

Разработка высокопроизводительных методов моделирования эволюции бактериальных сообществ в программе "Гаплоидный эволюционный конструктор"

МУСТАФИН ЗАХАР СЕРГЕЕВИЧ

Новосибирский государственный университет (Новосибирск), Россия
e-mail: Zidane-7@yandex.ru

МАТУШКИН ЮРИЙ ГЕОРГИЕВИЧ

Институт цитологии и генетики СО РАН (Новосибирск), Россия

ЛАШИН СЕРГЕЙ АЛЕКСАНДРОВИЧ

Институт цитологии и генетики СО РАН (Новосибирск), Россия

РАЗРАБОТКА ВЫСОКОПРОИЗВОДИТЕЛЬНЫХ МЕТОДОВ МОДЕЛИРОВАНИЯ ЭВОЛЮЦИИ БАКТЕРИАЛЬНЫХ СООБЩЕСТВ В ПРОГРАММЕ «ГАПЛОИДНЫЙ ЭВОЛЮЦИОННЫЙ КОНСТРУКТОР»

З.С.Мустафин*, Ю.Г.Матушкин, С.А.Лашин
Институт Цитологии и Генетики СО РАН
Новосибирский Государственный Университет
e-mail: Zidane-7@yandex.ru

Ключевые слова: моделирование, бактериальные сообщества, оптимизация, параллельное программирование, эволюция.

Моделирование эволюции бактериальных сообществ – актуальная задача современной биоинформатики. Ранее в ИЦиГ СО РАН был разработан программный комплекс «Гаплоидный эволюционный конструктор» (ГЭК), предназначенный для моделирования таких сообществ с помощью объектно-ориентированного подхода [1]. В рамках ГЭК осуществляется моделирование эволюции бактериальных сообществ, включая внутриклеточные процессы усвоения и выделения субстратов, взаимодействия с окружающей средой и другими популяциями. Время расчета сложных моделей ГЭК может достигать десятков часов. Данная работа направлена на ускорение процесса моделирования.

Разработан алгоритм для расчета функции изменения численности популяций, которая занимала практически все время выполнения программы. Исходный алгоритм был реализован с помощью рекурсии. Рекурсия была заменена циклом, что дало около 25% прироста производительности. Была реализована параллельная версия алгоритма с использованием технологии MPI. Алгоритм был протестирован на кластере ЦКП «Биоинформатика» СО РАН. Общее ускорение параллельной версии оказалось почти линейным. Время расчета тестовой модели бактериального сообщества с высокой степенью генетического разнообразия (порядка 108 уникальных аллельных комбинаций) сократилось с 622 минут (оригинальная версия ГЭК) до 482 минут (последовательная версия нового алгоритма) и двух минут (параллельная MPI версия, 264 процесса).

Таким образом, разработанный алгоритм позволяет пользователю значительно увеличить разнообразие процесса моделирования бактериальных сообществ. Мы

надеемся, что это будет способствовать получению новых результатов в теоретической эволюционной биологии.

Работа частично поддержана грантом РФФИ 12-07-00671-а.

Lashin S.A., Suslov V.V., Kolchanov N.A., Matushkin Yu.G. Simulation of coevolution in community by using the "Evolutionary Constructor" program. *In Silico Biology*, 2007, V 7, N 3, 261-275.