

МЕТОД ГЕОМЕТРИЧЕСКОГО РАЗЛИЧЕНИЯ ИЗОМЕРОВ МОЛЕКУЛЯРНЫХ СТРУКТУР С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МАТРИЦ РАССТОЯНИЙ

Назаренко К.М., Коробов Н.А., Марков П.Н., Назаренко Е.С., Посяева М.Г.,
Бувич Т.Л., Надыкто А.Б.

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

При проведении конформационного поиска молекулярных кластеров решаются задачи многомерной оптимизации, результаты которых обычно представляют собой группы изомеров схожей геометрической конфигурации. Для исследования свойств молекулярных кластеров часто достаточно рассматривать наиболее стабильные изомеры из каждой группы, такое цензурирование рассматриваемых данных позволяет существенно сократить затраты вычислительного времени. При применении одной и той же математической модели и в рамках одной ее реализации, выявление таких групп, может быть проведено на основе значений свободной энергии Гиббса и модуля дипольного момента молекулярных кластеров [1].

При использовании различных квантово-химических моделей электронной структуры или их реализаций эти значения могут существенно различаться [2] и единственным методом сравнения изомеров оказывается анализ расположения их атомов. В исследованиях молекулярных кластеров атмосферного происхождения моделируются сотни-тысячи изомеров, что делает невозможным их ручное геометрическое сопоставление.

Нами предлагается метод сравнения геометрических конфигураций молекулярных структур, основанный на анализе разностей их матриц расстояний, позволяющий оценить степень различия и установить его причины – указать смещенные атомы. Для ранжирования сходства изомеров нами используются метрики в виде среднего значения модуля разности, максимального значения модуля разности, нормированное на число атомов молекулярного кластера, а также максимальной суммы строки модулей разностей матриц расстояний. Пороговые значения метрик для различения выбираются исходя из равенства числа ошибок первого и второго рода.

Предложенный метод успешно протестирован при сравнении результатов моделирования гидратов серной кислоты с использованием различных реализаций методов теории функционала плотности.

Работа выполнена при поддержке Минобрнауки России в рамках выполнения государственного задания FSFS-2024-0011.

Литература.

1. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2018612048. «Программное средство идентификации данных математического моделирования молекулярных структур (Близнец)», Назаренко К. М. и др.
2. Назаренко К.М. и др. Особенности реализаций алгоритмов конформационного поиска // Моделирование нелинейных процессов и систем (MNPS - 2023), 2023, с 151.