

# ПРИМЕНЕНИЕ ГРИД-СИСТЕМ ИЗ ПЕРСОНАЛЬНЫХ КОМПЬЮТЕРОВ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ ПАРАМЕТРИЧЕСКОЙ ИДЕНТИФИКАЦИИ ПОТЕНЦИАЛОВ МЕЖАТОМНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ <sup>1</sup>

© 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

Для решения задач параметрической идентификации потенциалов межатомного взаимодействия применяются различные методы оптимизации. Рассматривается задача подбора параметров потенциала Терсоффа, применительно к однокомпонентным кристаллам с ковалентным типом химической связи.

**Ключевые слова:** оптимизационные методы, параметрическая идентификация, целевая функция, градиентные методы.

DOI:

## 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 [1, 2]. При таком подходе, результаты первопринципного [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 1000-1000000 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 [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.

---

<sup>1</sup> Работа выполнена за счет средств проекта Российского научного фонда № 14-11-00782 в ВЦ РАН

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 [5]. При этом значения физических величин, рассчитанные первопринципными методами, могут использоваться как эталонные значения в процессе решения данной оптимизационной задачи.

#### ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ ОПТИМИЗАЦИИ

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

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

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,  $\omega_i$  - 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:

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

где  $\xi_1 \dots \xi_n$  – 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:  $[\underline{\xi}_i, \bar{\xi}_i]$ ,  $i = 1, \dots, n$ , 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 [10]. Для нахождения точки со значениями параметров  $(\xi_1, \dots, \xi_n)$ , достаточно близкими к глобальному минимуму используются методы глобальной оптимизации, такие как метод Монте-Карло, метод сканирования, Granular Random Search [11] 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) [11] и другие.

Необходимо отметить, что описанные выше процедуры проводятся при определенном, фиксированном положении базисных атомов рассматриваемой кристаллической структуры. Вследствие этого, мы не можем быть уверены, что решив задачу 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, расставляющая 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[10], 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 др.).

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

$$E_{coh} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V_{ij},$$

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

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

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

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

$$b_{ij} = \left(1 + (\gamma \zeta_{ij})^n\right)^{-1/2n},$$

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

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

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

Переменные  $r_{ij}$  означают расстояния между атомами с номерами  $i$  и  $j$  соответственно, через  $\theta_{ijk}$  обозначен угол, образованный векторами, соединяющими атом  $i$  с атомами  $j$  и  $k$  соответственно. Потенциал Терсоффа включает 12 параметров, специфичных для моделируемого вещества:  $D_e, r_e, \beta, S, n, \gamma, \lambda, c, d, h, R, R_{cut}$ . 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 [6].

$$\sigma = C\varepsilon, \quad (3)$$

где  $\sigma$  – тензор напряжений,  $\varepsilon$  – тензор деформаций,  $C$  – тензор упругих констант, компоненты которого определяются выражениями

$$C_{ij} = \frac{1}{V} \frac{\partial^2 E}{\partial \varepsilon_i \partial \varepsilon_j} \quad i, j = 1, \dots, 6 \quad (4)$$

где  $\varepsilon_i$  – соответствующие компоненты тензора деформации кристалла.

Таким образом,  $C_{ij}(\xi)$  – значения упругих констант, рассчитанных по формуле (4) с использованием значения когезионной энергии, вычисленной с помощью выбранного потенциала межатомного взаимодействия,  $\hat{C}_{ij}$  – экспериментальные значения упругих констант. Число независимых упругих констант зависит от кристаллической структуры моделируемого материала. Так, в случае, если моделируется кубический кристалл остается лишь три независимые упругие константы  $C_{11}, C_{12}, C_{44}$  [6]. 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;

$\zeta$  – 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

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

Эталонные значения компонент целевой функции, полученные экспериментально либо квантомеханическими методами для монокристалла кремния, взяты из работы [2]:

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

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 эти значения:

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

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

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

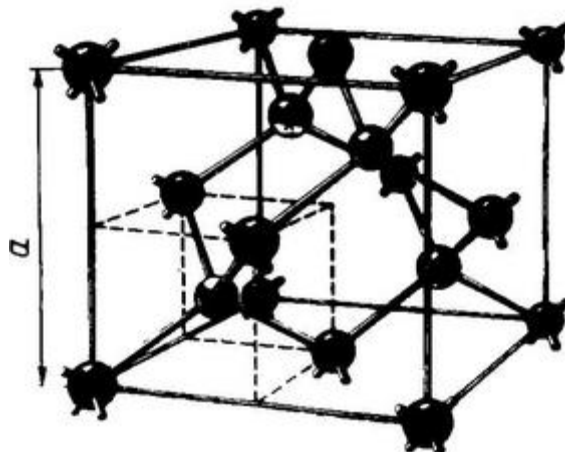


Рис 1. Одна ячейка кристаллической решетки кремния

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  $a$ .

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 является модуль оптимизации, реализованный в рамках библиотеки BNB-Solver[12]. Решаемая 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 применен метод Монте-Карло, генерирующий последовательность случайных начальных приближений в допустимом параллелепипеде. Использовались равномерно-распределенные псевдо-случайные 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) предложен в [11]. 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 превышению 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.

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 четырехядерными процессорами Intel(R) Xeon(R) CPU E5620 @ 2.40GHz. С целью ускорения вычислений запускалось 8 параллельных процессов, каждый из которых обработал 4096 начальных приближения. 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 Рис. 2 соответствуют значениям отклонения для 10 определяемых параметров.

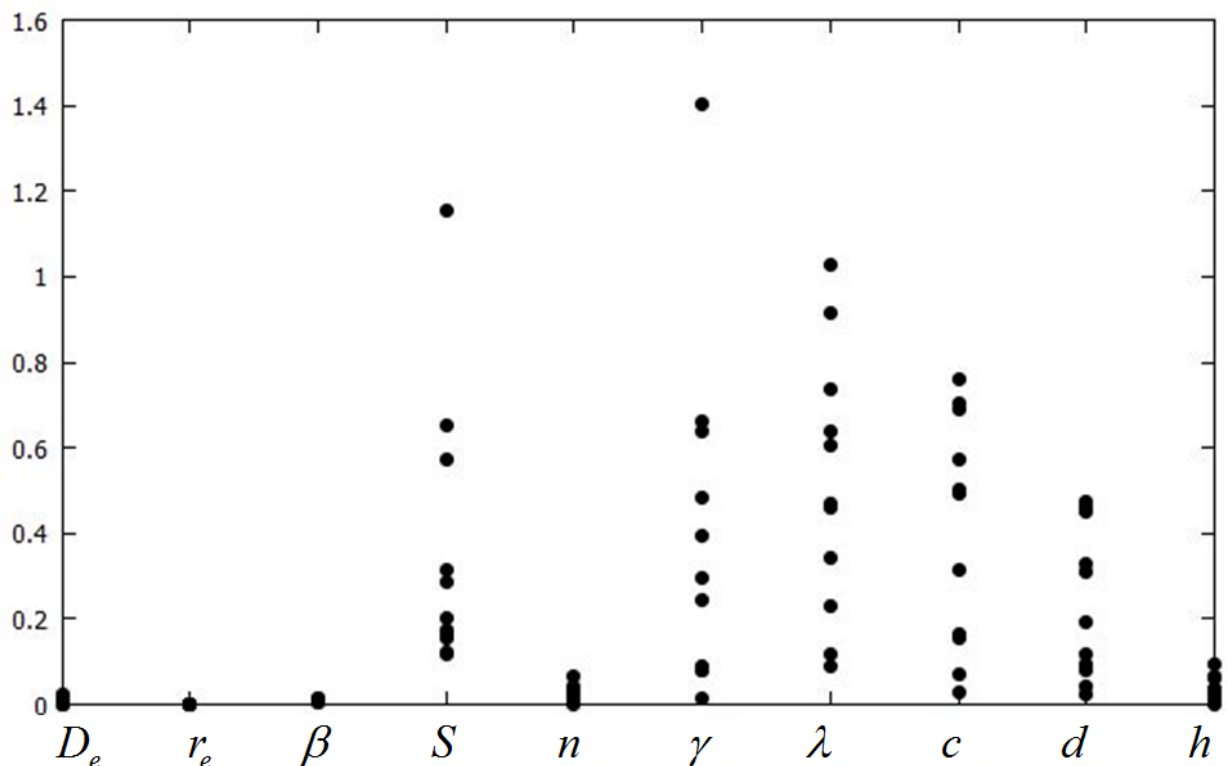


Рис. 2. Отклонения в значениях 10-ти параметров для найденных локальных минимумов (11 точек)

Полученные результаты показывают, что с заданной целевой функцией удается достаточно точно определить параметры  $D_e, r_e, \beta, n, h$ . 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 Рис. 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.

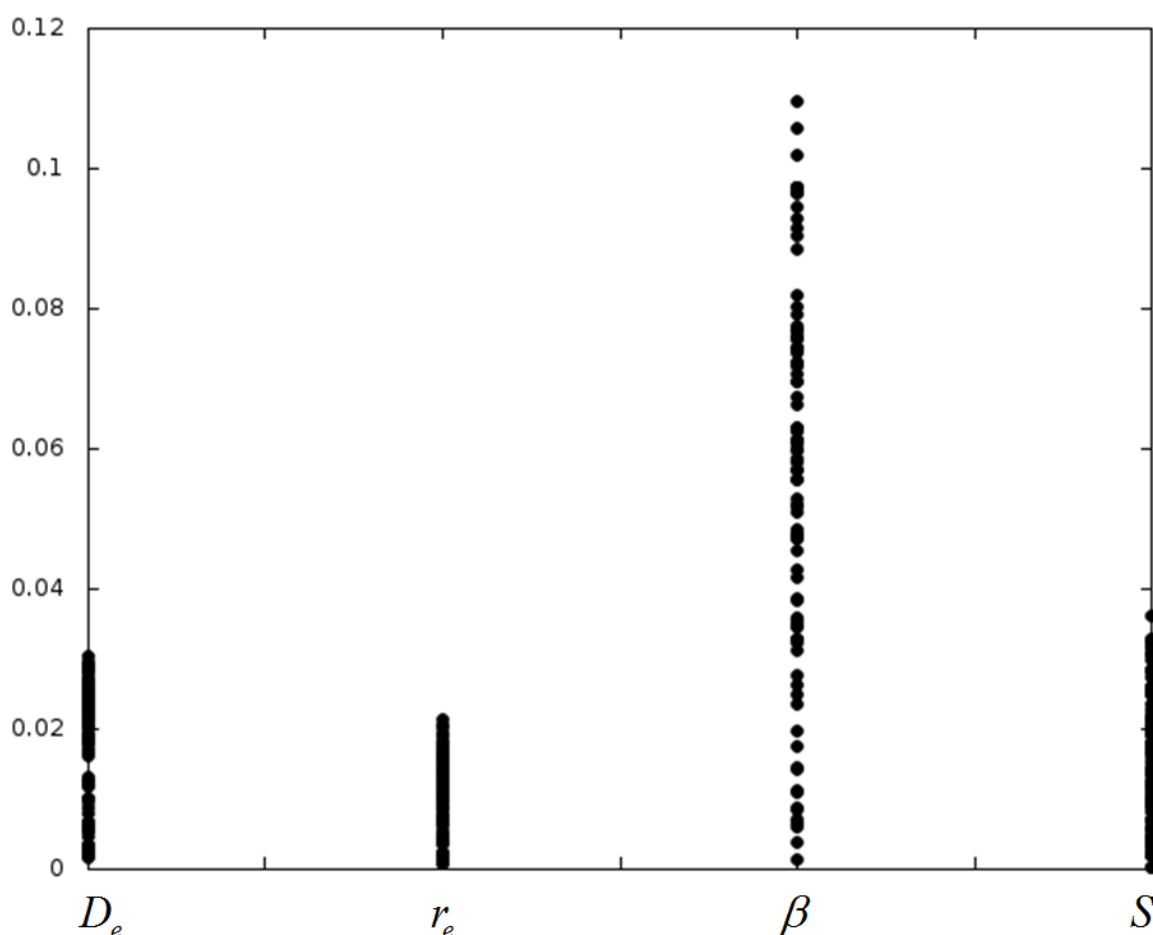


Рис. 3. Отклонения в значениях 4-х параметров для найденных локальных минимумов

С целью более точного исследования идентификации параметров потенциала в рассматриваемой задаче был проведен обширный вычислительный эксперимент в рамках проекта добровольных распределенных вычислений OPTIMA@home [15]. Был сгенерировано 16384 заданий, каждое из которых содержало 32 начальных приближения. Таким образом, всего было обработано 524288 начальных приближений. Основная часть была вычислена в течение первых трех дней расчетов. Далее происходило завершение оставшейся части. Часть вычислительных ресурсов была представлена персональными компьютерами пользователей. Также существенную долю в расчетах составили узлы суперкомпьютера МВС-100К [16], расположенного в Межведомственном суперкомпьютерном центре РАН. Для подключения этих узлов был задействован программный комплекс CluBoRUN [17], позволяющий использовать простаивающие ресурсы суперкомпьютеров в BOINC-проектах. В результате было отобрано 193 точки, в которых значение целевой функции не превосходит  $10^{-5}$ . Распределение значений идентифицированных параметров представлено на Рис. 4.

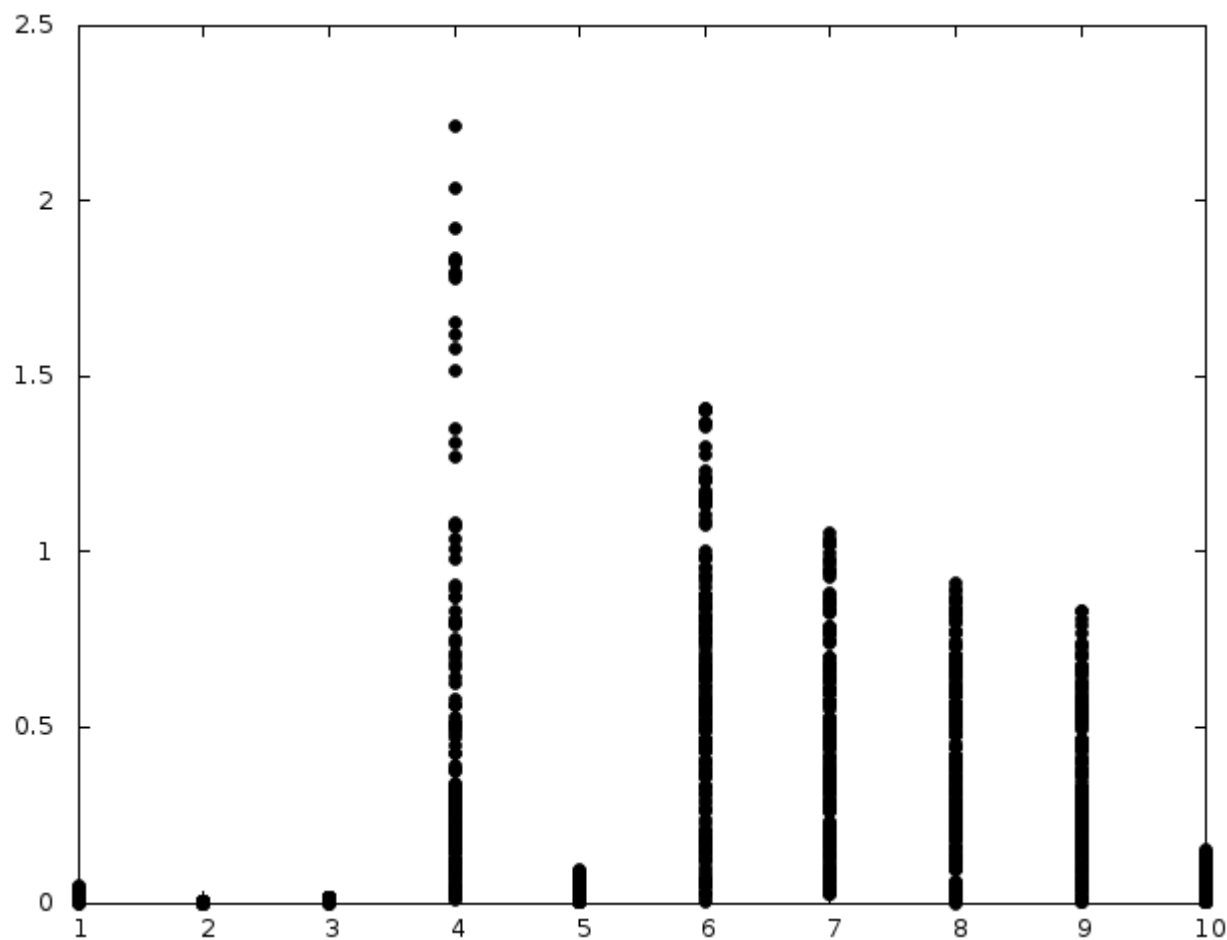


Рис. 4. Отклонения в значениях 10-ти параметров для найденных локальных минимумов (193 точки)

Также как и в случае 11 точек удастся достаточно точно определить параметры  $D_e, r_e, \beta, n, h$ . Остальные параметры определяются с весьма низкой точностью. 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 [13, 14].

## 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 эффективность 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 эти положения атомов будут соответствовать минимальной энергии. Поэтому следующим этапом является этап релаксации структуры. Для этого вычисляются силы, действующие на каждый из атомов элементарной ячейки (базисных атомов) и смещают их в соответствии с направлением действия сил до достижения ими положений, соответствующих минимуму энергии. Направления сил вычисляется 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.

Также планируется расширение списка применяемых оптимизационных алгоритмов, распараллеливание процесса идентификации параметров и моделирование новых материалов. В частности планируется рассмотреть кристаллы, содержащие атомы различного типа, с решетками, отличными от рассмотренной в данной работе кубической решетки.

В заключении авторы благодарят всех пользователей, предоставивших свои компьютеры для проведения расчетов. Особую благодарность хочется выразить членам команды российских добровольцев[18], которые приняли участие в отладке первой версии проекта и предоставили существенные вычислительные мощности для расчетов. Также мы благодарны Николаю Храпову, выполнившему работу по размещению данного приложения в рамках проекта OPTIMA@home. Авторы благодарят Межведомственный суперкомпьютерный центр РАН за предоставленные для расчетов вычислительные ресурсы.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Абгарян К.К. Применение оптимизационных методов для моделирования многослойных полупроводниковых наносистем // Труды Института системного анализа Российской академии наук. Динамика неоднородных систем. 2010 г. Т.53(3). С.6-9.
2. K. Abgaryan. Multiscale computational model of multy-layer semiconductor nanostructures. /IV International Conference on Optimization Methods and Applications. (OPTIMA- 2013). Petrovac, Montenegro. September 2013. Abstracts. pp.13-14.
3. P. Hohenberg, W. Kohn, Phys. Rev. 136, B864, 1964.
4. W. Kohn, L. J. Sham, Phys. Rev. 140, A1133, 1965
5. K. Abgaryan, D. Bazanov, I. Mutigillin. The simulation of the nitridation of the sapphire surface (001). Materials XXI International Conference "Interaction of ions with the surface" VIP 2013, T.2. С. 99-103.
6. Ч. Киттель. Введение в физику твердого тела. Из-во технико-теоретической литературы. Москва. 1957 г.
7. Juzhong Sun, Stirner T., Hagston W.E., Leyland A., Matthews A. // J. of Crystal Growth, 290 (2006), pp. 235-240.

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. Абгарян К.К., Быков Н.В., Мутигуллин И.В. Применение параллельных вычислений и метода молекулярной динамики для моделирования роста многослойных полупроводниковых наноструктур // Материалы IX международной конференции по неравновесным процессам в соплах и струях (NPNJ 2012), 25-31 мая 2012 г., Алушта, с. 457-459. М.: Изд-во МАИ, 2012.
10. J.Tersoff, Empirical interatomic potential for silicon with improved elastic properties. Phys. Rev. B. 1988, V.38, P.9902-9905.
11. Powell D. Elasticity, Lattice Dynamics and Parameterisation Techniques for the Tersoff Potential Applied to Elemental and Type III-V Semiconductors : дис. – University of Sheffield, 2006.
- 12.Посыпкин М.А. Решение задач глобальной оптимизации в среде распределенных вычислений // Программные продукты и системы. № 1. 2010. С. 23-29.
- 13.Евтушенко Ю. Г. Численный метод поиска глобального экстремума функций (перебор на неравномерной сетке) //Журнал вычислительной математики и математической физики. – 1971. – Т. 11. – №. 6. – С. 1390-1403.
- 14.Сергеев Я. Д., Квасов Д. Е. Диагональные методы глобальной оптимизации //М.: Физматлит. – 2008.
15. Проект добровольных вычислений OPTIMA@home <http://boinc.isa.ru/dcsdg/>
16. Суперкомпьютер MVS-100K <http://www.jsec.ru/hard/mvs100k.shtml>
17. Манзюк М.О., Заикин О.С. CluBORun: средство использования свободных ресурсов вычислительных кластеров для BOINC-расчетов // Труды научной конференции «Высокопроизводительные вычисления на базе BOINC: фундаментальные исследования и разработки». ИПМИ КарНЦ РАН. 2013. С. 9-14.
18. BOINC.RU <http://boinc.ru>