



Г.П. Климашова, А.Н. Коварцев

## ПРИМЕНЕНИЕ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ ПРИ ФОРМИРОВАНИИ НАЧАЛЬНЫХ ПРИБЛИЖЕНИЙ КОНФОРМАЦИЙ АТОМОВ КЛАСТЕРОВ МОРСА НА ОСНОВЕ ГЕОМЕТРИЧЕСКИ ОБОСНОВАННОГО МЕТОДА

(Самарский университет)

### Аннотация

Рассматривается задача формирования начальных приближений конформаций атомов кластеров Морса на основе геометрически обоснованного метода.

### Введение

Кластеры – это система, состоящая из конечного числа одинаковых частиц (атомов, молекул, ионов), обычно связанных [1]. Изучение кластеров имеет важнейшее значение для различных областей человеческой деятельности. Данные, полученные в ходе исследований кластеров, применяются в медицине, в металлургии (при моделировании металлов), используются для понимания процессов катализа, сворачивания белка, конденсации паров воды в облаках, а также при расчёте электронных и динамических характеристик наноматериалов, создании новых источников света и т.д. Основной задачей данного направления является обнаружение такой геометрической структуры атомного кластера (конформации), которая соответствует минимуму энергии взаимодействия входящих в него атомов [2].

Одной из наиболее используемых моделей является так называемый «кластер Морса». Эта модель позволяет описывать различные конфигурации металлических кластеров и находить среди них оптимальные, имеющие минимальную потенциальную энергию межатомных связей.

Известны две основные группы методов для нахождения минимума энергии кластеров. К первой относятся подходы, не использующие свойства, специфичные для данной задачи, т. е. неспециализированные методы оптимизации. Во вторую категорию входят методы, использующие специфику задачи. Эти методы основаны на общих геометрических закономерностях, наблюдаемых для конформаций с минимальной энергией. Предполагаемые глобальные минимумы зарегистрированы в Кэмбриджской базе данных (БД) (The Cambridge Energy Landscape Database) [3], как благодаря применению адаптированных алгоритмов глобальной оптимизации, так и генерации исходных конформаций-кандидатов на основании имеющихся представлений о структурных свойствах кластеров.

### Постановка задачи

Для кластеров Морса учитывается только парное взаимодействие атомов кластера, которое описывается потенциальной функцией:

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



где  $r_{ij}$  – расстояние между атомами  $i$  и  $j$ ;  $\rho$  – параметр (иногда называемый «коэффициентом жесткости»), характеризующий взаимодействие атомов в кластере Морса, который позволяет моделировать различные вещества. Обычно  $\rho$  принадлежит диапазону от 3 до 14. Данная работа посвящено кластерам, обладающим  $\rho = 14$ .

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

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

где  $X = (x_1, \dots, x_N)$ ,  $x_i \in \mathbb{R}^3$  – координаты центров атомов кластера [2].

Как видно из рисунка 1 функции резко растут при приближении расстояния между атомами к нулю, имеют единственную точку минимума и асимптотически стремятся к нулю при стремлении к бесконечности расстояния между парами атомов. Функции зависят от расстояния между парами атомов и не являются выпуклыми; результирующая целевая функция, полученная при суммировании вклада энергий парных взаимодействий, также представляет собой не выпуклую мультимодальную функцию пространственных координат  $N$  атомов. Таким образом, проблема поиска оптимальных конформаций атомных кластеров изящным образом свелась к задаче глобальной оптимизации потенциальной функции (2).

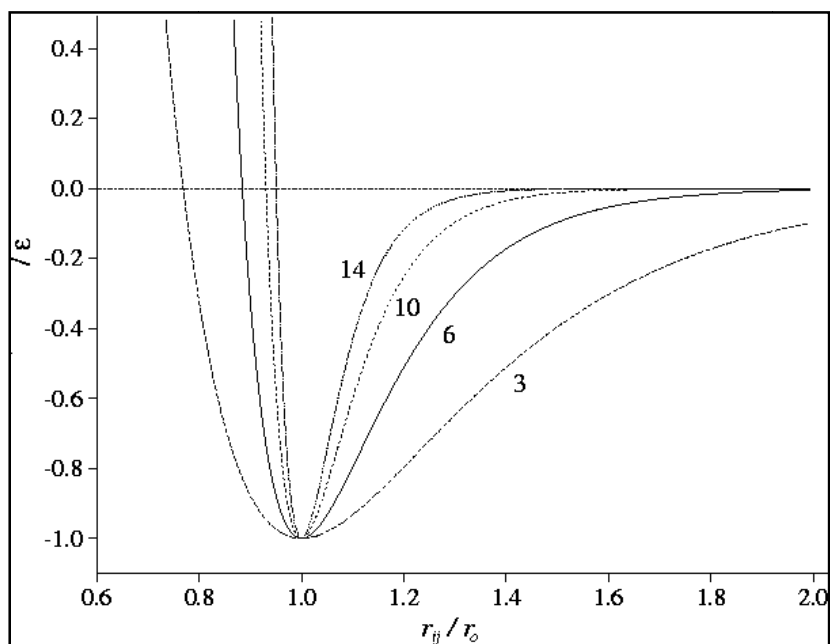


Рисунок 1 – Потенциал Морса парного взаимодействия при различных значениях  $\rho$



Следует отметить, что целевая функция задачи (2) зависит от большого количества оптимизируемых переменных и имеет множество экстремумов. Всё это, в совокупности, делает невозможным использование прямых методов глобальной оптимизации и требует разработки различных эвристик. Одним из таких алгоритмов является геометрически-обоснованный метод формирования начальной конфигурации полной икосаэдрической структуры атомного кластера. Основу метода составляет алгоритм размещения центров атомов при формировании структурных конфигураций любых размерностей, предложенный на кафедре программных систем факультета информатики, математики и электроники Самарского университета профессором Коварцевым А.Н.

Таким образом, основная задача разрабатываемого программного комплекса – построение кластеров на основе исходных файлов из Кэмбриджской БД и нахождение потенциальной энергии исследуемого кластера для сравнения с «эталоном» – значением, приведенным в указанной БД.

### Литература

- 1 Смирнов, Б.М. Кластеры и фазовые переходы / Б.М. Смирнов // Успехи физических наук. – 2007. – Т. 177, №4, – С. 369-373.
- 2 Коварцев, А.Н. Геометрически-обоснованный метод формирования атомных кластеров Морса больших размерностей / А.Н.Коварцев // Компьютерная оптика. – 2016. – Т. 40, №4 – С. 234-240.
- 3 База кластеров Морса The Cambridge Cluster Database [Электронный ресурс]. URL: <http://www-wales.ch.cam.ac.uk/CCD.html> (дата обращения: 12.02.2017).

<sup>1</sup>А.Е. Акимова, <sup>2</sup>А.А. Трешников, <sup>1</sup>Л.С. Зеленко

### ИНФОРМАЦИОННАЯ СРЕДА ГЭС. ПОДСИСТЕМА РАСЧЕТА ПОКАЗАТЕЛЕЙ ЭФФЕКТИВНОСТИ РАБОТЫ ОБОРУДОВАНИЯ

<sup>1</sup> Самарский национальный исследовательский университет  
имени академика С.П. Королёва

<sup>2</sup> ООО Научно-внедренческая фирма «Сенсоры. Модули. Системы»

Бесперебойная работа оборудования промышленного предприятия – одно из важнейших условий его успешной работы. Для улучшения показателей производительности работы предприятия необходимо увеличивать основной показатель всеобщего ухода за оборудованием (ОЕЕ – Overall Equipment Effectiveness), который отражает степень эффективности его использования. Для вычисления ОЕЕ требуется принимать в расчет качество продукции, производительность и готовность оборудования.

В настоящее время на Саяно-Шушенской гидроэлектростанции (ГЭС) функционирует комплексная система автоматизации, решающая различные за-