

## ОЦЕНКА ПЕРСПЕКТИВНОСТИ ТРАЕКТОРИЙ ОПТИМИЗАЦИИ ГЕОМЕТРИЧЕСКИХ КОНФИГУРАЦИЙ МОЛЕКУЛЯРНЫХ СТРУКТУР

Мягков А.С., Коробов Н.А., Марков П.Н., Назаренко Е.С., 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 неотъемлемой частью численных экспериментов по определению их структуры и свойств. Данный итерационный процесс, реализованный с использованием проблемно-ориентированного ПО, характеризуется высокой вычислительной сложностью и в то же время неустойчивостью.

Целью данной работы является снижение расхода процессорного времени за счет прекращения обработки вычислительных заданий, соответствующих малоперспективным оптимизациям. Оценка перспективности производится на основе уже полученной части траектории на основе значений смещений атомов молекулярной структуры и действующих на них сил. Вычислительные эксперименты с низкими оценками подлежат повторному запуску с минимальной точки[1].

В работе рассматриваются свойства траекторий оптимизаций, проводимых с использованием пакета Gaussian [2], позволяющие выявить сегменты характерные для успешного и неудачного завершения вычислительных экспериментов.

Мониторинг формируемых пакетом файлов-выгрузок на предмет наличия таких участков может позволить избежать нерационального использования вычислительных ресурсов.

### **Литература.**

1. Назаренко К. М., Назаренко Е. С., Надыкто А. Б., Кириллова Л. Н. Вычислительная среда для компьютерного моделирования наносистем. Система подготовки и обработки данных. // Вестник компьютерных и информационных технологий. 2016. № 10. С. 17 – 23.
2. Gaussian URL: <https://gaussian.com/gaussian16/>