

# Оптимизационные алгоритмы параметрической идентификации потенциала Терсоффа для двухкомпонентных материалов

МОСКОВСКИЙ АВИАЦИОННЫЙ ИНСТИТУТ  
(национальный исследовательский университет)

Студент: Александр Владимирович Гревцев  
Руководитель: Абгарян Каринэ Карленовна

Чтобы провести молекулярно-динамическое моделирование движения атомов в кристаллической решетке, требуется решить нормальную систему Коши:

$$\begin{cases} m_i \frac{dv_i^x}{dt} = -\frac{\partial U_i}{\partial x_i}, \\ m_i \frac{dv_i^y}{dt} = -\frac{\partial U_i}{\partial y_i}, \\ m_i \frac{dv_i^z}{dt} = -\frac{\partial U_i}{\partial z_i}, \\ \frac{dx_i}{dt} = v_i^x, \frac{dy_i}{dt} = v_i^y, \frac{dz_i}{dt} = v_i^z \end{cases} \quad (1)$$

Чтобы получить правые части, нужно иметь потенциал с идентифицированными параметрами.

Потенциал Терсоффа подходит для систем атомов с ковалентной связью. Эти системы рассматриваются в работе.

Полная энергия системы атомов моделируемого материала:

$$E = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n U(r_{ij}) \quad (2)$$

Суммируются значения энергии взаимодействующих пар атомов:

$$U(r_{ij}) = f_c(r_{ij})[f_R(r_{ij}) + b_{ij}f_A(r_{ij})] \quad (3)$$

где  $f_R$  и  $f_A$  – потенциалы притяжения и отталкивания между двумя атомами,

$$f_A(r_{ij}) = \frac{SD_e}{S-1} \exp(-\beta \sqrt{\frac{2}{S}}(r_{ij} - r_e)) \quad (4)$$

$$f_R(r_{ij}) = \frac{D_e}{S-1} \exp(-\beta \sqrt{2S}(r_{ij} - r_e)) \quad (5)$$

Функция отсечения:

$$f_c(r_{ij}) = \begin{cases} 0, & r_{ij} > (R + R_{cut}) \\ \frac{1}{2} \left[ 1 - \sin \left[ \frac{\pi(r_{ij} - R)}{2R_{cut}} \right] \right], & |r_{ij} - R| \leq R_{cut} \\ 1, & r_{ij} < (R - R_{cut}) \end{cases} \quad (6)$$

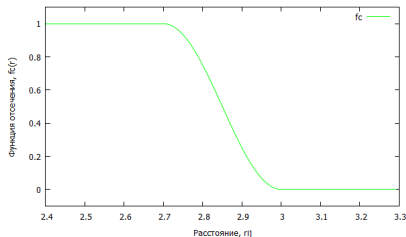


Рис. 1: Функция отсечения

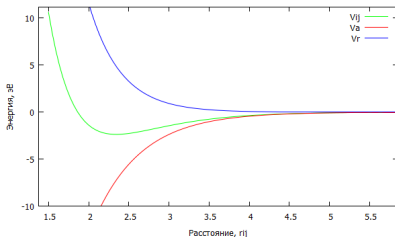


Рис. 2: Потенциал Терсоффа

Параметр, характеризующий зависимость энергии от расположения атома относительно соседних атомов:

$$b_{ij} = (1 + (\gamma\zeta_{ij})^n)^{-\frac{1}{2n}}, \quad (7)$$

$$\zeta_{ij} = \sum_{k=i,j} f_c(r_{ik})g(\theta_{ijk})\omega_{ik}, \quad (8)$$

$$\omega_{ik} = \exp[\lambda^3(r_{ij} - r_{ik})^3], \quad (9)$$

$$g(\theta_{ijk}) = 1 + \frac{c^2}{d^2} - \frac{c^2}{d^2 + (h - \cos(\theta_{ijk}))^2}, \quad (10)$$

# Однокомпонентные и двухкомпонентные материалы

Одно взаимодействие для компонента X:

X-X
$D_e$
$S$
$\beta$
$r_e$
$R$
$R_{cur}$
$c$
$d$
$h$
$n$
$\gamma$
$\lambda$

Три взаимодействия для компонент X и Y:

X-X	X-Y	Y-Y
$D_e$	$D_e$	$D_e$
$S$	$S$	$S$
$\beta$	$\beta$	$\beta$
$r_e$	$r_e$	$r_e$
$R$	$R$	$R$
$R_{cur}$	$R_{cur}$	$R_{cur}$
$c$	$c$	$c$
$d$	$d$	$d$
$h$	$h$	$h$
$n$	$n$	$n$
$\gamma$	$\gamma$	$\gamma$
$\lambda$	$\lambda$	$\lambda$

Для решения поставленной задачи необходимо найти:

$$\xi = \arg \min_{\xi \in X} F(\xi) \quad (11)$$

Необходимо определить вектор параметров потенциала Терсоффа  $\xi = (\xi_1, \dots, \xi_k) \in X, X \subseteq R^k, k = 36$ , на котором достигается минимум функционала:

$$F(\xi) = \omega_1 \frac{(f_1(\xi) - \hat{f}_1)^2}{\hat{f}_1^2} + \dots + \omega_7 \frac{(f_7(\xi) - \hat{f}_7)^2}{\hat{f}_7^2} \rightarrow \min, \xi \in X \quad (12)$$

В функцию минимизации входят следующие свойства материала:

- $f_1(\xi) = a$  – постоянная решетки;
- $f_2(\xi) = E_{coh}$  – когезионная энергия;
- $f_3(\xi) = B$  – модуль всестороннего растяжения и сжатия;
- $f_4(\xi) = C_{11}, f_5(\xi) = C_{12}, f_6(\xi) = C_{44}$  – константы эластичности;
- $f_7(\xi) = \zeta$  – параметр Клейнмана

Для решения поставленной задачи необходимо найти:

$$\xi = \arg \min_{\xi \in X} F(\xi) \quad (13)$$

Необходимо определить вектор параметров потенциала Терсоффа  $\xi = (\xi_1, \dots, \xi_k) \in X, X \subseteq R^k, k = 36$ , на котором достигается минимум функционала:

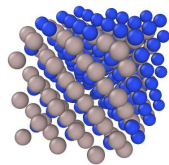
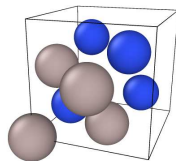
$$F(\xi) = \omega_1 \frac{(f_1(\xi) - \hat{f}_1)^2}{\hat{f}_1^2} + \dots + \omega_7 \frac{(f_7(\xi) - \hat{f}_7)^2}{\hat{f}_7^2} \rightarrow \min, \xi \in X \quad (14)$$

Эталонные значения характеристик  $\hat{f}_i$  самостоятельно вычислялись в программном пакете VASP на суперкомпьютере в Межведомственном Суперкомпьютерном Центре Российской Академии наук.

Вычисления в программном пакете VASP считаются очень близкими к экспериментальным данным.



- Рассматриваются материалы вида сфалерита;
- Элементарная ячейка состоит из 8 атомов;
- Элементарная ячейка дублируется 3 раза во всех трех координатах(216 атомов);
- В расчетах свойств учитываются периодические граничные условия.



Методы глобальной минимизации:

- Случайный перебор;
- Метод имитации отжига.

Методы локальной минимизации:

- Метод Хука-Дживса;
- Granular Radial Search<sup>1</sup>.

---

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

# Сравнение методов глобальной минимизации

Каждый метод обработал по 10 наборов параметров. В таблице приведены значения функции минимизации.

№	Случайный перебор	Метод имитации отжига
1	0.02064410	0.18527005054
2	0.02614400	0.05638658856
3	0.04038300	0.10829009569
4	0.04620780	0.06552733212
5	0.05129950	0.08336367006
6	0.05353240	0.07716891369
7	0.05855240	0.13123166326
8	0.06535910	0.04297800948
9	0.06545940	0.02592863035
10	0.06854700	0.06308355704
Среднее	0.04961287	0.0839228511
Время(сек)	66.981	238.210

# Сравнение методов локальной минимизации

Каждый метод обработал по 10 наборов параметров, которые были получены случайным перебором. В таблице приведены значения функции минимизации.

№	Granular Radial Search	Метод Хука-Дживса
1	0.00044200804	0.00001461210
2	0.00010578393	0.00104029163
3	0.00089300502	0.00151516639
4	0.00087604466	0.00055892461
5	0.00007427684	0.00094588701
6	0.00000861521	0.00062298738
7	0.00009718343	0.00001892765
8	0.00051598259	0.00095831038
9	0.00000198705	0.00112273151
10	0.00000487502	0.00007576683
Среднее	0.00030197620	0.00068736060
Время(мин)	208.466	441.933

Технология: OpenMP

Параметры системы: AMD Ryzen 7 1800X Eight-Core Processor  
3.60 GHz

Число потоков: 16

Параллельное вычисление  $U(r_{ij})$  при вычислении энергии.

Параллельная идентификация нескольких наборов параметров.

$$E = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n U(r_{ij})$$

Метод	Время(мин)
Без OpenMP	141.83
Вычисление $U(r_{ij})$	71.86
Параллельная идентификация	98.25
Комбинация	66.783

Комбинация двух вариантов параллельных вычислений дает лучший результат.

# Кремний (Si)

Пар.	Значение
$D_e$	5.14592
$S$	4.69548
$\beta$	1.44156
$r_e$	2.23518
$R$	2.85
$R_{cut}$	0.15
$c$	24697.3
$d$	103.132
$h$	-0.273259
$n$	1.21149
$\gamma$	0.953207
$\lambda$	0.00156529

Хар.	VASP	Результат
$E_{coh}$	-4.617	-4.594
$a$	5.465	5.513
$B$	0.893	0.904
$C'$	0.469	0.458
$C_{11}$	1.519	1.538
$C_{12}$	0.58	0.561
$C_{44}$	0.627	0.624
$\zeta$	0.522	0.517
$F(\xi)$		0.000051
Время	349.3	172.3

Пар.	Значение
$D_e$	5.60702
$S$	6.09551
$\beta$	1.4484
$r_e$	2.24235
$R$	2.95
$R_{cut}$	0.15
$c$	33739
$d$	125.481
$h$	-0.524262
$n$	1.57274
$\gamma$	1.6957
$\lambda$	17.5114

Хар.	VASP	Результат
$E_{coh}$	-3.781	-3.778
$a$	5.645	5.675
$B$	0.745	0.746
$C'$	0.346	0.348
$C_{11}$	1.208	1.21
$C_{12}$	0.514	0.514
$C_{44}$	0.604	0.602
$\zeta$	0.561	0.562
$F(\xi)$		0.0000083
Время	313.3	249.26

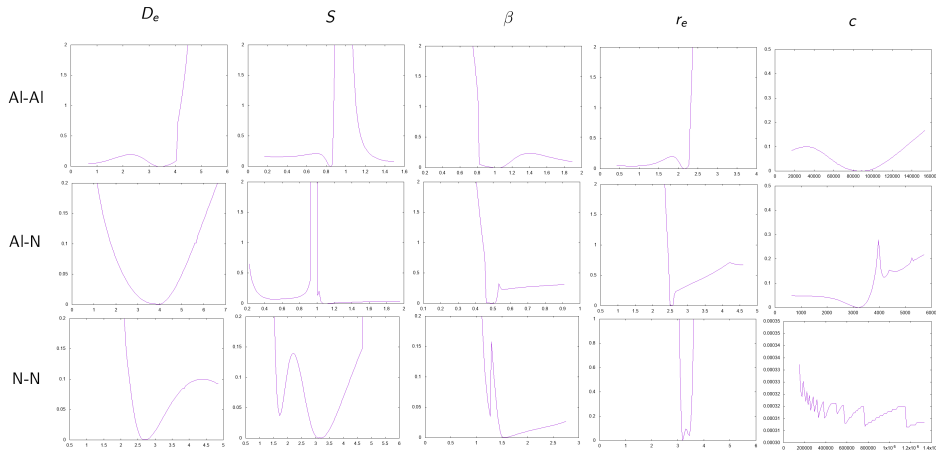


# Нитрид алюминия (AlN)

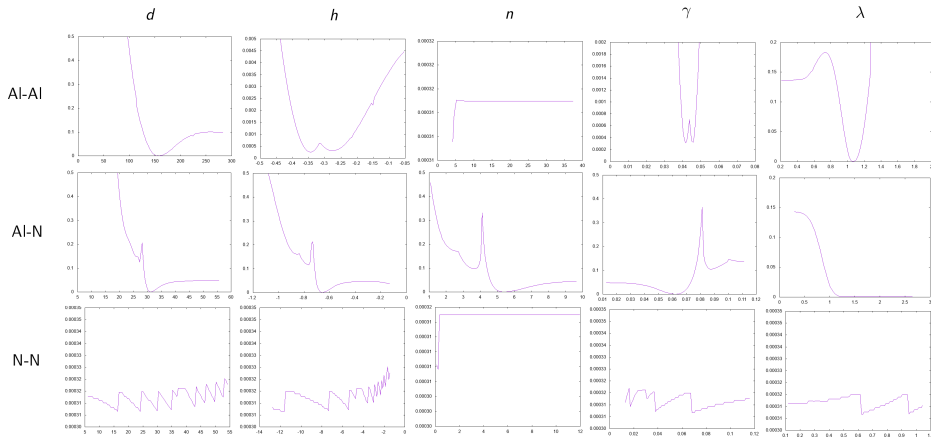
Пар.	Al-Al	Al-N	N-N
$D_e$	3.3551	3.9127	2.7198
$S$	0.8359	1.0955	3.1015
$\beta$	1.0591	0.5093	1.5406
$r_e$	2.1372	2.5772	3.1928
$R$	2.335	2.335	2.335
$R_{cut}$	0.8	0.8	0.8
$c$	85871.1	3201.3	746383
$d$	158.496	31.1845	30.3546
$h$	-0.2732	-0.6584	-7.1584
$n$	20.9305	5.4059	6.0999
$\gamma$	0.0416	0.0623	0.0649
$\lambda$	1.0528	1.4831	0.5853

Хар.	VASP	Результат
$E_{coh}$	-5.7528	-5.73307
$a$	4.38	4.22682
$B$	2.2285	2.24682
$C'$	0.791	0.794709
$C_{11}$	3.2833	3.3049
$C_{12}$	1.7012	1.71347
$C_{44}$	1.9094	1.8594
$\zeta$	0.6402	0.627198
$F(\xi)$		0.0003
Время	596.34	310.3

# Нитрид алюминия (область)



# Нитрид алюминия (область)

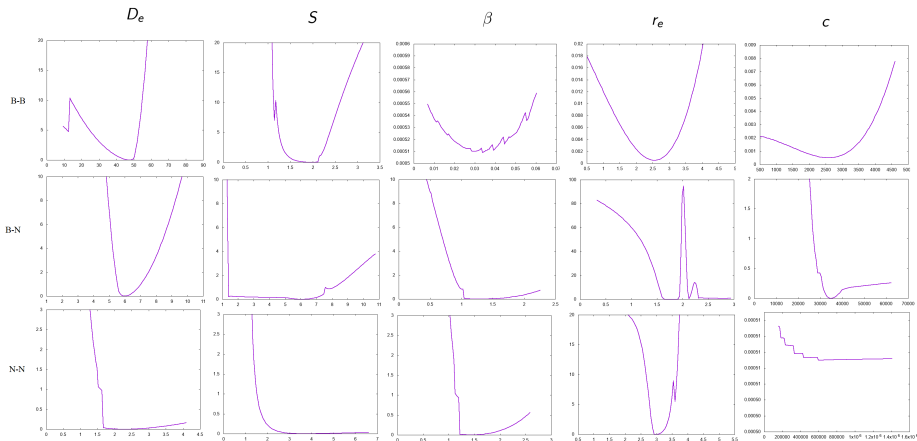


# Нитрид бора (BN)

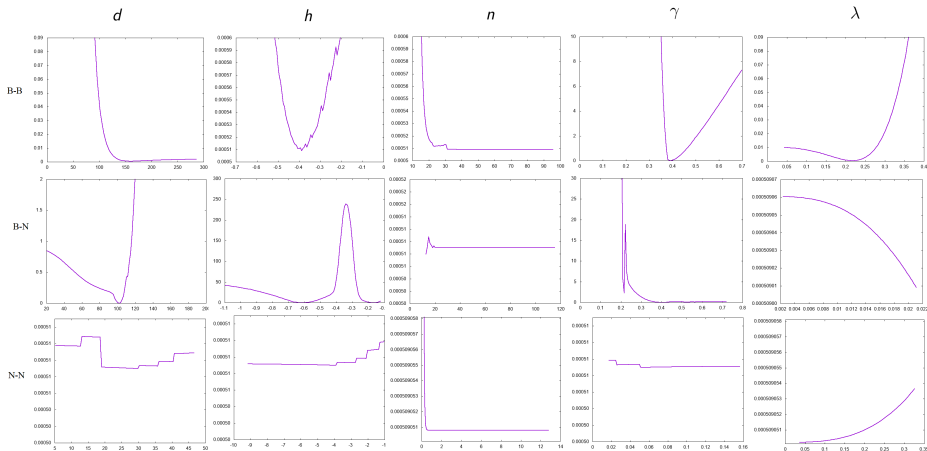
Пар.	B-B	B-N	N-N
$D_e$	47.3631	5.99477	2.2943
$S$	1.9582	6.03235	3.6989
$\beta$	0.0337	1.26559	1.4498
$r_e$	2.552	1.6491	2.9738
$R$	1.95	1.95	1.95
$R_{cut}$	0.75	0.75	0.75
$c$	2579.2	34907.1	787946
$d$	160.381	102.02	26.1181
$h$	-0.3888	-0.6157	-5.1370
$n$	53.5382	64.6551	6.4700
$\gamma$	0.3917	0.4029	0.0875
$\lambda$	0.2174	0.0118	0.1826

Хар.	VASP	Результат
$E_{coh}$	-6.728	-6.568
$a$	3.615	3.794
$B$	4.206	4.10621
$C'$	3.321	3.3132
$C_{11}$	8.635	8.634
$C_{12}$	1.992	2.009
$C_{44}$	4.779	4.875
$\zeta$	0.381	0.382
$F(\xi)$		0.0005
Время	606.2	320.6

# Нитрид бора (область)



# Нитрид бора (область)



- Исследованы методы глобальной и локальной минимизации для идентификации параметров потенциала Терсоффа.
- Исследованы варианты применения параллельных вычислений.
- Самостоятельно проведены вычисления характеристик материалов в программном пакете VASP на суперкомпьютере.
- Реализованная программа с потенциалом Терсоффа работает для однокомпонентных и двухкомпонентных материалов.

- Опубликовано одна печатная работа: А. В. Гревцев , Д. И. Бажанов и К. К. Абгарян, «Параллельные алгоритмы параметрической идентификации потенциала Терсоффа для AIN» Материалы XX Юбилейной международной конференции по вычислительной механике и современным прикладным программным системам, pp. 26-27, 2017.
- Сделано выступление с докладом на XX Юбилейной международной конференции по вычислительной механике и современным прикладным программным системам.