

Методы и распределенная программная инфраструктура для численного решения задачи поиска молекулярных кластеров с минимальной энергией*

М.А. Посыпкин

Рассматривается задача отыскания геометрической структуры кластера одинаковых атомов, взаимодействие которых описывается парными потенциалами. Применяемые для расчета методы стохастической оптимизации характеризуются высокой ресурсоемкостью, которая затрудняет их применение для анализа соединений с большим количеством атомов. Предлагается распределенная программная инфраструктура для реализации стохастических методов в GRID-среде, которая позволяет концентрировать находящиеся в глобальной сети разрозненные вычислительные ресурсы в целостную вычислительную среду, обладающую неограниченно наращиваемой производительностью. Приводятся результаты вычислительного эксперимента, подтверждающие эффективность предложенного подхода при решении задачи поиска конформации молекулярного кластера с минимальной энергией. Исследуется влияние различных параметров на скорость и точность расчетов.

1. Введение

Кластерами принято называть группы близко расположенных, тесно связанных друг с другом атомов, молекул, ионов. Изучение кластеров имеет важнейшее значение для понимания процессов конденсации, расчета электронных и динамических характеристик наноматериалов, создания новых источников света и многих других областей[1]. Одной из фундаментальных задач данного направления является определение геометрической структуры, или, как иногда говорят, *конформации* кластера, соответствующей минимальной энергии взаимодействия входящих в него частиц. Такие конформации наиболее часто наблюдаются в веществе при определенных условиях, например во время перехода от молекулярного к конденсированному состоянию.

Широко используется модель, при учитываются только парное взаимодействия частиц, входящих в кластер. Энергия взаимодействия двух частиц задается *парным потенциалом* $v(r)$: функцией одного аргумента, которая определяет зависимость энергии взаимодействия от расстояния между частицами. При этом энергия взаимодействия всех частиц кластера определяется как сумма энергии парных взаимодействий N входящих в него частиц:

$$E(x) = \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N v(r_{ij}), \quad (1)$$

где r_{ij} - расстояние между частицами i и j , а вектор x содержит $3N$ декартовых координат этих частиц. Так как эта модель обычно применяется для моделирования химических веществ, состоящих из одинаковых атомов, то частицы кластера будем также называть атомами. При исследовании различных веществ и процессов применяются различные потенциалы. В данной работе ограничимся рассмотрением трех распространенных потенциалов: Леннарда-Джонса, Морзе и Дзугутова, характеристики и графики которых приведены в таблице 1. Эти потенциалы применяются для моделирования структуры различных химических веществ. Кластеры Леннарда-Джонса встречаются в инертных газах, Дзугутова – в структурах металлов и стекол. Параметр ρ в потенциале Морзе позволяет моделировать различные вещества. Обычно рассматривают вариации этого параметра в диапазоне 3-14.

* Работа выполнена при поддержке программы П-15 президиума РАН

Таблица 1. Парные потенциалы взаимодействия

Потенциал	Формула
Леннард-Джонс	$v_{LJ}(r) = r^{-12} - 2r^{-6}$
Морзе	$v_M(r) = e^{\rho(1-r)}(e^{\rho(1-r)} - 2)$
Дзюгутов	$v_D(r) = A(r^{-m} - B)e^{c/(r-a)}\Theta(a-r) + Be^{d/(r-b)}\Theta(b-r)$, где $\Theta(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, \\ 1, & x \geq 0. \end{cases}$ $A = 5.82, B = 1.28, c = 1.10, m = 16, a = 1.87, b = 1.94, d = 0.27.$

Нахождению глобального минимума функции (1) посвящено значительное число работ. Существует база данных [2], в которой перечислены наименьшие найденные значения энергии и соответствующие конформации для различного числа атомов и разных потенциалов взаимодействия. Для нахождения минимума функции (1) применялись различные методы, которые можно условно разделить на две категории. К первой относятся подходы, не использующие специфичные для данной задачи свойства целевой функции, т.е. неспециализированные методы оптимизации. Во вторую категорию входят методы, использующие специфику задачи. Начнем с рассмотрения второй категории. Эти методы основаны на общих геометрических закономерностях, наблюдаемых для конформаций с минимальной энергией. Например, было замечено, что подавляющее большинство кластеров в модели Леннарда-Джонса имеют икосаэдральную структуру[3]. Изучение геометрических свойств кластеров Морзе показали, что минимумы могут соответствовать различным типам решеток, но, при этом, тяготеют к симметричной сферической форме[4]. Подобные наблюдения привели к созданию геометрически-обоснованных методов минимизации функции (1), которые на данный момент признаны наиболее эффективными для данной задачи.

Несмотря на высокую эффективность геометрически-обоснованных методов, они имеют ряд существенных недостатков. Во-первых, данные методы ориентированы на достаточно узкий класс задач, поэтому для каждой рассматриваемой модели взаимодействия требуется разрабатывать свой метод. В частности, методы, основанные на икосаэдральных решетках, показавшие высокую эффективность при отыскании энергетически-оптимальных конформаций кластеров Леннарда-Джонса, не позволяют столь же эффективно находить минимумы для потенциала Морзе. Во-вторых, априорные предположения о геометрической природе кластера могут стать причиной ошибок в нахождении минимумов, что было продемонстрировано в работе[5]. Поэтому, большое внимание уделяется также решению данной задачи неспециализированными оптимизационными методами. Считается[18], что такие методы обязательно должны применяться для верификации результатов проблемно-ориентированной оптимизации, основанной на геометрических соображениях.

К сожалению, попытки решения рассматриваемой задачи методами, гарантирующими глобальную оптимальность, не увенчались успехом для кластеров из 8 и более атомов[6]. Поэтому в качестве наиболее перспективных подходов к решению данной задачи рассматриваются различные эвристические алгоритмы. Одним из наиболее известных алгоритмов, хорошо зарекомендовавших себя при решении задачи поиска конформации с минимальной энергией взаимодействия, является локально-стохастический метод Monotonic Sequence Basin-Hopping (MSBH), предложенный в [5]. Суть подхода состоит в комбинации незначительных сдвигов в пространстве допустимых решения и локального поиска. Более подробно этот алгоритм рассматривается далее. MSBH позволил найти все известные энергетически-оптимальные конформации кластеров Леннарда-Джонса в диапазоне 3-150 атомов. При этом удалось улучшить некоторые ранее найденные минимумы[7]. Несомненным достоинством данного алгоритма является его простота и применимость для широкого класса задач. Основным недостатком является высокая ресурсоемкость. В частности, до ближайшего времени непосредственное применение этого алгоритма не позволяло получить известные минимумы для кластеров Морзе при $\rho = 14$ в диапазоне 40-80 атомов[8].

В последнее время в связи с развитием многопроцессорной техники и Грид-систем появились возможности для качественного повышения эффективности расчетов, в результате кото-

рого нередко удается расширить границы применимости различных методов. В данной работе представлена реализация распределенного варианта метода MSBH в рамках программной инфраструктуры BNB-Grid[9], предназначенной для решения задач конечномерной оптимизации в среде параллельных и распределенных вычислений. Для проведения вычислительного эксперимента были задействованы суперкомпьютеры различных организаций (МЦЦ РАН, ВЦ РАН, ИСП РАН, ТГУ). Результаты расчетов показали, объединение ресурсов распределенной вычислительной среды позволяет существенно повысить эффективность вычислений и расширить область применимости данного метода. В частности, с использованием разработанного программного комплекса были получены известные энергетически-оптимальные конформации кластеров Морзе для 70, 75, 80, 85, 90, 100 атомов, что не удавалось сделать ранее на однопроцессорных системах.

2. Постановка задачи и метод решения

Задача поиска структуры кластера с минимальной энергией взаимодействия формулируется как задача безусловной оптимизации: требуется найти минимум функции (1) в евклидовом пространстве размерности $n = 3N$, где N - число атомов в кластере. Аналитические выражения для градиента и гессиана целевой функции могут быть легко получены.

Рассматриваемый в данной работе алгоритм MSBH работает по следующей схеме (Рис. 1). В качестве начальной выбирается точка x_0 локального минимума функции. На каждом шаге алгоритма текущая точка локального минимума x подвергается возмущению Φ , к результату которого применяется локальный алгоритм L_f : $\tilde{x} = L_f(\Phi(x))$. Если $f(\tilde{x}) < f(x)$, то точка x заменяется на \tilde{x} . Далее процесс повторяется. Алгоритм останавливается, когда после заданного числа N_{\max} итераций не удастся улучшить найденный локальный минимум. Оператор возмущения изменяет координаты точки в пределах некоторой окрестности: $\Phi(x) = x + \xi$, $\xi_i \in [-r, r]$, $i = 1, \dots, n$. Величины ξ_i генерировались как равномерно-распределенные случайные числа в диапазоне $[-r, r]$. Возможно применение других законов распределения. Основными параметрами алгоритма МВН являются радиус окрестности просмотра r и количество N_{\max} итераций при генерации случайных точек. Радиус окрестности просмотра r должен быть достаточно небольшим, чтобы допускать эффективный перебор с помощью оператора возмущения в окрестности радиуса r . Эти параметры подбираются экспериментально.

АЛГОРИТМ МВН

ВХОДНОЙ ПАРАМЕТР: точка x_0

ВЫХОДНОЙ ПАРАМЕТР: точка x

А. Поместить в список точку x_0 .

В. Повторять в цикле до выполнения условия останова (число итераций $< N_{\max}$):

1. сгенерировать точку $\Phi(x)$;
2. применив к точке $\Phi(x)$ алгоритм локальной минимизации, получить точку $\tilde{x} = L_f(\Phi(x))$;
3. если $f(\tilde{x}) < f(x)$, то $x = \tilde{x}$.

С. Вернуть точку x

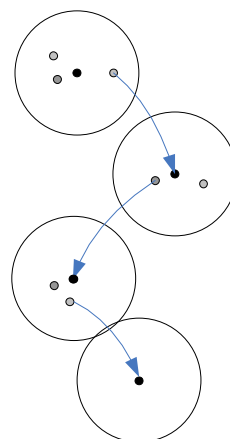


Рис. 1. Локально-стохастический алгоритм MSBH

На практике алгоритм MSBH чаще всего применяется вместе с каким-либо алгоритмом, генерирующим начальные приближения – например, методом Монте-Карло. Мы применяли

вариант, предложенный в работе[5], в котором некоторое количество начальных приближений генерируется случайно в кубе $[-1,1]^n$. Далее сгенерированные точки используются в качестве начальных для MSBH. Такой алгоритм идеально подходит для реализации в среде параллельных и распределенных вычислений, так как различные начальные приближения могут обрабатываться независимым образом.

3. Реализация алгоритма MSBH в системе BNB-Grid

3.1 Управление вычислительным пространством в системе BNB-Grid

В настоящее время в распоряжении отдельных исследователей и научных коллективов, как правило, имеются ресурсы следующих типов: рабочие станции, небольшие многопроцессорные комплексы, доступные в монопольном режиме, суперкомпьютеры коллективного доступа. Программный комплекс BNB-Grid[9] предназначен для решения задач оптимизации на распределенных системах, состоящих из узлов перечисленного типа. BNB-Grid запускает и организует взаимодействие параллельных приложений, решающих задачу с помощью библиотеки BNB-Solver[10] на различных вычислительных узлах. В результате формируется иерархическая распределенная система: на верхнем уровне части работы распределяются между параллельными приложениями, а далее они распределяются по процессорам средствами библиотеки BNB-Solver.

Ядро системы реализовано на языке программирования Java с использованием промежуточного программного обеспечения Internet Communication Engine (ICE)[11] – аналога CORBA. Каждый вычислительный узел представлен в системе распределенным экземпляром объекта типа CE-Manager – Computing Element Manager (Рис 1). Этот объект предоставляет интерфейс для запуска и остановки приложений на вычислительном узле. Координация работы объектов типа CE-Manager осуществляется с помощью другого распределенного объекта типа CS-Manager - Computing Space Manager. Графический интерфейс пользователя также реализован как ICE-объект, обозначенный на рисунке GUI Manager.

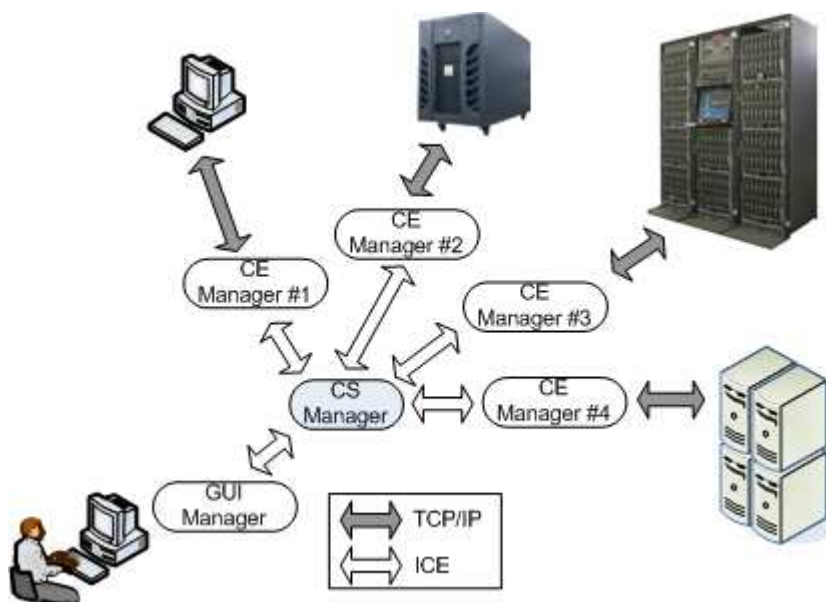


Рис. 1. Организация вычислений в BNB-Grid

ICE-объекты размещаются либо на одном, либо на нескольких компьютерах в пределах локальной сети. Доступ к удаленному вычислительному узлу осуществляется по следующей схеме (Рис. 2). Объект CE-Manager устанавливает SSH-соединение с внешним управляющим модулем узла, запускает на нем процесс CE-Server и устанавливает с ним TCP/IP соединение.

Если удаленный узел защищен сетевыми экранами, то применяется механизм туннелирования сетевого соединения через SSH-канал. Процесс CE-Server информирует CE-Manager о состоянии вычислительного узла. При обрыве соединения или перезагрузке узла CE-Server перезапускается. При получении запроса на запуск параллельного приложения CE-Manager создает объект APP-Manager, CE-Server создает процесс APP-Proxy, который запускает параллельное приложение BNB-Solver на узле. При этом CE-Manager взаимодействует с APP-Manager средствами ICE, а APP-Manager, в свою очередь, устанавливает TCP/IP соединение с BNB-Solver через APP-Proxy. Процесс APP-Proxy необходим, так как на суперкомпьютерах общего доступа непосредственный доступ из внешней сети к вычислительным модулям, как правило, невозможен.

На одном вычислительном узле может быть запущено несколько экземпляров приложения BNB-Solver. Такой подход часто оказывается целесообразным для суперкомпьютеров коллективного доступа, работающих под управлением систем пакетной обработки. На таких системах приложение, запросившее достаточно большое число процессоров может быть надолго помещено в очередь в ожидании соответствующего «окна» в расписании заданий. В то же время, приложение, запросившее существенно меньшее число процессоров, может быть запущено ранее. Этот эффект объясняется тем, что системе пакетной обработки проще эффективно размещать небольшие задания. Поэтому, в наших экспериментах на суперкомпьютерах коллективного доступа запускалось от пяти до двадцати приложений.

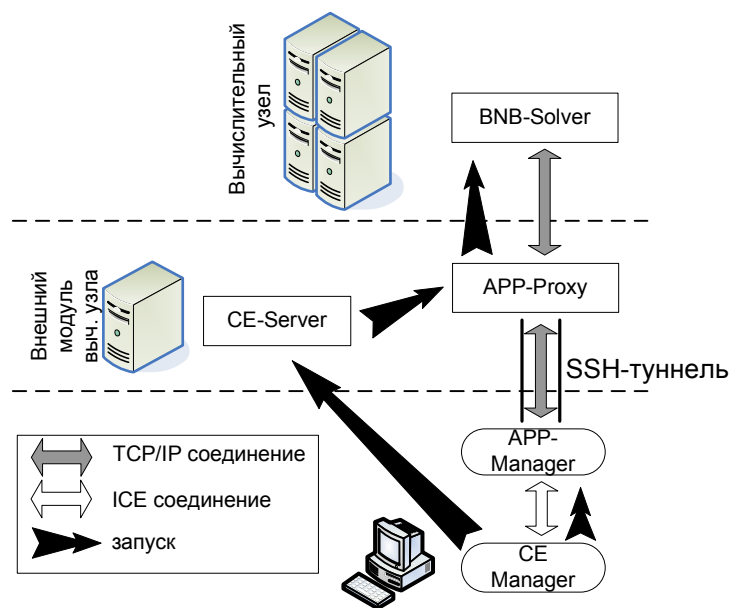


Рис. 2. Запуск приложений на удаленном вычислительном узле и установление соединения.

Выделение графического интерфейса пользователя в отдельный ICE-объект преследует две цели. Во-первых, для работы в системе BNB-Grid пользователю достаточно установить на своем персональном компьютере только этот компонент. Во-вторых, при таком подходе графический интерфейс становится легко заменяемым компонентом, который не является неотъемлемой частью системы, взаимодействуя с помощью ICE. Общий и специализированный для рассматриваемой задачи варианты графического интерфейса пользователя представлены на Рис. 3 и Рис. 4 соответственно. Общий графический интерфейс предоставляет возможности для загрузки исходных данных задачи, управления вычислительным пространством, загрузки и сохранения состояния решения задачи. Специализированный графический интерфейс, представленный на Рис. 4, позволяет просматривать и модифицировать исходные и полученные в результате расчетов кластеры. Такие возможности необходимы для исследования геометрических свойств энергетически-оптимальных кластеров. Вместе с системой хранения конфигураций этот

интерфейс образует развитую оболочку для исследования данной задачи. Более подробно эта система рассмотрена в работе[12].

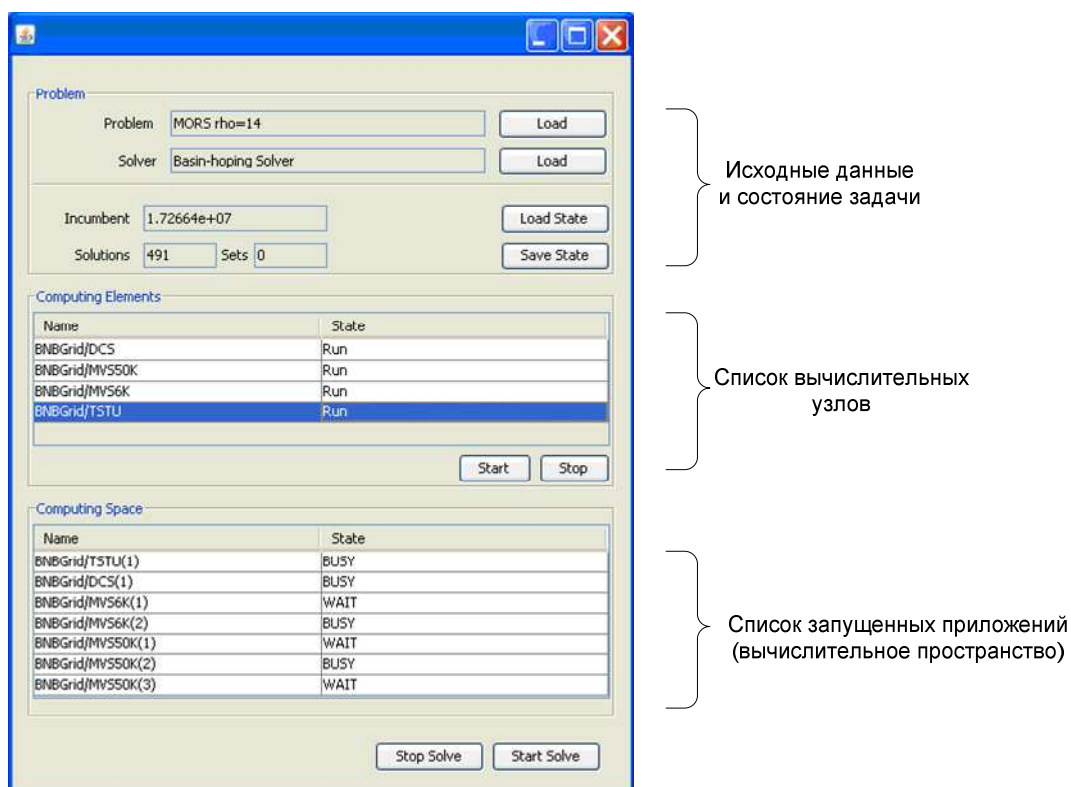


Рис.3. Графический интерфейс пользователя системы BNB-Grid

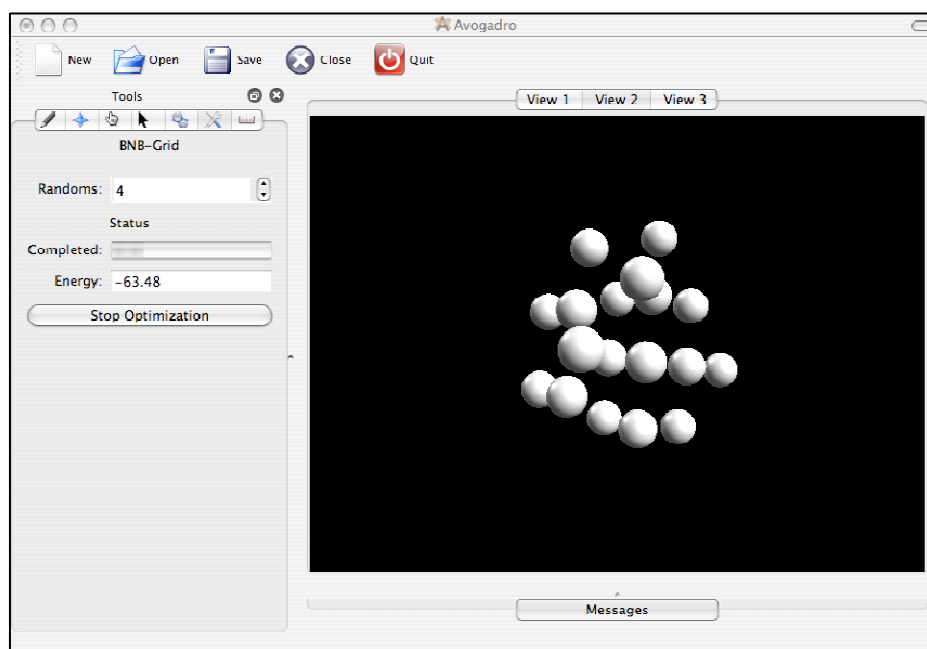


Рис.4. Версия графического интерфейса пользователя системы BNB-Grid для решения задачи поиска энергетически-минимальных конформаций молекулярных кластеров

3.2 Иерархическое управление распределением вычислительной нагрузки

Управляющие модули BNB-Grid и запущенных экземпляров библиотеки BNB-Solver образуют иерархическую систему управления распределением вычислительной нагрузки (Рис. 5). На верхнем уровне части работы распределяются ICE-объектом CS-Manager между экземплярами приложений BNB-Solver, а на нижнем – управляющим процессом (Master Process) приложения BNB-Solver между его рабочими процессами (Worker Process). Понятие части работы зависит от применяемого алгоритма: для методов ветвей и границ частями будут подмножества пространства допустимых решений, для эвристических алгоритмов – допустимые решения.

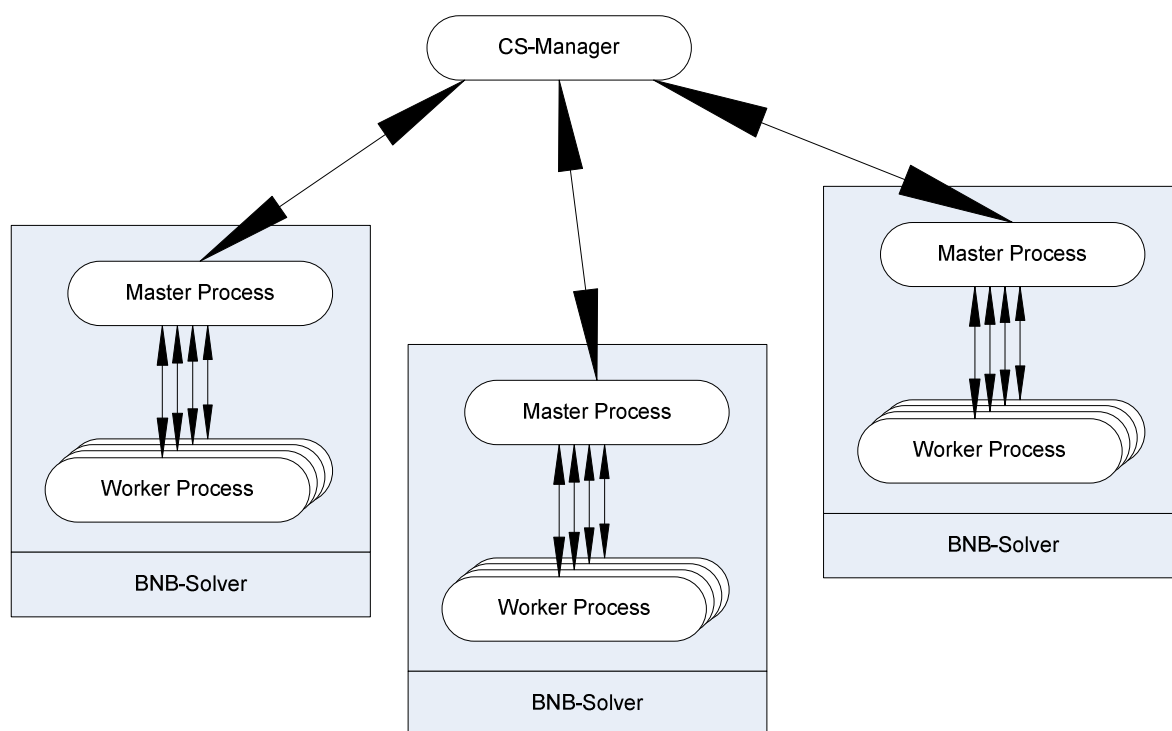


Рис. 5. Иерархическая структура BNB-Grid

Рассмотрим управление вычислительной нагрузкой в системе BNB-Grid на примере рассматриваемого алгоритма MSBH. На первом шаге на CS-Manager загружается некоторое число начальных точек и помещает его в специальный пул. ICE-объекты App-Manager запрашивают точки у CS-Manager и передают их на обработку связанным с ними экземплярам приложения BNB-Solver. Каждому из экземпляров передается число точек, не превосходящее числа рабочих процессов в приложении. Внутри параллельного приложения управляющий процесс библиотеки BNB-Solver распределяет точки по рабочим процессам. Как только все переданные параллельному приложению точки обработаны, приложение запрашивает новое задание с CS-Manager.

Из-за принудительного завершения приложения системой пакетной обработки, сетевого или аппаратного сбоя, экземпляр BNB-Solver может не завершить обработку выделенной ему части работы. Для предотвращения потери данных в такой ситуации, CS-Manager сохраняет резервные копии передаваемых заданий для каждого из экземпляров запущенных приложений. В случае аварийного завершения любого из них, соответствующая резервная копия возвращается в общий пул.

Для методов ветвей и границ балансировка усложняется, так как новые части работы генерируются в процессе вычислений. Методы балансировки нагрузки для методов ветвей и границ в программных комплексах BNB-Grid и BNB-Solver подробно рассмотрены в работах [9, 13].

4. Результаты вычислительных экспериментов

Вычислительные эксперименты проводились для потенциалов Леннарда-Джонса, Дзюгута и Морзе (таблица 1). В вычислениях были задействованы вычислительные узлы, приведенные в таблице 2.

Таблица 2. Характеристики узлов распределенной системы

№	Название	Архитектура процессора	Число вычислительных ядер	Местоположение	Наличие системы пакетной обработки
1	MVS100K	Intel Xeon 5365, 3 GHz	7856	Межведомственный суперкомпьютерный центр (Москва)	+
2	MVS6K	Intel Itanium II, 2.2 GHz	256	Вычислительный центр РАН (Москва)	+
3	OMEGA	Intel Xeon 5355, 2.66 GHz	88	Институт системного программирования РАН (Москва)	+
4	TSTU	Pentium IV, 3.2 GHz	8	Тамбовский Государственный Университет (Тамбов)	-
5	DCS	Pentium IV, 3.2GHz	1	Институт системного анализа РАН (Москва)	-

На начальной стадии экспериментов узлы 4, 5 были востребованы, так как из-за загруженности суперкомпьютеров коллективного доступа 1,3 не удалось оперативно получить большое количество вычислительных ядер. В дальнейшем, в связи с появлением доступа на кластер 3 и увеличении числа доступных ядер на МВС 100К, необходимость использовать в расчетах маломощные узлы 4 и 5 практически отпала. Приводимые ниже результаты были получены на распределенной системе, состоящей из узлов 1-3. При этом общее число задействованных процессоров достигало 512. Среднее число колебалось в интервале приблизительно 200-512 и зависело от текущей загруженности используемых кластеров.

Алгоритм MSBH управляется следующими параметрами: количество начальных приближений, максимальное количество возмущений N_{max} алгоритма MSBH до момента улучшения, и максимальный радиус возмущения r . Сначала для каждого из рассматриваемых потенциалов проводилась небольшая серия предварительных экспериментов для установления наилучшего значения параметра r . Как отмечается в работе [5], это значение практически не зависит от числа атомов, а определяется только видом потенциала. В таблице 3 приведены наилучшие значения параметра r для различных потенциалов.

Таблица 3. Наилучшие значения r для различных потенциалов

Потенциал	значение r
Морзе $\rho = 6$	0.4
Морзе $\rho = 14$	0.35
Леннард-Джонс	0.4
Дзюгут	0.4

В первом вычислительном эксперименте отыскивался минимум энергии кластера Леннарда-Джонса из 98 атомов. Известно, что данная конформация является одной из наиболее сложных для отыскания [7,8]. Обнаружение нового глобального минимума для 98 атомов стало заметным событием в свое время, послужившим основанием для публикации [7]. Результат вычислительного эксперимента приведен в строке 1 таблицы 3. N_{max} полагалось равным 8192. Для обработки 512 начальных приближений потребовалось 43 минуты, на протяжении которых наименьшее известное на настоящее время значение целевой функции было найдено 8 раз. На основании этого можно сделать вывод о том, что применяемый метод позволяет уверенно находить оптимальную конфигурацию.

Вторая серия экспериментов проводилась для потенциала Морзе при $\rho = 6$. Было выбрано также 512 начальных приближений, N_{max} полагалось равным 8192. Результаты расчетов для 85, 90 и 100 атомов приведены в строках 2-4 таблицы 3. Удалось улучшить минимум для 85 атомов, ранее найденный с применением параллельных вычислений [17]. Интересно отметить очень большое число попаданий в точку минимума для $N = 90, 100$, и то, что нахождение минимума для $N = 85$ атомов оказалось более сложной задачей по сравнению с $N = 90$ и $N = 100$. Возможно, это связано с тем, что найденные значения не являются глобальными минимумами.

Третья серия экспериментов проводилась для потенциала Морзе при $\rho = 14$, который рассматривается как наиболее сложный с точки зрения отыскания минимума по сравнению с другими значениями параметра. Были взяты, 1024 начальных приближения, параметр N_{max} был выбран равным 8192. Результаты экспериментов для 70, 75, 80, 85, 90, 100 атомов приведены в строках 5-10 таблицы 3. Для 70, 75, 80, 90 и 100 атомов найденные минимумы совпали с приведенным в работе [4]. Для 80 удалось получить очень близкий к оптимуму минимум, отличающийся от него в третьем знаке. Удалось улучшить минимумы для 85 и 90 атомов, ранее найденные с применением параллельной реализации MSBH [17].

Следующая серия экспериментов проводилась для потенциала Дзюгутова (таблица 3, строки 11-13). Известные значения минимумов были получены с использованием алгоритма [18], предложенного Дойе, который отличается от MSBH тем, что модификация решений проводится на основе геометрических соображений (сдвигаются атомы), а также для получения конфигурации из $N+1$ атома используется конфигурация из N атомов, полученная при предыдущих расчетах. Были проведены расчеты для 50 и 100 атомов. Для 50 атомов те же параметры, что и для кластеров Морзе дали хорошие результаты – минимум был найден. Для 100 атомов при первоначальном расчете с $N_{max} = 8192$ было получено значение, отличающееся от известного минимума. При пересчете с $N_{max} = 32768$ было получено несколько лучшее значение, но все равно, превосходящее известный минимум. При этом время расчетов приблизительно составило 12 часов. Полученные результаты позволяют сделать вывод о том, что кластеры Дзюгутова являются более трудными для обнаружения по сравнению с кластерами Морзе и Леннарда-Джонса и для успешного отыскания минимумов в диапазоне 50-100 атомов требуется консолидация значительных вычислительных ресурсов.

Заключение

В работе рассмотрена распределенная программная инфраструктура для решения задач конечномерной оптимизации, которая позволяет объединять разрозненные разнородные суперкомпьютерные ресурсы в единое вычислительное пространство. В рамках этой инфраструктуры был реализован известный стохастический алгоритм оптимизации MSBH. Результаты экспериментов показали, что суммарная вычислительная мощность нескольких суперкомпьютеров позволяет существенно раздвинуть границы применимости этого метода и получать оптимальные либо близкие к оптимальным конформации за приемлемое время для различных потенциалов межатомного взаимодействия. Были получены минимальные значения энергии взаимодействия и соответствующие им пространственные конфигурации для размерностей $N > 70$ для потенциала Морзе, что ранее не удавалось сделать с помощью данного метода.

Таблица 3. Результаты вычислительного эксперимента

№	Потенци-	Число	Число на-	N_{max}	Общее	Количе-	Найденный	Наилучший
---	----------	-------	-----------	-----------	-------	---------	-----------	-----------

	ал	атомов	чальных приближе- ний		время расчетов (мин)	ство «попада- ний»	минимум	известный минимум
1	Леннард- Джонс	98	512	8192	43	8	-543.665361	-543.665361
2	Морзе $\rho = 6$	85	512	8192	63	3	-405.246158	-405.246158
3	Морзе $\rho = 6$	90	512	8192	91	74	-433.355380	-433.355380
4	Морзе $\rho = 6$	100	512	8192	96	98	-488.675685	-488.675685
5	Морзе $\rho = 14$	70	1024	8192	174	9	-292.462856	-292.462856
6	Морзе $\rho = 14$	75	1024	8192	205	2	-318.407330	-318.407330
7	Морзе $\rho = 14$	80	1024	8192	244	3	-340.811371	-340.811371
8	Морзе $\rho = 14$	85	1024	8192	188	5	-363.891261	-363.893075
8	Морзе $\rho = 14$	90	1024	8192	266	2	-388.401652	-388.401652
10	Морзе $\rho = 14$	100	1024	8192	232	8	-439.070547	-439.070547
11	Дзюгутов	50	1024	8192	175	2	-104.366189	-104.366189
12	Дзюгутов	100	1024	8192	175	1	-218.678229	-219.523265
13	Дзюгутов	100	1024	32758	371	1	-218.744395	-219.523265

Полученный результат показывает, что консолидация большой вычислительной мощности нескольких суперкомпьютеров позволяет успешно решать задачи оптимизации структуры молекулярных кластеров для размерностей и потенциалов, которые ранее удавалось решить только с применением геометрически-обоснованных подходах. Этот факт представляется важным, так как применение неспециализированных методов требует меньше усилий по созданию новых алгоритмов, основанных на априорных предположениях о геометрической структуре химического соединения. Кроме того, неспециализированные методы могут рассматриваться как проверочные для проблемно-ориентированным подходах[18].

В дальнейшем планируется подключить к расчетам вычислительные ресурсы Московского государственного университета [14], Южноуральского государственного университета[15], компьютеры Грид-сегментов Европейского Грид-сообщества EGEE[16]. Предполагаемое увеличение постоянно-доступных вычислительных ядер до 2000-4000 позволит выйти на новый уровень точности вычислений и верифицировать существенно больший спектр известных минимумов. При этом возможно будут улучшены многие ранее найденные значения.

Другим путем увеличения производительности алгоритма является улучшения алгоритма поиска минимума. Представляется интересным использовать идеи генетического подхода, примененного в работе[19] для задач докинга лигандов. Принципы комбинирования свойств различных решений и предотвращения обхода одинаковых областей множества допустимых решений, предложенные в[19], могут существенно повысить эффективность стохастического поиска.

Автор выражает глубокую благодарность академику РАН Ю.Г. Евтушенко за постановку данной задачи и плодотворные обсуждения результатов работы. Также автор благодарен процессору А.П. Афанасьеву за ценные советы по реализации распределенных алгоритмов и внимание к работе. Также автор благодарен зам. директора МСЦ РАН Шабанову Б.М., зам. директора ВЦ РАН Михайлову Г.М., сотруднику ИСП РАН Самоварову О.И. за предоставление су-

перкомпьютерных вычислительных ресурсов и оперативное решение технических проблем в процессе расчетов.

Литература

1. Елецкий А.В. «Экзотические» объекты атомной физики // Соросовский образовательный журнал, № 4, 1995, С. 86-95.
2. The Cambridge Cluster Database, D. J. Wales, J. P. K. Doye, A. Dullweber, M. P. Hodges, F. Y. Naumkin F. Calvo, J. Hernández-Rojas and T. F. Middleton, [<http://www-wales.ch.cam.ac.uk/CCD.html>].
3. J. A. Northby, Structure and binding of Lennard-Jones clusters: $13 \leq N \leq 147$ // Journal of Chemical Physics, Vol. 87(1987), P. 6166-6178.
4. Longjiu Cheng, Jinlong Yang, Global Minimum Structures of Morse Clusters as a Function of the Range of the Potential: $81 \leq N \leq 160$ // Journal of Physical Chemistry A 2007, 111, P. 5287-5293.
5. Leary, R. H. 1997. Global Optima of Lennard-Jones Clusters. // Journal of Global Optimization 11, 1 (Jul. 1997), P. 35-53.
6. Costas D. Maranas, Christodoulos A. Floudas. A Global Optimization Approach for Lennard-Jones Microclusters // Journal of Chemical Physics, Vol. 97, 1992, P. 7667-7677.
7. Leary, Robert H. and Doye, Jonathan P. K., Tetrahedral global minimum for the 98-atom Lennard-Jones cluster // Phys. Rev. E, Vol. 60, № 6, 1999, P. 6320-6322.
8. Andrea Grosso, Marco Locatelli, Fabio Schoen, A population-based approach for hard global optimization problems based on dissimilarity measures // Mathematical Programming, Vol. 110, 2007, P. 373-404.
9. А.П. Афанасьев, М.А.Посыпкин, И.Х. Сигал, Проект BNB-Grid: решение задач глобальной оптимизации в распределенной среде // Труды второй международной конференции "Системный анализ и информационные технологии" САИТ-2007, том. 2, с. 177-181.
10. Посыпкин М.А. Архитектура и программная организация библиотеки для решения задач оптимизации методом ветвей и границ на многопроцессорных вычислительных комплексах // Проблемы вычислений в распределенной среде: распределенные приложения, коммуникационные системы, математические модели и оптимизация. Труды ИСА РАН. - М.: КомКнига, 2006, С. 18-25.
11. M. Henning, A New Approach to Object-Oriented Middleware // IEEE Internet Computing, Jan 2004.
12. С.А. Смирнов. Распределенный программный комплекс для моделирования структуры молекулярных соединений // Труды Третьей Международной научно-практической конференции "Современные информационные технологии и ИТ-образование" Москва, 6-9 декабря 2008 г. М.: МАКС ПРЕСС, 2008, С. 521-528.
13. М. А. Посыпкин, И. Х. Сигал, Комбинированный параллельный алгоритм решения задачи о ранце, Известия РАН, Теория и системы управления, № 4, 2008, С. 50-58.
14. Суперкомпьютерный комплекс МГУ [<http://parallel.ru/cluster/>].
15. Суперкомпьютерный центр Южно-Уральского государственного университета [<http://supercomputer.susu.ru/>].
16. Enabling Grids for E-science (EGEE)[<http://www.eu-egee.org/>].
17. М. А. Посыпкин, Параллельный эвристический алгоритм глобальной оптимизации // Труды ИСА РАН, Т. 32, 2008 г., С. 166-179.

18. J. P. Doye, D. J. Wales, S. I. Simdyankin, Global optimization and the energy landscapes of Dzugutov clusters // *Faraday Discuss.* 2001, Vol. 118, P. 159-170.
19. Романов А.Н., Кондакова О.А., Григорьев Ф.В., Сулимов А.В., Луцкеина С.В., Мартынов Я.Б., Сулимов В.Б., Компьютерный дизайн лекарственных средств: программа докинга SOL // *Вычислительные методы и программирование*, 2008, Т. 9, С. 213-233.