

МОСКОВСКИЙ АВИАЦИОННЫЙ ИНСТИТУТ  
(НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВОЛЬСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ)

Выпускная квалификационная работа по теме:  
«Применение высокопроизводительных вычислений для определения оптимальных параметров потенциалов межатомного взаимодействия»

Руководитель: зав. каф. 810Б МАИ Абгарян К. К.

Студент: Группа М8О-208М-16, Дилигул А. А.

Москва, 2018 г.

# Цель работы и постановка задачи

Решение глобальной и локальной оптимизационных задач с применением методов распараллеливания для структурной идентификации потенциала межатомного взаимодействия;

Молекулярное моделирование и проверка качества решения;

Анализ полученных решений и определение наилучшего метода оптимизации для поставленной задачи.

# Актуальность задачи

- ▶ Возможность предсказательного моделирования процессов формирования на поверхности металлов нанокластеров;
- ▶ Сокращение времени получения оптимальных параметров потенциала для последующего молекулярного моделирования;
- ▶ Представление протекающего процесса;

# Потенциал Rosato-Guillopo-Legrand

Полная энергия системы атомов моделируемого материала

$$E = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n U(r_{ij}) \quad [1]$$

Для потенциала RGL

$$E_{tot} = \sum_i (E_R^i + E_B^i) \quad [2]$$

- ▶  $E_{tot}$  - полная энергия системы
- ▶  $E_R^i$  - потенциал, отвечающий за энергию отталкивания
- ▶  $E_B^i$  - потенциал, отвечающий за энергию притяжения

$$U_i^R(r_i) = \sum_{j=1}^n \left( A_{\alpha\beta}^1 (r_{ij} - r_0^{\alpha\beta}) + A_{\alpha\beta}^0 \right) \exp \left( -p_{\alpha\beta} \left( \frac{r_{ij}}{r_0^{\alpha\beta}} - 1 \right) \right) \quad [3]$$

$$U_i^B(r_i) = - \left( \sum_{j=1}^n \xi_{\alpha\beta}^2 \exp \left( -2q_{\alpha\beta} \left( \frac{r_{ij}}{r_0^{\alpha\beta}} - 1 \right) \right) \right)^{\frac{1}{2}} \quad [4]$$

# Постановка задачи

Для решения поставленной задачи необходимо найти

$$\xi = \operatorname{argmin}_{\xi \in X} F(\xi) \quad [5]$$

Необходимо определить вектор  $\xi = (\xi_1, \dots, \xi_k) \in X, X \subseteq R^k, k = 18$ , на котором достигается минимум функционала:

$$F(\xi) = w_1 \frac{(a - \hat{a})^2}{\hat{a}^2} + w_2 \frac{(E_c - \hat{E}_c)^2}{\hat{E}_c^2} + w_3 \frac{(B - \hat{B})^2}{\hat{B}^2} + \dots \quad [6]$$

$$+ w_9 \frac{(E_{\text{dim}}^{\text{on}} - E_{\text{dim}}^{\text{on}})^2}{E_{\text{dim}}^{\text{on}^2}} \rightarrow \min, \xi \in X$$

$$\sum_{i=1}^l \omega_i = 1$$

[7]

# Входные данные

Входящие характеристики для потенциала  $RGL$  были взяты следующие:

$$\text{Экспериментальные данные} \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} f_1(\xi) = a \text{ — постоянная решетки} \\ f_2(\xi) = B \text{ — модуль всетороннего растяжения и сжатия} \\ f_3(\xi) = C_{11}, f_4(\xi) = C_{12}, f_5(\xi) = C_{44} \text{ — константы эластичности} \end{array} \right.$$

$$\text{Квантово-механические расчеты} \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} f_6(\xi) = E_{coh} \text{ — когезионная энергия} \\ f_7(\xi) = E_{sol} \text{ — энергия растворимости} \\ f_8(\xi) = E_{dim}^{in} \text{ — энергия связи димера в поверхностном слое} \\ f_9(\xi) = E_{dim}^{on} \text{ — энергия связи димера на поверхности} \end{array} \right.$$

# Решение

- ▶ Формируются эталонные характеристики: данные экспериментов, квантово-механические расчеты
- ▶ Выбираются допустимые интервалы поиска параметров потенциала:  
 $[\underline{\xi}_i, \overline{\xi}_i], i = \overline{1, k}$ , здесь  $k = 18$
- ▶ Запускается функция оптимизации

$F(\xi_1, \dots, \xi_k)$  - функция с множеством локальных минимумов  $\Rightarrow$

- ❖ Метод Монте-Карло – параллельный поиск точки, близкой к глобальному минимуму
- ❖ Granular Radial Search  
Nelder–Mead  $\Rightarrow$  поиск точного локального минимума  
Метод отжига

# Архитектура решения



+



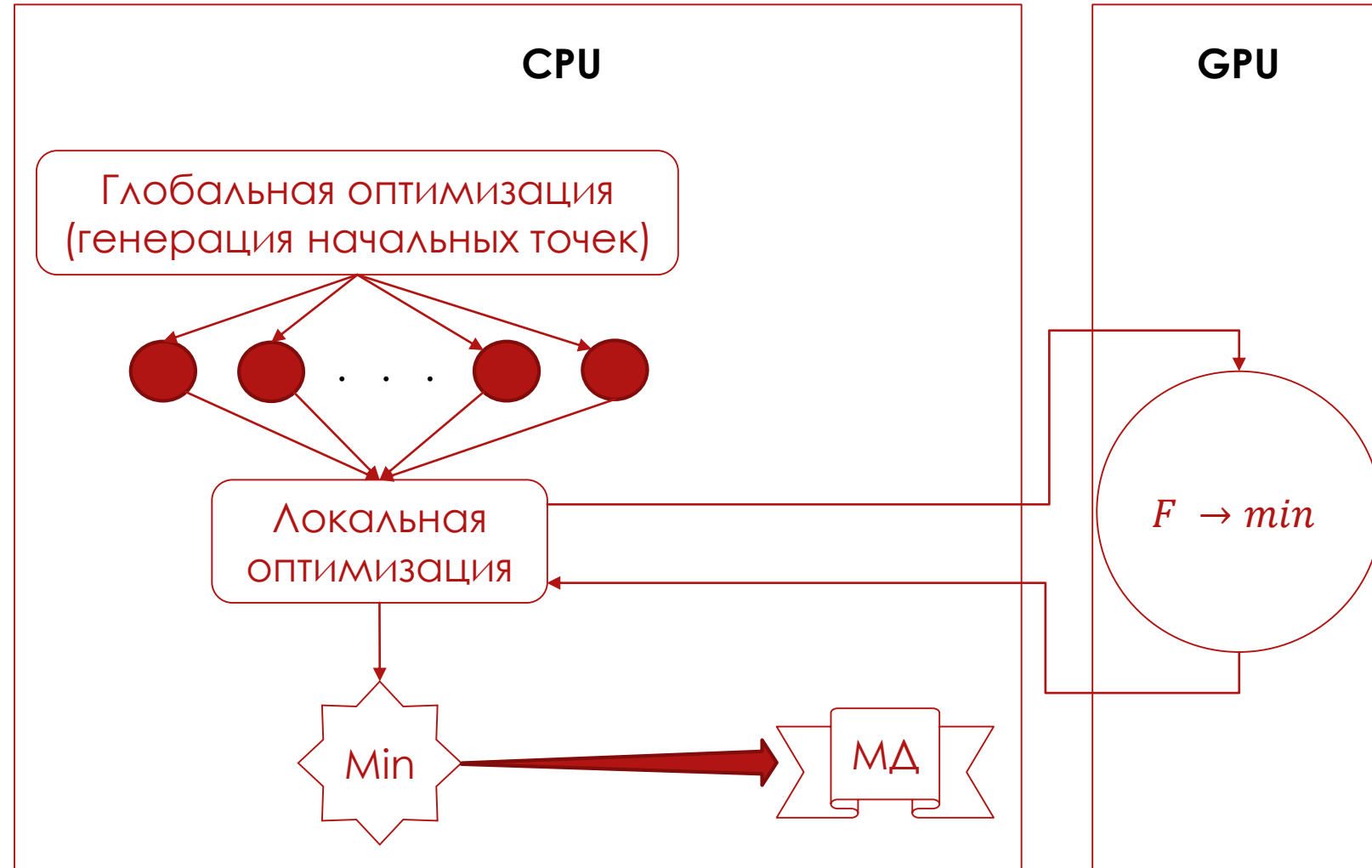
Технологии и языки:

- ▶ C++
- ▶ Nvidia CUDA
- ▶ Qt

Расчеты проводились на ПК

CPU: Intel Core i7 4702MQ

GPU NVIDIA GT 740M 2ГБ





# Методы глобального поиска

## Метод Монте-Карло

- ▶ Метод глобального поиска
- ▶ Роль: генерация случайных начальных подбираемых параметров  $\xi = (\xi_1, \dots, \xi_{18}) \in X$  потенциала RGL в допустимом параллелепипеде  $X$

$$X = [\underline{\xi}, \bar{\xi}] = x_i, \underline{\xi}_i \leq x_i \leq \bar{\xi}_i, \xi \in X, i = \overline{1, k}, X \subseteq R^k, k = 18 \quad [8]$$

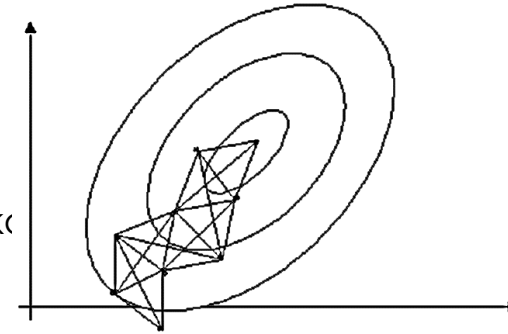
- ▶ Применение: параллельная генерация начальный параметров потенциала с последующим запуском методов локальной оптимизации

# Методы локального поиска

## Метод Nelder-Mead

Метод безусловной оптимизации функции от нескольких переменных

- ▶ Не использует градиентов функций
- ▶ Эффективен при трудоемких вычислениях
- ▶ Использует 3 операции над симплексом (Отражение, Растяжение, Сжатие)



## Метод Granular Radial Search [1]

Инициализация

- ▶ Параметр метода  $g$  – гранулярность, инициализируется значением 0.1
- ▶ Устанавливается начальная точка  $v$  и вычисляется значение функции минимизации  $F_{best}$

Шаг итерации

- ▶ Выполняется сдвиг по случайно выбранному параметру  $v[i]$  в диапазоне гранулярности :  
$$v^{\wedge}[i] = v[i] + k * g * v[i], \text{ где } k \in [-0.5, 0.5]$$
- ▶ Если значение целевой функции удается уменьшить, то найденное значение замещает начальное и алгоритм повторяется. В случае, если процент принятых параметров за каждые 100 итераций  $> 5\%$ , то  $g = g * 0.1$

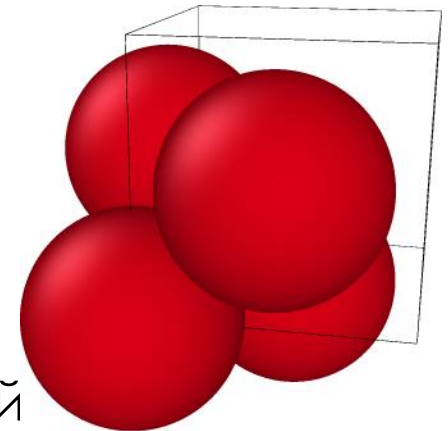
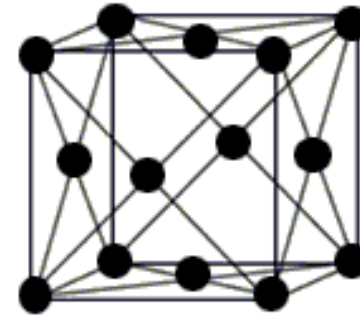
[1] Powell D. Elasticity, lattice dynamics and parameterisation techniques for the Tersoff potential applied to elemental and type III-V semiconductors. University of Sheffield, 2006.

# Исследуемые материалы:

*Co/Cu(001)*

*Cr/Ag(001)*

- ▶ Материал имеет структуру ГЦК решетки
- ▶ Элементарная ячейка содержит 4 атома



- ▶ Расчеты полных энергий проводились для кристаллической решетки размером  $4 \times 4 \times 4$  в единицах элементарной ячейки ГЦК структуры
- ▶ Учитывались периодические граничные условия

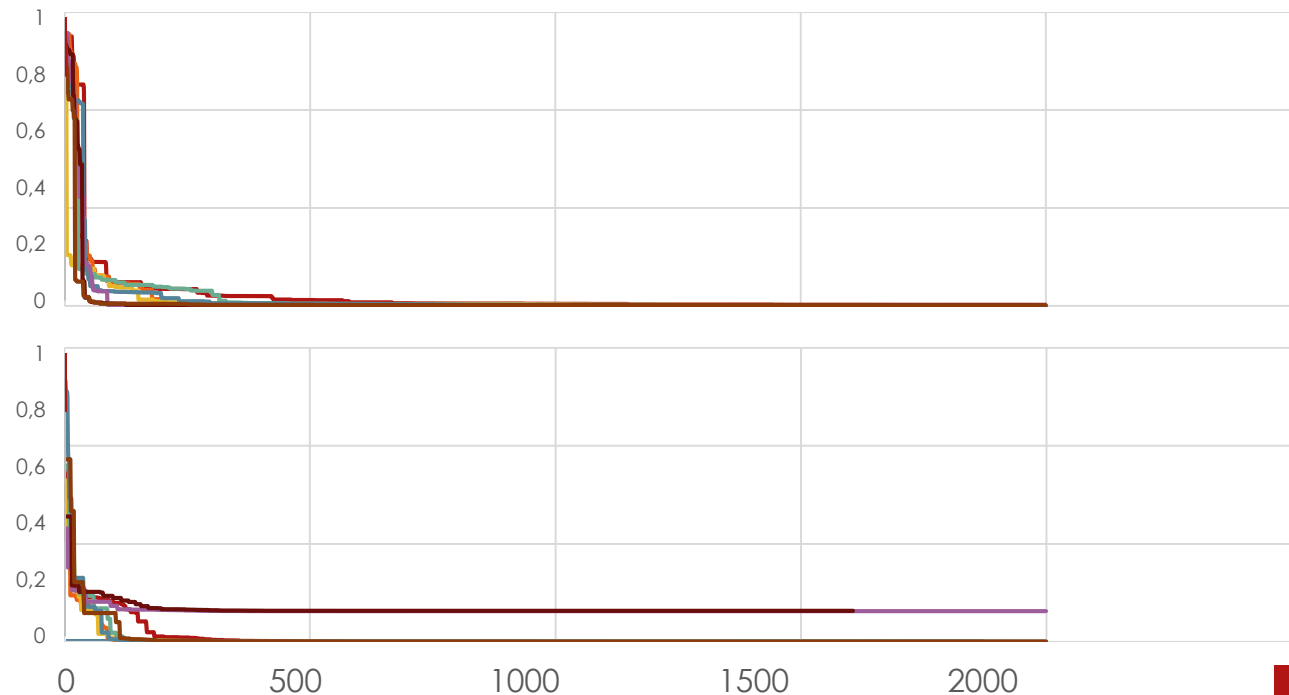
# Вычислительный эксперимент

По результатам локальной оптимизации выявлен наилучший метод

Ограничение эксперимента по итерациям – 2000 итераций

**GRS**

**Nelder – Mead**



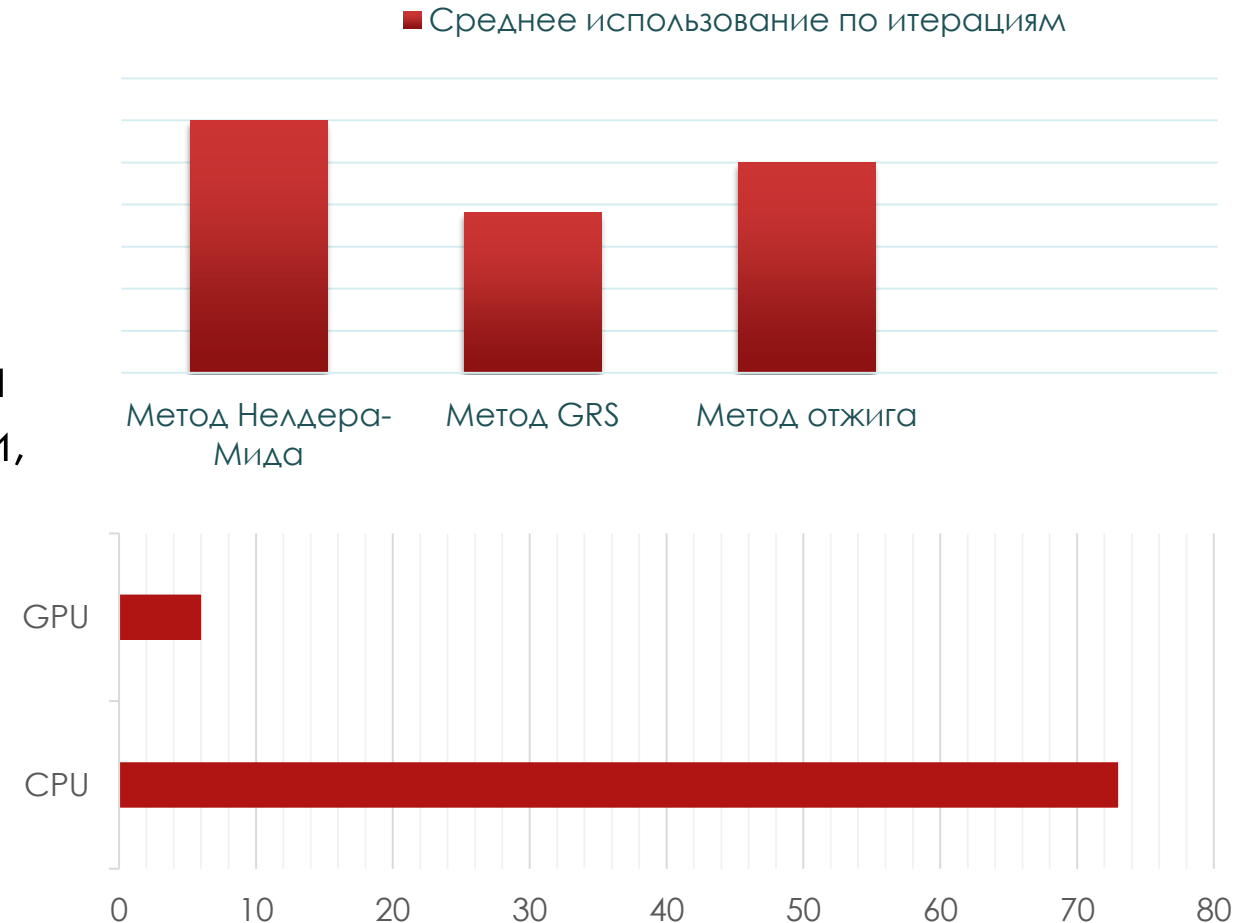
# Анализ алгоритмов Параллельные вычисления CUDA

Метод **GRS** использует минимум операций в среднем

Самая “дорогая” и часто используемая операция – вычисление полной энергии, которая требует реализации на GPU

Результат:

- ✓ Прирост скорости вычисления



# Молекулярное моделирование

Система из  $N$  частиц, двигающиеся под влиянием потенциальной функции  $U$

$$U = U(\vec{r})$$

Метод скоростей Верле

$$\vec{r}(t + \Delta t) = \vec{r}(t) + \vec{v}(t)\Delta t + \frac{1}{2}\vec{a}(t)\Delta t^2 \quad [ 9 ]$$

$$\vec{v}\left(t + \frac{\Delta t}{2}\right) = \vec{v}(t) + \frac{1}{2}\vec{a}(t)\Delta t \quad [ 10 ]$$

$$\vec{a}(t) = -\frac{\text{grad}(U(\vec{r}(t)))}{m} \quad [ 11 ]$$

$$\vec{v}(t + \Delta t) = \vec{v}\left(t + \frac{\Delta t}{2}\right) + \frac{1}{2}\vec{a}(t + \Delta t)\Delta t \quad [ 12 ]$$

Преимущества

- ✓ Достаточно точен и устойчив
- ✓ Является самостартующим

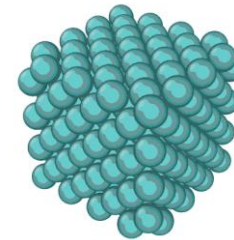
# Результаты молекулярной динамики *Co/Cu(001)*

## Применение МД

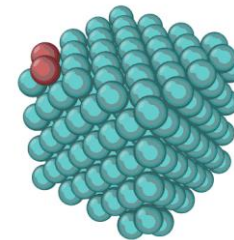
- ▶ Изучение дефектов кристалла
- ▶ Реконструкция поверхности кристалла

## Выводы по результатам МД

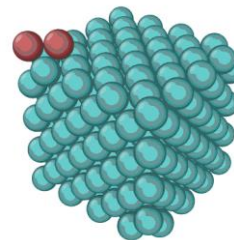
- ▶ Система остается устойчивой
- ▶ Найденное численное решение соответствует



Поверхность



Поверхность  
Добавочные атомы  
в поверхности



Поверхность  
Добавочные атомы  
на поверхности

# Заключение

Совместное использование глобальной (Монте-Карло) и локальной (GRS) оптимизации оказалось оптимальным подходом для решения подобной задачи

Применение параллельных вычислений на графическом процессоре уменьшило время идентификации параметров потенциала RGL

Методы молекулярной динамики позволили проследить эволюцию системы во времени



# Публикации

- ▶ Абгарян К.К., Бажанов Д.И., Дилигул А.А. Применение высокопроизводительных вычислений для определения оптимальных параметров потенциала межатомного взаимодействия для модели Rosato-Guillore-Legrand (RGL). // Материалы 16-й Международной конференции «Авиация и космонавтика - 2017». 20-24 ноября 2017г., Москва, -М.: изд-во МАИ, 2017, - с. 380-381