

Применение параллельных вычислений для *ab initio* предсказания кристаллических структур молекулярных веществ*

А.В. Дзябченко¹, Я.В. Кучериненко², М.Б. Кузьминский³

Научно-исследовательский физико-химический институт им. Л.Я. Карпова¹,
Геологический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова², Институт органической химии
им. Н.Д. Зелинского РАН³

В исследованиях и разработках новых молекулярных материалов с особыми свойствами, а также в исследованиях биологических макромолекул, опережающее развитие получили методы численного моделирования структуры и динамики молекулярных веществ и наноразмерных систем с применением различных модельных теорий межмолекулярного взаимодействия (ММВ). В этом направлении задача *ab initio* предсказания кристаллической структуры вещества (ПКС), зная *только* структуру молекулы, но не обладая при этом заранее *никакой* предварительной информацией о кристалле как таковом [1], занимает особое место. В частности, потому, что кристалл является той инстанцией на пути от молекулы к объемному веществу, которая предоставляет исследователю уникальную возможность оценить способность теоретической модели ММВ к адекватному воспроизведению надмолекулярных структур количественно, на уровне координат всех атомов, то есть наиболее строгим образом.

Технологии параллельных вычислений на базе супервычислительных комплексов (СВК) предоставляют возможность выхода на качественно новый уровень моделирования органических кристаллов и решения задач ПКС: как в отношении размера и сложности молекулярного состава, так и надежности предсказания за счет уточнения полуэмпирических моделей ММВ. Последнее предполагает решение *обратной задачи* на основе экспериментальных структурных данных для модельного ряда кристаллов заданного химического класса и их измеренных физических свойств (теплоты сублимации, объемного и анизотропных модулей упругости), что включает в себя многократное решение прямой задачи ПКС с пробными значениями параметров модели ММВ - как для кристаллов, входящих в исходный модельный ряд, так и новых объектов в качестве независимых тестовых примеров.

Наиболее ресурсоемкой частью задачи ПКС является поиск глобального минимума потенциальной энергии кристалла в пространстве $\sim 6N_f + 6$ структурных переменных, где N_f - число независимых молекул или молекулярных фрагментов, имеющих достаточно жесткое внутреннее строение по отношению к действию сил молекулярного окружения [1]. Оптимальная стратегия поиска заключается в сканировании фундаментальной области структурных переменных заданной пространственной группы путем генерации пробных наборов параметров жесткого тела N_f фрагментов в комбинации с пробными константами решетки, служащих стартовыми моделями для спуска в локальные минимумы одновременно. В рамках этой стратегии существует два уровня реализации параллельных вычислений.

В одном из них общее число K стартовых моделей распределяется между n процессами, каждый из которых последовательно выполняет оптимизацию K/n моделей независимо от остальных. Казалось бы, здесь трудно ожидать высокой эффективности параллельного алгоритма, поскольку траектории спуска в минимум для разных стартовых моделей могут оказаться совершенно разными по числу шагов и времени их выполнения. Однако, тестовые расчеты, проведенные на СК Ломоносов НИВЦ МГУ, и независимо на МВС-100К МСЦ РАН, на примере задачи показывают, что при достаточно больших отношениях K/n короткие траектории компенсируются длинными, давая в итоге практически одинаковые средние времена выполнения всей порции моделей и отличную масштабируемость в широком интервале изменения n .

* Работа поддержана финансированием Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 14-03-01091).

Другой уровень параллелизации касается расчета энергии и ее аналитических производных, которые в рамках попарно-аддитивного приближения вычисляют как суммы соответствующих термов N_p межатомных пар и N_h узлов обратной решетки. Поскольку действия при обработке всех пар или узлов при этом одинаковы, они могут выполняться n параллельными процессами синхронно, что позволяет применить здесь архитектуру вычислительных устройств SIMD типа ('Single Instruction – Multiple Data). Разработка соответствующего варианта программы для многоядерных GPU процессоров в настоящий момент находится в стадии выполнения.

Литература

1. Дзябченко А.В. От молекулы к твердому телу: предсказание структур органических кристаллов // Ж. физической химии. 2008. Т. 82. С. 1861–1870.