

INTPOL 使用手册

三原子通用插值程序 (多体展开/样条/再生核/混合方法)

版本 1.1, 2015 年 12 月 19 日。

1 简介

INTPOL 用于从 **ab initio** 离散原子坐标和能量数据, 通过多种插值方法, 得到精确的连续的势能面。INTPOL 可生成势能面的 **Fortran** 语言源程序, 并且可提供势能面的解析一阶和二阶导数。支持多种原始数据的坐标: 内坐标、内坐标和角度坐标的组合、雅克比坐标。可以采用可选的多体展开方法降低误差。可以对每个坐标指定不同的插值方法。

对于生成的势能面, 可以进一步计算插值在原始数据点的均方根误差。可以采用二次最速下降法搜索势能面中的最小值点和过渡态。对给定点可以计算简谐振动频率和零点能。

下面是使用时需要输入的指令概述。详细的解释请参考下一节。

第一次使用:

```
unzip INTPOL.1.1.zip
g++ -O3 intpol.cpp -o intpol.x
```

生成新的势能面程序并计算系数:

```
cp template.f90 intpol.x <工作目录>
cd <工作目录>
./intpol.x <输入文件>
cd <输出目录>
./compile.sh
./prep.x
```

检查插值误差:

```
./test.x
```

进行几何优化 (寻找最小值和过渡态) 和频率计算:

```
./run.x
```

2 详细运行步骤

解压源程序压缩包。

```
unzip INTPOL.1.1.zip
```

有两个主要文件：

`intpol.cpp` 是驱动文件，用于读取输入文件和生成预编译头文件。

`template.f90` 是主程序模板文件，包含插值程序相关的所有 `fortran` 代码片段。注意不能直接编译该文件，因为该文件中很多代码片段是相冲突的。

下面是运行方法：

2.1 编译 `intpol.cpp`

编译 `intpol.cpp` 得到可执行文件 `intpol.x`。注意该程序和具体的需要插值的体系无关，所以只需要编译一次。以后无论更改输入文件还是更改体系，都无需重新编译。输入如下命令：

```
g++ -O3 intpol.cpp -o intpol.x
```

2.2 复制 `intpol.x` 和 `template.f90` 到工作目录

工作目录是自己选定的任意目录。下面以附带的用于示例的 `HCILi` 体系为例，工作目录是 `examples/hcili` 目录。因此需要将 `intpol.x` 和 `template.f90` 复制到 `examples/hcili`：

```
cp template.f90 intpol.x examples/hcili
```

下面的操作都在工作目录进行，所以转到工作目录：

```
cd examples/hcili
```

2.3 准备输入文件及相关 `ab initio` 数据

输入文件描述采用何种插值方法及各种参数细节。输入文件的具体语法将在第 2 节进行解释。这里 `examples/hcili` 目录中已经准备好一个输入文件 `input-r2s.txt`，这个输入文件指定的是二维再生核+一维样条的混合方法。

这里已经准备好 `HCILi` 体系的势能离散点数据和三个二体势数据，共 4 个文件，存放在 `orig_data` 文件夹内。当用户自己准备这些离散点数据时，文件名和路径都可以任意指定，只要在 `input-r2s.txt` 输入文件中写明这些数据文件所在位置的相对路径即可（相对工作目录的路径）。

2.4 读取输入文件

接下来读取并自动分析输入文件：

```
./intpol.x input-r2s.txt
```

这一步会生成许多输出文件，它们会被存放在一个指定的输出目录 `hclli-r2s`。该目录的名字是在 `input-r2s.txt` 中给定的。下面进入到这个输出目录 `hclli-r2s`：

```
cd hclli-r2s
```

2.5 编译

在 `hclli-r2s` 会有一个自动生成的脚本 `compile.sh` 用于编译。运行该脚本得到插值程序和可执行程序：

```
./compile.sh
```

2.6 检查结果

编译完会得到 `prep.f90`, `test.f90`, `calc.f90`, `run.f90`, `prep.x`, `test.x`, `run.x` 几个文件。

`prep.f90` 这是用于计算系数的 `fortran` 源程序。无论采用何种插值方法，在进行计算之前，都需要先计算系数。计算系数将产生系数文件 `*-prep.txt`。该文件可以重复利用，只要不再更改势能面参数，就不用重新计算系数。

`test.f90` 这是用于检查势能面插值效果 (计算误差) 的 `fortran` 源程序。

`calc.f90` 这是势能面求值程序，可以和别的外部程序 (比如动力学程序) 一起编译。

`run.f90` 这是几何优化和频率计算程序。只有输入文件中要求计算频率或进行几何优化时，才会产生该文件。该程序会将优化得到的坐标和频率输出到屏幕上。

`prep.x` 和 `test.x` 分别是编译 `prep.f90` 和 `test.f90` 得到的，可以先执行 `./prep.x` 计算系数，然后执行 `./test.x` 计算势能面误差。如果不关心误差也可以不执行 `./test.x`。

`run.x` 是编译 `run.f90` 得到的。如果想直接从屏幕上读取几何优化和频率计算结果，则执行

```
./run.x
```

如果想保存该结果供以后引用，则可以执行

```
./run.x > run.out
```

除此之外还有一些 txt 文件会被程序引用。每个程序并不需要所有这些 txt 文件。下面*表示特定的体系名称。

*-pes-main.txt 是经过预处理的主要的 ab initio 数据。

*-pes-mbrab.txt, *-pes-mbrbc.txt, *-pes-mbrac.txt 是经过预处理的二体势 ab initio 数据。

*-pes-param.txt 是包含距离型再生核插值指数和再生核正规化参数的参数文件。如果指定了几何优化或者频率计算, 该文件还会包含几何优化的起始点和其他参数。该文件可能包含几个 namelist。第一个 namelist 是 rkhs, 包含再生核相关的参数。

在 rkhs 这个 namelist 里面, 第一个变量 r_exp 是再生核插值指数, 第二个变量 r_alpha 是正规化参数。每个变量第一个数对应多体展开的再生核。第二三四个数分别对应第一二三个坐标的再生核。如果没有使用多体展开或对应坐标没有使用再生核, 对应的参数会是 0 并且不起作用。可以修改该文件而不需重新编译程序。但是修改该文件以后, 一般需要重新进行系数计算。

如果指定了几何优化或者频率计算, 会有 namelist point1, point2, ..., opt1, opt2 等等。

在 point 系列的 namelist 里面, 只有一个变量 x, 有三个分量, 表示三个坐标。这三个坐标指定了要进行频率计算或者几何优化的初始点。如果想在其他的点进行几何优化或者频率计算, 只需修改该参数文件而无需重新编译程序。point 系列的 namelist 出现顺序和次数是和输入文件中的 Point 指令出现的顺序和次数一一对应的。

在 opt 系列的 namelist 里面, 包含了每次进行几何优化的参数。iter 指定进行几何优化的最大迭代步数。root 指定优化到最小值点 (1) 或者优化到过渡态 (2)。step_len 指定每次迭代的最大步长。step_conv 和 f_conv 分别是判断迭代收敛的步长和力 (即能量导数) 阈值。只有这两个条件同时满足才会判定收敛。可以直接修改这些参数然后重新执行程序而无需重新编译。

*-pes-prep.txt 是计算系数得到的系数文件。

*-pes-manybody.txt 是包含二体势 ab initio 数据和对应系数的系数文件。

prep.f90 在执行时需要*-pes-main.txt, *-pes-param.txt。如果使用了多体展开, 还需要*-pes-mbrab.txt, *-pes-mbrbc.txt, *-pes-mbrac.txt。该程序执行完会产生*-pes-prep.txt。如果使用了多体展开, 还会产生*-pes-manybody.txt。

calc.f90/test.f90/run.f90 在执行时需要*-pes-main.txt, *-pes-param.txt, *-pes-prep.txt。如果使用了多体展开, 还需要*-pes-manybody.txt。

在 calc.f90 中, 调用势能面子程序的方法是:

call intpol_main(o) 初始化。

call intpol_main(1, x, y, z, v) 计算坐标 (x, y, z) 的势能值 v。

call intpol_main(3, x, y, z, odo, dv) 计算坐标 (x, y, z) 的势能对坐标一阶导数 dv(1:3)。各分量分别为 dx, dy, dz。

call intpol_main(6, x, y, z, odo, dv) 计算坐标 (x, y, z) 的势能对坐标二阶导数 dv(1:6)。各分量分别为 dxdx, dxdy, dxdz, dydy, dydz, dzdz。

有时在别的程序直接写 call intpol_main 时会出现一些问题。这时可以在对应的 subroutine 的 implicit none 语句后面加上下面的 interface。之后便可以成功调用 intpol_main。

```
interface
  subroutine intpol_main(do_type, x, y, z, v, dv)
    implicit none
    integer :: do_type
    real(8), optional :: x, y, z, v, dv(0:do_type - 1)
  end subroutine intpol_main
end interface
```

3 输入语法

输入文件中可以使用感叹号 ! 加入注释语句。参数赋值的格式为:

参数名 = 参数值;

当要求多个参数值时, 各参数值可以用空格或 Tab 隔开。每条赋值句用分号;结尾, 多个赋值可以写在一行上。除了 Point, Frequencies 这些对应几何优化和频率计算的指令以外, 参数之间没有顺序要求。

有些参数需要放在对应的组中。一个组可以包含一些特定的参数。组的格式为:

{ 组名: 参数名 = 参数值; 参数名 = 参数值; ... }

不需要放在组中的参数称为全局参数。

允许的组名为: ManyBody, Spline, RKHS, Optimization。分别用于指定多体展开, 样条插值和再生核插值的细节参数。如果没有使用某些插值方法, 则不用在输入文件中包括这些组。如果对多个插值步骤使用了某一方法, 可能需要使用对应的组多次。除了 Optimization 属于对应几何优化的指令外, 其他组之间没有顺序要求。

组名和参数名不区分大小写。下面依次介绍所有的参数。

3.1 全局参数

3.1.1 ManyBody

可能的值: True 或 False。表示是否使用多体展开。

如果使用多体展开,则需提供独立的二体数据。虽然在旧版程序中二体数据可以自动从三体数据得到。二体数据要尽量光滑。二体数据也可以单独计算二体势得到,但是要注意这时需要给每个二体数据单独指定 VCut 和 VMin 参数(在 ManyBody 组中)。

多体展开的原理是减少三体项的变化幅度,从而减小整体误差。多体展开是否可以改进样条方法的插值效果尚不明确。由于再生核对函数渐近区特性有限制,当插值方法包括再生核部分时,强烈建议启用多体展开。

3.1.2 AtomName

值: 三个字符串,用空格隔开。依次对应 A、B、C 原子的元素名称或自定义名称。

如果进行频率计算或几何优化,这些名称将会被用到频率计算和几何优化的输出中。

3.1.3 AtomMass

值: 三个实数,可以以 amu 为单位。依次对应 A、B、C 原子的质量。

原子质量用于振动频率计算,对势能面插值不影响。为了得到准确的振动频率,必须使用 amu(相对原子质量)单位。如果不进行频率计算,则可以任意选择单位。如果使用雅克比坐标,将会使用该参数计算双原子质心,用以实现坐标变换。

3.1.4 Coordinate

值: 三个特定格式字符串,见下面的举例。表示三个插值坐标的含义。

如果是距离坐标,用 R 开头;如果是角度坐标,用 X 开头。后面使用 ABCM 代表原子。M 用于雅克比坐标所需的中点位置。例如

RAB RBC RAC 表示选取了三个内坐标

RAB RBC XABC 表示选取了两个距离坐标及其夹角

RAM RBC XAMC 表示选取 A+BC 构形的雅克比坐标

XBMA RBM RAC 表示选取 B+AC 构形的雅克比坐标

距离坐标的单位可以是任意的,但是需要统一单位,通常可以取原子单位。不同距离单位对再生核插值会影响结果。角度单位必须是度(0~360),通常考虑到对称性只需取遍 0~180。如果要求进行频率计算,要求距离单位必须为原子单位。

3.1.5 Method

值：下面各种给定的值之一。表示插值方法。这里给出对每个坐标依次采用哪种方法进行插值。只需给出方法名称。每种方法的具体参数在后面的小节中指定。通常，S 表示样条，R 表示再生核。

推荐的方法：SSS、R2S。可以得到准确的一阶和二阶导数。

可能的取值有下面几种组合：

SSS 三维立方样条 (即纯三维样条，属于分三步的分步插值。部分区域对称性可能较差，准确性较高。步数：3)

R3 对三个坐标整体使用三维再生核 (即纯再生核。整体对称性好，系数计算很慢且需要大量内存，准确性可能不高，可用于完全非网格的点分布，但并不建议使用高度非网格分布，因其会降低势能面求值速度。步数：1)

RRR 对三个坐标分别使用三个一维再生核 (即分步插值的再生核。对称性可能较差，速度快，要求网格点分布。导数会很不准确，可能导致几何优化难以收敛。步数：3)

R2R 对前两个坐标整体使用二维再生核，对最后一个坐标使用一维再生核 (与纯再生核相比，降低了整体对称性，提高了系数计算速度，提高了准确性。前两个坐标可以使用非网格点分布。导数不准确。步数：2)

RR2 对第一个坐标使用一维再生核，对后两个坐标整体使用二维再生核 (求值速度会非常慢，导数不准确。步数：2)

R2S 对前两个坐标整体使用二维再生核，对最后一个坐标使用一维样条 (即传统的混合方法，属于分两步的分步插值。整体对称性与纯三维样条相比更高，计算速度快，准确性较高。可以给出准确的解析一阶和二阶导数。步数：2)

SR2 对第一个坐标使用一维样条，对后两个坐标整体使用二维再生核 (步数：2)

SRR 对三个坐标依次使用样条、再生核、再生核 (分三步的混合分步插值。步数：3)

RSR 对三个坐标依次使用再生核、样条、再生核 (分三步的混合分步插值。步数：3)

RRS 对三个坐标依次使用再生核、再生核、样条 (分三步的混合分步插值。步数：3)

RSS 对三个坐标依次使用再生核、样条、样条 (分三步的混合分步插值。步数：3)

SRS 对三个坐标依次使用样条、再生核、样条 (分三步的混合分步插值。步数：3)

SSR 对三个坐标依次使用样条、样条、再生核 (分三步的混合分步插值。步数：3)

对上述所有方法，即便说明需要网格分布，实际上对于非网格分布算法也能运行，但是视具体情况可能一定程度上会降低插值效果(当然如果非网格部分的点选取合适也可以提升差插值效果)。可以使用某种非网格分布，然后计算插值误差，同时检查增加的点是否能提升频率的准确性，就可以知道该种分布是否可以改善插值效果。

当需要一阶导数或二阶导数时，对多步方法，若后续步骤为再生核，可能导数的效果不好，因为再生核的形式可能不适合对导数函数进行插值。但是该问题不影响势能值的效果。当分步插值中，第二或第三步为再生核时，求值速度会显著变慢。

3.1.6 MainFile

值：文件相对路径。指定总能量文件名。

该文件包含总能量，如果使用了多体展开，也不需要用户手动从中减去二体势。

3.1.7 MainColumn

值：四个整数。分别为第一、二、三个坐标和能量值所在列的序号。列的序号从 1 开始。

注意，尽管在不同的插值方法中可以对每一坐标的处理方式做调整，但是对于分步插值而言，无论选择何种插值方法，排在后面的坐标一定会后处理。而不同的处理顺序也会对插值效果造成影响。所以，有时可以通过更改此参数，调整数据列中三个坐标的给出顺序，来改善插值效果。当修改此顺序时，注意参数“Coordinate”也应做相应调整，以保持对应。

3.1.8 OutputDir

值：文件相对路径。指定输出文件夹名称。

经过处理的数据文件、参数文件、程序生成脚本、头文件等会输出到此文件夹。程序模板文件会复制到此文件夹。

3.1.9 VCut

值：实数。能量截断值。能量(减去 VMin 之前的)大于该值的点的能量将被设置为该值。

3.1.10 VMin

值：实数。能量都会被减去该值。该值只是一个能量参考点的更改，不影响插值效果。可以设为 0 或能量最小值或者任何自定的参考点。更改参考点后，插值程序输出的数值会产生平移，即都以该值为参考点。

3.2 组：ManyBody

当 ManyBody 参数的值为 True 时应提供该组。如果不使用多体展开，则可以不使用此组。

3.2.1 Method

值：R 或 S。指定二体势插值方法。S 表示样条，R 表示再生核。

3.2.2 E1

值：实数。一体势能量 (减去全局参数 VMin 之前的)。该能量一般是三个原子相距无穷远时的能量值。

3.2.3 VCut

值：三个实数。分别表示 rab、rbc、rac 的二体势能量截断值 (减去各自的 VMin 之前的)。如果二体势原始数据的能量参考点和总能量参考点是一样的，那么该值都设为和全局参数 VCut 一样即可。

3.2.4 VMin

值：三个实数。rab、rbc、rac 的二体势能量都会被减去该值。如果二体势原始数据的能量参考点和总能量参考点是一样的，那么该值都设为和全局参数 VMin 一样即可。

3.2.5 RABFile

值：文件相对路径。指定 rab 二体势能量文件名。

3.2.6 RBCFile

值：文件相对路径。指定 rbc 二体势能量文件名。

3.2.7 RACFile

值：文件相对路径。指定 rac 二体势能量文件名。

3.2.8 RABColumn

值：两个整数。分别为 RABFile 文件中 rab 坐标和能量值所在列的序号。列的序号从 1 开始。

3.2.9 RBCColumn

值：两个整数。分别为 RBCFile 文件中 rbc 坐标和能量值所在列的序号。列的序号从 1 开始。

3.2.10 RACColumn

值：两个整数。分别为 RACFile 文件中 rac 坐标和能量值所在列的序号。列的序号从 1 开始。

3.3 组：Spline

该组指定样条插值的具体参数。视具体情况，可以有多个。

3.3.1 Dim

值：一个整数，0, 1, 2, 或 3。

0 表示该组描述多体展开的插值参数。1 2 3 分别表示该组描述第一二三个坐标的插值参数。

3.3.2 Boundary

值：natural 或 clamp。表示样条插值的边界条件。

natural 自然样条边界条件。要求边界处二阶导数为零。当该坐标为距离坐标时建议选用。

clamp 钳制边界条件。要求边界处一阶导数为零。当该坐标为角度坐标时建议选用。

3.3.3 Fast

值: True 或 False。是否使用快速样条。

只有该小节对应维度为 2 或 3 时, 才能使用快速样条。第一个坐标的求值理论上不能被加速。快速样条会造成较大的浮点误差, 导致与 *ab initio* 固定小数位数的随机偏离, 该偏离一般对计算影响不大。如果不使用快速样条, 将降低求值速度。也可以部分使用快速样条。

注意: 快速样条在目前版本的程序中尚未实现, 所以该值必须设为 False。

3.4 组: RKHS

该组指定再生核插值的具体参数。视具体情况, 可以有多个。

3.4.1 Dim

值: 一个整数, 0, 1, 2, 或 3。

0 表示该组描述多体展开的插值参数。1 2 3 分别表示该组描述第一二三个坐标的插值参数。

3.4.2 Type

值: distancelike 或 anglelike。表示再生核类型。

distancelike 距离型再生核。当该坐标为距离坐标时建议选用。

anglelike 角度型再生核。当该坐标为角度坐标时建议选用。

3.4.3 Exp

值: 实数。表示距离型再生核的指数。

该指数越大, 表示该坐标对应的两个原子之间相互作用随距离增大衰减越快。只对距离型再生核需要指定, 通常取为 6。对角度型再生核应设为 0, 表示此参数不适用。

3.4.4 Regularization

值: 实数。表示正规化参数。

用于降低求解系数的病态性。该系数越大, 方程病态性越低, 拟合出的函数越光滑, 但是与 *ab initio* 数据的偏离越高。该系数越小, 拟合出的函数越不光滑, 与 *ab initio* 的偏离越小。当数据点不多时, 该参数取为 0 也是可以的。对二体项的插值建议取为 0。其他情况通常取为 $1\text{E-}14$ 左右。当采用二维或二维以上的再生核时, 对应的各个维度的正规化参数必须一样。

3.5 频率和几何优化

频率计算和几何优化通过指令 **Frequencies/Freq**, **Point** 和 **Optimization/Opt** 来实现。其中 **Frequencies** 和 **Point** 是参数名, **Optimization** 是组名, 这意味着 **Frequencies** 无需放在大括号中, 而 **Optimization** 必须放在大括号中并且加冒号。

通常, 频率需要在几何优化后的点 (最小值或过渡态) 进行计算。在其他一般点进行频率计算没有意义, 因为不满足简谐近似的条件 (一阶导数为零)。所以一般的执行顺序是先指定一个初始点, 然后优化到该点附近的过渡态或者最小值, 然后在优化的点计算频率。对应的输入指令如下:

```
Point = 1.0 1.0 90.0;  
{ Optimization: Type = minimum; }  
Frequencies;
```

其中 **Point** 指令指定了一个初始点, **Optimization: Type = minimum** 指令将寻找该点附近的最小值, 最后 **Frequencies** 指令计算该最小值点的频率。不带参数值 **Point** 指令将计算当前点的能量和导数, 比如

```
Point = 1.0 1.0 90.0;  
{ Optimization: Type = minimum; }  
Point;
```

的意思是, 指定初始点为 (1, 1, 90), 然后优化到附近的最小值点, 最后计算最小值点的能量和导数。最后一步计算出的导数理论上应该非常接近零。

除此之外, 也可进行多个不同点的几何优化和频率计算, 只要按顺序执行这些指令:

```
Point = 1.0 1.0 90.0;  
{ Optimization: Type = minimum; }  
Frequencies;  
Point = 2.0 2.0 30.0;  
{ Optimization: Type = transition; }  
Frequencies;
```

下面是每个指令的详细解释。

3.5.1 Point

值: 没有值或给出三个坐标。若给出坐标, 三个坐标依次对应 **Coordinate** 参数指定的含义。

用于指定几何优化或者频率计算的点, 并在该点进行单点能计算和导数计算 (基于构造的势能面)。如果不给出坐标, 则在当前点进行单点能和导数计算。在任何 **Frequencies** 或者

Optimization 指令之前，必须有至少一个带坐标值的 Point 指令。因为无法在不给定点的情况下计算频率或进行几何优化。

3.5.2 Frequencies/Freq

值：无值。用于在当前点计算振动频率和零点能。结果在执行产生的 run.x 程序时输出。

3.6 组：Optimization/Opt

该组指定几何优化的具体参数。每个参数都有对应的默认值。如果采取默认值，则可以省略该参数。几何优化的起始点通过在该组之前的 Point 指令指定。若要省略所有参数进行几何优化，可以在输入文件中写：

```
{ Optimization: }
```

下面给出该组中可以包含的参数及其默认值。这些参数在编译后都可以在产生的参数文件中更改。几何优化可能因为不收敛而失败。如果几何优化失败，将不会执行该指令后的所有指令而直接退出。几何优化会转换到内坐标中迭代，完成后后转换回原坐标。

3.6.1 Type

值：transition 或 minimum。默认值：minimum。

minimum 指定优化到最小值点。transition 指定优化到过渡态。

3.6.2 Iter

值：整数。默认值：100。

指定几何优化的最大迭代次数。如果步长过小通常需要较大的迭代次数。如果经过最大迭代次数而不能收敛，将会判定几何优化失败。

3.6.3 StepLength

值：实数。默认值：0.1。

指定几何优化的最大步长。步长过大会降低精度。步长过小可能导致收敛慢。

3.6.4 StepConv

值：实数。默认值：1e-8。指定几何优化的步长收敛阈值。小于此步长并且满足其他收敛条件，将停止迭代。

3.6.5 ForceConv

值：实数。默认值：1e-8。指定几何优化的导数收敛阈值。导数矢量的长度小于此值并且满足其他收敛条件，将停止迭代。

4 参考样例

程序附带了 NH₂ 体系和 HCILi 体系的混合(R2S)插值、三维样条插值、多体展开的三维样条插值和三维再生核插值的输入文件样例。其中 NH₂ 体系是非网格点的情形。通过阅读这些样例的输入文件，可以了解各种插值方法的参数指定细节。按照第一节所示的命令分别编译这些输入文件，并检查结果，可以检查各种插值方法的适用性。

5 引用

程序作者：Huanchen Zhai

Email: stczhc@gmail.com

混合方法引用文献：Huanchen Zhai, and Shi Ying Lin. “A Fast Hybrid Method for Constructing Multidimensional Potential Energy Surfaces From *ab initio* Calculations: A New Global Analytic PES of NH₂ System”, *Chemical Physics*, 2015, **455** (7), pp 57-64.

再生核方法引用文献：T.S. Ho, H. Rabitz, *J. Chem. Phys.* **104** (1996) 2584.

样条方法引用文献：W.H. Press, S.A. Teukolsky, W.T. Vetterling, B.P. Flannery, *NUMERICAL RECIPES IN FORTRAN 77*, Cambridge University Press, Cambridge, 1992.

几何优化引用文献：(a) Jun-Qiang Sun and Klaus Ruedenberg, *J. Chem. Phys.* **99** (1993) 5257. (b) Jun-Qiang Sun, Klaus Ruedenberg and Gregory J. Atchity, *J. Chem. Phys.* **99** (1993) 5276. (c) Jun-Qiang Sun and Klaus Ruedenberg, *J. Chem. Phys.* **101** (1994) 2157.