дратути

Целью данной работы является разработка эвристического алгоритма глобальной оптимизации кластеров Морса. Среди основных поставленных задач были исследование особенностей формирования атомных структур, обзор существующих методов оптимизации, разработка собственного алгоритма, проведение вычислительных экспериментов.

**КЛАСТЕРЫ** Частным случаем конформационного анализа является исследование моделей атомных кластеров, являющихся группами взаимодействующих определенным образом атомов. Данная задача актуальна, поскольку знание особенностей формирования атомных структур используется, например, при создании новых веществ с заданными свойствами.

**ЗАДАЧА** Проблема поиска оптимальных конформаций атомных кластеров сводится к задаче глобальной оптимизации потенциальной функции. Потенциальная функция кластера – есть сумма потенциалов парных взаимодействий всех атомов кластера. На слайде представлены потенциалы 2 наиболее известных моделей кластеров: кластеров Морса и Леннарда-Джонса. Обе приближенные модели потенциала часто используются для описания кластеров веществ с определенным типом атомов, например, некоторых газов. Тем не менее задача оптимизации кластеров Леннарда-Джонса имеет существенные недостатки, поскольку им свойственно структурное однообразие – практически все глобальные минимумы основаны на икосаэдре Маккея. При этом Потенциал Морса имеет параметр , который определяет ширину потенциальной ямы и позволяет рассматривать взаимодействия самых различных материалов. Именно кластерам Морса уделяется основное внимание в данной работе.

**ГЕОМЕТР** Среди существующих методов оптимизации кластерных структур можно выделить несколько больших групп. Одна из них -**геометрически обоснованные** методы, использующие выгодные геометрические фигуры. Например, известно, что по мере увеличения значения параметра ρ структура глобальных минимумов Морса меняется от икосаэдрической к декаэдрической и гранецентрированной кубической.

**ГЕНЕТИЧЕСКИЕ** Следующая группа методов – **генетические алгоритмы**, которые порождают популяции с помощью таких этапов как наследование, мутация, отбор.

**БХ** большую группу методов образуют **методы спуска**, которые предполагают, что локальные экстремумы группируются в ограниченном числе «бассейнов», в каждом из которых «воронки» локальных минимумов расположены настолько близко друг к другу, что за счет случайных возмущений координат атомов кластера возможен постепенный переход от локальных экстремумов к глобальному. При этом для определения локального экстремума используются локальные методы оптимизации.

**ПЛОТНАЯ УПАКОВКА** Рассмотрим основные этапы предлагаемого алгоритма. Во-первых, алгоритм заранее определяет плотную упаковку атомов на основе выгодных геометрических структур. Здесь важно достичь как можно более плотной упаковки. Для жестких шаров наибольшая плотность достигается для гранецентрированной кубической решётки. Но атомы кластеров Морса могут частично «вминаться» друг в друга, и более плотные упаковки формируются для икосаэдрических и додекаэдрических сеток. Использование такой решетки атомов позволяет существенно упростить задачу поиска координат, сведя ее к более простой задаче структурной оптимизации, а именно к выбору выгодных атомов из доступных. На этом этапе так же предполагается фиксация определенных атомов, что упростит дальнейшее решение задачи.

**СЛОИ** Анализ атомных структур в базе данных показал, что конформации можно разложить на слои. Этот факт позволяет упростить построение решетки, поскольку вместо трехмерной структуры формируется лишь несколько двумерных слоев, как показано на слайде.

**БИТЫ** Несмотря на существенное упрощение задачи, она все еще остается вычислительно сложной и решать ее перебором в настоящее время не представляется возможным. Поэтому на данном этапе мы будем представлять конформацию в форме числа в двоичной системе координат. При этом каждый бит отвечает за свой атом. бит равен 1 - если атом присутствует в конформации, 0 – если нет. При таком представлении структур мы можем представить нашу задачу структурной оптимизации в виде классической задачи оптимизации функции от одной переменной.

**РЕШЕНИЕ** Проблема заключается в том, что существующие прямые методы оптимизации здесь неприменимы или неэффективны, поскольку целевая функция не отвечает требованиям таких методов, например, в непрерывности. Поэтому в данной работе используется модифицированный метод Стронгина. На каждой итерации своей работы он дополняет начальную конфигурацию несколькими атомами, а остальные достраиваются разработанным алгоритмом развития. Такая техника по своей структуре напоминает генетический алгоритм, родителями здесь выступают метод Стронгина, алгоритм развития, начальная конфигурация. Итогом работы является несколько локально-оптимальных конфигураций, которые в дальнейшем уточняются процедурой локальной оптимизации.

**СТРОНГИН** Обосную выбор метода Стронгина. Он применяется для оптимизации некоторой целевой функции g(x) на интервале [a;b] Суть алгоритма сводится в делении начального интервала пока очередной делимый интервал не будет длиной меньше заданного эпсилон. На каждой итерации выбирается интервал с максимальной хактеристикой и делится, порождая 2 интервала. Р зависит от длины интервала и значений целевой функции на границах. Т.е. метод старается размещать точки испытаний либо в окрестностях локальных минимумов, либо в интервалах неопределенности, размеры которых велики по сравнению с другими участками. Среди других преимуществ метода –легко распараллелить, передавая каждому выч потомку свой интервал поиска.

**МОДИФИКАЦИЯ** Рассмотрим наш случай. Начальный интервал определяется в зависимости от размера искомой конформации и размера решетки атомов по принципу, изображенному на слайде. Целевая функция в зависимости от выбирает атомов, составляет из них начальную конфигурацию. Эта конфигурация с помощью разработанного алгоритма развития достраивается до размера. Итоговое значение целевой функции зависит от потенциала Морса получившейся конформации. Поскольку метод Стронгина используется для определения лишь первых атомов, и полная его работа не требуется, новый критерий остановки зависит от размера начального интервала и параметра .

**РАЗВИТИЕ** Ранее упоминался Алгоритм развития, достраивающий конформацию до определенного размера. Схема алгоритма представлена на слайде. конформация строится пошагово, то есть структура атомов образуется из найденной заранее структуры атомов присоединением одного нового атома. Атом выбирается исходя из критериев ближайших соседей и по количеству вносимой энергии. В процессе работы находится несколько конформаций, результатом считается структура с наименьшим потенциалом Морса.

**ЛОКАЛЬНАЯ** Большинство существующих методов глобальной оптимизации атомных кластеров являются двухэтапными, и рассматриваемый алгоритм не исключение. Все найденные оптимумы подвергаются процедуре локальной оптимизации, в данном случае это L-BFGS алгоритм. Алгоритм запоминает несколько последних значений функции/градиента и использует их для построения положительно определенной аппроксимации Гессиана. Аппроксимация используется для совершения шага по методу Ньютона.

**ПРОГА** Для проверки алгоритма была необходима его программная реализация. Она была написана на языке программирования Java. Java предоставляет интерфейсы для использования таких структур, как *BigInteger* и *BigDecimal*, что позволило использовать арифметику произвольной точности. Как упоминалось ранее, разработанный алгоритм хорошо поддается распараллеливанию, поэтому при его реализации был задействован пул потоков, в котором каждый вычислительный поток работает на своем интервале поиска. Среди прочих преимуществ – возможность запуска на любой платформе при наличии виртуальной машины. Все значимые параметры алгоритма, такие как начальная конформация, количество выч потоков, количество итераций на том или ином этапе задаются с помощью конфигурационного файла. Результат работы – текстовые файлы с информацией о найденных структурах.

**ФУНКЦИИ** Также был реализован графический интерфейс помощью библиотеки JavaFX. Интерфейс позволяет запускать вычисления, просматривать информацию о найденных структурах, отображать их 3д графики. Во время вычислений выводится информация о прогрессе для каждого из потоков.

**ЭКСП 1** авп

**ЭКСП 2** вап

**ИТОГИ** вап

Спасибо за внимание