

СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ РЕАЛИЗАЦИЙ АЛГОРИТМОВ КОНФОРМАЦИОННОГО ПОИСКА

**Назаренко К.М., Коробов Н.А., Назаренко Е.С.,
Марков П.Н., Токарев Д.А., 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 производительности программных реализаций математических моделей структуры и свойств молекулярных кластеров и точности результатов, получаемых с их помощью.

Моделирование начальной стадии формирования мелкодисперсных аэрозолей предполагает рассмотрение стабильных изомеров структур соответствующего состава. Проводимые для их поиска расчеты по оптимизации геометрических конфигураций, определению термодинамических и спектральных параметров представляют собой вычислительно сложную задачу и осуществляются с применением пакетов проблемно-ориентированного ПО, в которых реализованы модели и численные алгоритмы.

В работе проведены вычислительные эксперименты по оценке эффективности параллелизации алгоритмов конформационного поиска в пакетах Gaussian 09E и Orca 5.0.4 и сравнительный анализ результатов моделирования процесса гидратации серной кислоты квантово-химическими методами, основанными на теории функционала плотности. Исследование показало, что при использовании этих пакетов различия в описании термодинамики реакций не превышают химической точности (1 ккал/моль).

На основе полученных данных для повышения производительности конформационного поиска нами предлагается использовать пакет Orca, который на данной серии расчетов показал существенно более высокую (в 2,25-4,3 раза) производительность и устойчивость результатов оптимизации.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, грант № 22-19-00794.