

Ш-536

САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

На правах рукописи

Шефов

**Шефов Константин Сергеевич**

**Разработка методики и комплекса программ оптимизации  
молекулярно-динамического потенциала для химически  
реактивных систем**

Специальность 05.13.18 —  
«Математическое моделирование, численные методы и комплексы  
программ»

**АВТОРЕФЕРАТ**  
диссертации на соискание учёной степени  
кандидата физико-математических наук

Дубна — 2020

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего образования «Санкт-Петербургский государственный университет».

Научный руководитель: кандидат физико-математических наук  
**Степанова Маргарита Михайловна**  
доцент кафедры вычислительной физики  
ФГБОУ ВО «Санкт-Петербургский государственный университет»

Официальные оппоненты: **Мележик Владимир Степанович**,  
доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник,  
Международная межправительственная организация «Объединённый институт ядерных исследований», Лаборатория теоретической физики, г. Дубна, Московская обл.,  
ведущий научный сотрудник

**Любарцев Александр Павлович**,  
кандидат физико-математических наук,  
Стокгольмский университет, Отдел химии материалов и окружающей среды, г. Стокгольм, Швеция,  
профессор

С электронной версией диссертации можно ознакомиться на официальном сайте Объединённого института ядерных исследований в информационно-телекоммуникационной сети «Интернет» по адресу: <http://dissertations.jinr.ru/>.  
С печатной версией диссертации можно ознакомиться в Научно-технической библиотеке ОИЯИ (г. Дубна, Московская область, ул. Жолио-Кюри, д. 6).

Ученый секретарь диссертационного совета ОИЯИ  
по информационным технологиям и вычислительной физике — ОИЯИ.05.01.2019.П,  
доктор физико-математических наук

Е. В. Земляная

## Общая характеристика работы

**Актуальность темы.** Численное моделирование атомно-молекулярных систем, включая химические взаимодействия, актуально для большого набора прикладных научных задач. Моделирование позволяет предсказать ход реальных процессов, не прибегая к использованию зачастую дорогостоящих экспериментальных установок и материалов.

При небольших размерах моделируемых систем (несколько десятков атомов), можно использовать методы квантовой химии, например, основанные на теории функционала плотности (DFT). При размерах моделируемых систем, содержащих 1000 и более атомов, квантовые методы оказываются крайне требовательными к вычислительным ресурсам. По этой причине методы классической молекулярной динамики (МД) имеют преимущество, позволяя на современных распределённых вычислительных кластерах моделировать развивающиеся во времени системы с числом атомов порядка  $10^6 - 10^8$ .

При применении методов классической МД взаимодействие между частицами описывается потенциальным полем. Это поле в общем случае зависит от координат каждого атома в системе и многочисленных параметров взаимодействия в ней. В отличие от координат атомов эти параметры фиксированы во время моделирования, однако перед его началом их необходимо каким-либо образом определить.

На данный момент существует большое разнообразие потенциальных полей классической МД. Эмпирическое силовое поле ReaxFF (Reactive Force Field) является одним из наиболее универсальных инструментов для моделирования химических реакций. Основное отличие этого силового поля от ему подобных заключается в вычислении и использовании порядков связей (bond order) атомов вместо жёсткого связывания. Поле ReaxFF применимо практически к любым классам химических соединений, что подтверждается многочисленными публикациями. Но оно зависит от нескольких десятков параметров.

Процесс подбора параметров потенциала называется его оптимизацией. Для проведения оптимизации необходимо выбрать критерий оптимальности потенциала. Этот критерий может быть описан целевой функцией (ЦФ), зависящей от параметров потенциала и достигающей своего, в идеале абсолютного, минимума на множестве точек оптимальности. Поведение ЦФ на многомерной области определения в общем случае очень трудно оценить заранее, что существенно усложняет задачу.

В случае молекулярно-динамического потенциала целевая функция строится на основе оптимизирующего набора (training set). Он состоит из ряда простых соединений, представляющих составные части моделируемой системы. Это могут быть простые молекулы или ячейки кристаллов с периодическими условиями, характеристики которых можно получить методами квантовой химии или же взять из данных реального эксперимента и после этого сравнить со

Научно-техническая библиотека ОИЯИ

значениями тех же характеристик, вычисленных при помощи МД методов с оптимизируемым потенциалом.

Далеко не все известные методы поиска экстремума могут быть применены к ЦФ ввиду сильно ограниченной информации о её свойствах. Разработчиками ReaxFF для поиска параметров был предложен метод однопараметрического поиска (ОП). Достоинством данного способа является требование от ЦФ только кусочной непрерывности. В то же время ОП имеет ряд недостатков. Результат сильно зависит от задания начального приближения — единственной точки на области поиска. При произвольном выборе начального приближения можно ожидать сходимости лишь в один из локальных минимумов. За одну итерацию метод работает только с одним параметром. ОП плохо масштабируем.

Традиционной альтернативой для решения подобных задач являются стохастические алгоритмы, например, эволюционные алгоритмы (ЭА), метод оптимизации роя частиц и др. Эти методы имеют свои преимущества. В качестве начальных условий задаётся сразу большое количество случайных точек, что даёт лучший охват области поиска. Скорость сходимости значительно выше в сравнении с ОП. Хорошая разработанность, большой выбор методов. Хорошая масштабируемость. Недостатком стохастических методов является то, что они не всегда обеспечивают сходимость в абсолютный минимум за разумное время.

В нашем случае для задачи оптимизации МД потенциала применялся эволюционный алгоритм: гибридный генетический алгоритм с алгоритмом роя частиц [1]. Этот метод даёт относительно хорошие результаты, однако не всегда обеспечивает сходимость в абсолютный минимум на области поиска.

В данной диссертационной работе для решения поставленных задач применяется другая альтернатива — параллельный многомерный вариант алгоритма глобального поиска (АГП) Стронгина. К достоинствам АГП можно отнести следующее. АГП сходится в абсолютный минимум на заданной области или сетке. Результат расчётов зависит от задания границ области поиска, а не от начальной точки. Он хорошо масштабируется и имеет относительно простую параллельную реализацию. Метод имеет и свои недостатки. АГП требует, чтобы ЦФ удовлетворяла условию Липшица на области поиска. Несмотря на то, что АГП накладывает ограничения на вид ЦФ, для решаемой в работе задачи успешно удалось постронить целевую функцию, подходящую под эти условия.

Ввиду большой размерности области определения ЦФ, доступных вычислительных ресурсов может быть недостаточно для её оптимизации одновременно по всем параметрам. В этом случае следует отсортировать их по степени влияния на ЦФ, затем исключить наименее влияющие, а остальные разбить на группы, оптимизируя последовательно по каждой группе. Следует заметить, что при таком делении задачи при использовании АГП Стронгина можно ожидать сходимости в абсолютный минимум лишь для каждой группы в отдельности, но не для задачи в целом.

В рамках данной работы была разработана методика, представляющая собой последовательность действий для оптимизации МД потенциала, включая

выбор целевой функции, выбор и сравнение методов поиска параметров, получение оптимизирующего набора, анализ влияния параметров на целевую функцию и собственно оптимизацию потенциала.

В работе были реализованы несколько методов оптимизации и проведено их сравнение, что представляет отдельный интерес. Получены параметры потенциала ReaxFF для модельных систем Al – H и Zn – O – H и выполнено МД моделирование этих систем. Моделирование Al – H актуально для задач хранения водорода, а Zn – O – H — для изучения поверхностных эффектов при взаимодействии ZnO с H<sub>2</sub>O. Используемый автором алгоритм глобального поиска применяется для оптимизации МД потенциала впервые. В открытом доступе не существует программ поиска параметров ReaxFF. Созданная методика может быть применена как к задаче получения параметров МД потенциалов для произвольных классов соединений, так и для решения других сложных многопараметрических оптимизационных задач.

**Целью** данной работы является разработка методики оптимизации многопараметрического МД потенциала и реализация этой методики в виде комплекса программ для поиска параметров потенциала ReaxFF.

Для достижения поставленной цели были решены следующие задачи.

1. Разработать методику оптимизаций МД потенциала.
2. Подобрать целевую функцию для оптимизации потенциала.
3. Сравнить алгоритмы поиска экстремума функции многих переменных и выбрать наиболее подходящий.
4. Разработать параллельные программы оптимизации ReaxFF методом однопараметрического поиска, классическим и мультикритериальным алгоритмами глобального поиска Стронгина.
5. Исследовать масштабируемость программ на вычислительном кластере.
6. Подобрать методы и разработать программы для определения влияния отдельных параметров на целевую функцию с целью уменьшения размерности задачи оптимизации.
7. Рассчитать характеристики оптимизирующего набора для малых кластеров Al – H, кристаллов Al и AlH<sub>3</sub> методами квантовой химии.
8. Рассчитать характеристики оптимизирующего набора для малых кластеров Zn – O – H, кристаллов Zn и ZnO и тонких плёнок ZnO методами квантовой химии.
9. Оптимизировать потенциал ReaxFF для систем Al – H и Zn – O – H.
10. Выполнить МД моделирование кристаллов металла и оксида цинка с полученными параметрами ReaxFF.
11. Провести количественное сравнение полученных параметров ReaxFF для соединений Zn – O – H с данными, опубликованными в других источниках.

**Научная новизна.** Созданная в работе методика оптимизации молекулярно-динамического потенциала, её реализация в виде программного комплекса и полученные параметры потенциала являются оригинальными. Алгоритм глобального поиска Стронгина применяется для оптимизации МД

потенциала впервые и обладает рядом преимуществ над широко используемым однопараметрическим поиском, позволяя решать задачу быстрее и эффективнее. Вводится целевая функция, подходящая для оптимизации алгоритмом Стронгина. Анализ чувствительности ЦФ к параметрам с использованием квази-случайных последовательностей позволяет снизить размерность задачи без заметного ухудшения качества получаемого результата.

**Практическая значимость.** Разработанная методика и комплекс программ позволяют оптимизировать МД потенциал ReaxFF для произвольных классов химических соединений с целью моделирования с его помощью физических и химических процессов с их участием. Методика применима к оптимизации других многопараметрических потенциальных полей. Комплекс программ является эффективно масштабируемым на многоядерном вычислительном кластере.

Методика и программа оптимизации потенциала ReaxFF используются в коммерческой организации ООО «Энергон» с целью компьютерного моделирования физико-химических процессов в твёрдых электролитах и электродах литий-ионных аккумуляторных батарей. Комплекс программ использовался при выполнении НИР «Математические методы и вычислительные алгоритмы для исследования спектральных свойств операторов квантовых систем» ИАС П.38.241.2015. Отдельные модули комплекса программ используются для параметризации квантово-полевой модели с УСТ-потенциалом (совместное исследование СПбГУ и Харьковского Института Физики и Технологий) [2; 3].

**Вклад автора** при проведении представленных исследований является определяющим. Результаты диссертационной работы получены автором лично.

**Методология и методы исследования.** При решении поставленных задач использовались численные методы поиска экстремума функции многих переменных, методы классической молекулярной динамики, квантово-химические методы теории функционала плотности и методы анализа чувствительности функций многих переменных. При разработке программ применялась техника объектно ориентированного программирования с использованием Message Passing Interface (MPI) для параллельных вычислений. Все расчёты выполнены в кластере кафедры вычислительной физики СПбГУ:

8 узлов: 2 × 2 core Intel® Xeon® 3.0GHz/1333/4MB EM64T, 4 GB RAM;  
OS: CentOS Linux 6.5; MPI: MPICH2 v1.4.1pl1;  
Сеть: 1GB/s;

и с использованием оборудования РЦ ВЦ Научного парка СПбГУ:

14 узлов: 2 × 4 core Intel® Xeon® E5335 2.00 GHz, 16 GB RAM;  
2 узла: 2 × 4 core Intel® Xeon® E5-2603 v2 1.80 GHz, 16 GB RAM;  
OS: CentOS Linux 7 (Core); MPI: MPICH2 v1.4.1pl1;  
Сеть: 1GB/s.

**Основные положения, выносимые на защиту.**

1. Предложена методика оптимизации молекулярно-динамического потенциала, зависящего от многих параметров. Она универсальна и применима к

любому МД потенциалу. Применение анализа чувствительности позволило сортировать параметры по степени влияния на ЦФ, снизив размерность задачи путём исключения параметров с низким влиянием и разбиения на подзадачи более низкой размерности.

2. Предложена целевая функция для оптимизации МД потенциала ReaxFF алгоритмом Стронгина. Данная функция явно зависит от параметров потенциала и удовлетворяет условию Липшица на области поиска. Она не требует для своего вычисления минимизации потенциала по координатам атомов оптимизирующего набора, что значительно ускоряет расчёты.
3. Создан комплекс параллельных программ оптимизации МД потенциала ReaxFF, использующий различные алгоритмы поиска минимума и методы анализа чувствительности целевой функции. Программным комплексом были получены наборы параметров потенциала ReaxFF для соединений Al – H и Zn – O – H. Это позволило выполнить успешное моделирование динамических процессов с участием кристаллов и малых кластеров Al – H и Zn – O – H, показавшее применимость параметров для моделирования реальных систем.
4. Исследована масштабируемость комплекса программ. Реализация алгоритма Стронгина эффективно масштабируема, что подтверждено тестированием на кластере из 128 ядер. Масштабируемость практически не зависит от вида целевой функции.
5. Проведено сравнение реализованных алгоритмов оптимизации. Алгоритм Стронгина обладает рядом преимуществ над широко используемым однопараметрическим поиском:
  - решает задачу поиска параметров значительно быстрее;
  - зависит от задания границ области поиска, но не от начальной точки;
  - может быть эффективно распараллелен;
  - сходится в абсолютный минимум с точностью до сетки.

Мультикритериальный АГП предпочтительнее для решаемой в данной работе задачи оптимизации, чем его классический вариант, поскольку первый препятствует росту отдельных слагаемых ЦФ при уменьшении других. Расчёт показателей Соболя вместо кросс-корреляций при анализе чувствительности избавляет от ограничения на монотонную зависимость ЦФ от параметров. Применение квази-случайных последовательностей вместо псевдослучайных чисел даёт более равномерное покрытие области поиска параметров, что особенно важно при большой размерности задачи и относительно небольшом размере точек сетки.

**Достоверность** защищаемых положений обеспечивается корректным применением широко используемых методов и алгоритмов. Результаты вычислительных экспериментов сравниваются с результатами, ранее полученными другими авторами. Приводятся соответствующие ссылки. Достоверность результатов работы обусловлена их обсуждением на конференциях и семинарах, а также успешным внедрением в коммерческой организации.

**Соответствие паспорту специальности.** Диссертация соответствует требованиям специальности 05.13.18 — «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ». Её цель, задачи и результаты отвечают трём пунктам паспорта специальности: № 3 (разработка, обоснование и тестирование эффективных вычислительных методов с применением современных компьютерных технологий), № 4 (реализация эффективных численных методов и алгоритмов в виде комплексов проблемно-ориентированных программ для проведения вычислительного эксперимента) и № 5 (комплексные исследования научных и технических проблем с применением современной технологии математического моделирования и вычислительного эксперимента).

**Апробация работы.** Основные результаты работы были представлены на международной конференции «Научный сервис в сети Интернет: экзафлопсное будущее» (Новороссийск, 2011), на IV, VI, VII и VIII международных конференциях «Distributed Computing and Grid-technologies in Science and Education» (Дубна, 2010, 2014, 2016, 2018), а также на семинаре Института высокомолекулярных соединений РАН, семинарах ЛИТ Объединённого института ядерных исследований и семинарах кафедры вычислительной физики Физического факультета СПбГУ.

**Публикации.** Основные результаты по теме диссертации изложены в 8 рецензируемых печатных изданиях, включённых в международную наукометрическую базу данных Scopus или базу РИНЦ. Разработанная программа зарегистрирована, свидетельство о регистрации № 2018617828.

**Объем и структура работы.** Диссертация состоит из введения, четырёх глав, заключения, списка сокращений, списка литературы, списка рисунков, списка таблиц и шести приложений. Полный объём диссертации составляет 171 страницу, включая 36 рисунков и 32 таблицы. Список литературы содержит 91 наименование.

## Содержание работы

Во **введении** обосновывается актуальность исследований, проводимых в рамках данной диссертационной работы, вводятся основные понятия и термины, приводятся методы исследования, формулируется цель, ставятся задачи работы, излагаются достоверность, научная новизна и практическая значимость представляемой работы. Приводится **постановка задачи** оптимизации потенциала.

Метод классической молекулярной динамики (КМД) состоит в численном решении уравнений Ньютона для каждого атома в моделируемой системе:

$$m_i \frac{\partial^2 \vec{r}_i}{\partial t^2} = -\nabla U(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_Q), 1 \leq i \leq Q;$$

где  $m_i$  — массы атомов системы,  $\vec{r}_i$  — координаты атомов системы,  $t$  — время, а  $\nabla U(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_Q)$  — градиент потенциала взаимодействия атомов друг с другом,  $Q$  — число атомов системы. Для решения этих уравнений необходимо знать начальные координаты частиц и их начальные скорости. Уравнения решаются численно при помощи скоростной формы алгоритма Верле.

Метод КМД имеет границы применимости. Так, для моделируемых атомов длина волны де Бройля должна быть много меньше, чем межатомное расстояние. Также КМД не применима для моделирования систем, состоящих из лёгких атомов, таких как гелий или водород. Наконец, необходима эргодичность: времена, на которых рассматривается поведение системы, должны быть больше, чем время релаксации исследуемых физических величин.

Потенциалы взаимодействия, используемые при МД моделировании соединений конкретного типа, характеризуются заданием соответствующих параметров:

$$U = f(p_1, p_2, \dots, p_N). \quad (1)$$

Эти параметры задаются заранее, перед началом решения уравнений Ньютона, и не меняются при последующем моделировании. Число параметров потенциала может составлять до нескольких десятков. Процедура поиска параметров потенциала для конкретной моделируемой системы называется его оптимизацией. Мерой оптимальности является зависящая от параметров целевая функция (ЦФ)  $T(p_1, p_2, \dots, p_N)$ , определяемая отклонением каких-либо характеристик моделируемой системы, полученных методами МД, от полученных другими, более точными методами. Процесс оптимизации заключается в поиске параметров потенциала, сообщающих минимум ЦФ:

$$p_1^*, p_2^*, \dots, p_N^* : T(p_1^*, p_2^*, \dots, p_N^*) = \min_W T,$$

где  $W$  — область поиска параметров, имеющая размерность  $N$ .

Размерность задачи  $N$  может быть достаточно велика. Например, в данной работе полное число искоемых параметров варьируется от 50 до 90.

Целевая функция  $T$  является многоэкстремальной, общий вид ее (наличие оврагов, число экстремумов и т. п.) заранее не известен.

В общем случае ЦФ может не зависеть от параметров явно, например, для расчёта значения ЦФ может быть необходимо провести оптимизацию потенциала  $U$  по координатам атомов. Зависимость  $U$  от координат также может быть многоэкстремальной и иметь седловые точки.

Одной из задач данной работы является выбор такой целевой функции, которая бы явно зависела от искоемых параметров, и для расчёта которой не требовалась бы оптимизация  $U$  по  $\vec{r}_i$ .

Также в рамках данной диссертации размерность задачи снижается путём анализа чувствительности функции от параметров. Так, часть параметров с низкой чувствительностью можно исключить из оптимизации, а остальные разбить на небольшие группы, сортированные по убыванию влияния на ЦФ.

Задаче получения параметров для одного из потенциалов, ReaxFF, посвящена данная диссертация.

В первой главе поясняется суть метода классической молекулярной динамики, приводится обзор используемого в данной работе потенциала ReaxFF и молекулярно-динамического симулятора LAMMPS, который содержит реализацию этого потенциала без возможности его оптимизации. Описана целевая функция для оптимизации, предложенная авторами ReaxFF. Приведены методы квантовой химии для расчёта оптимизирующего набора. Представлены существующие методы поиска минимума функции многих переменных, а также методы анализа чувствительности функции, используемые в данной работе.

Потенциал ReaxFF, предложенный А. ван Дуином [4], — это эмпирический потенциал, который изначально разрабатывался, чтобы описывать химическую реактивность, разрыв и формирование химических связей, посредством МД моделирования. Форма МД-потенциала ReaxFF состоит из различных энергетических вкладов:

$$E_{\text{ReaxFF}}(\{r_{ij}\}, \{r_{ijk}\}, \{r_{ijkl}\}, \{q_i\}, \{BO_{ij}\}) = \\ = E_{\text{bond}} + E_{\text{lp}} + E_{\text{over}} + E_{\text{under}} + E_{\text{val}} + E_{\text{pen}} + E_{\text{coa}} + \\ + E_{\text{tors}} + E_{\text{conj}} + E_{\text{hbond}} + E_{\text{vdWaaals}} + E_{\text{Coulomb}}$$

Силовое поле зависит от расстояния между каждой парой атомов, от углов, образованных тремя атомами (от взаимного расположения трёх атомов), от двугранных углов, образованных четырьмя атомами (от взаимного расположения четырёх атомов), от зарядов атомов и от порядков связей (bond order) между атомами. Порядок связи характеризует кратность связи между конкретной парой атомов в соединении. Значение кратности в общем случае нецелое. Сам потенциал является суммой нескольких членов, каждый из которых отвечает за определённый тип взаимодействия, среди которых как валентные, так и невалентные.

Потенциал ReaxFF является функцией нескольких десятков параметров, характеризующих моделируемую систему. Важно отметить, что ReaxFF как функция координат атомов непрерывен вместе со своей первой производной.

В данной работе молекулярно-динамическое моделирование выполняется с использованием программного пакета LAMMPS (Large-Scale Atomic-Molecular Massively Parallel Simulator, <http://lammps.sandia.gov/>), распространяемого в виде исходного кода по лицензии GNU GPL. В LAMMPS реализована поддержка потенциала ReaxFF, но нет никаких средств для поиска параметров. Для работы с потенциалом ReaxFF созданный автором комплекс программ оптимизации использует пакет LAMMPS в качестве библиотеки.

Процедура оптимизации параметров МД потенциала (1) проводится путём поиска минимума ЦФ вида (2).

$$\text{Error}(p_1, p_2, \dots, p_N) = \sum_{i=1}^M \left[ \left( x_i^{\text{QC/Lit}} - x_i^{\text{ReaxFF}}(p_1, p_2, \dots, p_N) \right) / \sigma_i \right]^2 \quad (2)$$

Здесь  $x_i^{\text{QC/Lit}}$  — характеристики оптимизирующего набора (длины химических связей, валентные углы, энергии связей, теплоты образования молекул, эффективные заряды атомов и др.), вычисленные методами квантовой химии или взятые из реального эксперимента;  $x_i^{\text{ReaxFF}}$  — соответствующие перечисленным характеристикам значения, полученные с помощью ReaxFF;  $\sigma_i$  — весовой коэффициент, имеющий размерность  $x_i$  и характеризующий вклад разности  $x_i^{\text{QC/Lit}} - x_i^{\text{ReaxFF}}$  в сумму (2);  $p_k$  — оптимизируемые параметры ReaxFF.

Числа  $x_i^{\text{ReaxFF}}$  получаются путём оптимизации потенциала ReaxFF по координатам атомов для каждой молекулы или кристалла, входящих в оптимизирующий набор при заданных значениях параметров потенциала  $p_1, p_2, \dots, p_N$ . Так, характеристики  $x_i^{\text{ReaxFF}}$  косвенно зависят от параметров потенциала.

Для получения данных оптимизирующего набора используются методы квантовой химии на основе теории функционала плотности (density functional theory, DFT). Для расчётов использовались пакеты ABINIT, GAUSSIAN и CRYSTAL.

Одним из способов поиска минимума функции многих переменных является процедура однопараметрического поиска, предложенная разработчиками потенциала ReaxFF для оптимизации ЦФ вида (2). Для определения оптимального значения последовательно для каждого параметра на малом отрезке вычисляется значение функции при трёх разных значениях этого параметра, затем проводится параболическая аппроксимация.

Другим возможным способом оптимизации ЦФ является алгоритм глобального поиска (АГП) Р. Г. Стронгина [5]. Он позволяет находить абсолютный минимум целевой функции на отрезке и основан на вероятностном подходе. Изначально АГП сформулирован для функций одной переменной, определённой на отрезке. Целевая функция  $T(x)$  должна удовлетворять обобщённому условию Липшица на всей области поиска:  $|T(x_1) - T(x_2)| \leq K\rho(x_1, x_2)$ , где  $x_1$  и  $x_2$  — любые числа из интервала поиска,  $K$  — константа, а  $\rho$  — метрика в пространстве  $L_1$ ,  $\rho(x_1, x_2) = f(|x_1 - x_2|)$ , и функция  $f$  имеет обратную себе  $f^{-1}$ . Начальный шаг АГП — вычисление значений ЦФ на границах области поиска и, при необходимости, в произвольных различных  $P_2$  точках внутри неё.

Общая схема одной итерации алгоритма:

1. Упорядочить точки  $k$  предшествующих испытаний в порядке возрастания их координат:  $a = x_0 < \dots < x_i < \dots < x_k = b$ .
2. Вычислить для каждого интервала  $(x_{i-1}; x_i)$ ,  $1 \leq i \leq k$  характеристику  $R(i)$ , определяющую вероятность нахождения на нём минимума.
3. Упорядочить характеристики по убыванию:  $R(i_1) > \dots > R(i_k)$ .
4. Для всех интервалов с номерами  $i_1, \dots, i_{P_2}$ ,  $P_2 < k$ , провести испытания в точках  $x^{k+j} = \xi(i_j) \in (x_{i_j-1}; x_{i_j})$ ,  $j = \overline{1, P_2}$ . Испытания проводятся параллельно. Здесь  $\xi(i_j)$  соответствует положению математического ожидания минимума.
5. Проверить выполнение критерия остановки:  $|x_{i_1} - x_{i_1-1}| < \varepsilon$ .

Схема позволяет выполнять алгоритм параллельно на  $P_2$  процессах.

В многомерном варианте алгоритма функция многих переменных приводится к функции одной переменной при помощи развёрток типа кривой Пеано. Отсюда можно получить ещё один уровень параллельности, применив метод вращающихся развёрток [6]. Каждый параллельный процесс оперирует со своей развёрткой, повернутой относительно основной на углы  $\pm \frac{\pi}{2}$  относительно какой-либо пары направлений. Можно сделать  $N \cdot (N-1)$  таких поворотов для  $N$ -мерной области. Таким образом, максимальное число процессов на этом уровне параллельности  $P_1^{\max} = N \cdot (N-1) + 1$ , каждый из которых выполняет АГП и на каждой итерации сообщает свой результат всем остальным процессам. Параллельный алгоритм ускоряет сходимость и компенсирует последствия потери информации о близости точек области определения при использовании развёртки.

Расширением классического АГП является его многокритериальный вариант (МАГП). В нём кроме целевой функции учитываются несколько функций-условий, имеющих ту же область определения, что и целевая, и накладывающих ограничения на область поиска минимума.

В последнем разделе главы описаны используемые методы оценки влияния параметров на ЦФ, использующие либо корреляционный анализ, либо предложенный И. М. Соболев метод показателей чувствительности [7].

**Вторая глава** посвящена описанию разработанной методики оптимизации МД потенциала (рис. 1).

Первым шагом методики является выбор МД потенциала взаимодействия. Все потенциалы зависят от различного числа параметров, которые определяются конкретной моделируемой системой. Под процедурой оптимизации потенциала здесь подразумевается определение этих параметров.

Критерием оптимальности служит ЦФ, которая зависит от искоемых параметров, и множество её экстремумов является точками оптимальности потенциала. Выбор такой функции будет вторым шагом методики. Целевую функцию принято выбирать так, чтобы она зависела от абсолютных значений разностей каких-либо характеристик моделируемой системы, рассчитанных с помощью оптимизированного потенциала, и данных оптимизирующего набора. Например, функция (2).



Рис. 1 — Блок-схема методики оптимизации МД потенциала

Как правило, абсолютные значения разностей сопровождаются весовыми множителями, которые преобразуют первые в безразмерные величины, а также регулируют вклад отдельных компонент оптимизирующего набора в целевую функцию. Выбор весов является отдельной нетривиальной задачей.

Следующим шагом является выбор метода её оптимизации, то есть поиск экстремумов. Часто поведение и свойства ЦФ определить затруднительно. Например, о функции (2) можно лишь сказать, что она кусочно непрерывна в некоторой области. Таким образом, методы поиска экстремума, использующие градиент, для неё неприменимы. Например, для оптимизации функции (2) используется метод ОП. При выборе альтернативной целевой функции, явно зависящей от параметров потенциала, можно использовать более эффективные методы, например, классический АГП Стронгина или его модификацию — многокритериальный АГП (МАГП).

Сложность алгоритмов поиска минимума функций многих переменных таких, как МАГП, растёт экспоненциально при увеличении числа переменных. При размерности области определения ЦФ в несколько десятков доступных вычислительных ресурсов не хватает, чтобы оптимизировать все параметры одновременно. Выходом является сортировка параметров потенциала по степени их влияния на целевую функцию. Это ещё один шаг в методике.

Следующим шагом является получение оптимизирующего набора — характеристик простых молекул, полученных методами квантовой химии или же реальным экспериментом. В зависимости от сложности системы, под которую осуществляется поиск параметров, число характеристик в наборе может быть различным. Обычно набор содержит несколько сотен элементов. Нужно принять решение, по какому набору характеристик проводить оптимизацию, это значительно влияет на результат.

Последним шагом является непосредственно процесс поиска параметров, или оптимизации, МД потенциала под конкретную систему. Этот этап самый затратный по времени, поскольку требует продолжительных вычислений.

В третьей главе описана программная реализация разработанной методики. Последовательно реализованы методы оптимизации потенциала ReaxFF, основанные на следующих алгоритмах поиска минимума ЦФ: методе ОП, классическом АГП и мультикритериальном АГП Стронгина. При реализации АГП введена собственная целевая функция, явно зависящая от параметров потенциала. Также реализованы методы сортировки параметров по степени влияния на ЦФ: корреляционный анализ и метод показателей чувствительности. При проведении испытаний разработанных программ выявлены особенности, достоинства и недостатки используемых методов применительно к оптимизации параметров потенциала ReaxFF.

В рамках данной работы создана программа поиска параметров ReaxFF на основе метода ОП с функцией (2). Программа написана на языке С и использует MPI для параллельной работы. В качестве реализации потенциала ReaxFF

применена библиотека LAMMPS. Программа работает в три параллельных потока, каждый из которых вычисляет значение ЦФ при трёх различных значениях параметра потенциала в соответствии с алгоритмом ОП.

Программа ОП была использована для решения задачи поиска параметров МД потенциала ReaxFF для систем алюминий – водород. Методами теории функционала плотности автором был рассчитан оптимизирующий набор, включающий молекулу водорода  $H_2$ ; кластеры алюминия  $Al_n$ ,  $n = 2, \dots, 8, 13, 147$ ; кластеры гидрида алюминия  $Al_nH_{3n}$ ,  $n = 1, 2, \dots, 8$ ; кристалл металла алюминия и кристаллы гидрида алюминия для  $\alpha$ ,  $\beta$  и  $\gamma$  модификаций. Было оптимизировано 89 параметров потенциала, что заняло 84 дня. Для проверки качества полученных параметров был проведён анализ зависимостей энергий связи кристалла металла алюминия от объёма ячейки и кристаллов гидрида алюминия различных модификаций от объёма ячейки. Все данные сравнивались с данными расчётов квантовой химии. Было проведено моделирование кристаллов металла и гидридов трёх модификаций при комнатной температуре, при этом все решётки были стабильны в течение всего времени моделирования. Также было выполнено МД моделирование реальных экспериментов: плавления и кристаллизации чистого Al, взаимодействия атомарного водорода с поверхностью чистого Al (111), десорбции водорода гидридом алюминия. Полученные параметры пригодны для моделирования реальных процессов в системах Al – H.

Для работы с АГП Стронгина введена целевая функция, явно зависящая от параметров потенциала ReaxFF:

$$Error = \sum_{k=1}^L \sigma_k |U_k^{QC} - U_k^{ReaxFF}| + \sum_{k=1}^L \sigma_{L+k} \sqrt{\sum_{\alpha=1}^A \sum_{i=1}^3 (F_{k\alpha i}^{QC} - F_{k\alpha i}^{ReaxFF})^2}, \quad (3)$$

где  $U_k$  — потенциальные энергии соединений оптимизирующего набора,  $F_{k\alpha i}$  — компоненты сил, действующих на атомы каждой модели,  $L$  — число различных конфигураций соединений оптимизирующего набора,  $A$  — число атомов в соединениях,  $\sigma_k$  — весовые множители. Индексы QC и ReaxFF означают, что характеристики были получены соответственно методами квантовой химии и молекулярной динамики с ReaxFF.  $U_k^{ReaxFF} = U_k^{ReaxFF}(p_1, p_2, \dots, p_N)$  и  $F_{k\alpha i}^{ReaxFF} = F_{k\alpha i}^{ReaxFF}(p_1, p_2, \dots, p_N)$ , то есть зависят от параметров ReaxFF.

Анализ средствами программного пакета Maple показал, что на области поиска  $U_k^{ReaxFF}$  и  $F_{k\alpha i}^{ReaxFF}$  имеют непрерывную первую производную по оптимизируемому параметрам, что приводит к удовлетворению функции (3) требуемого для работы АГП условия Липшица.

При вычислении ЦФ вида (3) для каждой молекулы или ячейки кристалла необходимо рассчитать энергию и силы при нескольких различных значениях длин одних и тех же химических связей, для различных величин одних и тех же валентных углов, при различных объёмах ячеек кристалла.

Весовые множители  $\sigma_k$  можно выбирать такими, чтобы вклад каждого слагаемого в (3) в сумму в среднем был бы одинаковым. Среднее в данном случае

рассчитывается по некоторому достаточно большому набору псевдослучайных точек области определения ЦФ.

Далее описывается программный комплекс, реализующий параллельный многомерный классический АГП. АГП имеет здесь только один уровень параллельности — по развёрткам. Комплекс включает в себя следующие программы. `ps_random_gen` — генератор псевдослучайных последовательностей. `param_sort_corr` сортирует параметры по степени влияния на ЦФ на основе корреляций. `tf_weights_compute` определяет весовые множители в (3). `gsa_reaxff_optimize` оптимизирует параметры потенциала. `gsa_errors_compute` выводит все  $U_k^{QC}$ ,  $F_{k\alpha i}^{QC}$ ,  $U_k^{ReaxFF}$  и  $F_{k\alpha i}^{ReaxFF}$  из формулы (3) для заданного набора параметров. `tf_values_plot` используется для построения графиков зависимостей значения целевой функции (3) от каждого параметра в отдельности при фиксированных остальных. Комплекс написан на языке C++ с использованием ООП и технологии MPI. В качестве реализации потенциала ReaxFF применена библиотека LAMMPS. Созданная реализация алгоритма была успешно протестирована на функциях многих переменных Михалеви́ча и Растригина.

Программный комплекс классического АГП был применён к решению задачи поиска параметров МД потенциала ReaxFF для систем Zn – O – H. Целью была проверка применимости метода посредством сравнения его результатов с результатами для контрольного набора, полученного методом ОП в работе [8]. Оптимизировались 24 параметра из 51, выбранные по условию того, что максимальная корреляция их изменения с изменением какого-либо из слагаемых ЦФ (3) больше 0,1. Границы области поиска были заданы из расчёта  $[0,9 \cdot p_i^{entr}; 1,1 \cdot p_i^{entr}]$ , где  $p_i^{entr}$ ,  $1 \leq i \leq N$  — значения параметров контрольного набора. Поиск минимума ЦФ проводился последовательно по группам из 6 параметров на кластере с использованием 31 ядра. Локальный минимум на области из 24 параметров был достигнут за 10 дней.

С полученными параметрами проведён анализ зависимостей энергий связи

- молекул Zn – O – H от длины химической связи;
- молекул Zn – O – H от величины валентного угла;
- кристаллов Zn различных модификаций от объёма ячейки;
- кристаллов ZnO различных модификаций от объёма ячейки.

Также были определены постоянные решёток и модули упругости кристаллов. Все данные сравнивались с данными расчётов квантовой химии. Наблюдается уменьшение разностей энергий ReaxFF и кв. химии в сравнении с контрольными параметрами [8] потенциала для молекул и кристаллов металла и увеличение разностей энергий для кристаллов оксида. Для ZnO зависимости энергий от объёма для всех модификаций отличаются от данных расчётов квантовыми методами как по форме, так и по абсолютному значению энергии. После оптимизации значение ЦФ хотя и стало меньше значения ЦФ при контрольном наборе [8], но произошло это за счёт слагаемых ЦФ, связанных с молекулами и кристаллами



металлов, в то время как значения слагаемых, связанных с кристаллами оксидов, наоборот, увеличились.

Во избежание подобного поведения необходимо ограничить рост отдельных слагаемых целевой функции во время оптимизации. Для этого был реализован мультикритериальный вариант АГП (МАГП). Комплекс программ для МАГП во многом схож по своему устройству с комплексом для классического АГП, однако он включает ряд усовершенствований. Вместо генератора псевдослучайных чисел комплекс для МАГП использует генератор квази-случайных чисел `quasi_rand_gen`, дающих более равномерное распределение точек в многомерном пространстве. Блок сортировки параметров по влиянию на ЦФ был дополнен алгоритмом определения влияния через показатели чувствительности Соболя `param_sort_sa`, который является более универсальным. Программа оптимизации параметров классическим АГП заменена программой МАГП `mgsa_reaxff_optimize`. Наконец, реализация МАГП имеет два уровня параллельности: 1 — по развёрткам, 2 — по вероятностным характеристикам  $R(i)$ . Блок-схема комплекса приведена на рис. 2, где прямоугольники с двойной границей обозначают программы, а остальные — классы. Класс `Params` отвечает за работу с параметрами `ReaxFF`, `Models` — за оптимизирующий набор, а остальные являются частью программы `mgsa_reaxff_optimize`. Реализация МАГП была протестирована на функциях Михалевича и Растригина.

Программный комплекс доступен в виде архива с исходными кодами, сценарием сборки, документацией для пользователя и примерами входных файлов.

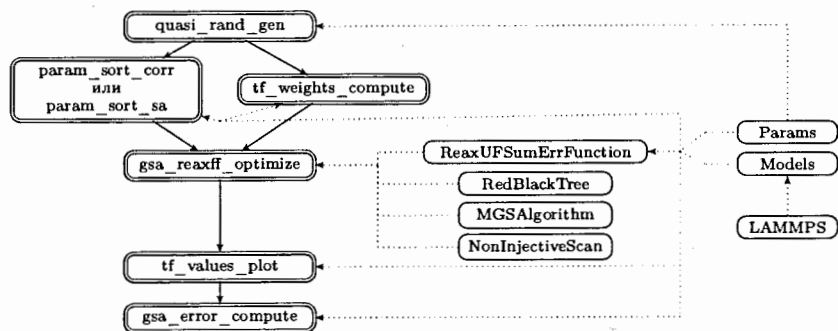


Рис. 2 — Блок-схема комплекса программ мультикритериального АГП

Проведён анализ масштабируемости созданной реализации МАГП, а именно, исследована зависимость накладных расходов от числа ядер, определена оптимальная размерность области поиска ( $N=4$ ), исследована масштабируемость программы на втором уровне параллельности при различном числе развёрток, а также показано, что эффективность реализации в рамках нашего класса задач не зависит от вида ЦФ. Использовался вычислительный кластер на 128 ядер ЦПУ, описанный выше.

Для размерности области поиска  $N = 4$  и трёх фиксированных чисел развёрток  $P_1 = 1, 7, 13$  сравнивается зависимость ускорения по числу итераций  $A_I$

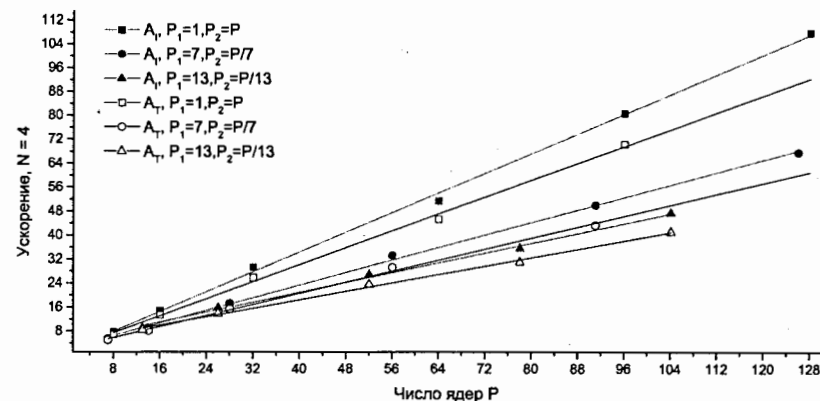


Рис. 3 — Зависимость ускорения МАГП от числа ядер и времени  $A_T$  от числа ядер  $P$  (рис. 3).  $P$  будет кратно числу ядер на 2-м уровне  $P_2$ .  $A_I(P_1, P_2) = \frac{I(1,1)}{I(P_1, P_2)}$ ,  $A_T(P_1, P_2) = \frac{t(1,1)}{t(P_1, P_2)}$ , где  $I(P_1, P_2)$  и  $t(P_1, P_2)$  — соответственно число итераций и время работы МАГП до сходимости. Синим на рис. 3 обозначены зависимости по итерациям ( $A_I(P)$ ), красным — по времени ( $A_T(P)$ ). Линейная аппроксимация методом НК говорит о постоянной эффективности ( $\Delta A_T / \Delta P$ ) с ростом числа ядер, см. таблицу 1.

Таблица 1 — Эффективность параллельной реализации МАГП

$P_1$	1	7	13
$\Delta A_T / \Delta P, \%$	$71 \pm 1,9$	$46 \pm 1,3$	$35 \pm 1,0$

По разнице между графиками  $A_I$  и  $A_T$  можно судить о снижении эффективности за счёт накладных расходов. Наиболее эффективным является распределение ядер на второй уровень параллельности с использованием всего одной развёртки ( $P_1 = 1$ ).

**Четвёртая глава** посвящена применению программного комплекса мультикритериального АГП для получения параметров потенциала `ReaxFF` для соединений Zn–O–H.

В первом разделе описан оптимизирующий набор для Zn–O–H, полученный автором методами теории функционала плотности. Набор включает в себя ячейки кристаллов ZnO модификаций Wurtzite (W), Rocksalt (R), Zincblende (Z) и CsCl (C) с периодическими условиями; ячейки кристаллов металла цинка модификаций HCP, FCC, BCC и SC с периодическими условиями; тонкие плёнки ZnO модификаций W и R толщиной 10 слоёв с периодическими условиями по двум измерениям; молекулы  $Zn(OH)_2$  и  $HOZnOZnOH$ ; мини-кристаллы ZnO модификаций W, R и Z из 8 ячеек (45, 64 и 64 атома соответственно) без периодических условий. Итого оптимизирующий набор содержал 148 значений потенциала и 148 векторов сил, действующих на атомы.

Во втором разделе описано применение комплекса МАГП к задаче поиска параметров МД потенциала ReaxFF. Результаты сравниваются с полученными классическим АГП и с результатами контрольного набора [8] — того же, который использовался в третьей главе. Оптимизировались 24 параметра из 51, полученные программой `param_sort_sa`, с генератором квази-случайных последовательностей `quasi_rand_gen`. Границы области поиска такие же, как при КАГП. Параметры оптимизировались группами по 4 с использованием одной развёртки и 128 ядер на втором уровне параллельности по вероятностным характеристикам. Расчёт занял 10 часов.

Анализ зависимостей энергий связи молекул и кристаллов металлов от их геометрий с полученными МАГП параметрами показывает лучшие результаты, чем таковой с контрольными параметрами. Для кристаллов ZnO наблюдается заметное уменьшение разностей энергий ReaxFF и кв. химии в сравнении с результатами классического АГП. Зависимости для 3 модификаций из 4 почти совпадают по форме, разница в абсолютных значениях уменьшилась в 10 раз. На рис. 4 приведены зависимости для некоторых соединений. В таблице 2 представлены значения для постоянных решёток и модулей упругости (BM), вычисленные методами квантовой химии (QC) и МД (ReaxFF), для наблюдаемых в природе кристаллов Zn и ZnO.

Таблица 2 — Параметры решёток и модули упругости кристаллов Zn и ZnO

Кристалл	Характ.	QC	ReaxFF АГП	ReaxFF МАГП	ReaxFF конт.
ZnO Wurtzite	a, Å	3.28	3.12	3.27	3.29
ZnO Wurtzite	c, Å	5.28	5.26	5.24	5.28
ZnO Wurtzite	BM, ГПа	143	222	138	144
ZnO Rocksalt	a, Å	4.34	4.17	4.35	4.44
ZnO Rocksalt	BM, ГПа	183	562	242	283
Zn HCP	a, Å	2.65	2.74	2.74	2.73
Zn HCP	c, Å	4.98	4.47	4.47	4.46
Zn HCP	BM, ГПа	74.1	66.1	81.3	87.7

Для сравнения оптимизированного МАГП набора параметров с контрольным было проведено МД моделирование 4 модификаций кристаллов металла и 4 — оксида цинка при комнатной температуре. Моделируемые системы представляли собой несколько ячеек кристаллов (параллелепипеды) в вакууме — всего порядка 2000 атомов каждая. При моделировании кристаллы оксида W, R и Z оставались стабильными, решётка не деформировалась. Незначительно отличались постоянные решёток после уравнивания моделей. Кристалл ZnO CsCl (не наблюдается в природе) полностью потерял свою структуру независимо от использованных параметров ReaxFF. Модификации HCP и FCC металла вели себя одинаково независимо от набора параметров. При моделировании кристалла HCP решётка в обоих случаях несколько сжалась по оси z из-за отсутствия в обоих наборах параметров углового члена для чистого Zn, и соотношение постоянных решётки a/c вернулось к естественному для гексагональной упаковки.

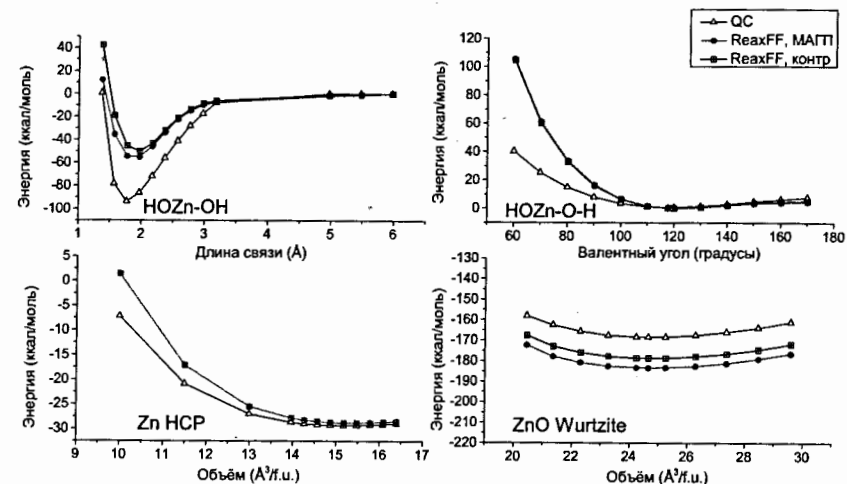
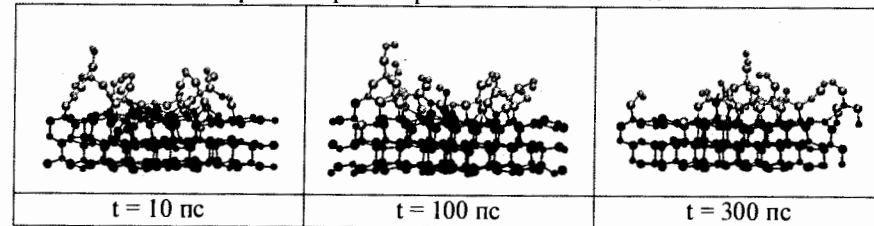


Рис. 4 — Зависимости энергии связи систем от их геометрии

Кристалл FCC при моделировании сохранил как свою структуру, так и постоянные решётки. Кристалл BCC при моделировании в контрольных параметрах оставался стабильным, а при моделировании с оптимизированными — постепенно превратился в кристалл HCP. Это поведение ожидаемо, поскольку кристалл Zn модификации BCC не обнаружен в природе. Кристалл простой кубической решётки SC в обоих случаях не сохранил свою структуру, но он также не обнаружен в природе. В целом, кристаллы металла ведут себя в динамике одинаково, не зависимо от набора параметров потенциала, применяемых при моделировании.

С полученными МАГП параметрами выполнено моделирование роста слоя кристалла оксида цинка Wurtzite на поверхности (0001) из отдельных кластеров ZnO при температуре 300 К. Наблюдалось формирование первого слоя и частично второго. В таблице 3 приведены состояния модели в зависимости от времени.

Таблица 3 — Моделирование роста кристалла ZnO Wurtzite



Также проведено моделирование адсорбции молекул воды поверхностью кристалла ZnO Wurtzite (10 $\bar{1}$ 0). Были рассмотрены три локально оптимальные по геометрии конфигурации: М) молекулы воды на поверхности кристалла не

диссоциировали; MD) каждая вторая молекула диссоциировала на ион водорода и гидроксильный ион; D) все молекулы диссоциировали. Рассчитаны энергии переходных состояний между этими конфигурациями. Методом линейной интерполяции координат всех атомов между конфигурациями M, MD и D было получено по девять промежуточных конфигураций между каждой парой M–MD, MD–D и M–D. Для каждого промежуточного состояния была вычислена энергия связи системы. Результаты были сопоставлены с данными квантовой химии и расчётами ReaxFF с контрольными параметрами [8] (рис. 5). В крайних точках графиков (M, MD, D) энергии, полученные ReaxFF с параметрами МАГП, ближе к значениям КХ, чем при использовании контрольного набора. Также кривая (MD–D) для набора параметров МАГП ближе к КХ, чем контрольная. Этот результат следует считать очень хорошим с учётом того, что оптимизирующий набор не содержал конфигураций ZnO — H<sub>2</sub>O.



Рис. 5 — Пути диссоциации H<sub>2</sub>O на поверхности ZnO Wurtzite (10 $\bar{1}$ 0). QC, V3LYP — результаты расчётов КХ; ReaxFF, контр — контрольный набор; ReaxFF, МАГП — результаты, полученные автором

В **заключении** приводятся основные результаты работы.

Разработана методика оптимизации МД потенциала, зависящего от многих параметров. Она была реализована в виде комплекса параллельных программ оптимизации потенциала ReaxFF, использующих различные алгоритмы: метод ОП, классический и мультикритериальный АГП Стронгина.

Предложена целевая функция для оптимизации МД потенциала ReaxFF, явно зависящая от параметров потенциала, не требующая минимизации потенциала по координатам атомов.

Получен набор параметров для соединений Zn – O – H и проведено моделирование динамических процессов с участием кристаллов и малых кластеров. Набор параметров может быть использован для моделирования роста кристалла ZnO и взаимодействия поверхностей ZnO с водой.

Выполнено сравнение реализованных алгоритмов оптимизации для потенциала ReaxFF. Наиболее эффективным методом оказался МАГП. Он сходится

значительно быстрее ОП, эффективно масштабируется, а также позволяет накладывать ограничения на рост отдельных групп слагаемых целевой функции, препятствуя уменьшению одних слагаемых за счёт других.

### Публикации автора по теме диссертации

1. Шефов, К. С. Реализация алгоритма оптимизации параметров молекулярно-динамического потенциала ReaxFF / К. С. Шефов, М. М. Степанова // Программные продукты и системы. — 2014. — 2 (106). — С. 141–145.
2. Шефов, К. С. Реализация и применение параллельного алгоритма глобального поиска минимума к задаче оптимизации параметров молекулярно-динамического потенциала ReaxFF / К. С. Шефов, М. М. Степанова // Компьютерные исследования и моделирование. — 2015. — Т. 7, № 3. — С. 745–752.
3. Шефов, К. С. Мультикритериальный алгоритм глобального поиска минимума в задаче оптимизации реактивного силового поля / К. С. Шефов, М. М. Степанова, С. Ю. Славянов // Теоретическая и математическая физика. — 2016. — Т. 187, № 1. — С. 177–194.
4. Shefov, K. S. Parametrization of the Reactive MD Force Field for Zn-O-H Systems / K. S. Shefov, M. M. Stepanova, S. N. Kotriakhova // CEUR Workshop Proceedings. Vol. 1787. — 2016. — P. 567–572.
5. Shefov, K. S. Sensitivity analysis in a problem of reaxff molecular-dynamic force field optimization / K. S. Shefov, M. M. Stepanova // CEUR Workshop Proceedings. Vol. 2267. — 2018. — P. 595–600.
6. Shefov, K. S. Scalability of the parallel strongin algorithm in the problem of optimizing a molecular-dynamic force field / K. S. Shefov, M. M. Stepanova // CEUR Workshop Proceedings. Vol. 2267. — 2018. — P. 605–610.
7. Shefov, K. S. Using Grid for Quantum Chemistry and Molecular Dynamic Applications / K. S. Shefov, D. S. Kasterin, M. M. Stepanova // Distributed Computing and Grid-Technologies in Science and Education: Proc. of the 4th Intern. Conf. (Dubna, 2010) ISBN: 978-5-9530-0269-1. — 2010. — P. 383–388.
8. Шефов, К. С. Программа для поиска параметров молекулярно-динамического потенциала (MGSA ReaxFF) / К. С. Шефов, М. М. Степанова // Свидетельство о государственной регистрации ПрЭВМ, рег. №2018617828 от 02.07.2018. — 2018. — Т. 7.

### Список литературы

1. Kotriakhova, S. N. Parallel evolutionary algorithm in high-dimensional optimization problem / S. N. Kotriakhova, M. M. Stepanova // CEUR Workshop Proceedings. Vol. 1787. — 2016. — P. 328–332.

2. Applications of the Kharkov potential in the theory of nuclear forces and nuclear reactions / A. Arslanaliev [et al.] // Problems of Atomic Science and Technology. — 2018. — Vol. 115, no. 3. — P. 3.
3. Relativistic Faddeev Calculation for Nucleon-Deuteron Scattering with the Kharkov Potential / H. Kamada [et al.] // Recent Progress in Few-Body Physics. Springer Proceedings in Physics. — 2018. — Vol. 238. — P. 449—453.
4. ReaxFF: A Reactive Force Field for Hydrocarbons / A. van Duin [et al.] // J. Phys. Chem. A. — 2001. — Vol. 105 (41). — P. 9396—9409.
5. Стронгин, Р. Г. Численные методы в многоэкстремальных задачах / Р. Г. Стронгин. — М. : Наука, 1978. — 240 с.
6. Стронгин, Р. Г. Параллельные методы решения задач глобальной оптимизации / Р. Г. Стронгин, В. П. Гергель, К. А. Баркалов // Изв. Вузов. Приборостроение. — 2009. — Т. 52, № 10. — С. 25—33.
7. Соболев, И. М. Глобальные показатели чувствительности для изучения нелинейных математических моделей / И. М. Соболев // Математическое моделирование. — 2005. — Т. 17, № 9. — С. 43—52.
8. Water adsorption on stepped ZnO surfaces from MD simulation / D. Raymond [et al.] // Surface Science. — 2010. — Vol. 604. — P. 741—752.