

МУЛЬТИПРОГРАММНАЯ СХЕМА КОНФОРМАЦИОННОГО ПОИСКА МОЛЕКУЛЯРНЫХ КЛАСТЕРОВ

Н.А. Коробов, К.М. Назаренко, Е.С. Назаренко, П.Н. Марков

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

В работе представлен комплекс программных решений, направленных на повышение эффективности конформационного поиска. На основе данных исследования [1] проведена классификация молекулярных структур по вычислительной сложности оптимизации их геометрий. Для отслеживания эволюции изомеров и их «родословной» при использовании генетического алгоритма многоуровневого поиска [2] разработан модуль идентифицирующей маркировки их исходных геометрий. Применение данного модуля позволяет выбрать управляющие параметры алгоритма автоматической подготовки исходных данных.

Разработаны средства межпрограммной конвертации данных, позволяющие включить в цепочку многоуровневой оптимизации программный пакет DMol3, входящий в состав BIOVIA Materials Studio. Проведен анализ эффективности оптимизации геометрий молекулярных кластеров посредством DMol3 с использованием различных базисных наборов волновых функций при различных многопроцессорных режимах исполнения пакета.

Описанный комплекс программ расширяет функционал вычислительной среды для компьютерного моделирования молекулярных и наносистем, описанной в [3]. Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки РФ, проект № 1.7706.2017/БЧ, и РФФИ, грант № 15-08-4969а.

Литература.

1. Федосов М.Е., Коробов Н.А., Назаренко К.М. Оценка временных характеристик вычислительных экспериментов с использованием квантово-химических методов // Двадцать четвертая международная конференция Математика Компьютер Образование. 2017. с. 58.
2. Назаренко К.М., Назаренко Е.С., Марков П.Н., Коробов Н.А. Эффективные средства автоматизации математического моделирования молекулярных и наносистем // Двадцать четвертая международная конференция Математика Компьютер Образование. 2017. с. 43.
3. Назаренко К. М., Коробов Н. А., Надыкто А. Б., Кириллова Л. Н. Комплексное исследование производительности проблемно-ориентированных вычислительных GRID-систем для моделирования наноструктур и наноматериалов. // Вестник компьютерных и информационных технологий. 2016. № 8. С. 22 – 28.