

## НОВАЯ АППРОКСИМАЦИЯ DFT ДЛЯ БЫСТРЫХ РАСЧЕТОВ БИО- И НАНОСТРУКТУР

Аникин Н.А., Кузьминский М.Б.

Учреждение Российской академии наук Институт органической химии им. Н.Д.Зелинского РАН, г.Москва

Аникин Н.А.  
Кузьминский М.Б.  
Институт  
органической  
химии им. Н.Д.  
Зелинского РАН

Методы функционала плотности (DFT) часто применяются для квантовохимического описания разнообразных молекулярных систем, в т.ч. био- и наноструктур. Но для гигантских (тысячи атомов) био- и наноструктур эти методы слишком ресурсоемки даже при единичных расчетах, а тем более - при массовых расчетах тысяч структур. Разработанные недавно методы "модельного" DFT, SCC-DFTB [1], позволяют сильно ускорить расчеты (приближаясь к времени вычислений менее точными полуэмпирическими методами), но все-таки недостаточно точны для количественного воспроизведения результатов DFT.

В работе предложен улучшенный по сравнению с SCC-DFTB метод приближенного расчета фокиана конкретных функционалов DFT (типа PBE, B3LYP и др.) в физически корректном и "вычислительно экономичном" виде, что позволяет на порядки ускорить расчеты при большей, чем у полуэмпирических методов или SCC-DFTB, точности и систематичности приближения к заданному функционалу DFT. Метод содержит параметры, подбираемые по результатам расчетов (выбранным функционалом DFT в выбранном базисе АО) эталонных фокианов тысяч молекул, содержащих группировки атомов, характерных для заданного класса молекулярных систем (протеины, нанотрубки и др.), что позволяет адаптировать его к особенностям заданного класса молекул.

В сочетании с использованием прямых методов определения разреженной матрицы плотности вместо обычной диагонализации фокиана это позволяет на порядки ускорить расчеты гигантских молекул и получить линейное масштабирование времени расчета с их размером.

При аппроксимации матричных элементов фокиана DFT в заданном базисе АО матричные элементы оператора кинетической энергии (как и интегралы перекрывания) рассчитываются с применением быстро вычисляемых сплайнов от межъядерного расстояния между центрами АО, отдельно для каждой пары типов АО каждой пары атомов.

В процессе вычисления матричных элементов кулоновского оператора (притяжения к ядрам плюс электрон-электронного отталкивания) и обменно-корреляционного оператора DFT, вспомогательно используются заранее затабулированные (тоже в виде сплайнов от межъядерных расстояний) аппроксимации двухатомных перекрываний АО линейными комбинациями вспомогательных функций плотности. Кулоновские одно- и двухэлектронные интегралы от вспомогательных функций плотности тоже задаются сплайнами от межъядерных расстояний.

"Остаток" фокиана ("эталонный" фокиан DFT минус вклады кулоновского оператора и оператора кинетической энергии) - это обменно-корреляционный фокиан (плюс погрешность аппроксимации кулоновского оператора). Он заменяется суммой атомных потенциалов (каждый из которых в виде суммы гауссовских экспонент от расстояния до соответствующего ядра), содержащих параметры. Они подбираются по МНК путем минимизации отклонения приближенных матричных элементов фокиана (тысячи элементов на одну молекулу) от соответствующих элементов фокиана для тысяч "эталонных" модельных молекул с атомными группировками, характерными молекул данного класса. Матричные элементы кулоновского оператора рассчитываются методом быстрых мультиполей FMM [2], имеющим линейное масштабирование времени расчета.

Все коэффициенты сплайнов, параметры метода и эталонные фокианы DFT будут храниться в специальном пополняемом хранилище данных. Для расчетов планируется применение графических ускорителей (GPU) нового поколения с архитектурой NVIDIA Fermi и средств PGI CUDA Fortran. Комплекс программ для расчетов молекул предложенным в работе новым квантовохимическим методом планируется разработать для среды Linux/x86-64.

Предлагаемый метод позволяет быстро аппроксимировать сам фокиан DFT, а не подгонять параметры по рассчитываемым по нему физико-химическим свойствам (дипольные моменты, равновесные межъядерные расстояния, теплоты реакций и др.), как это обычно делается в полуэмпирических методах. По сравнению с полуэмпирическими методами и SCC-DFTB, также имеющими высокое быстродействие для больших молекул, это повышает точность нашего метода и стабильность воспроизведения результатов DFT-расчетов.

При использовании специальной авторской методики [3] можно еще больше ускорить массовые серийные расчеты гигантских молекулярных систем, таких как докинг-комплексы, нанотрубки и комплексы на поверхности твердого тела.

Работа поддержана РФФИ, проект 11-07-00470.

#### Литература

1. *Zheng G., Lundberg M., Jakowski J., Vreven T., Frisch M.J., Morokuma K.* Int. J. Quant. Chem, 2009. v.109, N9. P.1841–1854.
2. *Greengard L., Rokhlin V.* J Comput. Phys. 1987. v.73, N1. P.325-348.
3. *Аникин Н.А., Андреев А.М., Кузьминский М.Б., Менджович А.С.* "Быстродействующий метод для массовых полуэмпирических расчетов докинг-комплексов". Известия АН, сер.хим. 2008. N9. с.1759-1764.