

РАЗВИТИЕ РЕЛЯТИВИСТСКОГО МЕТОДА СВЯЗАННЫХ КЛАСТЕРОВ ДЛЯ МОДЕЛЬНЫХ ПРОСТРАНСТВ С НЕСКОЛЬКИМИ КВАЗИЧАСТИЦАМИ

Олейниченко А.В.^{1,2}, Зайцевский А.В.^{1,2}, Элиав Э.³

¹ НИЦ «Курчатовский институт» - Петербургский институт ядерной физики, Орлова роца, г. Гатчина, 188300 Россия, zaitsevskii_av@pnpi.nrcki.ru

² Московский государственный университет им. М.В.Ломоносова, Россия

³ Университет Тель-Авива, Израиль

Релятивистский метод связанных кластеров в пространстве Фока (Fock space relativistic coupled cluster, FS RCC) [1,2] представляет собой наиболее перспективную основу для создания прецизионных моделей электронной структуры молекул соединений тяжелых элементов в возбужденных состояниях, адекватных современному уровню развития экспериментальной молекулярной спектроскопии. Данный метод характеризуется концептуальной простотой, относительно несложной программной реализацией и приемлемой вычислительной сложностью, а также систематическим подходом к построению моделей электронной структуры, принципиально позволяющим контролировать точность получаемых результатов. Несмотря на перечисленные достоинства, в настоящий момент область применимости метода связанных кластеров в пространстве Фока ограничена системами с небольшим количеством (до двух) открытых оболочек, электронные состояния которых могут быть описаны наборами детерминантов, принадлежащих секторам фоковского пространства с максимум двумя квазичастицами над вакуумом. Кроме того, современные реализации предполагают включение лишь одно- и двухчастичных возбуждений в кластерный оператор, чего определено недостаточно для надежного описания систем с большим количеством открытых оболочек [3]. Развитие метода FS RCC в настоящее время сдерживается, главным образом, отсутствием общего систематического подхода к построению эффективных программных реализаций релятивистской версии метода, которые могли бы работать с операторами возбуждения произвольной кратности.

В работе рассматриваются различные подходы к обобщению метода связанных кластеров в пространстве Фока на случай систем с несколькими открытыми оболочками (т. н. случай «высоких секторов»). Обсуждаются потенциальные преимущества и недостатки рассматриваемых схем, в том числе, представлены оценки асимптотической сложности реализующих их программных алгоритмов.

Предложена архитектура эффективного программного пакета, создаваемого в рамках работы по расширению области применимости метода связанных кластеров в пространстве Фока. Разработаны новые алгоритмы, позволяющие максимально эффективно использовать пространственную (и спиновую в нерелятивистском случае) симметрию молекулярных систем для снижения вычислительных затрат. Представлены универсальные алгоритмы, необходимые для дальнейшего построения методов, задействующих операторы с произвольной кратностью возбуждения. Значительное внимание в работе уделяется вопросу создания параллельных версий данных алгоритмов, ориентированных на использование ресурсов современных суперкомпьютерных систем.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 14-31-00022).

1. А. В. Зайцевский, Л. В. Скрипников, Э. Элиав. Моделирование возбужденных электронных состояний молекул релятивистским методом связанных кластеров: новые перспективы. Материалы VII Всероссийской конференции по структуре и энергетике молекул, Иваново, 2018.
2. D. I. Lyakh, M. Musial, V. F. Lotrich, R. J. Bartlett. // Chem. Rev., 2012, V. 112, P. 182.
3. S. R. Hughes, U. Kaldor. // Int. J. Quantum Chem., 1995, V. 55, P. 127.