

ОПТИКА И СПЕКТРОСКОПИЯ

УДК 539.194

DOI: 10.17223/00213411/68/6/12

Модифицированный генетический алгоритм повышенной сходимости для аппроксимации поверхности потенциальной энергии молекул*А.К. Третьяков¹, Ю.В. Кистенёв¹¹ *Национальный исследовательский Томский государственный университет, г. Томск, Россия*

Представлен модифицированный генетический алгоритм повышенной сходимости (ГАПС) для решения нерегуляризованной, глубоко параметризованной и невыпуклой задачи. Основная особенность ГАПС – частичная оптимизация генома особей с помощью алгоритма Левенберга – Марквардта. Введена модельная функция (МФ), характеристичная для задачи аппроксимации поверхности потенциальной энергии молекул. С помощью МФ проведен сравнительный анализ ГАПС, генетического алгоритма, алгоритмов Левенберга – Марквардта и Adam.

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

Введение

Аппроксимация точек поверхности потенциальной энергии (ППЭ) молекул, как правило, осуществляется с помощью параметризованной аналитической модели на основе физически подкрепленных функций. Параметрами этих функций являются молекулярные параметры (МП), к примеру, силовые константы, параметры геометрии и ППЭ молекулы и т.д. Аппроксимация дискретных значений ППЭ предоставляет аналитическую, гладкую функцию ППЭ, которая в дальнейшем используется для определения или уточнения физических свойств молекулы, получения колебательного, вращательного и электронного спектров. Задача определения МП путем аппроксимации ППЭ исследуемой молекулы в общем случае является многопараметрической, нерегуляризованной и невыпуклой. Для аппроксимации ППЭ широко используются итерационные алгоритмы: градиентного спуска, наискорейшего спуска, Ньютона, Гаусса – Ньютона, Левенберга – Марквардта (ЛМ) [1, 2] в сочетании с целевой функцией, к примеру: средней абсолютной ошибкой, относительной ошибкой, среднеквадратичной ошибкой (Root Mean Square Error, RMSE) и т.д. Характер описываемой задачи обуславливает высокую чувствительность конечных значений целевой функции к начальным и граничным условиям. При использовании итерационных методов это приводит к неудовлетворительной точности аппроксимации, к необходимости использовать более комплексные подходы, такие как понижение размерности задачи, оценка граничных условий и поиск оптимальных начальных условий.

В качестве альтернативы, для решения обозначенной задачи могут быть применены методы машинного обучения (МО). В силу свойства стохастичности данные методы способны совершить поиск глобального экстремума за меньшее количество итераций и/или со сравнимой или большей точностью, а также без применения более комплексной логики в решении обозначенной задачи. Отметим, что методы МО широко применяются в рамках исследований на тематику квантово-химических расчетов [3–9]. Успешное использование МО в различных вариациях продемонстрировано как для расчета дискретных значений ППЭ, так и для оптимизации модели ППЭ [10–12]. Для решения задачи аппроксимации ППЭ многоатомных структур используются методы МО, такие как нейронные сети, регрессия гауссовского процесса и генетический алгоритм (ГА) [3–5, 9, 13–15]. В рамках аппроксимации ППЭ чаще применяются методы, не требующие обучающих данных, что обусловлено ограниченным количеством рассчитанных точек ППЭ.

Adam (Adaptive Moment Estimation) представляет собой алгоритм адаптивной оптимизации [16]. Изначально разработан для глубокого обучения нейронных сетей. Основные отличительные

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