

## ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ И АЛГОРИТМЫ

### ЭВОЛЮЦИОННЫЙ ДЕТЕРМИНИРОВАННЫЙ АЛГОРИТМ ГЛОБАЛЬНОЙ ОПТИМИЗАЦИИ АТОМНЫХ КЛАСТЕРОВ МОРСА

Коварцев А.Н.

Самарский государственный аэрокосмический университет имени академика С.П. Королёва (национальный исследовательский университет) (СГАУ)

#### Аннотация

В статье предлагается новый эволюционный детерминированный алгоритм глобальной оптимизации геометрических структур кластеров Морса. Эвристики, используемые в алгоритме, основанные на специфических особенностях решаемой задачи, позволили обеспечить ему полиномиальную сложность. Приводятся результаты вычислительных экспериментов, подтверждающие эффективность предложенного подхода при решении задачи поиска атомных кластеров Морса с минимальной энергией.

**Ключевые слова:** кластеры Морса, потенциальная функция Морса, геометрические структуры, глобальная оптимизация, популяция конформаций.

#### Введение

Информация о структурном устройстве атомных кластеров имеет большое значение в различных областях человеческой деятельности, например, при моделировании металлов (золото, никель), изучении проблемы сворачивания белка, понимании процессов конденсации паров воды в облаках, расчёте электронных и динамических характеристик наноматериалов, создании новых источников света и во многих других областях. Основной задачей данного направления является обнаружение такой геометрической структуры атомного кластера, иными словами, *конформации* кластера, которая соответствует минимуму энергии взаимодействия входящих в него атомов.

Обычно учитывается только парное взаимодействие атомов кластера, которое для кластеров Морса описывается потенциальной функцией

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

где  $r_{ij}$  – расстояние между атомами  $i$  и  $j$ ;  $\rho$  – радиус взаимодействия атомов в кластере Морса, который позволяет моделировать различные вещества. Обычно  $\rho$  принадлежит диапазону от 3 до 14.

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

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

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

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 решётки расположения атомов в конформации тяготеют к симметричной сферической форме [1]. Использование этой информации привело к созданию геометри-

чески обоснованных методов глобальной оптимизации кластеров Морса.

Следует отметить, что в этой области результатами оказались только эвристические методы, использующие специфику задачи, поскольку использование прямых методов глобальной оптимизации (ГО), гарантирующих глобальную оптимальность, не дало результатов для кластеров с числом атомов больше 8 (24 оптимизируемых переменных, т. к. в оптимизации используются все координаты расположения атомов в кластере). И это неудивительно, поскольку прямые методы глобальной оптимизации при общих стандартных предположениях относительно свойств оптимизируемой функции имеют экспоненциальный рост сложности в зависимости от размерности оптимизационной задачи [2]. Удивительным можно считать тот факт, что эвристические методы позволили обнаружить глобальные минимумы функции (2) для кластеров размерности 160 и более атомов (440 и более переменных) [1].

Начало систематическим исследованиям в этой области положила работа [3], в которой был предложен локально-стохастический «basin-hopping» метод (ВН) поиска конформации с минимальной энергией. Основную идею метода составляет представление о том, что для потенциальной функции (2) локальные экстремумы группируются в ограниченное число так называемых «бассейнов», в каждом из которых «воронки» локальных минимумов расположены настолько близко друг к другу, что за счёт случайных возмущений координат атомов кластера возможен постепенный переход от локальных экстремумов к глобальному. При этом для определения локального экстремума в каждой из «воронок» использовались локальные методы непрерывной оптимизации. В результате была создана база данных [4] оптимальных кластеров Морса для числа атомов от  $N=5$  до  $N=80$  при  $\rho = 3, 6, 10, 14$ .

Развитие метода ВН можно найти в работе [5]. В ней представлена реализация распределённого модифицированного варианта метода MSBH, предназна-

ченного для решения задач конечномерной оптимизации в среде параллельных и распределённых вычислений. Дальнейшее совершенствование методов глобальной оптимизации кластеров Морса связано с развитием методов организации случайных возмущений их атомарных структур. Так, например, в работе [6] на этапе генерации возмущённого положения координат атомов кластера используется методология генетических алгоритмов, приспособленная к данному случаю за счёт введения специфических операций направленной мутации и кроссовера. Интересный вариант использования эвристик алгоритма «муравьиной тропы» приводится в работе [7].

В данной статье рассматривается эволюционный детерминированный алгоритм глобальной оптимизации конформаций кластеров Морса, отличающийся более высокой вероятностью нахождения именно глобальных минимумов функции (2), существенно расширяющий список конформаций, близких к глобальным минимумам базы данных Кембриджского университета [4].

### 1. Идея алгоритма

Если рассмотреть весь перечень алгоритмов, используемых для оптимизации структур кластеров Морса, то нетрудно увидеть общую черту, свойственную им. Какими бы способами ни было в них реализовано формирование начальной конфигурации кластера Морса, в конечном итоге эта конфигурация улучшается с помощью локальных алгоритмов непрерывной оптимизации. Данная стратегия, получившая название *локальной техники*, уже давно повторно используется во многих алгоритмах глобальной оптимизации, включая и точные методы [8].

В прямых (точных) методах глобальной оптимизации исследователь сталкивается с проблемой экспоненциального роста сложности задачи оптимизации в зависимости от числа оптимизируемых переменных. Включение в общий алгоритм оптимизации локальных методов оптимизации, имеющих полиномиальную сложность, часто позволяет существенно снизить общую трудоёмкость решаемой задачи [2, 8].

Для задачи оптимизации кластеров Морса можно предложить двухэтапный алгоритм ГО, в котором на первом этапе формируются эффективные начальные приближения, а на втором этапе с помощью непрерывных методов локальной оптимизации находятся точные решения, содержащие и глобальный экстремум. Если при этом допустить, что существует алгоритм полиномиальной сложности для подбора начальных приближений, то общая сложность алгоритма ГО кластеров Морса может приблизиться к полиномиальной.

Пусть

$$X_1^{(N)}, X_2^{(N)}, \dots, X_k^{(N)}, \dots \quad (3)$$

конформации кластеров Морса из  $N$  атомов, упорядоченные по мере возрастания потенциальной энергии (2)

$$v(X_1^{(N)}) \leq v(X_2^{(N)}) \leq \dots \leq v(X_k^{(N)}) \leq \dots$$

В данном случае  $X_1^{(N)}$  – наилучшая конформация из  $N$  атомов. Очевидно, что присоединение к каждой из конформаций ещё одного атома в определённом месте кластера в итоге породит кластер Морса наименьшей потенциальной энергии, состоящий из  $N+1$  атомов. Тогда эволюционно, шаг за шагом можно построить оптимальные кластеры Морса для любого количества атомов. Конечно, здесь, как указывается во многих работах [1, 3, 6, 7], мы сталкиваемся с очень большим количеством кластеров-прототипов, один из которых формирует оптимальный кластер. Однако, как это будет показано далее, разумные эвристики позволяют существенно сократить количество просматриваемых претендентов.

### 2. Алгоритм развития кластера

Одна из эвристик предлагаемого метода заключается в том, что построение расширенной конформации кластера можно представить как процесс присоединения очередного атома  $x_{N+1}$  к конформации  $X^{(N)}$  на её внешней стороне. Очевидно, что новый атом «примкнёт» к «содружеству» из трёх атомов (шаров), близко расположенных друг к другу. В этом случае нетрудоёмкий алгоритм плотной упаковки четырёх шаров, включая новый атом, существенно упрощает процедуру формирования нового кластера.

Задачу плотной упаковки 4 шаров радиуса  $R$  рассмотрим в следующем виде. Пусть задана некоторая конфигурация из трёх шаров. Положения шаров описываются векторами  $x_1, x_2, x_3$ .

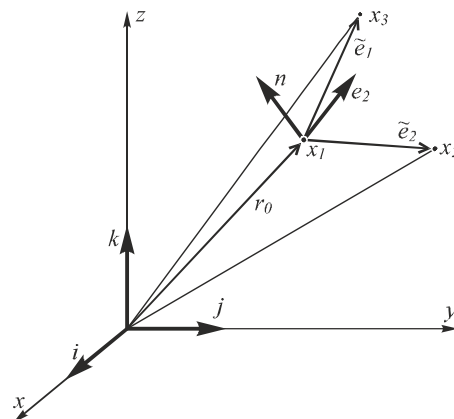


Рис. 1. Преобразование системы координат

Построим декартову систему координат в плоскости исходных шаров с центром в точке  $x_1$ . Для этого введём вектора  $\tilde{e}_1 = x_2 - x_1, \tilde{e}_2 = x_3 - x_1$  и нормальный к ним вектор  $\tilde{n} = [\tilde{e}_1, \tilde{e}_2]$ . Нормализуем  $\tilde{e}_1$  и  $\tilde{n}$ :  $e_1 = \tilde{e}_1 / |\tilde{e}_1|, n = \tilde{n} / |\tilde{n}|$ . Построим вектор, перпендикулярный к  $\tilde{e}_1$  и  $\tilde{n}$ :

$$e_2 = \begin{vmatrix} i & j & k \\ e_1^x & e_1^y & e_1^z \\ n_x & n_y & n_z \end{vmatrix}$$

Тогда матрица преобразования системы координат примет вид:

$$S = \begin{pmatrix} e_1^x & e_2^x & n_x \\ e_1^y & e_2^y & n_y \\ e_1^z & e_2^z & n_z \end{pmatrix}.$$

Найдём расположение шаров в новой системе координат:

$$\begin{cases} \tilde{x}_1 = S^{-1}(x_1 - r_0), \\ \tilde{x}_2 = S^{-1}(x_2 - r_0), \\ \tilde{x}_3 = S^{-1}(x_3 - r_0). \end{cases} \quad (4)$$

По построению новые координаты шаров (4) расположены в плоскости. Если положить  $r_0 = x_1$ , то их координаты можно представить в виде

$$\begin{cases} \tilde{x}_1 = (0, 0, 0), \\ \tilde{x}_2 = (a, b, 0), \\ \tilde{x}_3 = (c, d, 0). \end{cases}$$

Определим координаты точки, равноудалённой от центров трёх шаров (см. рис. 2).

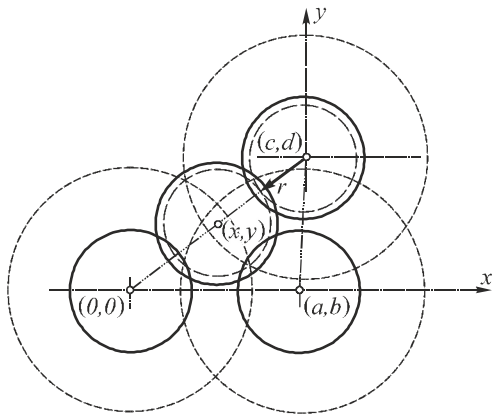


Рис. 2. Плотная упаковка шаров

Решение найдём из системы уравнений:

$$\begin{cases} x^2 + y^2 = (x - a)^2 + (y - b)^2, \\ x^2 + y^2 = (x - c)^2 + (y - d)^2. \end{cases}$$

В результате получим координаты 4-го шара в плоскости расположения исходных шаров:

$$\begin{cases} x = \frac{b(c^2 + d^2) - d(a^2 + b^2)}{2(ad - bc)}, \\ y = -\frac{a(c^2 + d^2) - c(a^2 + b^2)}{2(ad - bc)}. \end{cases}$$

Для нахождения третьей координаты «присоединяемого» шара  $z$  определим радиус сечения 4-го шара в точке касания других шаров:

$$r = \sqrt{(x - c)^2 + (y - d)^2} / 2.$$

Откуда получим:  $z_{1,2} = \pm 2\sqrt{R^2 - r^2}$  и два набора координат четвёртого шара (сверху и снизу плоско-

сти расположения исходных шаров):  $\tilde{x}_1^* = (x, y, z_1)'$ ,  $\tilde{x}_2^* = (x, y, z_2)'$ .

Обратный переход реализуется преобразованием:

$$\begin{cases} x_1^* = S\tilde{x}_1^* + r_0, \\ x_2^* = S\tilde{x}_2^* + r_0. \end{cases} \quad (5)$$

Из двух вариантов присоединения нового атома (5) выбирается тот, который минимизирует потенциальную энергию новой конформации (2), т.е.  $x_{N+1} = \tilde{x}_1^*$  или  $\tilde{x}_2^*$ . Детерминированный алгоритм развития исходной конформации кластера можно представить следующим образом.

**Алгоритм развития кластера**

**Шаг 1.** В исходной конформации  $X^{(N)}$  выделяются все триады «соседних» атомов, лежащих на внешней стороне кластера:  $T_N = \{tr_1, tr_2, \dots, tr_m\}$ , где  $tr_j = \{x_{j1}, x_{j2}, x_{j3}\}$ ,  $x_{jk} \in X^{(N)}$ . Здесь «соседними» атомами считаются атомы, для которых расстояние между любыми двумя атомами  $r_{ij} < r_{зад}$ .

**Шаг 2.** Для каждой триады  $tr_j \in T_N$  по формулам (4)–(5) определяется положение нового атома  $x_{N+1}^{(j)}$  для  $j$ -й триады, на основе которой формируется новая конформация  $X_j^{(N+1)} = (x_1, \dots, x_N, x_{N+1}^j)'$ .

**Шаг 3.** Для каждой построенной конформации  $X_j^{(N+1)}$  с помощью алгоритма локальной оптимизации уточняется положение нового атома  $x_{N+1}^j$ :

$$\tilde{X}_j^{(N+1)} = \arg \min_{x_{N+1}^j} v(X_j^N).$$

**Шаг 4.** Список конформаций

$Kon = \{\tilde{X}_j^{(N+1)}\}$ ,  $j = 1, \dots, M$  упорядочивается в порядке увеличения значений энергетических оценок, при этом из списка исключаются конформации с оценками  $v(\tilde{X}_j^{(N+1)}) < 0$ .

**3. Сокращение популяции конформаций**

Каждый кластер из списка конформаций предшествующего уровня  $N$  (3) порождает конечное, но значительное количество конформаций  $Kon$ . Общее число конформаций, пригодных для формирования кластера Морса с наименьшей энергетической оценкой, прирастает экспоненциально, поэтому необходимы некие эвристики, ограничивающие рост популяции кластеров.

Вычислительные эксперименты показали, что по мере увеличения числа атомов рекордные конформации кластеров Морса в общем случае формируются необязательно от предшествующих рекордных конформаций. Рекордные энергетические свойства кластеров «наследуются» только для кластеров в диапазоне  $N$  от 7 до 17. Далее рекордные конформации

формируются из структур предшествующих кластеров с относительно более высокими значениями потенциальной энергии. Последнее можно объяснить постоянными изменениями типов геометрических структур кластеров, соответствующих глобальному минимуму, которые меняются от икосаэдрических к декаэдрическим и гранецентрированным кубическим [3]. Это связано с геометрическими особенностями плотной упаковки атомов в зависимости от их числа.

В вычислительных экспериментах были отслежены все предшествующие конформации для кластеров, обеспечивающих глобальный минимум для  $N=22, 21, 20$  и  $19$ . На рис. 3 показано развитие величины относительного отклонения значений потенциальных энергий  $dv_N(k) = v(X_N^{(k)}) - v_{\min}(k)$  кластеров-предков относительно рекордных значений  $v_{\min}(k)$  с достигнутыми глобальными минимумами для  $N=22, 21, 20, 19$ . Из рисунка видно, что в развитии величина  $dv_N(k)$  не превышает 3.

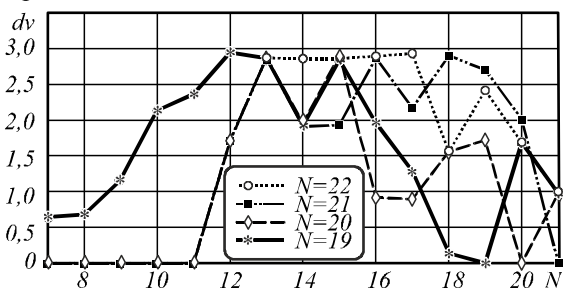


Рис. 3. Отклонения потенциалов кластеров от рекордных значений

В этом случае в качестве эвристического критерия «отбраковки» неперспективных конформаций можно использовать условие:

$$v\{\tilde{X}_j^{(N)}\} - v_{\min}(N) > 3,1, \tag{6}$$

причём в качестве глобального минимума в описываемом алгоритме использовалось текущее рекордное значение  $v_{\min}(N)$ .

Как показали эксперименты, критерий (6) на 80% сокращает популяцию конформаций  $Kon$ , тем не менее их количество остаётся достаточно большим. Популяция содержит большое количество изоморфных геометрических структур. Проверка изоморфизма таких структур невозможна из-за экспоненциальной сложности подобного рода алгоритмов. Однако структурное подобие конформаций можно косвенно оценить, если потенциальную энергию (2) распределить по атомам.

Положим

$$v_j(X) = \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^N v(r_{ij}), j = 1, \dots, N. \tag{7}$$

Для каждого кластера распределение потенциальной энергии по атомам носит индивидуальный характер. Очевидно, что для изоморфных геометрических структур распределения (7) идентичны, поэтому в качестве критерия проверки изоморфности конформаций  $i$  и  $k$  можно использовать условие:

$$\bigwedge_{j=1}^N (v_j(X_i) \approx v_j(X_k)) = 1. \tag{8}$$

В формуле (8) совпадение потенциалов атомов проверяется с точностью до 4 верных значащих цифр.

И, наконец, опытным путём было установлено, что конформации, перспективные для формирования кластеров минимальной энергии, происходят от первых трёх лучших конформаций каждого модифицируемого кластера. Данная жёсткая эвристика существенно сокращает популяцию новых конформаций.

Использование предложенных эвристик дало обнадеживающие результаты. На рис. 4 показано изменение размеров популяции кластеров в зависимости от числа атомов в кластере. Как видно из рисунка, рост популяции хорошо описывается квадратичной зависимостью, из чего можно сделать вывод, что увеличение числа начальных приближений для алгоритма ГО кластеров Морса происходит полиномиально.

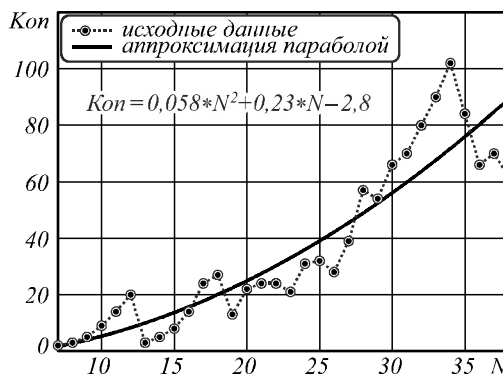


Рис. 4. Рост популяции атомных кластеров

#### 4. Алгоритм глобальной оптимизации

Суть эволюционного детерминированного алгоритма глобальной оптимизации кластеров Морса заключается в следующем.

Пусть  $Kon(N) = \{X_1^{(N)}, \dots, X_n^{(N)}\}$  – начальная популяция кластеров Морса, состоящая из  $N$  атомов и, естественно, содержащая глобальный минимум. Требуется найти глобальные минимумы для всех последующих атомарных структур.

<i>Алгоритм глобальной оптимизации кластеров Морса</i>
<p><i>Шаг 1.</i> Для всех представителей текущей популяции конформаций <math>Kon(N)</math> с помощью <i>алгоритма развития кластера</i> строятся потомки (новая популяция) атомарных структур размерности <math>N+1</math>. При этом от каждого представителя <math>X_k^{(N)}</math>, если это возможно, отбираются только три самых лучших: <math>\{X_{k,1}^{(N+1)}, X_{k,2}^{(N+1)}, X_{k,3}^{(N+1)}\}</math>. Для них реализуется процедура улучшения структуры кластера с помощью алгоритма локальной оптимизации:</p> $\tilde{X}_{k,i}^{(N+1)} = \arg \min_{X_{k,i}^{(N+1)}} v(X_{k,i}^{(N+1)}), i = 1, 2, 3. \tag{9}$ <p>В итоге имеем частную популяцию для рассматриваемого представителя:</p>

$$Kon_k(N+1) = \{\tilde{X}_{k,1}^{(N+1)}, \tilde{X}_{k,2}^{(N+1)}, \tilde{X}_{k,3}^{(N+1)}\}.$$

Шаг 2. Списки частных популяций

$Kon_k(N+1)$  объединяются

$$Kon(N+1) = \bigcap_{k=1}^n Kon_k(N+1).$$
 Построенная таким

образом популяция сортируется в порядке увеличения потенциала, и из неё удаляются конформации, удовлетворяющие эвристикам (6) и (8). Таким образом, глобальным минимумом обладает кластер, стоящий на первом месте в отсортированном списке  $Kon(N+1)$ .

Шаг 3. Для определения следующего глобального минимума повторяются шаги 1 и 2 для новой популяции и т.д.

### 5. Результаты вычислительных экспериментов

Проверка работоспособности алгоритма проводилась для потенциала Морса (1) при  $\rho = 6$  в диапазоне  $5 \leq N \leq 35$ .

Для всех рассматриваемых атомарных кластеров были найдены структуры, обеспечивающие глобальные минимумы потенциальной энергии из Кембриджской базы данных [4]. Предложенные эвристики сокращения популяции начальных приближений устойчивых структур кластеров подтвердили полиномиальную сложность их формирования (см. рис. 4). В итоге алгоритм поиска кластера минимальной энергии также имеет полиномиальную сложность.

В табл. 1 приводятся новые устойчивые конформации кластеров Морса, полученные в результате вычислительных экспериментов.

Табл. 1. Новые локально-оптимальные конформации кластеров Морса  $\rho = 6$

N	v	N	v	N	v	N	v	N	v
5A	<b>-9,044930</b>	15*	-48,81322	21*	-75,82640	27A	-104,489430	31F	-120,805231
6A	-12,487810	15C	-47,952559	21*	-75,81294	27*	-103,9112	32B	<b>-127,771395</b>
7A	-16,207580	15*	-47,81833	21*	-75,71404	27*	-103,7666	32A	-127,643751
8A	-19,161862	15*	-47,80298	...	+17 конф.	27*	-103,7417	32*	-127,0789
8B	-19,327420	15A	-47,570579	21C	-73,577014	...	+19 конф.	32*	-127,0782
9B	<b>-23,417190</b>	16B	<b>-53,845835</b>	22A	<b>-81,136735</b>	27C	-102,749592	32*	-126,85
9*	-22,48804	16*	-52,94447	22*	-80,96916	27D	-101,722918	...	+35 конф.
9*	-22,46391	16*	-52,92592	22*	-80,62839	27E	-101,920210	32C	-125,953587
9A	-22,330837	16C	-52,265348	22*	-80,54599	28B	<b>-108,997831</b>	32D	-125,950348
10B	<b>-27,473283</b>	16A	-50,834213	...	+18 конф.	28A	-108,854564	32E	-125,644966
10*	-26,58833	17D	<b>-57,941386</b>	22B	-77,887855	28*	-108,6557	32F	-125,126341
10*	-26,57976	17C	-57,912963	23A	<b>-86,735494</b>	28*	-108,6313	33C	<b>-132,287431</b>
10*	-26,56953	17B	-57,884517	23*	-85,20832	28*	-108,5231	33*	-132,2336
10*	-26,54796	17*	-57,1011	23*	-85,19818	...	+35 конф.	33B	-131,773513
...	+3 конф.	17*	-57,06555	23*	-85,10665	28C	-108,186446	33*	-131,7059
10A	-25,503904	17*	-57,05462	...	+3 конф.	28D	-107,213896	33A	-131,704206
11C	<b>-31,521880</b>	17*	-57,05356	23B	-84,940552	28E	-106,238844	33*	-131,6283
11E	-30,698890	17*	-57,04937	23C	-83,504908	29A	<b>-114,145949</b>	33*	-131,5847
11*	-30,65523	17E	-56,573571	23D	-82,252747	29*	-113,5494	33D	-131,555811
11*	-30,64097	17A	-53,156042	24A	<b>-90,685398</b>	29*	-113,1432	33*	-131,4365
11*	-30,63453	18B	<b>-62,689245</b>	24A'	-90,680804	...	+14 конф.	33E	-131,378662
11*	-30,61992	18*	-62,55016	24*	-89,94411	29B	-112,655980	33F	-130,466899
11*	-30,60239	18*	-62,0315	24*	-89,74132	29C	-111,543685	34B	<b>-136,797544</b>
11F	-30,431713	18C	-62,002920	24*	-89,55294	29D	-111,508961	34*	-136,7745
11A	-28,795153	18*	-61,95092	...	+28 конф.	29E	-111,353973	34*	-136,7468
12B	-36,400278	18*	-61,19915	24B	-87,820376	29F	-111,135014	34*	-136,7355
12A	-35,199881	...	+7 конф.	24C	-87,626843	30B	<b>-118,432844</b>	...	+3 конф.
12D	-34,838761	18D	-60,926500	25A	<b>-95,127899</b>	30A	-118,115802	34A	-136,468311
12*	-34,75599	18A	-59,881449	25A'	-95,040400	30*	-118,0694	34C	-135,989024
12*	-34,7538	19A	<b>-68,492285</b>	25*	-94,74573	30*	-117,894	34D	-135,963257
12*	-34,69076	19*	-66,76968	25*	-94,67848	30*	-117,703	34E	-135,656902
12*	-34,688851	19*	-66,59359	25*	-94,64781	...	+18 конф.	34F	-135,532334
12*	-34,66153	19*	-66,53821	...	+16 конф.	30C	-117,010672	35C	<b>-141,957188</b>
12E	-34,568002	...	+9 конф.	25B	-93,342771	30D'	-115,974020	35D	-141,402997
13A	<b>-42,439863</b>	19B	-65,064771	25C	-92,241466	30E	-115,625207	35*	-141,2824
13*	-39,57574	20A	<b>-72,507782</b>	26A	<b>-100,549598</b>	31B	<b>-122,857743</b>	35*	-141,2752
13*	-39,54507	20*	-71,69458	26*	-99,54504	31*	-122,6235	35*	-141,2513
13B	-39,360710	20*	-70,82512	26*	-99,24709	31*	-122,4401	...	+3 конф.
14B	<b>-45,619277</b>	20*	-70,8267	26*	-99,23104	31A	-122,440052	35B	-141,106305
14A	-44,827522	...	+15 конф.	26*	-99,22397	31*	-122,3844	35A	-140,503355
14*	-43,70905	20B	-69,202704	...	+25 конф.	31*	-122,3698	35E	-141,051852
14*	-43,66124	21B	<b>-76,529139</b>	26C	-97,648652	31C	-122,342421	35F	-140,132124
14C	-43,634048	21A	-76,487266	26B	-97,363225	31D	-121,523693		
15B	<b>-49,748409</b>	21*	-76,46437	27B	<b>-104,745275</b>	31E	-121,367441		

В колонках « $N$ » проиндексированы атомарные кластеры: число определяет число атомов в кластере, буквенный индекс – тип его симметрии. Поскольку симметрия новых устойчивых образований не исследовалась, то новые конформации проиндексированы числом и символом «\*». Глобальные минимумы выделены жирным шрифтом, и все атомарные структуры в рамках своего «веса» упорядочены в сторону увеличения потенциальной энергии. Новые конформации выделены цветом и курсивом.

Интересно, что начиная с группы атомов  $N=9$  в базе данных Кембриджа [4] между глобальным минимумом и ближайшим локальным минимумом были найдены новые устойчивые конформации с более низкими уровнями потенциала в сравнении с известными значениями локальных минимумов. Часто найденные структурные образования по своему потенциалу незначительно отличаются от глобальных минимумов. Это справедливо для кластеров  $N=18, 21, 22, 27, 28, 31-34$ .

Обращает внимание, что новые конформации в зависимости от размера кластера распределены неравномерно в базе данных Кембриджа. Так, для кластеров с  $N=19, 20-22, 24-30, 32$  количество новых конформаций измеряется десятками, в то время как для кластеров с  $N=31, 33-35$  их количество не более десятка.

Как показали исследования, близость значений потенциальной энергии кластеров не означает совпадения их геометрических структур. Так, например, найденные кластеры ( $N=28$ ) с потенциальными энергиями  $v=-107,6352$  и  $v=-107,6354$ , отличающиеся на 0,0002%, имеют совершенно разные геометрические структуры, представленные на рис. 5.

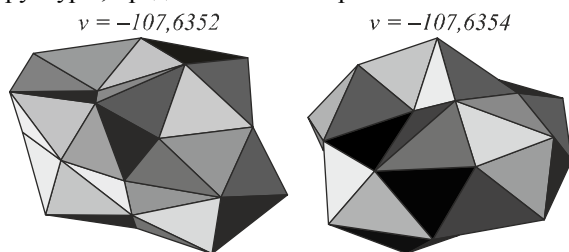


Рис. 5. Структуры кластеров Морса с одинаковой потенциальной энергией

Исследования показали, что полученные атомарные структуры являются достаточно устойчивыми образованиями, во всяком случае, максимальный радиус возмущения (величина случайного отклонения координат атомов от своего первоначального положения) не превышает  $r=0,35$ , что согласуется с результатами, опубликованными в работе [5]. После случайных колебаний координат атомов кластеров, представленных на рис. 5, локальная оптимизация (9) возвращает их в исходное состояние.

### Заключение

В работе рассмотрен эволюционный детерминированный алгоритм глобальной оптимизации геометрических структур кластеров Морса. Основная идея предложенного алгоритма состоит во введенных эвристиках формирования популяции исходных конформаций кла-

стеров (алгоритм развития кластера) и критериях сокращения популяции кластеров (критерии (6) и (8)), что позволило довести сложность алгоритма глобальной оптимизации до полиномиального уровня. Данный результат позволяет надеяться на организацию поиска глобальных минимумов кластеров Морса больших размерностей. Однако для этого потребуются использование современных суперкомпьютерных технологий. Тем не менее, даже для кластеров небольших размерностей в качестве первых новых результатов были получены новые конформации кластеров Морса, не зарегистрированные в базе данных Кембриджского университета. Новые локально-оптимальные конформации по уровню потенциальной энергии, как правило, находятся сразу после глобальных минимумов. Кроме того, предложенный алгоритм позволяет отследить эволюцию изменений геометрических структур кластеров Морса вплоть до формирования глобального минимума.

Для увеличения производительности алгоритма в дальнейшем планируется разработка его параллельной версии.

### 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.

### Литература

1. **Cheng, L.** Global Minimum Structures of Morse Clusters as a Function of the Range of the Potential:  $81 \leq N \leq 160$  / L. Cheng, J. Yang // Journal of Physical Chemistry A. – 2007. – Vol. 111. – P. 5287- 5293.
2. **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.
3. **Wales, D.** Global Optimization by Basin-Hopping and the Lowest Energy Structures of Lennard-Jones Clusters Containing up to 110 Atoms / D. Wales, J. Doye // Journal of Physical Chemistry A. – 1997. – Vol. 101. – P. 5111-5116.
4. The Cambridge Cluster Database [Электронный ресурс]. – URL: <http://www.wales.ch.cam.ac.uk/CCD.html> (дата обращения: 07.04.2014).
5. **Посыпкин, М.А.** Методы и распределенная программная инфраструктура для численного решения задачи поиска молекулярных кластеров с минимальной энергией / М.А. Посыпкин // Труды ПАВТ'2009. – 2009. – С. 528-536.
6. **Pullan, W.** Unbiased Geometry Optimization of Morse Atomic Clusters / W. Pullan // WCCI 2010 IEEE World Congress on Computational Intelligence. – CCIB, Barcelona, Spain. – 2010. – P. 4496-4502.
7. **Lourenço, N.** DACCO: A Discrete Ant Colony Algorithm to Cluster Geometry Optimization. / N. Lourenço, F.B. Pereira // GECCO '12 Proceedings of the 14th Annual Conference on Genetic and Evolutionary Computation. – ACM New York, NY, USA. – 2012. – P. 41-48.
8. **Коварцев, А.Н.** Исследование эффективности глобальной параллельной оптимизации функций многих переменных / А.Н. Коварцев, Д.А. Попова-Коварцева, П.В. Аболмасов // Вестник ННГУ. – 2013. – № 3(1). – С. 252-261.

### References

1. **Cheng, L.** Global Minimum Structures of Morse Clusters as a Function of the Range of the Potential:  $81 \leq N \leq 160$  / L. Cheng, J. Yang // Journal of Physical Chemistry A. – 2007. – Vol. 111. – P. 5287- 5293.
2. **Kovartsev, A.N.** On efficiency of parallel algorithms for global optimization of functions of several variables / A.N. Kovartsev, D.A. Popova-Kovartseva // Computer Optics. – 2011. – Vol. 35(2). – P. 256-261. – (In Russian).
3. **Wales, D.** Global Optimization by Basin-Hopping and the Lowest Energy Structures of Lennard-Jones Clusters Containing up to 110 Atoms / D. Wales, J. Doye // Journal of Physical Chemistry A. – 1997. – Vol. 101. – P. 5111-5116.
4. The Cambridge Cluster Database [Electronic resource]. – URL: <http://www-wales.ch.cam.ac.uk/CCD.html> (Request date: 07.04.2014).
5. **Posypkin, M.A.** Numerical Methods and the Distributed Software Infrastructure for Structural Cluster Optimizations / M.A. Posypkin // Proceedings of Conference PaVT'2009. – 2009. – P. 528-536. – (In Russian).
6. **Pullan, W.** Unbiased Geometry Optimization of Morse Atomic Clusters / W. Pullan // WCCI 2010 IEEE World Congress on Computational Intelligence. – CCIB, Barcelona, Spain. – 2010. – P. 4496-4502.
7. **Lourenço, N.** DACCO: A Discrete Ant Colony Algorithm to Cluster Geometry Optimization. / N. Lourenço, F.B. Pereira // GECCO '12 Proceedings of the 14th Annual Conference on Genetic and Evolutionary Computation. – ACM New York, NY, USA. – 2012. – P. 41-48.
8. **Kovartsev, A.N.** Efficiency of parallel global optimization of multivariable function / A.N. Kovartsev, D.A. Popova-Kovartseva, P.V. Abolmasov // Vestnik UNN. – 2013. – Vol. 3(1). – P. 252-261. – (In Russian).

## A DETERMINISTIC EVOLUTIONARY ALGORITHM FOR THE GLOBAL OPTIMIZATION OF MORSE CLUSTER

*A.N. Kovartsev*

*Samara State Aerospace University*

### Abstract

In this paper we propose a new deterministic evolutionary algorithm for global optimization of Morse clusters. The algorithm has been proven to possess the polynomial efficiency due to the problem-specific heuristics applied. We illustrate the effectiveness of the approach by a set of test problems in structural Morse cluster optimization.

**Keywords:** Morse clusters, Morse potential, cluster structures, global optimization, population of cluster conformations.

### Сведения об авторе

**Коварцев Александр Николаевич**, 1952 года рождения. В 1975 году окончил Куйбышевский авиационный институт (ныне – Самарский государственный аэрокосмический университет имени академика С.П. Королёва) по специальности «Прикладная математика». Доктор технических наук (2000 год), профессор, работает заведующим кафедрой программных систем СГАУ. Директор школы информатики СГАУ. А.Н. Коварцев – специалист в области автоматизации проектирования, разработки и тестирования сложных программных средств; надёжности программного обеспечения; моделирования параллельных вычислений и глобальной оптимизации. Имеет более 90 научных публикаций.

E-mail: [kovr\\_ssau@mail.ru](mailto:kovr_ssau@mail.ru).

**Alexander Kovartsev** (b. 1952) graduated with honours (1975) from S.P. Korolyov Kuibyshev Aviation Institute (presently, S. P. Korolyov Samara State Aerospace University (SSAU)), majoring in Applied Mathematics. He received his Doctor of Engineering (2000) degrees from Samara State Aerospace University. He is professor, chair of SSAU's sub-department software systems SSAU; Director of the School of Computer SSAU. His current research interests include computer-aided design, development and testing of complex software; simulation of parallel computing and global optimization. He has more than 90 scientific publications.

*Поступила в редакцию 8 сентября 2015 г.  
Окончательный вариант – 17 марта 2015 г.*