



P. S. Roslyakov, P. N. Lomakov // Procedia Structural Integrity, 2016. – V. 2. – P. 1797–1804.

4. Stepanova, L. V. Multi-parameter description of the crack-tip stress field: Analytic determination of coefficients of crack-tip stress expansions in the vicinity of the crack tips of two finite cracks in an infinite plane medium [Текст] / L. V. Stepanova, P. S. Roslyakov // International Journal of Solids and Structures, 2016, V. 100 – 101. – P. 11– 28.

5. Tada, H. The Stress Analysis of Cracks Handbook [Текст]: монография / H. Tada, P. C. Paris, G. R. Irwin. – 3rd ed. – NY: ASME Press, 2000. – 678p.

Г.П. Климашова, А.Н. Коварцев

ПРИМЕНЕНИЕ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ ПРИ ВЫЯСНЕНИИ ПРАВИЛ ФОРМИРОВАНИЯ НАЧАЛЬНЫХ ПРИБЛИЖЕНИЙ КОНФОРМАЦИЙ АТОМНЫХ КЛАСТЕРОВ МОРСА НА ОСНОВЕ ГЕОМЕТРИЧЕСКИ ОБОСНОВАННОГО МЕТОДА

(Самарский университет)

Аннотация

Данная статья посвящена проблеме формирования начальных приближений атомных кластеров Морса для наиболее сложного случая, когда жёсткость кластера равна 14. Рассматривается задача формирования начальных приближений конформаций атомных кластеров Морса на основе геометрически обоснованного метода. Описываются результаты, полученные в ходе проведения экспериментов над кластерами в разработанном авторами с помощью MATLAB, JavaScript, Html и CSS программном продукте, носящего название «Кластеры Морса». Сайт проекта: <https://www.clustersofmorse.ru>.

Введение

В 1964 году профессором Массачусетского технологического института Ф. Коттоном впервые был употреблён термин «кластер» по отношению к группе частиц [1]. Считается, что именно тогда было сформулировано определение кластера, которое является актуальным и в настоящее время. Так, под кластером сегодня принято понимать группу близко расположенных и связанных друг с другом однотипных частиц (атомов/молекул/ионов), а иногда и ультрадисперсных частиц [2].

Интересно, что систематические исследования свойств кластеров были начаты только в 80-х годах прошлого века. Учёных тогда поразил тот факт, что свойства кластеров сильно отличаются от свойств объёмных соединений того же состава. Стоит отметить, что это неудивительно для небольших кластеров: их электронная и атомная структура кардинально отличается от структуры вещества в объёмном состоянии. Однако, даже достаточно крупные кластеры, имеющие структуру, подобную объёмному веществу, могут иметь отличные от него свойства [3].



Одним из множества вопросов, которые возникают при изучении кластеров, является вопрос о том, *в чём состоит принципиальное отличие атомных кластеров от молекул*, так как и те, и другие по своей природе, представляют собой группы атомов. Было выяснено, что основным отличительным признаком кластеров от молекул служит стабильность последних. В отличие от молекул кластеры не могут существовать при наличии контакта с себе подобными. Столкновение кластеров обязательно ведёт к увеличению или уменьшению их размеров [1]. Таким образом, атомные или молекулярные кластеры состоят из набора частиц и могут иметь новые, совершенно иные физические свойства (магнитные, электрические, оптические) [4] по сравнению с одиночной молекулой или объёмной материей.

Одной из наиболее используемых *моделей кластера* является так называемый «кластер Морса» (Филипп Морс учёный из США, разработавший формулу для описания потенциала кластера). 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 потенциальной энергией. Предполагаемые глобальные минимумы зарегистрированы в Кэмбриджской базе данных (БД) (The Cambridge Energy Landscape Database) и её расширении [5,6], они были получены как благодаря применению адаптированных алгоритмов глобальной оптимизации, так и генерации исходных конформаций-кандидатов на основании имеющихся представлений о структурных свойствах кластеров.

Актуальность задачи оптимизации кластеров Морса

Исследование топографии поверхности потенциальной энергии признано важным по той причине, что даже в случае упрощённого допущения об энергии взаимодействия, задача нахождения минимума суммарной потенциальной энергии является крайне сложной, так как она представляет собой случай невыпуклой оптимизации с большим числом локальных минимумов. Так, Хоар утверждал, что число локальных минимумов микрокластера из n атомов растёт как $\exp(n^2)$.

Уилли и Венник (1985 год) [7] доказали, что сложность задачи определения минимума потенциальной энергии кластера, в котором между атомами учитывается парное взаимодействие и игнорируется химическое, принадлежит к классу NP-полных задач, и до сих пор не известен не экспоненциальный алгоритм её решения.

Как правило, кластеры состоят из одной или нескольких сотен атомов и представляют интерес для физики твёрдого тела, химии и материаловедения. Также изучение кластеров имеет важнейшее значение для различных областей человеческой деятельности. Данные, полученные в ходе исследований класте-



ров, применяются в медицине (в том числе, при разработке новых лекарств), в металлургии (при моделировании металлов), а также при разработке новых материалов. Указанные данные также необходимы для понимания процессов катализа, сворачивания белка, конденсации паров воды в облаках, 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* [4], т.е. минимальному значению потенциальной энергии кластера.

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 ; ρ – параметр (иногда называемый «коэффициентом жёсткости»), характеризующий взаимодействие атомов в кластере Морса, который позволяет моделировать различные вещества. Обычно ρ принадлежит диапазону от 3 до 14. Данная работа посвящено кластерам, обладающим $\rho = 14$, т.е. «жёстким» кластерам.

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

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

где $X = (x_1, \dots, x_N)$, $x_i \in R^3$ – координаты центров атомов кластера [4].

Разработанное программное обеспечение

Интерфейс программного продукта «Кластеры Морса» разработан на базе диалоговых окон без использования стандартных шаблонов от MATLAB. В системе предусмотрена одна роль пользователя – оператор (аналитик). Справка реализована в виде html-страниц с использованием JavaScript и CSS. Программа также содержит внутри себя разработанные авторами, а потому и не имеющие аналогов, «Банк статей» и «Словарь терминов».

В ходе работы над кластерами Морса, информация о которых была взята из источника [5, 6], с применением уникальных алгоритмов послойного препарирования кластера и алгоритма формирования начальных приближений конформаций атомов кластера Морса, разработанных на базе кафедры программных систем факультета информатики Самарского университета профессором Коварцевым А.Н., была получена таблица закономерностей роста кластеров. Следует заметить, что целью построения этой таблицы было выяснение правил и закономерностей формирования «дочернего» кластера из «родительского». При этом, «дочерним» считается кластер, следующий за «родительским» в уже упомянутых БД.



В ходе тестирования разработанного программного обеспечения было обработано 234 кластера с размерностями от 7 до 240 элементов.

Результаты работы

В результате проведённых экспериментов были получены следующие результаты:

1 Обнаружена слоистая структура «жёстких» кластеров. При этом было выяснено, что существуют, так называемые, «эталонные» слои, то есть слои, геометрическая структура которых остаётся неизменной и повторяется для каждого кластера, обладающего достаточным для этого числом элементов;

2 Найдены «магические числа». Все остальные кластеры могут быть получены, либо добавлением к кластеру с магическим числом элементов нового атома, либо разборкой такого кластера;

3 Установлены конформации, которыми обладают «жёсткие» оптимальные кластеры. Стало большой неожиданностью открытие секторальной структуры. Также было обнаружено, что самой популярной конформацией является декаэдрическая;

4 Обнаружено, что существует всего два пути «наращивания» каждого слоя кластера: классический (центральный) и секторальный. По классической схеме слой постепенно доводится до эталонного, в то время как при секторальной схеме существует не весь слой, а лишь его сектор. И как бы много элементов не было к нему добавлено, сектор никогда не вырастет до полного слоя.

Выводы

Обнаруженные закономерности формирования дочернего кластера из родительского дают право надеяться, что по прошествии некоторого времени и количества дополнительных проведённых экспериментов, будет выяснен весь список правил получения оптимальной конформации для дочернего кластера без полного перебора всех существующих вариантов. Вообще говоря, после проведённых экспериментов стало ясно, что существует реальная возможность выявления списка из 10-20 правил, применение которых позволит сократить число возможных конформаций формируемого кластера хотя бы до 10-30 штук.

Литература

1 Сидоров Л.Н. Молекулы, ионы и кластеры в газовой фазе [Электронный ресурс] // Русский переплёт. Статьи Соросовского Образовательного журнала в текстовом формате (2000 г.). URL: <http://www.pereplet.ru/obrazovanie/stsoros/1112.html> (дата обращения: 20.03.2018).

2 Смирнов, Б.М. Кластеры и фазовые переходы / Б.М. Смирнов // Успехи физических наук. – 2007. – Т. 177, №4, – С. 369-373.

3 Напольский К.С., Лукашин А.В., Елисеев А.А. Кластеры и наноструктуры. Москва: МГУ, 2007. 60 с.



4 Коварцев А.Н. Геометрически-обоснованный метод формирования атомных кластеров Морса больших размерностей / А.Н.Коварцев // Компьютерная оптика. – 2016. – Т. 40, №4 – С. 234-240.

5 База кластеров Морса The Cambridge Cluster Database [Электронный ресурс]. URL: <http://www-wales.ch.cam.ac.uk/CCD.html> (дата обращения: 21.03.2018).

6 База кластеров Морса The Cambridge Cluster Database. Morse Cluster: Table of global minima (7-240) [Электронный ресурс]. URL: <http://staff.ustc.edu.cn/~clj/morse/table.html> (дата обращения: 21.03.2018).

7 Pereira F. B., Marques J. M. C. Analysis of Crossover Operators for Cluster Geometry Optimization [Электронный ресурс] // Chapter, November 2010. URL: <https://www.researchgate.net/publication/226395707> (дата обращения: 20.03.2018).

А.С. Кабильджанов, Ч.З. Охунбабоева, А.А. Авазбаев

МЕТОДИКА ВЫБОРА ОПТИМАЛЬНЫХ ЗНАЧЕНИЙ ПАРАМЕТРОВ МЕЛИОРАТИВНОЙ ТЕХНИКИ В УСЛОВИЯХ МНОГОКРИТЕРИАЛЬНОСТИ

(Ташкентский институт инженеров ирригации
и механизации сельского хозяйства)

Проведение культуртехнической мелиорации осуществляется при помощи мелиоративной техники, к параметрам которой предъявляются определенные требования по обеспечению эффективности технологических процессов обработки почвы [1]. Определение наиболее приемлемых значений параметров мелиоративной техники (МО) в строгой математической постановке трактуется как оптимизационная задача, которая на практике носит многопараметрический и многокритериальный характер и решается с использованием полиномиальных математических моделей [2].

Представим математическую модель МО в следующем виде:

$$y_i = f_i(x, z, a); \quad i = \overline{1, k}, \quad (1)$$

где $y_i; i = \overline{1, k}$ - выходные параметры МО, играющие роль частных критериев оптимальности; x - входные параметры МО; z - конструктивные параметры; $f_i; i = \overline{1, k}$ - заданные полиномиальные функции; a - параметры математической модели МО, значения которых известны.

Как правило, при проектировании МО на его параметры накладываются следующие ограничения:

1) $y_i \leq t_i; y_j = t_j; y_l \geq t_l$ - функциональные ограничения на выходные параметры, определяющие условия работоспособности МО, где t_i - заданные числовые значения;