

ОСОБЕННОСТИ ДИНАМИКИ ПАРАМЕТРОВ ОПТИМИЗАЦИИ ГЕОМЕТРИЧЕСКИХ КОНФИГУРАЦИИ МОЛЕКУЛЯРНЫХ СТРУКТУР

Мягков А.С., Токарев Д.А., Коробов Н.А., Назаренко К.М.

Московский Государственный Технологический Университет «СТАНКИН»
Россия, 127055, г. Москва, ул. Вадковский пер. 1,
Тел.: (+7 499)972-95-00
E-mail: cmr.nazy@gmail.com

Оптимизация геометрических конфигураций молекулярных кластеров является итерационным процессом, характеризующимся высокой вычислительной сложностью, снижение которой способствует повышению детальности конформационного поиска и расширению круга исследуемых систем.

С целью снижения расхода процессорного времени, в рамках данной работы продолжено исследование проблемы текущей перспективности заданий оптимизации [1] и выявляются наиболее значимые факторы, влияющие на результат их выполнения. В случае некорректного завершения задания, либо признания его неперспективным следует возобновить итерации, используя в качестве исходных данных точку поверхности потенциальной энергии, соответствующую обнаруженному минимальному значению, либо результату последней итерации.

Показано, что длительность попытки оптимизации влияет на динамику основных показателей сходимости: максимальное и среднеквадратичное межитерационное смещение, а также значения межатомных сил. На основе предыстории значений этих показателей предполагается принимать решение о продолжении обработки вычислительного задания.

Для выборок файлов-выгрузок результатов сегментированного выполнения заданий конформационного поиска молекулярных кластеров атмосферного происхождения нами исследуются последовательности таких показателей итераций как максимальные и среднеквадратичные значения смещений молекулярных структур и значения межатомных сил. В ходе исследования установлены такие свойства наблюдаемых последовательностей как неравномерность и наличие резких скачков значений при повторном запуске вычислений. Динамику значений энергии самосогласованного поля наилучшим образом описывают максимальные и среднеквадратичные значения межатомных сил.

Полученные сведения могут в дальнейшем использоваться при разработке интегральных показателей перспективности заданий конформационного поиска на основе текущих значений энергии и итерационных параметров сходимости.

Литература.

1. Мягков А.С., Коробов Н.А., Марков П.Н., Назаренко Е.С., Назаренко К.М. Оценка перспективности траекторий оптимизации геометрических конфигураций молекулярных структур. // *XXIX Международная конференция Математика. Компьютер. Образование МКО-2022*, Том 29, 2022.