

УДК 519.658

ПРИМЕНЕНИЕ ОПТИМИЗАЦИОННЫХ МЕТОДОВ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ ПАРАМЕТРИЧЕСКОЙ ИДЕНТИФИКАЦИИ ПОТЕНЦИАЛОВ МЕЖАТОМНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ¹⁾

© 2014 г. К. К. Абгарян, М. А. Посыпкин

(119333 Москва, ул. Вавилова, 40, ВЦ РАН)

e-mail: kristal83@mail.ru, mposypkin@gmail.com

Поступила в редакцию 29.07.2014 г.

Для решения задач параметрической идентификации потенциалов межатомного взаимодействия используются различные методы оптимизации. Рассматривается задача подбора параметров потенциала Терсоффа применительно к однокомпонентным кристаллам с ковалентным типом химической связи. Библ. 13. Фиг. 3.

Ключевые слова: оптимизационные методы, параметрическая идентификация, целевая функция, градиентные методы, потенциал Терсоффа, программный комплекс.

DOI: 10.7868/S0044466914120023

ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время особенно перспективным представляется развитие и применение оптимизационных методов для решения актуальной задачи предсказательного компьютерного моделирования кристаллических структур с использованием многомасштабных подходов (см. [1], [2]). При таком подходе результаты первопринципного (см. [3], [4]) моделирования атомной структуры и электронных свойств систем, состоящих из 200–1000 атомов, используются в качестве входных данных для моделирования более сложных структур, состоящих из 1000–1 000 000 атомов. Такие подходы дают широкие возможности для предсказательного моделирования структур с дефектами, позволяют рассматривать различные динамические процессы (протекающие во времени), такие как диффузия, адгезия и другие. На каждом уровне масштаба можно сформулировать задачу в экстремальной постановке и применять соответствующие методы оптимизации. На первом уровне масштаба в рамках теории функционала электронной плотности (см. [2], [3]) решается оптимизационная задача нахождения конфигурации базисных атомов соответствующей минимальному значению полной энергии системы путем минимизации функционала энергии системы. В известных пакетах прикладных программ, таких как VASP (<http://cms.mpi.univie.ac.at/vasp/>), Quantum ESPRESSO и других, реализован данный подход.

Увеличить число частиц в рассматриваемых системах позволяет переход на следующий уровень масштабной иерархии к молекулярно-динамическому моделированию. На данном уровне используются эмпирические потенциалы межатомного взаимодействия. Важнейшим этапом молекулярно-динамического моделирования является структурная идентификация потенциалов для конкретного кристаллического материала, которая состоит в подборе вида потенциала (определении структуры потенциала), подходящего для описания конкретной кристаллической структуры, характеризующейся химическим составом, геометрией и типом химической связи. Для определения значений параметров выбранного потенциала межатомного взаимодействия решается оптимизационная задача параметрической идентификации. Применяются методы локальной и глобальной оптимизации (см. [5], [6]). При этом значения физических величин, рассчитанные первопринципными методами, могут использоваться как эталонные значения в процессе решения данной оптимизационной задачи (см. [6]).

¹⁾ Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (код проекта 14-11-00782).

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ ОПТИМИЗАЦИИ

Оптимизационная задача может быть формально записана как задача минимизации следующего функционала:

$$F(\xi) = \sum_{i=1}^m \omega_i (f_i(\xi) - \hat{f}_i)^2 \rightarrow \min, \quad \xi \in X, \quad (1)$$

в котором \hat{f}_i — эталонное значение i -й характеристики, $f_i(\xi)$ — значение характеристики, полученное в результате расчетов для заданного набора базисных атомов, $\xi \in R^n$ — вектор подбираемых параметров, ω_i — весовой коэффициент. Допустимое множество $X \subseteq R^n$ является параллелепипедом, границы которого выбираются таким образом, чтобы заведомо содержать возможный диапазон параметров. В задаче (1) требуется найти набор параметров $\xi \in R^n$, минимизирующий значение функции $F(\xi)$. Такой набор будет обеспечивать минимальное отклонение рассчитанных характеристик материала от эталонных значений, тем самым наиболее точно описывая моделируемые свойства кристалла.

В работе предложен подход, основанный на воспроизведении упругих свойств кристалла. Он базируется на рассчитанном с помощью первопринципного моделирования значении когезионной энергии, экспериментально определенных значениях упругих постоянных и других важнейших характеристиках структурных свойств рассматриваемого материала. Количество слагаемых в (1) варьируется в зависимости от материала.

В результате можно составить функцию вида

$$F(\xi_1, \dots, \xi_n) = \sum_i (\omega_i (A_i(\xi) - \bar{A}_i)^2) \rightarrow \min,$$

где ξ_1, \dots, ξ_n — параметры потенциала, по которым ведется оптимизация, A_i — величины, полученные ab initio расчетом или экспериментально.

Решение ищется на множестве $X \in R^n$, состоящем из всех допустимых значений искомым параметров, где $\xi = (\xi_1, \dots, \xi_n) \in X \in R^n$ — вектор подбираемых параметров.

Формирование вида минимизируемой функции $F(\xi_1, \dots, \xi_n)$ производится исходя из знаний о химическом составе, кристаллической структуре и типе связи моделируемого материала. Даже в простейшем кубическом случае функция $F(\xi_1, \dots, \xi_n)$ является многоэкстремальной.

Для решения поставленной задачи на начальном этапе необходимо определить допустимые интервалы поиска параметров потенциала: $[\xi_i, \bar{\xi}_i]$, $i = 1, \dots, n$, где n — общее число определяемых параметров потенциала. Это можно сделать различными способами. Далее будет показано, как это делалось при решении задачи параметрической идентификации параметров потенциала Терсоффа (см. [7]). Для нахождения точки со значениями параметров (ξ_1, \dots, ξ_n) , достаточно близкими к глобальному минимуму, используются методы глобальной оптимизации, такие как метод Монте-Карло, метод сканирования, Granular Random Search (см. [7]) и т.д. Далее найденная точка используется в качестве начальной для более точного поиска локального минимума, например методом градиентного спуска с адаптивным выбором шага, GRS (granular radial search) (см. [8]), и другими.

Необходимо отметить, что описанные выше процедуры проводятся при определенном, фиксированном положении базисных атомов рассматриваемой кристаллической структуры. Вследствие этого мы не можем быть уверены, что после решения задачи параметрической идентификации в данной постановке положения базисных атомов будут соответствовать минимуму потенциальной энергии системы.

Поэтому следующим шагом является вычисление сил, действующих на каждый из атомов элементарной ячейки, и смещение атомов в соответствии с направлением действия сил до достижения ими положений, соответствующих минимуму энергии. Эта процедура называется *релаксацией структуры*. Направления сил вычисляются исходя из градиента потенциальной энергии. Возможна альтернативная процедура релаксации — оптимизация по координатам частиц, представляющая частицы в положения, соответствующие минимуму суммарной потенциальной энергии системы.

В том случае, если атомы при найденных параметрах потенциала испытывают значительные смещения от требуемых положений равновесия либо свойства материала сильно отклонились от требуемых, следует провести повторно процедуру параметрической идентификации для выбранного потенциала, включив в набор эталонных значений в (1) значения тех свойств, описание которых необходимо уточнить.

ЧИСЛЕННЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ. РЕШЕНИЕ ПРИКЛАДНОЙ ЗАДАЧИ

Рассматривается задача подбора параметров потенциала Терсоффа (см. [7]) применительно к однокомпонентным кристаллам. Данный потенциал является примером многочастичного потенциала, основанного на концепции порядка связей: сила связи между двумя атомами не постоянна, а зависит от локального окружения. Такие потенциалы могут использоваться для описания свойств кристаллов с ковалентной связью (например углерода, кремния, германия и других).

Потенциал Терсоффа позволяет вычислить когезионную энергию E_{coh} взаимодействия группы атомов по следующей формуле:

$$\begin{aligned}
 E_{\text{coh}} &= \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V_{ij}, \\
 V_{ij} &= f_c(r_{ij})(V_R(r_{ij}) - b_{ij}V_A(r_{ij})), \\
 f_c(r) &= \begin{cases} 1, & r < R - R_{\text{cut}}, \\ \frac{1}{2} \left(1 - \sin \left(\frac{\pi(r - R)}{2R_{\text{cut}}} \right) \right), & R - R_{\text{cut}} < r < R + R_{\text{cut}}, \\ 0, & r > R + R_{\text{cut}}, \end{cases} \\
 V_R(r_{ij}) &= \frac{D_e}{S - 1} \exp(-\beta \sqrt{2S}(r_{ij} - r_e)), \\
 V_A(r_{ij}) &= \frac{SD_e}{S - 1} \exp\left(-\beta \sqrt{\frac{2}{S}}(r_{ij} - r_e)\right), \\
 b_{ij} &= \left(1 + (\gamma \zeta_{ij})^n\right)^{-1/2n}, \\
 \zeta_{ij} &= \sum_{k \neq i, j} f_c(r_{ik})g(\theta_{ijk})\omega_{ik}, \\
 \omega_{ik} &= \exp\left(\lambda^3 (r_{ij} - r_{ik})^3\right), \\
 g(\theta_{ijk}) &= 1 + \left(\frac{c}{d}\right)^2 - \frac{c^2}{d^2 + (h - \cos \theta_{ijk})^2}.
 \end{aligned}$$

Переменные r_{ij} обозначают расстояния между атомами с номерами i и j соответственно, через θ_{ijk} обозначен угол, образованный векторами, соединяющими атом i с атомами j и k соответственно. Потенциал Терсоффа включает 12 параметров, специфичных для моделируемого вещества: $D_e, r_e, \beta, S, n, \gamma, \lambda, c, d, h, R, R_{\text{cut}}$. При этом параметры R и R_{cut} определяются исходя из полученных экспериментально геометрических характеристик вещества и не нуждаются в подборе.

Далее рассматривается задача идентификации параметров потенциала Терсоффа для изотропных кристаллов с кубической кристаллической решеткой. Согласно закону Гука, малые деформации пропорциональны напряжениям (см. [9]):

$$\sigma = C\varepsilon,$$

где σ — тензор напряжений, ε — тензор деформаций, C — тензор упругих констант, компоненты которого определяются выражениями

$$C_{ij} = \frac{1}{V} \frac{\partial^2 E}{\partial \varepsilon_i \partial \varepsilon_j}, \quad i, j = 1, \dots, 6, \quad (2)$$

где ε_i — соответствующие компоненты тензора деформации кристалла.

Таким образом, $C_{ij}(\xi)$ – значения упругих констант, рассчитанных по формуле (2) с использованием значения когезионной энергии, вычисленной с помощью выбранного потенциала меж-атомного взаимодействия, \hat{C}_{ij} – экспериментальные значения упругих констант. Число независимых упругих констант определяется кристаллической структурой моделируемого материала. Так, при моделировании кубического кристалла остаются лишь три независимые упругие константы C_{11}, C_{12}, C_{44} (см. [9], [10]). Оставшиеся компоненты тензора либо нулевые, либо совпадают с перечисленными. Целевая функция, минимум которой требуется найти для решения задачи идентификации параметров в рассматриваемом случае, имеет следующий вид:

$$f(\xi) = \omega_1(E(\xi) - \hat{E})^2 + \omega_2(a(\xi) - \hat{a})^2 + \omega_3(B(\xi) - \hat{B})^2 + \omega_4(C'(\xi) - \hat{C}')^2 + \\ + \omega_5(C_{44}(\xi) - \hat{C}_{44})^2 + \omega_6(\zeta(\xi) - \hat{\zeta})^2,$$

где $\xi = (D_e, r_e, \beta, S, n, \gamma, \lambda, c, d, h)$ – вектор идентифицируемых параметров. В целевую функцию входят следующие величины:

E – когезионная энергия системы, отнесенная к числу атомов моделируемой совокупности (удельная энергия);

a – константа решетки (характерный размер);

B – модуль объемной упругости;

C' – модуль сдвига;

C_{44} – постоянная эластичности;

ζ – параметр Клейнмана, который характеризует дополнительное изменение решетки при сдвиговой деформации. Это изменение является следствием стремления атомов занять энергетически оптимальное положение.

Величина C_{44} является компонентом тензора упругих постоянных, а модули объемной упругости и сдвига вычисляются через компоненты C_{11} и C_{12} по формулам

$$B = (C_{11} + 2C_{12})/3, \quad C' = (C_{11} - C_{12})/2.$$

Эталонные значения компонент целевой функции, полученные экспериментально либо квантомеханическими методами для монокристалла кремния, взяты из [8]:

$$\hat{E} = -4.63, \quad \hat{a} = 5.43, \quad \hat{B} = 0.97, \quad \hat{C}' = 0.51, \quad \hat{C}_{44} = 0.79, \quad \hat{\zeta} = 0.52.$$

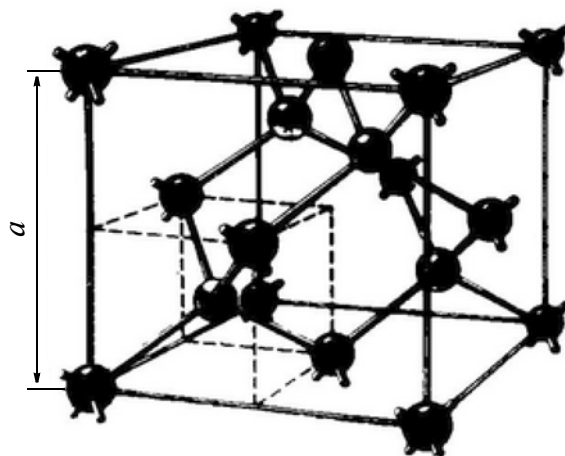
Параллелепипед $X = [\underline{\xi}, \bar{\xi}] = \{\xi \in R^n : \xi_i \leq x_i \leq \bar{\xi}_i\}$ для определения начальных приближений выбирался таким образом, чтобы заведомо содержать возможные значения параметров. Были проанализированы известные значения коэффициентов потенциала Терсоффа для однокомпонентного кристалла кремния. Границы выбирались таким образом, чтобы заведомо содержать значения

$$\underline{\xi} = (0.5, 0.5, 0.5, 0.5, 0.1, 5 \times 10^{-8}, 0.5, 10000, 1, -2),$$

$$\bar{\xi} = (10, 5, 5, 5, 2, 3 \times 10^{-6}, 3, 200000, 30, -0.1).$$

Все расчеты проводились для одной ячейки кристаллической решетки кремния, состоящей из 18 атомов (фиг. 1). При этом учитывались не только взаимодействия между атомами ячейки, но и взаимодействия с соседними атомами в пределах, определяемых радиусом отсечения R_{cut} .

Когезионная энергия рассчитывалась в соответствии с формулами вычисления потенциала Терсоффа, после чего выполнялось деление вычисленного значения на число атомов в ячейке для получения удельной энергии. Компоненты B, C' вычислялись методами аппроксимации отношения изменения энергии к величине соответствующих малых деформаций решетки. Характер деформации, применяемой для вычисления постоянной эластичности C_{44} , таков, что часть атомов смещается с позиций, определяемых деформацией, занимая энергетически оптимальное положение. Это моделируется с помощью процедуры поиска минимума энергии в зависимости от смещения группы внутренних атомов в решетке, определяемого параметром Клейнмана. Также процедура одномерной минимизации применяется для определения при заданных значениях параметров потенциала величины постоянной решетки a .



Фиг. 1. Одна ячейка кристаллической решетки кремния.

Был реализован программный комплекс, включающий в себя следующие модули:

1. модуль создания кристаллической решетки, который заполняет массив координат атомов в соответствии с типом кристаллической решетки и ее характерным размером;
2. модуль вычисления основных характеристик материала и целевой функции $F(x)$;
3. модуль оптимизации, выполняющий поиск минимума $F(x)$ на допустимом множестве X .

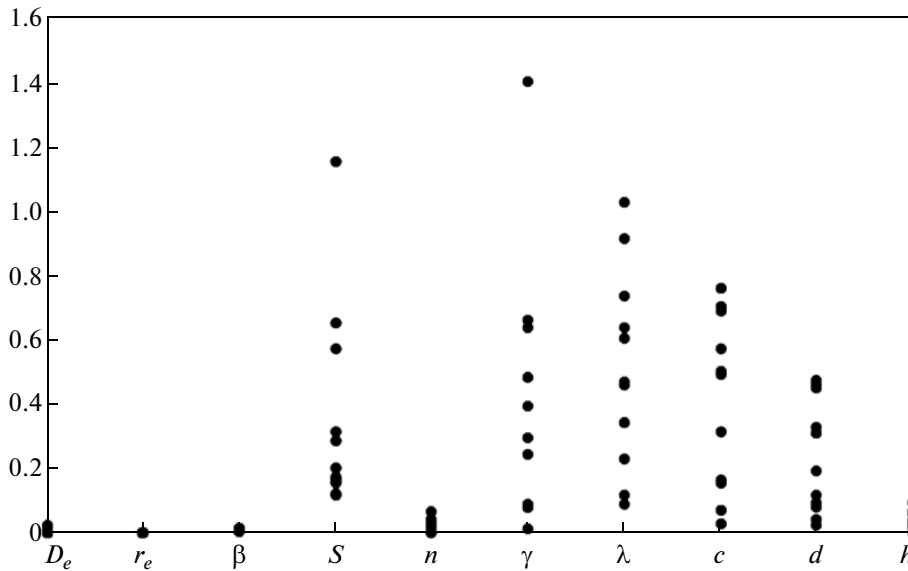
Наиболее сложным компонентом программного комплекса являлся модуль оптимизации, реализованный в рамках библиотеки BNB-Solver (см. [11]). Поставленная задача относится к классу “черного ящика”, т.к. явное выражение для целевой функции не известно и ее значение есть результат работы сложной вычислительной процедуры. Для решения данной задачи был применен подход, состоящий в сочетании методов глобализации поиска, обеспечивающих диверсификацию поиска в пределах допустимого параллелепипеда и локальных методов, позволяющих находить локальный минимум в заданной окрестности.

В качестве метода глобализации поиска был применен метод Монте-Карло, генерирующий последовательность случайных начальных приближений в допустимом параллелепипеде. Использовались равномерно распределенные псевдослучайные числа по каждой из координат в пределах границ параллелепипеда.

Были опробованы два локальных оптимизационных алгоритма. Первый алгоритм — метод градиентного спуска с адаптивным выбором шага. Использовалась численная аппроксимация градиента методом конечных разностей. Второй алгоритм GRS (granular radial search) был предложен в [8]. Метод работает следующим образом: из начальной точки выполняется случайный сдвиг по одному из параметров в заданном диапазоне g . Если удастся уменьшить значение целевой функции, то вновь найденное значение замещает начальное и выполняется новый сдвиг. Начальное значение при этом выбирается случайно в параллелепипеде X . Если процент “удачных” сдвигов, приведших к уменьшению значения целевой функции, становится меньше заданного порога, то уменьшается гранулярность g . Алгоритм останавливается или по превышении верхней границы количества итераций, или когда гранулярность становится слишком малой.

Поскольку характерные значения идентифицируемых параметров сильно различаются, для обеспечения эффективной работы алгоритма необходимо провести их масштабирование. В данном случае применялось линейное масштабирование, где коэффициент, на который умножался соответствующий параметр, выбирался равным $1/\tilde{\xi}_i$, где $\tilde{\xi}_i = (\underline{\xi}_i + \bar{\xi}_i)/2$.

Результаты предварительных вычислительных экспериментов показали, что алгоритм градиентного спуска работает хуже для данной задачи по сравнению с GRS. При ограничении на число итераций, дающем приблизительно одинаковое время работы, алгоритм GRS обеспечивает существенно более высокую точность. В эксперименте с 8-ю запусками из различных начальных приближений с помощью метода GRS было найдено оптимальное значение 0.0002, тогда как применение градиентного спуска позволило получить минимальное значение целевой функции, равное 0.1987.



Фиг. 2. Отклонения в значениях 10-ти параметров для найденных локальных минимумов.

Вычислительный эксперимент был организован следующим образом. Были сгенерированы 32768 случайных начальных приближений, равномерно распределенных в параллелепипеде X . Далее к полученным приближениям применялся алгоритм GRS. Для расчетов использовался сервер с двумя четырехъядерными процессорами Intel(R) Xeon(R) CPU E5620, 2.40GHz. С целью ускорения вычислений запускалось 8 параллельных процессов, каждый из которых обрабатывал 4096 начальных приближений. Общее время расчетов составило примерно 2 суток.

Из найденных локальных минимумов дальнейшей обработке подвергались только те, значение целевой функции в которых не превосходило 10^{-5} . Для таких точек производилась дополнительная численная проверка условия локального минимума. Проверка состояла в том, что в окрестности заданного радиуса случайным образом выбиралось некоторое число точек, в которых вычислялось значение целевой функции. Если хотя бы в одной из них значение оказывалось меньше, чем в предполагаемой точке минимума, то проверка считалась не пройденной. Для экспериментов использовалась окрестность $U(x) = \{y \in R^n : |x_i - y_i| \leq \rho\}$, $\rho = 0.1$. Количество точек вычисления целевой функции было положено равным 1000.

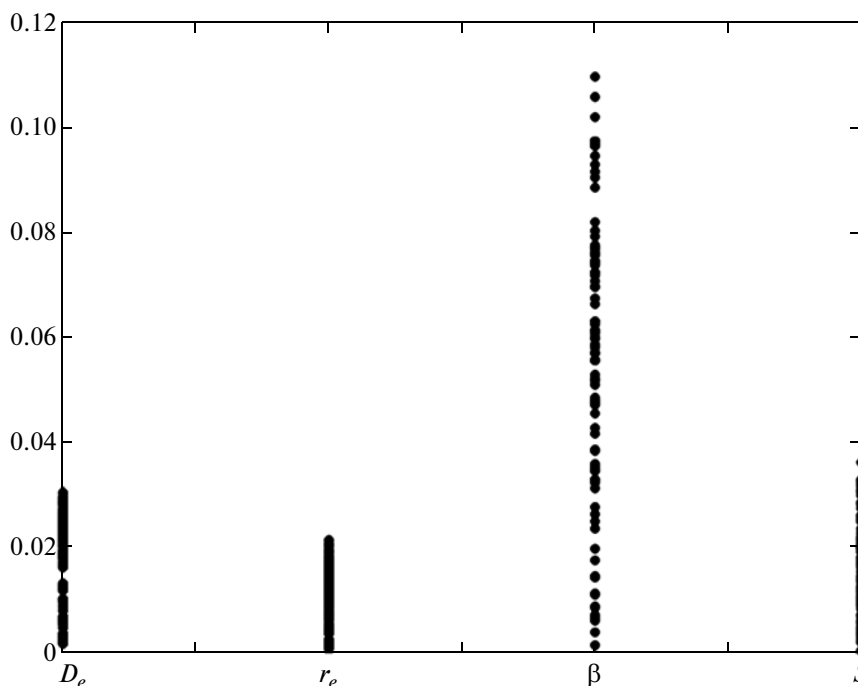
Для 11 сгенерированных точек, удовлетворяющих условию $f(\xi) \leq 10^{-5}$, проверка на локальный минимум прошла успешно. Был проведен анализ отклонения найденных параметров от эталонных значений. По каждому из 10 параметров было вычислено отклонение d_i от эталонного значения по формуле

$$d_i = \frac{|x_i - r_i|}{|r_i|}, \quad i = 1, \dots, 10,$$

где x_i — значение параметра, r_i — эталонное значение параметра. Точки на фиг. 2 соответствуют значениям отклонения для 10 определяемых параметров.

Полученные результаты показывают, что с заданной целевой функцией удастся достаточно точно определить параметры D_e, r_e, β, n, h . Остальные параметры определяются с разной степенью точности, при этом отклонения для некоторых параметров могут достигать существенных величин, в 1.5 раза превышая эталонное значение параметра.

Если же зафиксировать последние 6 параметров, то распределение будет иметь вид, представленный на фиг. 3. При использовании 1024 начальных приближений 112 локальных минимумов имели значение целевой функции меньше 0.001. Несмотря на то что число точек в 10 раз больше, чем в случае 10 параметров, а точность вычислений ниже, разброс значений заметно меньше и находится в приемлемом диапазоне.



Фиг. 3. Отклонения в значениях 4-х параметров для найденных локальных минимумов.

Приведем значения параметров для кремния, соответствующие точке ξ^0 , в которой найдено минимальное значение целевой функции $v_0 = 5 \times 10^{-6}$ и вектор $\hat{\xi}$ эталонных значений параметров из [11]:

$$\xi^0 = (2.36, 2.34, 1.48, 1.73, 0.95, 1.34 \times 10^{-6}, 0.79, 121010, 13.91, -0.42),$$

$$\hat{\xi} = (2.36, 2.34, 1.46, 1.48, 0.94, 1.25 \times 10^{-6}, 1.46, 113031, 14.25, -0.42).$$

Значения основных компонентов целевой функции при этом составляют

$$E(\xi^0) = -4.63, \quad a(\xi^0) = 5.42, \quad B(\xi^0) = 0.98, \quad C'(\xi^0) = 0.51, \quad C_{44}(\xi^0) = 0.80, \quad \zeta(\xi^0) = 0.52.$$

Значения найденных характеристик совпадают с эталонными с точностью до второго знака.

Полученные результаты позволяют сделать вывод, что при заданной точности расчетов ряд параметров определяется не однозначно. Приемлемость полученной точности определения параметров будет определяться результатами молекулярно-динамического моделирования, которое планируется провести в дальнейшем.

Возможны следующие пути повышения однозначности определения параметров:

1. введение в целевую функцию дополнительных слагаемых;
2. фиксация значений “проблемных” параметров потенциала на априорных значениях, обоснованных с физической точки зрения;
3. радикальное повышение точности расчетов за счет настройки параметров используемых методов и применения других методов расчета, в частности, планируется рассмотреть методы глобальной липшицевой оптимизации (см. [12], [13]).

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе рассмотрена задача идентификации параметров потенциала межатомного взаимодействия, которая является одним из этапов процесса математического моделирования материалов. Дана общая постановка и ее уточнение для потенциала Терсоффа. Проведены вычислительные эксперименты для кремния. Результаты экспериментов позволили сравнить эффектив-

ность оптимизационных алгоритмов и оценить возможность идентификации различных параметров. Предложены подходы для борьбы с неоднозначностью определяемых параметров.

Свойства материала в рассматриваемых выше процедурах вычисляются при неизменных относительных координатах атомов (относительные положения атомов в элементарной ячейке зафиксированы), это не гарантирует того, что при полученном потенциале данные положения атомов будут соответствовать минимальной энергии. Поэтому следующим этапом является этап релаксации структуры. Для этого вычисляются силы, действующие на каждый из атомов элементарной ячейки (базисные атомы), а атомы смещаются в соответствии с направлением действия сил до достижения ими положений, соответствующих минимуму энергии. Направления сил вычисляются исходя из градиента потенциальной энергии. В том случае, если атомы для найденных параметров потенциала испытывают значительные смещения от требуемых положений равновесия либо свойства материала сильно отклонились от требуемых, необходимо провести вторичный фитинг, корректирующий некоторые из полученных параметров с включением в число переменных координат тех атомов, отклонение которых выходит за принятые допустимые пределы. Эти исследования планируется провести в будущем.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Абгарян К.К. Применение оптимизационных методов для моделирования многослойных полупроводниковых наносистем // Тр. Ин-та системного анализа РАН. Динамика неоднородных систем. 2010. Т. 53. № 3. С. 6–9.
2. Abgaryan K. Multiscale computational model of multy-layer semiconductor nanostructures // IV Internat. Conference on Optimizat. Meth. and Appl. (OPTIMA – 2013). Petrovac, Montenegro. September, 2013. P. 13–14.
3. Hohenberg P., Kohn W. Inhomogeneous electron gas. Phys. Rev. 1964. V. 136. B864–B871.
4. Kohn W., Sham L.J. Self-consistent equations including exchange and correlation effects // Phys. Rev. 1965. V. 140. A1133–A1138.
5. Abgaryan K., Bazanov D., Mutigillin I. The simulation of the nitridation of the sapphire surface (001) // Materials XXI Internat. Conference “Interaction of ions with the surface”. VIP. 2013. V. 2. P. 99–103.
6. Абгарян К.К., Быков Н.В., Мутигуллин И.В. Применение параллельных вычислений и метода молекулярной динамики для моделирования роста многослойных полупроводниковых наноструктур // Материалы IX междунар. конференции по неравновесным процессам в соплах и струях (NPNJ 2012). Алушта, 25–31 мая 2012. М.: Изд-во МАИ, 2012. С. 457–459.
7. Tersoff J. Empirical interatomic potential for silicon with improved elastic properties // Phys. Rev. B. 1988. V. 38. P. 9902–9905.
8. Powell D. Elasticity, lattice dynamics and parameterisation techniques for the Tersoff potential applied to elemental and type III-V semiconductors. University of Sheffield, 2006.
9. Куммель Ч. Введение в физику твердого тела. М.: Из-во техн.-теорет. лит-ры, 1957.
10. Juzhong S., Stirner T., Hagston W.E., Leyland A., Matthews A. A simple transferable interatomic potential model for binary oxides applied to bulk α - Al_2O_3 and the (0001) α - Al_2O_3 surface // J. Crystal Growth. 2006. V. 290. P. 235–240.
11. Посыпкин М.А. Решение задач глобальной оптимизации в среде распределенных вычислений // Программные продукты и системы. 2010. № 1. С. 23–29.
12. Евтушенко Ю.Г. Численный метод поиска глобального экстремума функций (перебор на неравномерной сетке) // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 1971. Т. 11. №. 6. С. 1390–1403.
13. Сергеев Я.Д., Квасов Д.Е. Диагональные методы глобальной оптимизации. М.: Физматлит, 2008.