

ТЕХНОЛОГИЯ ПАРАЛЛЕЛЬНОЙ ОПТИМИЗАЦИИ ДЛЯ АТОМНО-МОЛЕКУЛЯРНЫХ КЛАСТЕРОВ МОРСА

Горнов Александр Юрьевич

д.т.н., главный научный сотрудник, e-mail: gornov@icc.ru

Аникин Антон Сергеевич

к.ф.-м.н., научный сотрудник, e-mail: anton.anikin@gmail.com

Сороковиков Павел Сергеевич

программист, e-mail: sorokovikov.p.s@gmail.com

Зароднюк Татьяна Сергеевна

к.т.н., старший научный сотрудник, e-mail: tz@icc.ru

Лаборатория «Оптимальное управление»,

Институт динамики систем и теории управления им. В.М. Матросова СО РАН,
664033 г. Иркутск, ул. Лермонтова 134.

Аннотация. В статье рассматриваются специализированные вычислительные технологии и алгоритмы, используемые для поиска низкопотенциальных атомно-молекулярных кластеров. Проведенные вычислительные эксперименты продемонстрировали достаточно высокую конкурентоспособность новых алгоритмов по сравнению с классическими для функций рассматриваемого типа. С использованием разработанного программного комплекса получены рекордные результаты оптимизации атомно-молекулярных кластеров Морса рекордных размерностей.

Ключевые слова: атомно-молекулярный кластер, задача глобальной оптимизации, невыпуклая функция.

Цитирование: Горнов А.Ю., Аникин А.С., Сороковиков П.С., Зароднюк Т.С. Технология параллельной оптимизации для атомно-молекулярных кластеров Морса // Информационные и математические технологии в науке и управлении. 2021. № 4 (24). С. 60-67. DOI: 10.38028/ESI.2021.24.4.006.

Введение. Современные экспериментальные методы молекулярной физики позволяют исследователям получать достаточно большой объем содержательной информации о структуре различных веществ [1], что дает возможность формировать соответствующие математические модели. Проблема поиска атомно-молекулярных кластеров с низким потенциалом также является одной из классических задач вычислительной химии (см., напр., [2]). Эта задача сводится к поиску минимума потенциальных функций в виде специальных математических моделей, которые уже созданы для нескольких сотен структур [3]. В Кембриджской базе данных (the Cambridge Energy Landscape Database, <http://www-wales.ch.cam.ac.uk/CCD.html>) представлены результаты глобальной оптимизации для различного типа моделей: кластеров инертных газов, кластеров металлов, ионных кластеров, кластеров кремния и германия и других. Основная трудность задач этого класса – их невыпуклость, что выражается в огромном количестве локальных экстремумов потенциальных функций. Эксперты дают оценки, которые в некоторых случаях доказывают экспоненциальный рост количества локальных экстремумов от количества атомов или оптимизированных переменных. Наиболее известными и часто рассматриваемыми в научной литературе потенциальными функциями являются модели Леннарда-Джонса, Морса, Китинга, Дзугутова, Гупты и др. Поскольку точное значение глобального минимума в большинстве случаев неизвестно, в работах этого направления используется принцип предъявления «лучшего из известных» решений. Это означает, что представленное решение «вероятно оптимально» до тех пор, пока один из экспертов не обнаружит меньшее значение.

Регулярные исследования задач оптимизации, сформулированных для потенциалов атомно-молекулярных кластеров, начались в 90-х годах XX века специалистами из Великобритании и США. На этом этапе рекордными показателями размерности задач были, например, для потенциала Морса всего 147 атомов, чему соответствует 441 переменная оптимизируемой функции, но количество локальных экстремумов в рекордных задачах уже оценивалось астрономическим показателем – 10^{60} . Поиск решения задач оптимизации низкопотенциальных кластеров все возрастающих размерностей продолжает оставаться актуальной проблемой в связи с возникновением подобных постановок в химии, физике, материаловедении, нанoeлектронике, нанобиологии, фармацевтике, военных технологиях и других областях [4].

1. Постановка задачи оптимизации потенциала Морса. Взаимодействие между элементами кластеров, как структур, состоящих из конечного числа атомов или молекул, описывается, как уже упоминалось, функциями потенциалов, задающих поверхности потенциальной энергии. Нахождение минимумов или стационарных точек таких потенциалов позволяет получать устойчивые атомно-молекулярные конфигурации. Подобное моделирование в ряде ситуаций заменяет натурные (физические) эксперименты. К одной из самых популярных задач данного класса, несомненно, стоит отнести оптимизацию атомно-молекулярных кластеров Морса (см., например, [5]), как классического объекта вычислительной химии. Задача поиска низкопотенциальных кластеров заключается в глобальной минимизации невыпуклой функции при выполнении заданных ограничений:

$$f(x) \rightarrow \min, x \in B,$$

$$B = \{x \mid x = (x_1, x_2, \dots, x_n), \alpha_i \leq x_i \leq \beta_i, i = \overline{1, n}\}, \text{ где } f(x) = \sum_{i=1}^N \sum_{j=i+1}^N e^{\rho(1-r_{ij})} (e^{\rho(1-r_{ij})} - 2),$$

а расстояние между i -й и j -й частицами вычисляется по формуле:

$$r_{ij} = \sqrt{(x_{3(i-1)+1} - x_{3(j-1)+1})^2 + (x_{3(i-1)+2} - x_{3(j-1)+2})^2 + (x_{3(i-1)+3} - x_{3(j-1)+3})^2}.$$

Здесь N – число атомов, $n = 3N$ – размерность вектора x , ρ – параметр модели, равный 3. Вид потенциальной функции Морса зависит от значений параметра ρ (рис. 1).

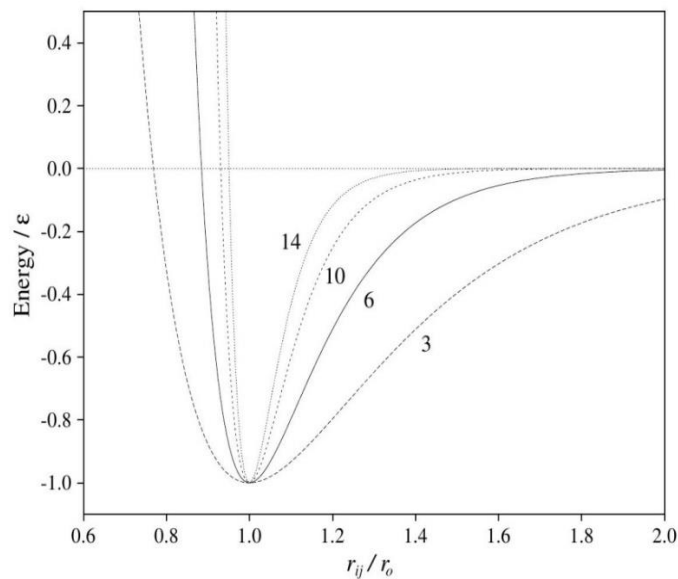


Рис. 1. Потенциальная функция атомно-молекулярного кластера Морса при разных значениях параметра ρ .

Задачи оптимизации атомно-молекулярных кластеров относят к задачам глобальной оптимизации. Для них характерно наличие астрономического числа локальных экстремумов. Современные постановки таких задач включают «большие кластеры», состоящие более чем из 200 атомов или 600 переменных. Для исследования задач оптимизации данного класса требуется использование специализированных подходов, учитывающих специфику исследуемых структур.

2. Трехкомпонентная вычислительная технология. Предложенная идея исследования атомно-молекулярных кластеров опирается на использование трехкомпонентной вычислительной технологии. На первом этапе предлагается использовать «быстрые» эвристические алгоритмы, работающие с заданным временным ограничением (метод Б.Т. Поляка, «Рейдер»-метод, алгоритм Дж. Барзилай – Дж. Борвейна, градиентный метод «криволинейного поиска» и др. [6, 7]), позволяющие быстро спуститься на дно оврага, наличие которых обычно характерно для потенциальных функций. Второй этап является наиболее затратным и заключается в реализации процедуры «перемещения по дну оврага». Для этого требуется использование алгоритмов со сверхлинейной скоростью сходимости – методов сопряженных градиентов и квазиньютоновских методов. На третьей стадии «уточнения экстремума» мы используем вычислительно устойчивые безградиентные методы – Partan-метод (метод Партана), алгоритм М.Д. Пауэлла и другие (см, например, [8]).

Алгоритмы постоптимизационного анализа используются для повышения эффективности вычислительных технологий поиска низкопотенциальных атомно-молекулярных кластеров. Основное внимание в этих алгоритмах уделяется поиску вычислительных характеристик конкретной модели и выявлению ресурсов для повышения производительности и надежности алгоритмических схем с несколькими методами. Реализованы алгоритмы проверки точности необходимых условий оптимальности, оценок вырожденности локальных экстремумов, обусловленности функционалов в окрестности экстремумов и размеров их областей притяжения.

Для организации параллельных вычислений предложена вычислительная технология Форест, опирающаяся на использование процедуры рестарта локальных спусков. Проверка нормы градиента осуществляется каждый раз, когда удается достичь стационарной точки. Оценивается время работы каждого локального спуска и при необходимости осуществляется рестарт «слишком старых» ветвей. На перезапуск отдельной ветви также влияет близость к другому локальному спуску и сравнительно большое значение оптимизируемой функции, найденное как рекордное. Предложенная схема технологии Форест представлена на рисунке 2.

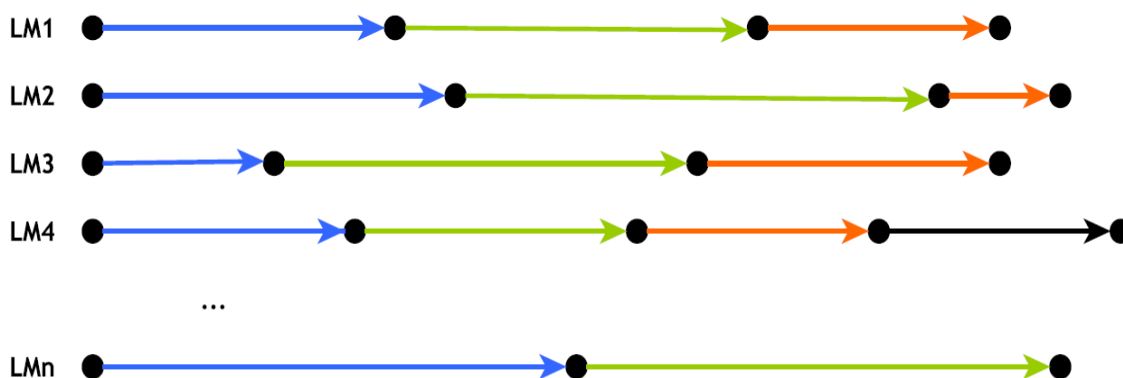


Рис. 2. Графическая интерпретация параллельных локальных спусков, реализованных в технологии Форест.

В результате запуска процедуры организации рестартов удается оптимизировать параллельный поиск решения, сократив время расчетов и оптимизировав использование вычислительных ресурсов (рис. 3).

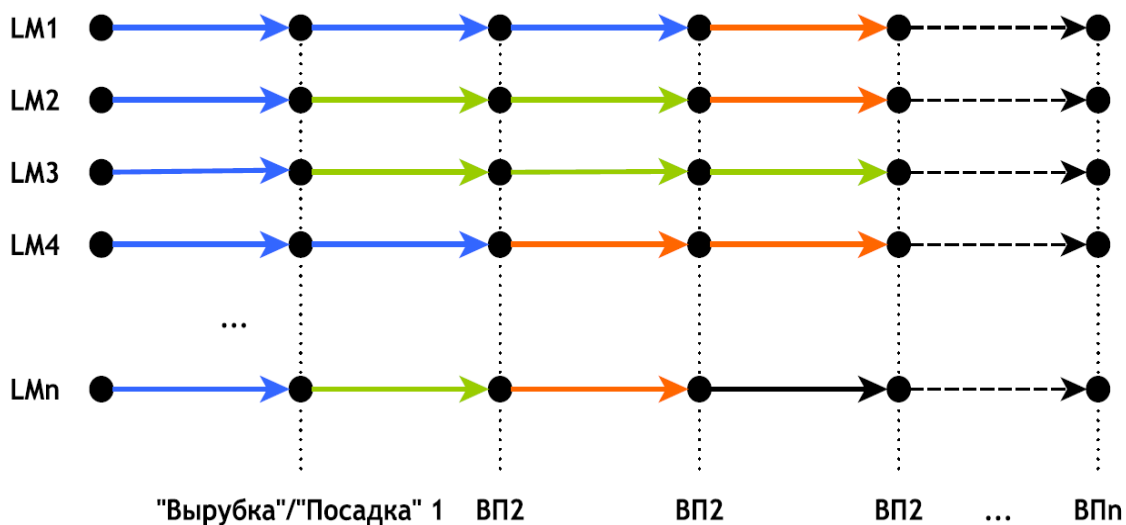


Рис. 3. Оптимизация потоков вычислительной технологии Форест в результате использования процедуры рестартов.

Программная реализация представленных алгоритмов выполнена на языке C в рамках программного комплекса OPTCON-M, работающего под ОС Linux, Mac OS X и Windows с использованием компиляторов GCC/MinGW, Clang, ICC. Технологии параллельного программирования OpenMP, MPI и CUDA позволили существенно ускорить получение решений за счет многократного запуска процедур поиска решения в параллельных потоках. Реализованы интерактивный и пакетный режимы работы программного комплекса, позволяющие как влиять на организацию вычислительного процесса путем изменения последовательности методов и значений алгоритмических параметров, так и быстро запускать программный комплекс со стандартными настройками.

3. Полученные результаты. Исследованиями подобных постановок активно занимаются в Великобритании: D.J. Wales, J.P.K. Doye, A. Dullweber, M.P. Hodges, F.Y. Naumkin F. Calvo, J. Hernández-Rojas and T.F. Middleton (The Cambridge Cluster Database, www.wales.ch.cam.ac.uk/CCD.html), в Китае: Hefei National Laboratory for Physical Sciences at the Microscale and School of Life Sciences, University of Science and Technology of China, в Португалии: Jorge Marques, Department of Chemistry Research in Computational Chemistry and Molecular Modeling University of Coimbra (apps.uc.pt/mypage/faculty/qtmarque/en/clusters). Опубликованы результаты расчетов для кластеров Морса размерностей от 5 до 147 атомов (в базе данных [9]), от 148 до 240 (в работах групп из Китая [10] и Португалии [11]).

Сравнение результатов, полученных с помощью ПК OPTCON-M, удалось провести для кластеров размерностей до 240 атомов (примеры кластеров от 150 до 200 атомов представлены на рисунке 4). Эти известные расчеты удалось повторить и убедиться в работоспособности предлагаемых алгоритмов для задач оптимизации атомно-молекулярных кластеров.

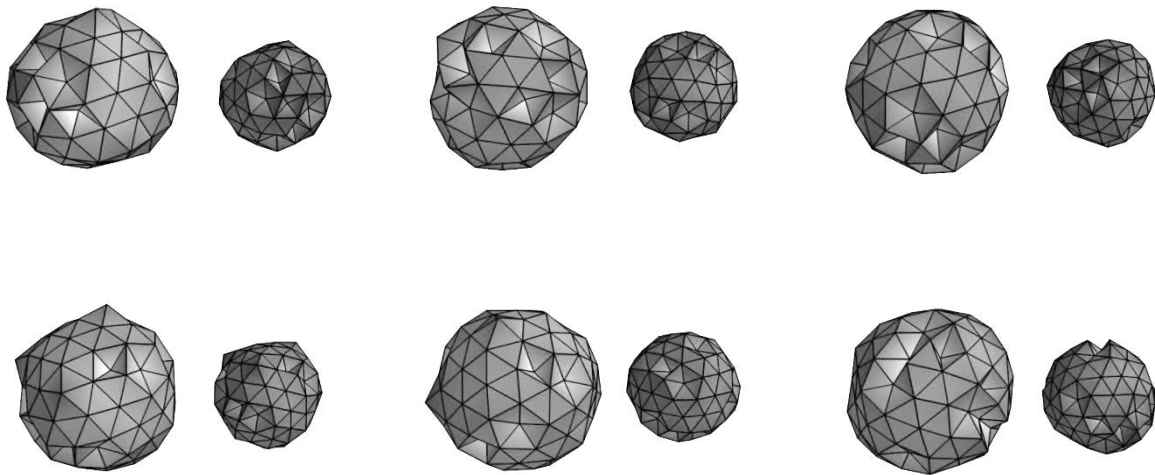


Рис. 4. Структуры кластеров из 150, 160 и 170 атомов (верхний ряд); из 180, 190 и 200 атомов (нижний ряд), полученные в Университете науки и технологии Китая (слева) и в Институте динамики систем и теории управления им. В.М. Матросова СО РАН (справа).

На рисунке 5 изображены кластеры, состоящие из 240 атомов. Результаты системных вычислительных экспериментов по поиску глобального экстремума в модели Морса со сверхбольшим числом атомов (от 300 до 680) приведены в таблице 1. Авторам неизвестно о других попытках проведения расчетов для кластеров Морса указанных размерностей.

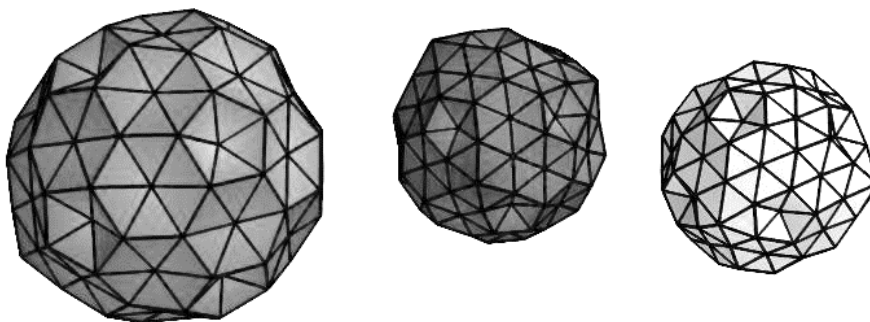


Рис. 5. Структуры кластеров из 240 атомов, полученные в Университете науки и технологии Китая (слева), ИДСТУ СО РАН (в центре) и Коимбрском университете Португалии (справа).

Таблица 1. Рекордные значения потенциальной функции Морса

N	$f^*(x)$	N	$f^*(x)$	N	$f^*(x)$
300	-3728.226966	430	-5771.164824	560	-7881.460360
310	-3879.968259	440	-5928.212283	570	-8034.433295
320	-4031.192528	450	-6086.447626	580	-8210.328570
330	-4185.823810	460	-6243.648248	590	-8374.874243
340	-4341.617312	470	-6403.362570	600	-8544.026103
350	-4495.258746	480	-6559.388537	610	-8704.551373
360	-4652.526830	490	-6718.903821	620	-8876.820224
370	-4808.833596	500	-6893.650168	630	-9046.997894

N	$f^*(x)$	N	$f^*(x)$	N	$f^*(x)$
380	-4963.857118	510	-7054.414052	640	-9208.003264
390	-5117.601743	520	-7216.954715	650	-9367.283286
400	-5280.028313	530	-7378.800085	660	-9549.828351
410	-5439.956025	540	-7548.160216	670	-9708.553979
420	-5605.374049	550	-7700.516816	680	-9882.546522

Заключение. Вычислительные эксперименты также проводились для потенциала Саттона-Чена [5], который часто используется при расчете свойств нанокластеров металлов, таких как серебро, родий, никель, медь, золото и платина. Рассмотрена проблема поиска низкопотенциальных кластеров беспрецедентных размеров для потенциала Гупта – типичного представителя класса задач молекулярной динамики. Используя параллельные версии предложенных алгоритмов, была реализована специализированная технология многометодной вычислительной оптимизации и решен ряд задач минимизации потенциала Китинга (Keating P.N., 1966) с размерностями более 100 переменных.

С помощью разработанного программного обеспечения решена прикладная задача молекулярного докинга. Задача заключалась в поиске структуры белка, способной выполнять заданную «фармацевтическую миссию». Процесс оптимизации геометрии синтезированной белковой молекулы соответствует минимизации функции, которая устанавливает потенциальную энергию значительной молекулы. Для упрощенной модели белковой молекулы биологи предложили многокомпонентную функцию, которая включает различные типы энергии взаимодействия как связанных, так и несвязанных атомов. Полученные результаты расчетов (структура белковой молекулы) были оценены биологами как правдоподобные и нашли содержательную интерпретацию.

Разработанная параллельная вычислительная технология позволяет эффективно решать задачи оптимизации атомно-молекулярных кластеров. В результате серии вычислительных экспериментов получены минимальные значения потенциальной функции для кластеров Морса рекордных размерностей.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Brooks R.L. The Fundamentals of Atomic and Molecular Physics. Springer. 2013.
2. Cheng L., Feng Y., Yang Jie, Yang Jinlong. Funnel hopping: searching the cluster potential energy surface over the funnels. The Journal of Chemical Physics. Vol. 130(21). 214112. 2009.
3. The Cambridge Energy Landscape Database. Режим доступа: <http://www-wales.ch.cam.ac.uk/CCD.html> (дата обращения: 01.12.2021).
4. Cruz S.M.A., Marques J.M.C. and Pereira F.B. Improved evolutionary algorithm for the global optimization of clusters with competing attractive and repulsive interactions // J. Chem. Phys. 145. 154109. 2016.
5. Doye J.P.K., Wales D.J. Structural consequences of the range of the interatomic potential a menagerie of clusters // Journal of the Chemical Society, Faraday Transactions. 1997. Vol. 93. No 24. Pp. 4233-4243.
6. Anikin A., Gornov A., Sorokovikov P. Algorithms for global minimum search of atomic-molecular clusters of extremely large dimensions // Системный анализ: моделирование и управление: Материалы Междунар. конф., посвященной памяти академика А.В. Кряжжского. М.: МАКС Пресс. 2018. С. 9-10.

7. Gornov A.Yu., Zarodnyuk T.S., Anikin A.S., Finkelstein E.A. Extension technology and extrema selections in a stochastic multistart algorithm for optimal control problems // Journal of Global Optimization. 2020. Vol. 76. No 3. Pp. 533-543.
8. Gornov A., Sorokovikov P., Zarodnyuk T. Computational technology for global search based on modified algorithm of the univariate nonlocal optimization // Advances in Intelligent Systems Research. Atlantis Press. 2019. Pp. 189-193.
9. Wales D.J., Doye J.P.K. The Cambridge Energy Landscape Database. Режим доступа: <http://www-wales.ch.cam.ac.uk/CCD.html>. (дата обращения: 01.12.2021).
10. Feng Y., Cheng L., Liu H. Putative global minimum structures of Morse clusters as a function of the range of the potential: $161 \leq n \leq 240$ // The Journal of Physical Chemistry A. Vol. 113. No 49. 2009. Pp. 13651-13655.
11. Marques J.M.C., Pais A., Abreu P.E. On the use of big-bang method to generate low-energy structures of atomic clusters modeled with pair potentials of different ranges // Journal of Computational Chemistry, Vol. 33. No 4. 2012. Pp. 442-452.

UDC 519.711.2

PARALLEL OPTIMIZATION TECHNOLOGY FOR ATOMIC-MOLECULAR MORSE CLUSTERS

Alexander Yu. Gornov

Dr., Chief Researcher

e-mail: gornov@icc.ru

Anton S. Anikin

Dr., Researcher, e-mail: anton.anikin@gmail.com

Pavel S. Sorokovikov

Programmer, e-mail: sorokovikov.p.s@gmail.com

Tatyana S. Zarodnyuk

Dr., Senior Researcher, e-mail: tz@icc.ru

Laboratory "Optimal control",

Matrosov Institute for System Dynamics and Control Theory

Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences

664033, Irkutsk, Russia, Lermontov Str., 134.

Abstract. The paper deals with specialized computing technology and algorithms used for finding low-potential atomic-molecular clusters. The performed computational experiments demonstrated a rather high competitiveness of the new algorithms in comparison with the classical methods for the considerable functions. Using the developed software, the applied problem of molecular docking was solved. Using the developed software package, record results for optimization of atomic-molecular Morse clusters of large dimensions have been obtained.

Keywords: atomic-molecular cluster, global optimization problem, non-convex function.

REFERENCES

1. Brooks R.L. The Fundamentals of Atomic and Molecular Physics. Springer. 2013.
2. Cheng L., Feng Y., Yang Jie, Yang Jinlong. Funnel hopping: searching the cluster potential energy surface over the funnels. The Journal of Chemical Physics. Vol. 130(21). 214112. 2009.
3. The Cambridge Energy Landscape Database. Available at: <http://www-wales.ch.cam.ac.uk/CCD.html>. (accessed 01.12.2021).

4. Cruz S.M.A., Marques J.M.C. and Pereira F.B. Improved evolutionary algorithm for the global optimization of clusters with competing attractive and repulsive interactions // J. Chem. Phys. 145. 154109. 2016.
5. Doye J.P.K., Wales D.J. Structural consequences of the range of the interatomic potential a menagerie of clusters // Journal of the Chemical Society, Faraday Transactions. 1997. Vol. 93. No 24. Pp. 4233-4243.
6. Anikin A., Gornov A., Sorokovikov P. Algorithms for global minimum search of atomic-molecular clusters of extremely large dimensions // Sistemnyy analiz: modelirovaniye i upravleniye: Materialy Mezhdunar. konf., posvyashchennoy pamyati akademika A.V. Kryazhinskogo = Systems Analysis: Modeling and Management: Proceedings of the Intern. Conf., dedicated to the memory of Academician A.V. Kryazhinsky. M.: MAX Press. 2018. Pp. 9-10.
7. Gornov A.Yu., Zarodnyuk T.S., Anikin A.S., Finkelstein E.A. Extension technology and extrema selections in a stochastic multistart algorithm for optimal control problems // Journal of Global Optimization. 2020. Vol. 76. No 3. Pp. 533–543.
8. Gornov A., Sorokovikov P., Zarodnyuk T. Computational technology for global search based on modified algorithm of the univariate nonlocal optimization // Advances in Intelligent Systems Research. Atlantis Press. 2019. Pp. 189-193.
9. Wales D.J., Doye J.P.K. The Cambridge Energy Landscape Database. Available at: <http://www-wales.ch.cam.ac.uk/CCD.html>. (accessed 01.12.2021).
10. Feng Y., Cheng L., Liu H. Putative global minimum structures of Morse clusters as a function of the range of the potential: $161 \leq n \leq 240$ // The Journal of Physical Chemistry A. Vol. 113. No 49. 2009. Pp. 13651-13655.
11. Marques J.M.C., Pais A., Abreu P.E. On the use of big-bang method to generate low-energy structures of atomic clusters modeled with pair potentials of different ranges // Journal of Computational Chemistry, Vol. 33. No 4. 2012. Pp. 442-452.

Статья поступила в редакцию 12.12.2021; одобрена после рецензирования 20.12.2021; принята к публикации 24.12.2021.

The article was submitted 12.12.2021; approved after reviewing 20.12.2021; accepted for publication 24.12.2021.