

# Правила формирования начальных приближений конформаций атомных кластеров Морса на основе геометрически обоснованного метода

А.Н. Коварцев<sup>1</sup>, Г.П. Климашова<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Самарский национальный исследовательский университет им. академика С.П. Королева, Московское шоссе 34А, Самара, Россия, 443086

**Аннотация.** В статье представлен новый метод формирования начальных приближений атомных кластеров Морса для наиболее сложного случая, когда жёсткость кластера равна 14. Сформулирована постановка задачи структурной оптимизации конформаций атомных кластеров Морса. Разработан алгоритм структурной оптимизации атомного кластера Морса, который существенно снижает алгоритмическую сложность решаемой задачи.

## 1. Введение

Атомные или молекулярные кластеры состоят из набора частиц и могут иметь новые, совершенно иные физические свойства по сравнению с одиночной молекулой или объёмной материей. Оценка их наиболее важных свойств используется во многих областях, начиная от прогнозирования структуры белка и заканчивая изучением влияния стратосферных облаков на разрушение озонового слоя. Кроме того, правильное понимание свойств кластеров имеет огромное значение для нанотехнологий.

В настоящее время не существует прямых экспериментальных методов, способных идентифицировать структуру свободных кластеров с использованием молекулярных пучков. Обычно оценивают параметры, зависящие от структуры объекта, и используют модели с прогнозируемыми предпочтительными геометрическими конфигурациями. Взаимодействия между частицами, которые составляют кластер, можно описать многомерной функцией, обозначенной как потенциальная энергетическая поверхность (Potential Energy Surface), знание которой является обязательным при теоретическом изучении свойств кластеров [1].

Энергия кластеров Морса получается суммированием потенциалов Морса, описывающих все парные взаимодействия, которые происходят в совокупности в кластере [2], при этом химической связью между атомами пренебрегают:

$$v(r_{ij}) = e^{\rho(1-r_{ij})} (e^{\rho(1-r_{ij})} - 2), \quad (1)$$

где  $r_{ij}$  – расстояние между атомами  $i$  и  $j$ ;  $\rho$  – параметр, расширяющий или сужающий потенциальную «яму» парных взаимодействий атомов в кластере Морса [3]. Обычно  $\rho$  принадлежит диапазону от 3 до 14.

Энергию взаимодействия всех атомов кластера можно вычислить как сумму энергий парных взаимодействий

$$v(X) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^m \sum_{\substack{j=1 \\ (i \neq j)}}^m v(r_{ij}), \quad (2)$$

где  $X = (x_1, \dots, x_m)'$ ,  $x_i \in R^3$  – координаты центров атомов кластера.

В подавляющем количестве работ, посвященных этой тематике, проблему поиска оптимальных конформаций атомных кластеров связывают с задачей глобальной оптимизации (ГО) потенциальной функции (2).

В настоящее время задачи ГО используются во многих прикладных областях математики, информатики, физики, биологии, химии и смежных с ними отраслями знаний. Особое внимание исследователей, в последнее время, связано с поиском оптимальных конформаций молекул (*molecular conformation problems*) [4, 5, 6].

Однако задача поиска оптимального атомного кластера, соответствующего наименьшей потенциальной энергии связей, оказалась NP-трудной задачей [7], поскольку результирующая целевая функция, полученная при суммировании вклада энергий парных взаимодействий, представляет собой невыпуклую мультимодальную функцию пространственных координат многих атомов.

Естественно, что основную проблему при формировании оптимальных конформаций атомных кластеров составляет проблема глобальной оптимизации (ГО) потенциальной функции, зависящей от большого количества переменных. Теоретические исследования методов глобальной оптимизации не допускают существование практически значимых прямых методов ГО для функций с числом переменных больше 30 [8]. В связи с этим, существующая практика поиска оптимальных конформаций основывается на использовании стохастических алгоритмов глобальной оптимизации. Успех их применения связан с использованием большого количества эвристик о свойствах объекта исследования. В настоящее время глобально-оптимальные конформации для кластеров Морса построены вплоть до кластеров, состоящих из 240 атомов [9]. Однако построение атомных кластеров Морса больших размеров ( $N > 240$ ) до сих пор представляет серьёзные трудности из-за значительных вычислительных затрат.

В статье рассматриваются вопросы, связанные с формированием глобально-оптимальных конформаций атомных кластеров Морса больших размеров ( $N > 240$ ). Предлагаемые подходы основываются на поиске рациональных эвристик для формирования начальных приближений атомных кластеров Морса и использовании локальных методов оптимизации функций большого количества переменных.

## 2. Постановка задачи структурной оптимизации

Для нахождения конформаций, обеспечивающих глобальный минимум энергии кластера, в настоящее время, применяются различные методы оптимизации, которые так или иначе используют дополнительную информацию о свойствах атомного кластера. Например, для кластеров Морса было замечено, что решетки расположения атомов в конформации тяготеют к симметричной сферической форме [10]. Использование этой информации привело к созданию геометрически-обоснованных методов глобальной оптимизации кластеров Морса. К идее учёта геометрических структурных свойств кластера для минимизации его потенциальной энергии часто относились с недоверием, однако впоследствии к ней не раз возвращались [5, 11, 12]. Например, в работе [11] в качестве ядер начальных конформаций кластеров использовались икосаэдрические, декаэдрические или гранецентрированные кубические структуры.

В данной работе рассматривается задача поиска оптимальных конфигураций кластера Морса в наиболее сложной постановке, когда  $\rho = 14$  и атомы могут лишь касаться друг друга. В этом случае задача формирования атомных кластеров минимальной потенциальной энергии фактически связана с проблемой плотной упаковки шаров [13]. Предполагается, что для

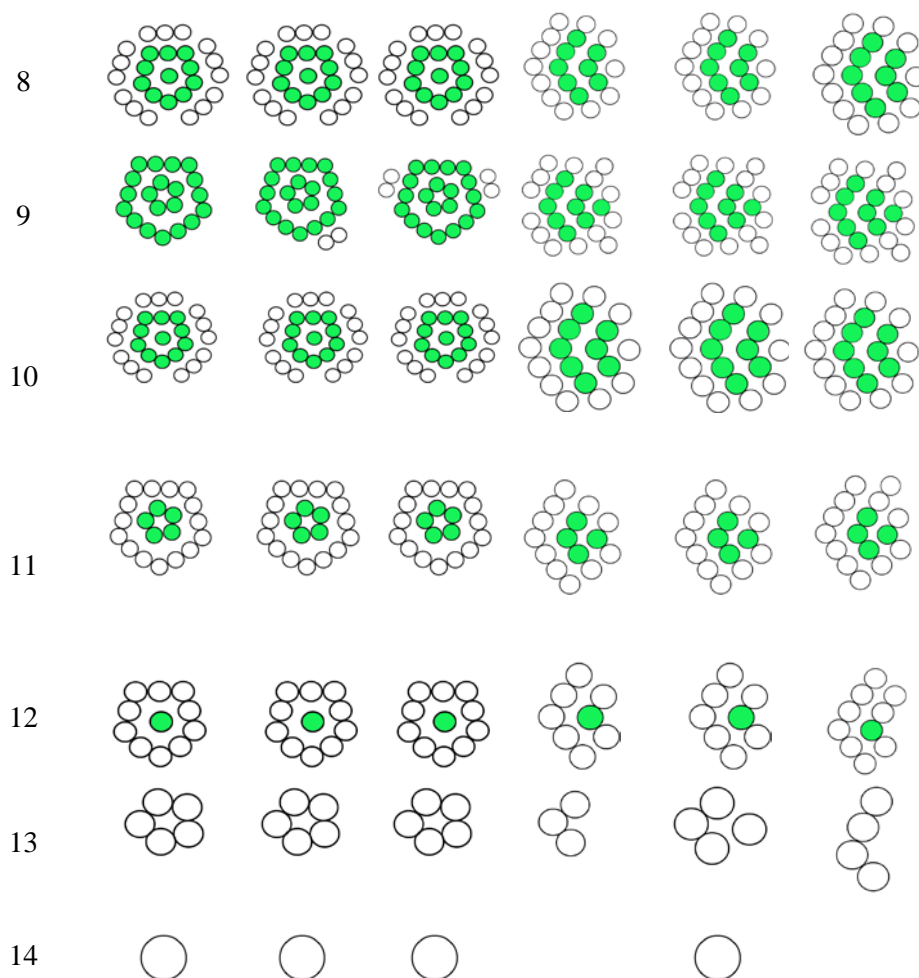
кластеров наиболее важными факторами являются: сферичность формы конформации и достижимость как можно более плотной «упаковки» атомов.

Для «жестких» шаров наиболее плотная упаковка получается для гранцентрированной кубической решётки. В этом случае шары заполняют чуть больше 74% объёма пространства [14]. В то же время для «мягких» атомов кластера Морса, когда атомы могут частично «вминаться» друг в друга, более плотные упаковки формируются для икосаэдрических и додекаэдрических сеток [3, 11, 15, 16]. В работе [17] по результатам анализа глобально-оптимальных конформаций кластеров Морса для  $\rho=14$ , представленных в базе данных [9], было показано, что всегда можно найти такое положение оси, например  $z$ , когда атомы кластера будут располагаться слоями, образуя нечеткую слоистую структуру (таблица 1). Под «нечетким» слоем в данном случае понимается расположение группы атомов (шаров) таким образом, чтобы их центры находились не на плоскости, а в достаточно «тонком» слое  $z_j \pm \Delta z_j$ . Из таблицы видно, что конформации кластеров следующего поколения «наследуют» геометрию своих предшественников. Так ядра кластеров  $N=196$  и  $N=200$  (как, впрочем, и для остальных кластеров с числом атомов от 193 до 199) совпадают с ядром симметричного икосаэдра  $N=192$ . Изменения происходят только на внешних оболочках кластеров.

Однако в определенные моменты происходят качественные изменения геометрической структуры глобально-оптимальных конформаций. В таблице 1 показано, что для  $N=201$  оптимальной становится смещенная икосаэдрическая структура, в работе [9] такая структура называется плотно упакованной (close-packed). Тем не менее, и здесь наблюдается наследование родительских свойств у потомков с большим числом атомов.

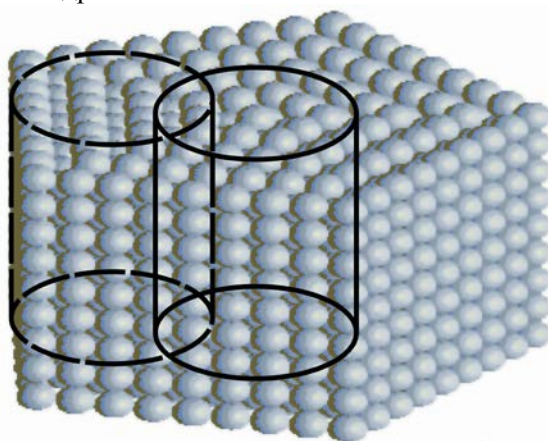
**Таблица 1.** Слои глобально-оптимальных кластеров Морса  $\rho = 14$ .

Слой	$N=192$	$N=196$	$N=200$	$N=201$	$N=203$	$N=209$
1						
2						
3						
4						
5						
6						
7						



В отдельных случаях встречается еще один вид перерождения конформации кластера, когда все атомы располагаются в узлах гранецентрированной сетки. Последнее справедливо, например, для кластеров с  $N=38, 39, 40$  и  $N=223, 234, 235$ .

Анализ опубликованных глобально-оптимальных конформаций атомных кластеров Морса [9] показал, что выбор оптимальных расположений атомов кластера происходит из ограниченной области компактного расположения атомов икосаэдрической решетки (рисунок 1). Причем часть атомов, образующих группу (ядро кластера), содержится во всех глобально-оптимальных кластерах икосаэдрического типа.



**Рисунок 1.** Икосаэдрическая решётка.

Для сужения области поиска начальных конформаций кластера предлагается выделять группу атомов, «вырезая» их из икосаэдрической решетки правильными геометрическими фигурами, например, цилиндром. Размеры цилиндра несложно предсказать, зная размер формируемого кластера. Здесь важно, что бы в размеры цилиндра помещалось достаточное количество атомов с небольшим запасом. Тогда для икосаэдрических кластеров ось цилиндра следует совмещать с осью икосаэдрической сетки, а для плотно упакованных кластеров ось цилиндра смещается (рисунок 1).

Введем множество  $X_{seq} = \{X_1, X_2, \dots, X_M\}$  – подмножество икосаэдрической сетки, на котором ищется глобально-оптимальная конформация кластера. Пусть  $X_{cor} = \{\tilde{X}_{i_1}, \tilde{X}_{i_2}, \dots, \tilde{X}_{i_L}\}$  – ядро кластера, т.е. группа атомов, безусловно входящих в глобально-оптимальную конформацию ( $\forall k \tilde{X}_k \in X_{set} \ k=1, \dots, M$ ).

Определим подмножество множества  $X_{seq}$  свободных вершин  $X_{var} = X_{seq} \setminus X_{cor}$ , на котором ищется оптимальная конформация ( $X_{seq}$  – её неизменная часть). Для  $X_{seq}$  сформируем граф  $G$ , учитывающий связность атомов между собой. Это можно сделать, построив матрицу инцидентности графа  $G$  следующим образом:

$$A_{seq} = \|a_{ij}\| \quad i, j = 1, \dots, M; \quad a_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{если } \|X_i - X_j\| \leq r_{min}, \\ 0 & \text{иначе} \end{cases} \quad (3)$$

где  $r_{min}$  - минимальное расстояние между атомами, которое фиксирует их связь. Матрица инцидентности (3) фактически определяет граф поиска  $G(X_{seq}, U, A_{seq})$ . Введем подграф  $H(X', U', A') \subset G$  графа  $G$ . Причем  $|X'| = N$ , т.е. количество вершин графа равно размеру оптимизируемой конформации.

Очевидно, что на множестве  $X_{seq}$  таких графов будет большое, но перечислимое количество. Обозначим их  $H_\alpha \subset G$ . Определим функцию выбора рационального подграфа  $\varphi(H_\alpha)$ , определяющую полезность данной конфигурации кластера (подграфа). В качестве такой функции можно использовать потенциальную энергию парных взаимодействий атомов (2) или сумму степеней вершин подграфа

$$\varphi_1(H_\alpha) = \sum_{X'_i \in X'} \text{deg}(X'_i). \quad (4)$$

Тогда задачу структурной оптимизации можно поставить следующим образом:

$$\begin{cases} \min(\max) & \varphi(H_\alpha) \\ H_\alpha \subset G \\ |X'| = N \end{cases} \quad (5)$$

Задача (5) относится к категории задач глобальной оптимизации, однако имеет меньшую сложность по сравнению с задачей ГО функции (2), поскольку она содержит меньшее количество оптимизируемых параметров (пропорциональное  $|X_{var}|$ ) и является задачей дискретной, а не параметрической оптимизации. В принципе задачу (5) для небольших размеров кластеров можно решить, используя переборные алгоритмы.

### 3. Стохастический алгоритм построения начальных конформаций кластеров Морса

Идея предлагаемого алгоритма (таблица 2) достаточно проста и в некотором виде была реализована в детерминированном эвристическом алгоритме (ДЭА), описанном в работе [18]. Оптимальная конформация кластера строится путем последовательного прикрепления атомов на рациональные позиции к предшествующей конфигурации кластера. Однако имеются существенные отличия между ДЭА и предлагаемым подходом. В новом варианте атомы размещаются на местах не произвольно, в зависимости от геометрической конфигурации

кластера, а на заранее известных местах икосаэдрической решетки, гарантирующей плотную упаковку атомов кластера Морса. При этом ядро кластера, т.е. группе атомов содержащихся во всех глобально-оптимальных конформациях некоторого ряда размеров, служит своеобразной «закваской» конформации. С учетом геометрических связей, описанных в графе  $G$ , ядро определяет облик рациональной конформации, а задача (5) становится оптимизационной задачей на графах, которая допускает алгоритмы полиномиальной сложности. Рассмотрим подробнее.

Поскольку «закваска» во многом определяет «облик» рациональной конфигурации кластера, введем некоторое множество вершин из  $X_{var}$ , разыгрываемых случайным образом. Пусть  $X_{rnd} = \{X_1, X_2, \dots, X_r\}$   $X_{rnd} \subset X_{var}$ . Положим

$$X_{var}^{(1)} = X_{var}^{(0)} \setminus X_{rnd}, \tag{6}$$

$$X_{cor}^{(1)} = X_{cor}^{(0)} \cup X_{rnd}, \tag{7}$$

где  $X_{var}^{(0)} = X_{var}$ ,  $X_{cor}^{(0)} = X_{cor}$ .

Критерий  $\varphi_1(H_\alpha)$  (4) оказывается полезным на начальном этапе работы алгоритма, для формирования области выбора наиболее «удачного» атома для его включение в состав кластера. Суммарная степень подграфа определяет количество коротких связей между атомами, и чем больше  $\varphi_1(H_\alpha)$ , тем больше потенциальная энергия связи атомов. Естественно выбирать конформацию кластера среди вариантов с наибольшими значениями этого критерия. Вычислить критерий  $\varphi_1(H_\alpha)$  несложно с помощью построенной матрицы инцидентности  $A_{seq}$ .

**Таблица 2.** Алгоритм структурной оптимизации кластера.

*Шаг 1.* Предварительные операции:

- Вычисление матрицы инцидентности  $A_{seq}$ ;
- Розыгрыш элементов множества  $X_{rnd}$ ;
- Начальные установки:  $X_{var}^{(1)} = X_{var}^{(0)} \setminus X_{rnd}$  и  $X_{cor}^{(1)} = X_{cor}^{(0)} \cup X_{rnd}$ .

*Шаг 2.* Для каждого атома  $X_{var}^j \in X_{var}$  с помощью матрицы  $A_{seq}$  вычисляется значение критерия  $z_j = \varphi_1(X_{var}^j)$ . Множество атомов  $X_{var}$  упорядочивается по значению критерия  $z_j$  в порядке убывания  $\{z'_1, \dots, z'_{m_{var}}\} = sort(\{z_1, \dots, z_{m_{var}}\})$

*Шаг 3.* Рассматривается подмножество  $X_{opt} = \{X_{var}^j \mid z_j = z'_1\}$  множества  $X_{var}$ , образующее перспективные конформации, если соответствующий атом добавить к ядру кластера  $X_{cor}^{(1)}$ . Если  $|X_{opt}| = 1$ , то множество  $X_{opt}$  расширяется элементами  $X_{opt} = \{X_{var}^j \mid z_j = z'_2\}$ .

*Шаг 4.* Для каждого атома  $X_{opt}^j$  множества  $X_{opt}$  вычисляются значения потенциальных энергий кластеров  $X_j^* = X_{opt}^j \cup X_{cor}$  ( $X_j^* \in X_{opt}$ ):  $v(X_j^*)$ . Кроме того, для каждого атома вычисляется возможный потенциальный «вклад» атома с учетом его коротких связей на множестве  $X_{seq}$ :  $v_2(X_j^*) = \frac{1}{2} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^M v(r_{ji})$ .

*Шаг 5.* Для выбора рационального атома из множества  $X_{opt}$  формируется векторная целевая функция с двумя компонентами  $y_j = (v(X_j^*), v_2(X_j^*))$ . Здесь первая компонента вектора  $y_j$  непосредственно оценивает эффективность кластера с присоединённой вершиной  $X_j^*$ . Чем меньше  $v(X_j^*)$ , тем лучше. Однако часто выгоднее присоединять не лучшую вершину текущей итерации, а вершину с большим количеством связей со свободными вершинами в надежде получить большую выгоду в будущем. Для этого используется показатель  $v_2(X_j^*)$ .

*Шаг 6.* На множестве  $X_{opt}$  строится парето-оптимальное множество [20]  $X_{par} \subset X_{opt}$ . Если  $|X_{par}|=1$ , то это и есть искомым «рациональный» атом  $X^* = X_{par}^1$ . Если нет, то решение  $X^*$  выбирается случайным образом из элементов множества  $X_{par}$ .

*Шаг 7.* Ядро кластера расширяется на один атом:  $X_{cor}^{(k)} = X_{cor}^{(k-1)} \cup X^*$  и одновременно сокращается множество  $X_{var}^{(k)} = X_{var}^{(k-1)} \setminus X^*$ .

*Шаг 8.* Если  $|X_{cor}^{(k)}| < N$ , то перейти к следующей итерации (шагу 2), иначе завершить построение оптимальной конформации.

Поиск глобально-оптимальной конформации в предлагаемом подходе реализуется за счет случайного перебора компонент множества  $X_{rnd}$ , определяющего геометрический облик начальной оптимальной конформации кластера Морса, достраиваемой до нужного размера алгоритмом структурной оптимизации кластера.

Алгоритм структурной оптимизации кластера, описанный выше, имеет полиномиальную сложность, которую можно оценить величиной порядка  $O(N) \approx \frac{1}{4}(N-L-r-1)^2 \approx N^2$ . Стохастический алгоритм формирования множества  $X_{rnd}$  методом Монте-Карло имеет большую сложность. При полном переборе мы имеем экспоненциальную сложность  $O_1(N) \approx \frac{(M-L-r)!}{(r)!(M-L)!}$ . Однако вероятность случайного выбора комбинации атомов, принадлежащих глобально-оптимальной конформации, не так уж мала

$$Pr(N) = \sum_{j=0}^r \frac{N-L+j}{M-L-j}. \tag{8}$$

И в процессе случайного поиска глобально оптимальной конформации кластера Морса стохастического алгоритма совместно с алгоритмом структурной оптимизации можно ожидать сравнительно быстрого результата. Во всяком случае, алгоритм стохастической оптимизации легко распараллеливается.

Предлагаемые алгоритмы стохастической и структурной оптимизации совместными усилиями позволяют сформировать геометрический «облик» начальной конформации кластера Морса. Полученная заготовка в дальнейшем обрабатывается методами локальной оптимизации, и, как результат, мы получаем окончательный вариант кластера Морса. Данная стратегия, получившая название *локальной техники*, уже давно плодотворно используется во многих алгоритмах глобальной оптимизации, включая и точные методы [19] и методы оптимизации структур кластеров Морса.

#### 4. Вычислительные эксперименты

Работоспособность предлагаемого метода поиска глобально-оптимальных конформаций атомных кластеров Морса для наиболее сложного случая  $\rho=14$  была проверена на известных из базы данных [11] кластерах больших размеров  $N=210$  и  $211$ . Предлагаемые алгоритмы нашли глобально-оптимальные конформации с кодами  $210K$  и  $211G$ , соответственно с потенциальными энергиями связи  $v_{210K} = -994.8091$  и  $v_{211G} = -1000.7765$ . Для группы кластеров  $N=211$  нашли свое подтверждение кластеры со значениями потенциальных энергий близкими к оптимальному  $v_{211F} = -1000.7757$  и  $v_{211H} = -999.6763$ , но были найдены конформации, не опубликованные в БД, имеющие уровни потенциальной энергии, сравнимые с оптимальными значениями  $v_{211-I} = -998.8049$  и  $v_{211-II} = -997.8472$ . В ходе экспериментов было замечено, что предлагаемый метод формирования глобально-оптимальных конформаций атомных кластеров Морса порождает большое количество геометрических структур, сравнимых по эффективности с глобально-оптимальным вариантом.

#### 5. Заключение

В данной работе представлен новый метод формирования начальных приближений атомных кластеров Морса в наиболее сложном случае, когда  $\rho=14$ . В предложенном подходе используются классические идеи метода Монте-Карло, к которому часто прибегают для разрешения проблемы роста сложности задачи. Однако в данном случае значительное количество проблем, связанных со сложностью решаемой задачи, снимается с помощью предложенного алгоритма структурной оптимизации кластера. Нужно отметить, что при формировании глобально-оптимальных кластеров Морса размеров  $N=210$  и  $211$  мощности современного персонального компьютера оказались достаточными для решения поставленных задач.

#### 6. Благодарности

Работа выполнена при государственной поддержке Министерства образования и науки РФ в рамках реализации мероприятия Программы повышения конкурентоспособности СГАУ среди ведущих мировых научно-образовательных центров на 2013-2020 годы, также гранта РФФИ №16-41-630637.

#### 7. Литература

- [1] Stillinger, F. Exponential multiplicity of inherent structures / F. Stillinger // *Phys. Rev. E.* – 1999. – Vol. 59. – P. 48-51.
- [2] Morse, P. Diatomic molecules according to the wave mechanics. ii. vibrational levels / P. Morse // *Phys. Rev.* – 1929. – Vol. 34. – P. 57-64.
- [3] Doye, J.P.K. Structural consequences of the range of the interatomic potential: a menagerie of clusters Unabridged version of this paper: html, postscript, gzipped postscript / J.P.K. Doye, D.J. Wales // *J. Chem. Soc., Faraday Trans.* – 1997. – Vol. 93. – P. 4233-4244.
- [4] Heiles, S. Global optimization of clusters using electronic structure methods / S. Heiles, R.L. Johnston // *Quantum Chemistry.* – 2013. – Vol. 113. – P. 2091-2109.
- [5] Locatelli, M. *Global Optimization: Theory, Algorithms and Applications* / M. Locatelli, F. Schoen. – SIAM, 2013. – 433 p.
- [6] Grosso, A. Global optimization of binary Lennard-Jones clusters / A. Grosso, F. Schoen // *Optimization Methods and Software.* – 2009. – Vol. 24(4-5). – P. 819-835.
- [7] Wille, L.T. Computational complexity of the ground-state determination of atomic clusters / L.T. Wille, J. Vennik // *J. Phys. A: Math. Gen.* – 1985. – Vol. 18. – P. 419-422.
- [8] Коварцев, А.Н. К вопросу об эффективности параллельных алгоритмов глобальной оптимизации функций многих переменных / А.Н. Коварцев, Д.А. Попова-Коварцева // *Компьютерная оптика.* – 2011. - Т. 35, №2. – С.256-261.



- [9] Table of the global minima of Morse clusters for  $N = 81 - 240$  [Electronic resource]. – URL: <http://staff.ustc.edu.cn/~clj/morse/table.html>. (date of the application: 07.10.2016)
- [10] Ren, L. Structural prediction of  $(Au)_{20} N$  ( $N=240$ ) clusters and their building-up principle / L. Ren, L. Cheng // *Computational and Theoretical Chemistry*. – 2012. – Vol. 984. – P. 142-147.
- [11] Cheng, L. Funnel hopping: searching the cluster potential energy surface over the funnels / L. Cheng, Y. Feng, J. Yang, J. Yang // *Journal of Chemical Physics*. – 2009. – Vol. 130(21). – P. 214112.
- [12] Shao, N. Probing the structural evolution of medium-sized gold clusters:  $Au_n$ - ( $n = 27-35$ ) / N. Shao, W. Huang, Y. Gao, L.M. Wang, X. Li, L.S. Wang, X.C. Zeng // *Journal of the American Chemical Society*. – 2010. – Vol. 132(18). – P. 6596-6605.
- [13] Бери, Р.С. Конкуренция кубической гранецентрированной и икосаэдральной кластерных структур / Р.С. Берри, Б.М. Смирнов, А.Ю. Стрижев // *ЖЭТФ*. – 1997. – Т. 112, № 3. – С. 1082–1090.
- [14] Hales, T.C. A proof of the Kepler conjecture / T.C. Hales // *Annals of Mathematics*. – 2005. – Vol. 162. – P.1065-1185.
- [15] Pullan, W. Unbiased Geometry Optimisation of Morse Atomic Clusters / W. Pullan // *WCCI 2010 IEEE World Congress on Computational Intelligence, Barcelona, Spain, 2010*. – P. 4496-4502.
- [16] Berry, R.S. Competition between face-centered cubic and icosahedral cluster structures / R.S. Berry, B.M. Smirnov, A.Y. Strizhev // *Zh. Т.* – 1997. – Vol. 112, № 3. – P 1082-1090.
- [17] Коварцев, А.Н. Геометрически обоснованный метод формирования атомных кластеров Морса больших размеров / А.Н. Коварцев // *Компьютерная оптика*. – 2017. – Т. 41, № 1. – С. 118-125. DOI: 10.18287/2412-6179-2017-41-1-118-125.
- [18] Коварцев, А.Н. Эволюционный детерминированный алгоритм глобальной оптимизации атомных кластеров Морса / А.Н. Коварцев // *Компьютерная оптика*. – 2015. – Т. 39, № 2. – С. 234-240.
- [19] Коварцев, А.Н. Исследование эффективности глобальной параллельной оптимизации функций многих переменных / А.Н. Коварцев, Д.А. Попова-Коварцева, П.В. Аболмасов // *Вестник ННГУ*. – 2013. – Т. 3, № 1. – С. 252-261.

# Rules for the formation of initial approximations of the conformation of Morse atomic clusters on the basis of a geometrically grounded method

A.N. Kovarcev<sup>1</sup>, G.P. Klimashova<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Samara National Research University, Moskovskoe Shosse 34A, Samara, Russia, 443086

**Abstract.** The paper presents a new method for the formation of initial approximations of Morse atomic clusters for the most complicated case, when the cluster stiffness is 14. The formulation of the problem of structural optimization of conformations of Morse atomic clusters is formulated. An algorithm for the structural optimization of the Morse atomic cluster is developed, which significantly reduces the algorithmic complexity of the problem being solved.

**Keywords:** Atomic and molecular physics, global geometric optimization, Morse clusters.