

КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

УДК 539.194

DOI: 10.17223/00213411/68/11/23

Применение модифицированного генетического алгоритма повышенной сходимости для аппроксимации поверхности потенциальной энергии молекулы OCS*А.К. Третьяков¹, Р.В. Николаев¹, Ю.В. Кистенев¹, С.Э. Шипилов¹¹Национальный исследовательский Томский государственный университет, г. Томск, Россия

Приведены результаты апробации модифицированного генетического алгоритма повышенной сходимости (ГАПС) в задаче аппроксимации поверхности потенциальной энергии (ППЭ) молекулы OCS. Проведен сравнительный анализ и показано кратное превосходство ГАПС в точности при многократной аппроксимации ППЭ OCS относительно алгоритма Левенберга – Марквардта.

Ключевые слова: поверхность потенциальной энергии, машинное обучение, генетический алгоритм, алгоритмы оптимизации, итерационные алгоритмы.

Введение

Аппроксимация поверхности потенциальной энергии (ППЭ) многоатомных молекул проводится с целью получения гладкой физически подкрепленной математической функции (аппроксимирующей функции, АФ). Полученная функция играет ключевую роль в задачах оптики и спектроскопии, а именно, позволяет определять физические свойства молекулы, в особенности, рассчитывать колебательные, вращательные и электронные спектры [1].

Задача численной аппроксимации ППЭ молекулы, как правило, является глубоко параметризованной, математически нерегуляризованной и невыпуклой задачей. Существует множество подходов к формированию АФ для различных по количеству атомов и пространственной структуре молекул. Каждая отдельная АФ определяется параметрами, описывающими геометрию молекулы, параметрами, характеризующими поступательные и вращательные степени свободы молекулы, и параметрами, которые имеют сугубо математический смысл и являются подгоночными коэффициентами.

Обычно аппроксимация осуществляется в несколько этапов с разделением всех параметров аппроксимирующей математической функции на отдельные группы. К примеру, параметры, описывающие геометрию модели, могут быть оценены отдельно, путем оптимизации геометрии молекулы с помощью программ для квантово-химических расчетов [1, 2]. Но независимо от того, аппроксимируется весь набор параметров целиком или отдельно по группам параметров, возникают невыпуклые и нерегуляризованные численные задачи.

Для эффективного решения подобных задач был разработан алгоритм машинного обучения, а именно – модифицированный генетический алгоритм повышенной сходимости (ГАПС) [3–5]. Подробное описание ГАПС, его структуры и отличительных особенностей, а также сравнительный анализ его эффективности по отношению к алгоритмам Левенберга – Марквардта (ЛМ) и Adam, приведены в предыдущих работах [3, 6, 7]. Цель настоящего исследования – изучить релевантность ГАПС применительно к задаче аппроксимации ППЭ линейной молекулы карбонилсульфида (OCS) и сравнить полученные результаты с аналогичными, рассчитанными с помощью алгоритма ЛМ [2, 8, 9]. Все программы и расчеты реализованы с помощью языка программирования Python [10].

Аппроксимация поверхности потенциальной энергии молекулы OCS

Для оценки эффективности и сравнительного анализа ГАПС с алгоритмом ЛМ использована следующая АФ для ППЭ OCS [2]:

$$V(R_1, R_2, \theta, \{F_{ijk}\}, \{R_m, \kappa_m\}, \theta_e) = \sum_{i,j,k} F_{ijk} M_i^i(R_1, R_{1e}, \kappa_1) M_j^j(R_2, R_{2e}, \kappa_2) M_k^k(\theta, \theta_e), \quad (1)$$

$$M_{i,j}(R_m, R_{me}, \kappa_m) = 1 - e^{-\kappa_m(R_m - R_{me})}, \quad m = 1, 2,$$

* Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (грант № 075-15-2024-557 от 25.04.2024 г.).