r < a$, центром которой является точка O – положение равновесия молекулы B. Расстояние от A до O равно равновесному расстоянию между