

СТАТИСТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ УСТОЙЧИВОСТИ АЛГОРИТМОВ КОНФОРМАЦИОННОГО ПОИСКА

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

Целью данной работы является исследование влияния частоты выбора начальных условий и аппроксимации гессиана на эффективность и производительность конформационного поиска.

Расчет матрицы Гессе на первой итерации алгоритма Берни является одной из его ключевых особенностей. Для снижения вычислительной сложности на последующих итерациях оптимизации геометрических конфигураций молекулярных структур гессианов лишь корректируется. Однако неудачный выбор начальной точки приводит к увеличению требуемого числа итераций, и в случае неудачной попытки оптимизации нами производится ее возобновление с минимальной либо последней точки.

Учитывая большое количество изомеров и случайную составляющую алгоритма их оптимизации, нами исследована статистическая значимость различий общего количества итераций в зависимости от предельной допустимой длины попытки.

Для выборок, полученных при конформационном поиске молекулярных структур атмосферного происхождения, были сформулированы статистические гипотезы о равенстве количества итераций. В результате их проверки с использованием непараметрического U-критерия Манна-Уитни нами установлено, что:

1. Алгоритм Берни неустойчив к частому возобновлению оптимизации, слишком короткие попытки оптимизации (менее 50 итераций) приводят к значительному снижению эффективности конформационного поиска.

2. При достаточно длительных попытках оптимизации (55 итераций и более) отсутствуют статистически значимые влияния возобновления оптимизации на эффективность и производительность конформационного поиска.

Результаты работы могут применяться для динамической балансировки вычислений, повышения отказоустойчивости и проектирования вычислительных комплексов, решающих задачи молекулярного моделирования.

Работа выполнена при поддержке РФФ, грант № 18-11-00247-П.