Применение быстрого автоматического дифференцирования для вычисления градиента потенциала Терсоффа

А.Ф. Албу

Аннотация. Для решения задач компьютерного моделирования кристаллических структур материалов часто используются градиентные методы оптимизации. При этом возникает необходимость определения точного значения градиента потенциала Терсоффа по специфическим для моделируемого вещества параметрам этого потенциала. На основе методологии быстрого автоматического дифференцирования получены формулы, позволяющие вычислять точное значение указанного выше градиента.

Ключевые слова: потенциал Терсоффа, градиент, быстрое автоматическое дифференцирование.

Введение

При описании и моделировании кристаллической структуры материала, характеризующейся химическим составом, геометрией и типом химической связи, используются потенциалы межатомного взаимодействия. Структурная идентификация потенциалов для конкретного кристаллического материала, которая состоит в подборе параметров потенциала, является одним из важных этапов молекулярно-динамического моделирования. Для решения задач параметрической идентификации потенциалов межатомного взаимодействия в последнее время все большую актуальность приобретает применение различных методов оптимизации [1, 2].

Для описания свойств кристаллов с ковалентной связью (например, углерода, кремния, германия и др.) часто используется потенциал Терсоффа [3]. Он является примером многочастичного потенциала, основанного на концепции порядка связей: сила связи между двумя атомами не постоянна, а зависит от локального окружения.

В работе [2] предложен подход к решению задачи идентификации параметров потенциалов, основанный на воспроизведении упругих свойств кристалла. Он базируется на рассчитанном с помощью первопринципного моделирования значении когезионной энергии, экспериментально определенных значениях упругих постоянных и других характеристиках структурных свойств исследуемого материала. Для достижения указанной цели в работе [2] поставлена оптимизационная задача, которая записана формально как задача минимизации следующего функционала:

$$F(\xi) = \sum_{i=1}^{M} \omega_i \left(f_i(\xi) - \hat{f}_i \right)^2 \to \min, \qquad \xi \in X ,$$

в котором ω_i – весовой коэффициент; $f_i(\xi)$ – значение i-й характеристики, полученное в результате численных расчетов для заданного набора базисных атомов; $\hat{f}_i$ – эталонное значе-

ние i-й характеристики; $\xi \in R^m$ – вектор подбираемых параметров. Решение ищется на множестве $X \subseteq R^m$, которое является параллелепипедом. Его границы выбираются таким образом, чтобы заведомо содержать возможный диапазон параметров. Множество X состоит из всех допустимых значений искомых параметров, где $\xi = (\xi_1,...,\xi_m) \in X \subseteq R^m$, m – число определяемых параметров потенциала. Количество слагаемых для $F(\xi)$ в формуле варьируется в зависимости от материала. Искомый набор параметров будет обеспечивать минимальное отклонение рассчитанных характеристик материала от эталонных значений, тем самым наиболее точно описывая моделируемые свойства кристалла.

Для эффективного решения задачи параметрической идентификации большое значение имеет возможность вычислять градиент потенциала Терсоффа по искомым параметрам. Естественный путь для этого – использовать метод конечных разностей. Как показали результаты проведенных исследований, этот метод не позволяет вычислять значения градиента потенциала Терсоффа с приемлемой точностью и требует одиннадцать раз вычислять значение самого потенциала. В данной работе для вычисления градиента потенциала Терсоффа по параметрам была применена современная эффективная методология быстрого автоматического дифференцирования [4, 5]. Она позволила получать значения градиента потенциала Терсоффа по параметрам с машинной точностью, при этом затраты машинного времени не превосходили утроенного времени вычисления самого потенциала.

Необходимо отметить, что рассматриваемая оптимизационная задача решается при определенном, фиксированном положении базисных атомов рассматриваемой кристаллической структуры. Решив задачу идентификации параметров в такой постановке, нет уверенности, что положения базисных атомов будут соответствовать минимуму потенциальной энергии системы. Поэтому следующим шагом исследований является оптимизация по координатам частиц, расставляющая частицы в положения, соответствующие минимуму суммарной потенциальной энергии рассматриваемой системы атомов. На этом этапе возникает необходимость вычисления градиента потенциала Терсоффа по координатам атомов.

В работе построен многошаговый процесс вычислений потенциала Терсоффа и сопряженных переменных, с помощью которых на основе методологии быстрого автоматического дифференцирования [4, 5] определяется точное значение градиента потенциала Терсоффа по специфическим для моделируемого вещества параметрам и координатам атомов.

1. Алгоритм вычисления потенциала Терсоффа и сопряженных переменных

Потенциал Терсоффа позволяет вычислить когезионную энергию взаимодействия группы атомов по следующей формуле [3]:

$$E = \sum_{i=1}^{I-1} \sum_{j=i+1}^{I} V_{ij},$$

$$V_{ij} = f_c(r_{ij})\left(V_R(r_{ij}) - b_{ij} V_A(r_{ij})\right),$$

$$f_c(r) = \begin{cases} 1, & r < R - R_{cut} = R_m, \\ \frac{1}{2}\left(1 - \sin\left(\frac{\pi(r-R)}{2R_{cut}}\right)\right), & R_m < r < R_p, \\ 0, & r > R + R_{cut} = R_p, \end{cases}$$

$$V_{ij}^R = V_R(r_{ij}) = \frac{D_e}{S-1}\exp\left(-\beta\sqrt{2S}\,(r_{ij} - r_e)\right),$$

$$V_{ij}^A = V_A(r_{ij}) = \frac{SD_e}{S-1}\exp\left(-\beta\sqrt{\frac{2}{S}}(r_{ij} - r_e)\right),$$

$$b_{ij} = \left(1 + (\gamma\varsigma_{ij})^{\eta}\right)^{-\frac{1}{2\eta}}, \qquad \varsigma_{ij} = \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i,j}}^{I} f_c(r_{ik}) g_{ijk} \omega_{ijk},$$

$$\omega_{ijk} = \exp\left(\lambda^3 \tau_{ijk}\right), \qquad \tau_{ijk} = \left(r_{ij} - r_{ik}\right)^3,$$

$$g_{ijk} = g(\theta_{ijk}) = 1 + \left(\frac{c}{d}\right)^2 - \frac{c^2}{d^2 + (h - \cos\theta_{ijk})^2}.$$

Здесь I – количество атомов в рассматриваемой группе; r_{ij} – расстояния между атомами с номерами i и j; θ_{ijk} – угол, образованный векторами, соединяющими атом i с атомами j

и k соответственно; R и R_{cut} – параметры, определяющиеся из полученных экспериментально геометрических характеристик вещества. Потенциал Терсоффа включает 10 параметров, специфичных для моделируемого вещества: D_e, r_e, β, S, η, γ, λ, c, d, h.

Ниже приводятся общие формулы быстрого автоматического дифференцирования [4, 5], которые и будут использоваться для вычисления градиента потенциала Терсоффа по указанным выше параметрам и по координатам атомов.

Пусть векторы $z \in R^n$ и $u \in R^m$ связаны между собой следующим многошаговым процессом:

$$z_i = F(i, Z_i, U_i), \qquad 1 \le i \le n, \qquad (1)$$

где Z_i – набор векторов z_i, которые входят в правую часть равенства (1), а U_i – набор векторов u_i, которые входят в правую часть этого равенства. Пусть дифференцируемая функция $W(z,u)$ определяет отображение $W: R^n \times R^m \to R^1$. Тогда компоненты градиента сложной функции $\Omega(u) = W(z(u),u)$ относительно независимых переменных u_i вычисляются по формуле:

$$\frac{d\Omega}{du_i} = W_{u_i}(z,u) + \sum_{q \in \overline{K}_i} F_{u_i}^T(q, Z_q, U_q) p_q. \qquad (2)$$

Множители $p_i \in R^n$ – это сопряженные переменные, которые определяются из следующей системы линейных алгебраических уравнений:

$$p_i = W_{z_i}(z,u) + \sum_{q \in \overline{Q}_i} F_{z_i}^T(q, Z_q, U_q) p_q, \qquad (3)$$

где $\overline{Q}_i$ и $\overline{K}_i$ – индексные множества:

$$\overline{Q}_i = \{ j : 1 \le j \le n, \quad z_i \in Z_j \}$$

и

$$\overline{K}_i = \{ j : 1 \le j \le n, \quad u_i \in U_j \}.$$

Для того чтобы воспользоваться этими формулами, представим вычисление значения потенциала Терсоффа в виде многошагового процесса.

Расстояние между атомами с номерами i и j ($i, j = \overline{1, I}, i \ne j$) определяется соотношением:

$$r_{ij} = \sqrt{(x_{1i} - x_{1j})^2 + (x_{2i} - x_{2j})^2 + (x_{3i} - x_{3j})^2}, \ (i \ne j),$$

где (x_{1i}, x_{2i}, x_{3i}) – координаты i-ого атома. Если θ_{ijk} – угол, образованный векторами, соединяющими атом i с атомами j и k, тогда $q_{ijk} = \cos(\theta_{ijk}) = \dfrac{r_{ij}^2 + r_{ik}^2 - r_{jk}^2}{2 r_{ij} r_{ik}}$.

Применим полученные соотношения к потенциалу Терсоффа. Пусть $\bar{u}$ и $\bar{z}$ – векторы, имеющие координаты: $\bar{u}^T = [u_1, u_2, ..., u_{10}]^T$, $\bar{z}^T = [z_1, z_2, ..., z_{17}]^T$, где

$u_1 = D_e$, $u_2 = r_e$, $u_3 = \beta$, $u_4 = S$, $u_5 = \eta$,

$u_6 = \gamma$, $u_7 = \lambda$, $u_8 = c$, $u_9 = d$, $u_{10} = h$;

$$z_1 = \left\{ z_1^{ijk} = \sqrt{(x_{1i} - x_{1k})^2 + (x_{2i} - x_{2k})^2 + (x_{3i} - x_{3k})^2} \right\},$$

$$z_2 = \left\{ z_2^{ijk} = \sqrt{(x_{1j} - x_{1k})^2 + (x_{2j} - x_{2k})^2 + (x_{3j} - x_{3k})^2} \right\},$$

$$z_3 = \left\{ z_3^{ijk} = q_{ijk} = \frac{(z_{13}^{ij})^2 + (z_1^{ijk})^2 - (z_2^{ijk})^2}{2 z_{13}^{ij} z_1^{ijk}} \right\},$$

$$z_4 = \left\{ z_4^{ijk} = f_c(z_1^{ijk}) \right\},$$

$$z_5 = \left\{ z_5^{ijk} = g_{ijk} = 1 + \left(\frac{u_8}{u_9} \right)^2 - \frac{(u_8)^2}{(u_9)^2 + (u_{10} - z_3^{ijk})^2} \right\},$$

$$z_6 = \left\{ z_6^{ijk} = \tau_{ijk} = \left(z_{13}^{ij} - z_1^{ijk} \right)^3 \right\},$$

$$z_7 = \left\{ z_7^{ijk} = \omega_{ijk} = \exp\left((u_7)^3 z_6^{ijk} \right) \right\},$$

$$z_8 = \left\{ z_8^{ijk} = f_c(r_{ik}) g_{ijk} \omega_{ijk} = z_4^{ijk} z_5^{ijk} z_7^{ijk} \right\},$$

$$z_9 = \left\{ z_9^{ij} = \varsigma_{ij} = \sum_{k=1, k \ne i, j}^{I} z_8^{ijk} \right\},$$

$$z_{10} = \left\{ z_{10}^{ij} = \gamma \varsigma_{ij} = u_6 z_9^{ij} \right\},$$

$$z_{11} = \left\{ z_{11}^{ij} = (\gamma \varsigma_{ij})^{\eta} = (z_{10}^{ij})^{u_5} \right\},$$

$$z_{12} = \left\{ z_{12}^{ij} = b_{ij} = (1 + z_{11}^{ij})^{-\frac{1}{2u_5}} \right\},$$

$$z_{13} = \left\{ z_{13}^{ij} = \sqrt{(x_{1i} - x_{1j})^2 + (x_{2i} - x_{2j})^2 + (x_{3i} - x_{3j})^2} \right\},$$

$$z_{14}=\left\{z_{14}^{ij}=V_{ij}^{R}=\frac{u_1}{u_4-1}\exp\left(-u_3\sqrt{2u_4}\,(z_{13}^{ij}-u_2)\right)\right\},$$

$$z_{15}=\left\{z_{15}^{ij}=V_{ij}^{A}=\frac{u_1u_4}{u_4-1}\exp\left(-u_3\sqrt{\frac{2}{u_4}}\,(z_{13}^{ij}-u_2)\right)\right\},$$

$$z_{16}=\left\{z_{16}^{ij}=f_c(z_{13}^{ij})\right\},$$

$$z_{17}=\left\{z_{17}^{ij}=V_{ij}=z_{16}^{ij}(z_{14}^{ij}-z_{12}^{ij}z_{15}^{ij})\right\},$$

$$\left(i=\overline{1,I-1},\ j=\overline{i+1,I},k=\overline{1,I},k\neq i,j\right).$$

Таким образом, потенциал Терсоффа вычисляется по формуле $E(z(u))=\sum_{i=1}^{I-1}\sum_{j=i+1}^{I}z_{17}^{ij}$, где фазовые переменные $z_1,z_2,...,z_{17}$ определяются указанным выше многошаговым процессом $z_l=F(l,Z_l,U_l)$, $(l=\overline{1,17})$. Отметим, что каждая компонента z_l состоит из множества других компонент.

Согласно формулам быстрого автоматического дифференцирования (2), (3), компоненты градиента сложной функции $\Omega(u)=E(z(u))=\sum_{i=1}^{I-1}\sum_{j=i+1}^{I}z_{17}^{ij}(u)$ относительно независимых переменных u_m, $(m=\overline{1,10})$ вычисляются по формуле:

$$\frac{\partial\Omega}{\partial u_m}=\sum_{q\in\overline{K}_m}F_{u_m}^{T}(q,Z_q,U_q)p_q,$$

$$\overline{K}_m=\left\{j:\ \ u_m\in U_j\right\},\qquad(m=\overline{1,10}).$$

где множители p_q определяются из следующей системы линейных алгебраических уравнений (сопряженная задача):

$$p_l=E_{z_l}(z)+\sum_{q\in\overline{Q}_l}F_{z_l}^{T}(q,Z_q,U_q)p_q,\qquad(4)$$

$$\overline{Q}_l=\left\{j:\ \ z_l\in Z_j\right\},\qquad(l=\overline{1,17}).$$

Отметим, что $E_{u_m}(z(u))=0$, т.к. функция $E(z(u))$ явно не зависит от компонент вектора u.

Вектор сопряженных переменных $\overline{p}$ имеет такую же размерность, как и вектор фазовых переменных z: $\overline{p}^{T}=\left[p_1,p_2,...,p_{17}\right]^{T}$.

Методология быстрого автоматического дифференцирования позволяет формально по формуле (4) выписать соотношения, с помощью которых вычисляются сопряженные переменные p_i. А именно, для всех $i=\overline{1,I-1}$, $j=\overline{i+1,I}$, $k=\overline{1,I}$, $k\neq i,j$:

$$p_1^{ijk}=\frac{(z_1^{ijk})^2-(z_{13}^{ij})^2+(z_2^{ijk})^2}{2(z_1^{ijk})^2(z_{13}^{ij})}\,p_3^{ijk}+$$

$$+\frac{df_{ijk}}{dz_1^{ijk}}\,p_4^{ijk}-3\left(z_{13}^{ij}-z_1^{ijk}\right)^2p_6^{ijk},$$

$$p_2^{ijk}=-\frac{z_2^{ijk}}{z_1^{ijk}z_{13}^{ij}}\,p_3^{ijk},$$

$$p_3^{ijk}=-\frac{2u_8^2(u_{10}-z_3^{ijk})}{\left(u_9^2+(u_{10}-z_3^{ijk})^2\right)^2}\,p_5^{ijk},$$

$$p_4^{ijk}=z_5^{ijk}z_7^{ijk}p_8^{ijk},$$

$$p_5^{ijk}=z_4^{ijk}z_7^{ijk}p_8^{ijk},$$

$$p_6^{ijk}=u_7^3\exp(z_6^{ijk}u_7^3)p_7^{ijk},$$

$$p_7^{ijk}=z_4^{ijk}z_5^{ijk}p_8^{ijk},$$

$$p_8^{ijk}=p_9^{ij},$$

$$p_9^{ij}=u_6p_{10}^{ij},\qquad(5)$$

$$p_{10}^{ij}=u_5\left(z_{10}^{ij}\right)^{u_5-1}p_{11}^{ij},$$

$$p_{11}^{ij}=-\frac{1}{2u_5}\left(1+z_{11}^{ij}\right)^{-1/(2u_5)-1}p_{12}^{ij},$$

$$p_{12}^{ij}=-z_{15}^{ij}z_{16}^{ij}p_{17}^{ij},$$

$$p_{13}^{ij}=\sum_{\substack{k=1,\\k\neq i,j}}^{I}\left(\frac{(z_{13}^{ij})^2-(z_1^{ijk})^2+(z_2^{ijk})^2}{2(z_1^{ijk})(z_{13}^{ij})^2}\,p_3^{ijk}\right)+$$

$$+\sum_{\substack{k=1,\\k\neq i,j}}^{I}\left(3\left(z_{13}^{ij}-z_1^{ijk}\right)^2p_6^{ijk}\right)+\frac{df_{ij}}{dz_{13}^{ij}}\,p_{16}^{ij}-$$

$$-\frac{u_1u_3\sqrt{2u_4}}{u_4-1}\exp\left(-u_3\sqrt{2u_4}\,(z_{13}^{ij}-u_2)\right)p_{14}^{ij}-$$

$$-\frac{u_1u_3u_4\sqrt{2/u_4}}{u_4-1}\exp\left(-u_3\sqrt{2/u_4}\,(z_{13}^{ij}-u_2)\right)p_{15}^{ij},$$

$$p_{14}^{ij}=z_{16}^{ij}p_{17}^{ij},$$

$$p_{15}^{ij}=-z_{12}^{ij}z_{16}^{ij}p_{17}^{ij},$$

$$p_{16}^{ij}=(z_{14}^{ij}-z_{12}^{ij}z_{15}^{ij})\,p_{17}^{ij},$$

$$p_{17}^{ij}=1.$$

Сопряженные переменные вычисляются в обратном порядке: $p_{17}, p_{16},..., p_1$ и используются далее в формулах для вычисления компонент градиента потенциала Терсоффа.

2. Вычисление градиента потенциала Терсоффа по параметрам и координатам атомов

Градиент функции $\Omega(u) = E(z(u)) = \sum_{i=1}^{I-1}\sum_{j=i+1}^{I} z_{17}^{ij}(u)$ относительно независимых переменных u_m, ($m = \overline{1,10}$) определяется соотношениями:

$$\frac{\partial\Omega}{\partial u_1} = \sum_{i=1}^{I-1}\sum_{j=i+1}^{I}\left(\frac{z_{14}^{ij}}{u_1}p_{14}^{ij} + \frac{z_{15}^{ij}}{u_1}p_{15}^{ij}\right),$$

$$\frac{\partial\Omega}{\partial u_2} = \sum_{i=1}^{I-1}\sum_{j=i+1}^{I}\left(z_{14}^{ij}u_3\sqrt{2u_4}\ p_{14}^{ij} + z_{15}^{ij}u_3\sqrt{2/u_4}\ p_{15}^{ij}\right),$$

$$\frac{\partial\Omega}{\partial u_3} = \sum_{i=1}^{I-1}\sum_{j=i+1}^{I}\left(z_{14}^{ij}\left(-\sqrt{2u_4}(z_{13}^{ij}-u_2)\right)p_{14}^{ij}\right) +$$
$$+\sum_{i=1}^{I-1}\sum_{j=i+1}^{I}\left(z_{15}^{ij}\left(-\sqrt{2/u_4}(z_{13}^{ij}-u_2)\right)p_{15}^{ij}\right),$$

$$\frac{\partial\Omega}{\partial u_4} = \sum_{i=1}^{I-1}\sum_{j=i+1}^{I}\left(\frac{-z_{14}^{ij}p_{14}^{ij}}{u_4-1} - \frac{u_3}{2}\sqrt{\frac{2}{u_4}}(z_{13}^{ij}-u_2)z_{14}^{ij}p_{14}^{ij}\right) +$$
$$+\sum_{i=1}^{I-1}\sum_{j=i+1}^{I}\left(\left(\frac{-z_{15}^{ij}}{u_4(u_4-1)} + \frac{u_3}{2u_4}\sqrt{\frac{2}{u_4}}(z_{13}^{ij}-u_2)z_{15}^{ij}\right)p_{15}^{ij}\right),$$

$$\frac{\partial\Omega}{\partial u_5} = \sum_{i=1}^{I-1}\sum_{j=i+1}^{I}\left((z_{10}^{ij})^{u_5}\ln(z_{10}^{ij})\ p_{11}^{ij}\right) +$$
$$+\sum_{i=1}^{I-1}\sum_{j=i+1}^{I}\left(\frac{(1+z_{11}^{ij})^{-\frac{1}{2u_5}}}{2u_5^2}\ln(1+z_{11}^{ij})\ p_{12}^{ij}\right),$$

$$\frac{\partial\Omega}{\partial u_6} = \sum_{i=1}^{I-1}\sum_{j=i+1}^{I}\left(z_9^{ij}\ p_{10}^{ij}\right), \qquad (6)$$

$$\frac{\partial\Omega}{\partial u_7} = \sum_{i=1}^{I-1}\sum_{j=i+1}^{I}\left(\sum_{k=1,k\neq i,j}^{I}\left(3z_6^{ij}z_7^{ij}u_7^2\ p_7^{ijk}\right)\right),$$

$$\frac{\partial\Omega}{\partial u_8} = \sum_{i=1}^{I-1}\sum_{j=i+1}^{I}\left(\sum_{\substack{k=1,\\k\neq i,j}}^{I}\left(\frac{2u_8}{u_9^2} - \frac{2u_8}{u_9^2+(u_{10}-z_3^{ijk})^2}\right)p_5^{ijk}\right),$$

$$\frac{\partial\Omega}{\partial u_9} = \sum_{i=1}^{I-1}\sum_{j=i+1}^{I}\left(\sum_{\substack{k=1,\\k\neq i,j}}^{I}\left(\frac{2u_8^2u_9}{\left(u_9^2+(u_{10}-z_3^{ijk})^2\right)^2} - \frac{2u_8^2}{u_9^3}\right)p_5^{ijk}\right),$$

$$\frac{\partial\Omega}{\partial u_{10}} = \sum_{i=1}^{I-1}\sum_{j=i+1}^{I}\left(\sum_{\substack{k=1,\\k\neq i,j}}^{I}\left(\frac{2u_8^2(u_{10}-z_3^{ijk})}{\left(u_9^2+(u_{10}-z_3^{ijk})^2\right)^2}\right)p_5^{ijk}\right).$$

Для того чтобы вычислить градиент потенциала Терсоффа по координатам атомов, введем вектор v, имеющий компоненты:
$v^T = \left[x_{11}, x_{12},..., x_{1I}, x_{21}, x_{22},..., x_{2I}, x_{31}, x_{32},..., x_{3I}\right]^T$,
где x_{1i}, x_{2i}, x_{3i}, ($i = \overline{1,I}$) – координаты i-ого атома.

Тогда градиент функции $\Psi(v) = E(z(v)) = \sum_{i=1}^{I-1}\sum_{j=i+1}^{I} z_{17}^{ij}(v)$ относительно независимых переменных x_{1i}, x_{2i}, x_{3i}, ($i = \overline{1,I}$) определяется соотношениями:

$$\frac{\partial\Psi}{\partial x_{li}} = \sum_{j=i+1}^{I}\left(\frac{x_{li}-x_{lj}}{z_{13}^{ij}}p_{13}^{ij}\right) - \sum_{j=1}^{i-1}\left(\frac{x_{lj}-x_{li}}{z_{13}^{ji}}p_{13}^{ji}\right) +$$
$$+\sum_{j=i+1}^{I}\sum_{\substack{k=1;\\k\neq i,j}}^{I}\left(\frac{x_{li}-x_{lk}}{z_1^{ijk}}p_1^{ijk}\right) - \sum_{\substack{k=1;\\k\neq i}}^{I-1}\sum_{\substack{j=k+1;\\j\neq i}}^{I}\left(\frac{x_{lk}-x_{li}}{z_1^{kji}}p_1^{kji}\right) +$$
$$+\sum_{j=1}^{i}\sum_{\substack{k=1;\\k\neq i+1,j}}^{I}\left(\frac{x_{l,i+1}-x_{lk}}{z_2^{j,i+1,k}}p_2^{j,i+1,k}\right) - \sum_{\substack{k=1;\\k\neq i}}^{I-1}\sum_{\substack{j=k+1;\\j\neq i}}^{I}\left(\frac{x_{lk}-x_{li}}{z_2^{kji}}p_2^{kji}\right),$$

$$(i = \overline{1,I-1};\quad l = 1,2,3).$$

Здесь, как и в формулах (6), для вычисления вектора сопряженных переменных $p^T = \left[p_1, p_2,..., p_{17}\right]^T$ используется многошаговый процесс (5).

Отметим, что приведенные выше формулы позволяют получить точное значение компонент градиента потенциала Терсоффа по рассматриваемым параметрам и по координатам.

В работе [2] рассмотрена задача подбора параметров потенциала Терсоффа применительно к однокомпонентному кристаллу кремния. Для

определения начальных приближений в указанной работе допустимое множество $X=[\underline{u},\bar{u}]=\{u\in R^{10}:\underline{u}_i\le x_i\le\bar{u}_i\}$ выбиралось таким образом, чтобы заведомо содержать все возможные значения параметров, а именно:

$$\underline{u}=(0.5;\,0.5;\,0.5;\,0.5;\,0.1;\,5\cdot10^{-8};\,0.5;\,10000;\,1;\,-2),$$
$$\bar{u}=(10;\,5;\,5;\,5;\,2;\,3\cdot10^{-6};\,3;\,200000;\,30;\,-0.1).$$

В Табл. 1-Табл. 3 приведены значения градиента потенциала Терсоффа по трем специфическим для моделируемого вещества параметрам: $u_1=D_e$, $u_3=\beta$, $u_6=\gamma$. Все входные параметры задачи выбирались из диапазона допустимых значений. Величина Δ в таблицах указывает на значения приращения параметров u_i, которые были использованы при вычислении градиента с помощью метода конечных разностей.

Как следует из Табл. 1, при вычислении первой компоненты градиента наиболее подходящим является выбор Δ из интервала $[10^{-9};1.0]$, что составляет от 10^{-7}% до 100% от начального приближения $u_1=1.0$. Из Табл. 2 следует, что при вычислении третьей компоненты градиента наиболее подходящим является выбор $\Delta\approx10^{-7}$. Это составляет примерно 10^{-5}% от начального приближения $u_3=1.0$. Из Табл. 3 следует, что при вычислении шестой компоненты градиента наиболее подходящим является выбор $\Delta\approx10^{-11}$. Это составляет примерно 10^{-2}% от начального приближения $u_6=10^{-7}$.

На основании сказанного выше следует вывод о том, что вычисление градиента потенциала Терсоффа с помощью метода конечных разностей связано с определенными трудностями. В случае использования этого метода необходимо проводить исследования, связанные с выбором приращения каждого параметра потенциала и при каждом его новом значении. В противоположность этому, предложенный в работе алгоритм, использующий формулы быстрого автоматического дифференцирования, позволяет автоматически получить с машинной точностью значение этого градиента.

Табл. 1.

$i=1$, $u_1=1$ / Δ	Градиент, вычисленный с помощью метода конечных разностей	Градиент, вычисленный с помощью БАД-методологии
10^{+0}	-7.079590296064·10^{+0}	-7.079590296064·10^{+0}
10^{-1}	-7.079590296064·10^{+0}	
10^{-2}	-7.079590296064·10^{+0}	
10^{-3}	-7.079590296065·10^{+0}	
10^{-4}	-7.079590296115·10^{+0}	
10^{-5}	-7.079590296577·10^{+0}	
10^{-6}	-7.079590300663·10^{+0}	
10^{-7}	-7.079590274017·10^{+0}	
10^{-8}	-7.079590425008·10^{+0}	
10^{-9}	-7.079593800086·10^{+0}	
10^{-10}	-7.079581365588·10^{+0}	
10^{-11}	-7.079936636956·10^{+0}	
10^{-12}	-7.080558361849·10^{+0}	
10^{-13}	-7.123190925995·10^{+0}	
10^{-14}	-7.105427357601·10^{+0}	

Табл. 2.

$i=3$, $u_3=1$ / Δ	Градиент, вычисленный с помощью метода конечных разностей	Градиент, вычисленный с помощью БАД-методологии
10^{+0}	5.040779772307·10^{+0}	8.117021018694·10^{+0}
10^{-1}	7.763850484617·10^{+0}	
10^{-2}	8.081747974402·10^{+0}	
10^{-3}	8.113495177169·10^{+0}	
10^{-4}	8.116668450269·10^{+0}	
10^{-5}	8.116985761664·10^{+0}	
10^{-6}	8.117017491927·10^{+0}	
10^{-7}	8.117020646736·10^{+0}	
10^{-8}	8.117020477982·10^{+0}	
10^{-9}	8.117016392362·10^{+0}	
10^{-10}	8.116973759797·10^{+0}	
10^{-11}	8.116529670588·10^{+0}	
10^{-12}	8.115286220800·10^{+0}	
10^{-13}	8.064660050877·10^{+0}	
10^{-14}	8.348877145181·10^{+0}	

Табл. 3.

$i = 6$, $u_1 = 10^{-7}$ Δ	Градиент, вычисленный с помощью метода конечных разностей	Градиент, вычисленный с помощью БАД-методологии
10^{+0}	$6.071520096240 \cdot 10^{+0}$	$1.288320939087 \cdot 10^{+6}$
10^{-1}	$6.051321329241 \cdot 10^{+1}$	
10^{-2}	$5.987456824696 \cdot 10^{+2}$	
10^{-3}	$5.785802721743 \cdot 10^{+3}$	
10^{-4}	$5.157534688020 \cdot 10^{+4}$	
10^{-5}	$3.423739581332 \cdot 10^{+5}$	
10^{-6}	$9.846043659341 \cdot 10^{+5}$	
10^{-7}	$1.248772527026 \cdot 10^{+6}$	
10^{-8}	$1.284241101155 \cdot 10^{+6}$	
10^{-9}	$1.287911733860 \cdot 10^{+6}$	
10^{-10}	$1.288280750167 \cdot 10^{+6}$	
10^{-11}	$1.288324366744 \cdot 10^{+6}$	
10^{-12}	$1.288395748311 \cdot 10^{+6}$	
10^{-13}	$1.289073070510 \cdot 10^{+6}$	
10^{-14}	$1.295842633198 \cdot 10^{+6}$	

В работе [6] на примере задачи оптимального управления процессом плавления вещества оценено машинное время, требуемое для вычисления градиента целевой функции с помощью методологии быстрого автоматического дифференцирования в задачах оптимального управления тепловыми процессами с фазовыми переходами. Подобные исследования были проведены и для предложенного здесь алгоритма. Эти исследования показали, что время, требуемое для определения компонент градиента потенциала Терсоффа с помощью указанного выше метода, не превышает времени, требуемого для вычисления трех значений этой функции.

Литература

1. Абгарян К.К., Посыпкин М.А. Применение оптимизационных методов для решения задач параметрической идентификации потенциалов межатомного взаимодействия. // Ж. вычисл. матем. и матем. физики. 2014. Т. 54. № 12, С. 1994–2001.
2. Абгарян К.К., Посыпкин М.А. Программный комплекс для решения задач параметрической идентификации потенциалов межатомного взаимодействия. // International Journal of Open Information Technologies. 2014. Т. 2, № 10, С. 14-19.
3. J.Tersoff. Empirical interatomic potential for silicon with improved elastic properties. \\ Phys. Rev. B. 1988, V.38, P. 9902-9905.
4. Ю.Г. Евтушенко. Оптимизация и быстрое автоматическое дифференцирование. Научное издание. Вычислительный центр им. А.А. Дородницына Российской академии наук. Москва. 2013. 144 С.
5. Evtushenko, Y.G. Computation of Exact Gradients in Distributed Dynamic Systems // Optimizat. Methods and Software. 1998. № 9. P. 45-75.
6. А.Ф. Албу, В.И. Зубов. Об эффективности решения задач оптимального управления с помощью методологии быстрого автоматического дифференцирования. // Труды Института математики и механики УрО РАН. 2015. Т. 21. № 4. С. 20-29.

Албу Алла Филипповна. Старший научный сотрудник Вычислительного центра им. А.А. Дородницына Федерального исследовательского центра «Информатика и управление» Российской академии наук. Окончила Кишиневский государственный университет в 1982 году. Кандидат физико-математических наук. Автор 59 печатных работ. Область научных интересов: оптимальное управление, математическое моделирование, вычислительная математика.
E-mail: alla.albu@mail.ru