

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ
ΤΜΗΜΑ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ Η/Υ ΚΑΙ ΠΛΗΡΟΦΟΡΙΚΗΣ

Μεταπτυχιακό μάθημα
ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ
Ακαδημαϊκό έτος 2020-2021

ΕΡΓΑΣΙΑ 3

Προθεσμία παράδοσης: 24 Ιανουαρίου 2021

Διδάσκων: Κ. Παρόπουλος

Με τον όρο *συστάδες ατόμων* (*atom clusters*) χαρακτηρίζουμε ευσταθείς (συνήθως) ομάδες ατόμων που σχηματίζονται διαμέσου φυσικών και χημικών δεσμών μεταξύ των ατόμων παράγοντας νέα στοιχεία. Οι φυσικές και χημικές ιδιότητες των συστάδων αλλάζουν σημαντικά με τον αριθμό των ατόμων που τις απαρτίζουν. Οι ιδιότητες αυτές παίζουν πολύ σημαντικό ρόλο στην κατασκευή νέων υλικών με συγκεκριμένα χαρακτηριστικά αγωγιμότητας, αποθήκευσης ενέργειας κ.λ.π.

Μια από τις μεθόδους μελέτης ατομικών συστάδων έγκειται στη μελέτη του ενεργειακού προφίλ της συστάδας διαμέσου εξισώσεων *δυναμικού* (*potential*) που περιγράφουν τις αλληλεπιδράσεις μεταξύ των ατόμων της συστάδας. Ένα τέτοιο μοντέλο συστάδων, το οποίο αποδεικνύεται ιδιαίτερα ακριβές για την περίπτωση των αδρανών αερίων, είναι οι *συστάδες Lennard-Jones* (*Lennard-Jones clusters*).

Η ελάχιστη τιμή της δυναμική ενέργειας μιας τέτοιας συστάδας ατόμων συνήθως αντιστοιχεί στη θεμελιώδη κατάσταση της συστάδας κι επηρεάζεται άμεσα από τη δομή της συστάδας, δηλαδή τη διάταξη των ατόμων στον χώρο. Κατά συνέπεια, η εύρεση της βέλτιστης διάταξης των ατόμων στο χώρο με στόχο την εύρεση εκείνης της δομής που ελαχιστοποιεί τη δυναμική ενέργεια της συστάδας αποτελεί πρωτεύοντα στόχο. Δεδομένου ότι αυτό το πρόβλημα είναι NP-hard όσο αυξάνεται το πλήθος των ατόμων, η χρήση μεθόδων βελτιστοποίησης είναι αναγκαία.

Έστω ότι μια συστάδα X αποτελείται από N άτομα, $X = \{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N\}$. Κάθε άτομο \mathbf{x}_i ορίζεται από τις συντεταγμένες του στον χώρο:

$$\mathbf{x}_i = (x_{i1}, x_{i2}, x_{i3})^T,$$

άρα μπορούμε να ορίσουμε πλήρως την συστάδα X αν γνωρίζουμε ακριβώς τις συντεταγμένες όλων των ατόμων που την απαρτίζουν:

$$X = \{\underbrace{x_{11}, x_{12}, x_{13}}_{\text{atom } \mathbf{x}_1}, \underbrace{x_{21}, x_{22}, x_{23}}_{\text{atom } \mathbf{x}_2}, \dots, \underbrace{x_{N1}, x_{N2}, x_{N3}}_{\text{atom } \mathbf{x}_N}\}$$

Αν συμβολίσουμε ως r_{ij} την Ευκλείδεια απόσταση (ℓ_2 -norm) των ατόμων \mathbf{x}_i και \mathbf{x}_j :

$$r_{ij} = \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|_2,$$

τότε η δυναμική ενέργεια που προκύπτει για το ζεύγος αυτό δίνεται από τη σχέση:

$$v_{ij} = \left(\frac{\sigma}{r_{ij}}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}}\right)^6,$$

ενώ η δυναμική ενέργεια ολόκληρης της συστάδας των N ατόμων δίνεται από τη συνάρτηση δυναμικού Lennard-Jones:

$$E_{LJ} = 4\varepsilon \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N v_{ij}, \quad (1)$$

όπου σ (equilibrium pair separation) και ε (pair well depth) είναι παράμετροι του δυναμικού.

Στόχος της παρούσας εργασίας είναι να υπολογίσουμε βέλτιστες συστάδες ατόμων Lennard-Jones, οι οποίες ελαχιστοποιούν τις αντίστοιχες συναρτήσεις δυναμικού της Σχέσης (1), για διαφορετικά πλήθη ατόμων N . Η προσοχή μας θα επικεντρωθεί σε συστάδες με παραμέτρους:

$$\sigma = \varepsilon = 1.$$

Οι αντίστοιχες αντικειμενικές συναρτήσεις αναμένεται να έχουν μεγάλο πλήθος τοπικών ελαχίστων. Για παράδειγμα, για $N = 13$ το αντίστοιχο πρόβλημα ελαχιστοποίησης έχει 988 τοπικά ελάχιστα, ενώ για $N = 100$ το πλήθος των τοπικών ελαχίστων είναι 10^{40} . Οι βέλτιστες

τιμές της συνάρτησης δυναμικού Lennard-Jones της Σχέσης (1) για $N = 1, 2, \dots, 150$, είναι αρνητικές και δίνονται στην παρακάτω ιστοσελίδα (University of Oxford, UK):

<http://doye.chem.ox.ac.uk/jon/structures/LJ/tables.150.html>

Τα προβλήματα που θα επιλύσουμε είναι για τα ακόλουθα N :

$$N = 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 15, 20, 30, 40, 50,$$

με χώρο αναζήτησης των συντεταγμένων των ατόμων:

$$x_{ij} \in [-2.5, 2.5], \quad i = 1, \dots, N, \quad j = 1, 2, 3,$$

και επιθυμητή ακρίβεια προσέγγισης της λύσης $\epsilon = 10^{-3}$. Οι αλγόριθμοι που θα εξετάσουμε είναι οι ακόλουθοι:

1. Γενετικοί αλγόριθμοι δυαδικής αναπαράστασης με roulette wheel και tournament selection.
2. Γενετικοί αλγόριθμοι πραγματικής αναπαράστασης.
3. Μέθοδος Particle Swarm Optimization (μοντέλα gbest και lbest).

Η βέλτιστη διαμόρφωση έκαστου αλγορίθμου αποτελεί αντικείμενο της μελέτης. Συνίσταται να γίνει μια σχετική προεπεξεργασία για τον εντοπισμό καλών παραμέτρων και τελεστών καθενός αλγορίθμου και να διατηρηθούν οι πιο ελπιδοφόροι. Το διαθέσιμο πλήθος συναρτησιακών υπολογισμών για όλες τις περιπτώσεις είναι:

$$T_{\max} = N * 10^5,$$

όπου N το αντίστοιχο πλήθος ατόμων. Όλοι οι αλγόριθμοι που θα υλοποιηθούν θα πρέπει να εκτελεστούν για 30 πειράματα έκαστος και τα αποτελέσματα να αναλυθούν στατιστικά (πίνακες, γραφήματα, boxplots κ.λ.π.).

Επίσης, θα πρέπει να συγκριθούν στατιστικά με χρήση του Wilcoxon test ώστε να εντοπιστεί ο καλύτερος ανάμεσά τους με πρωτεύον κριτήριο την ποιότητα της λύσης που βρέθηκε στο δοθέν πλήθος T_{\max} συναρτησιακών υπολογισμών και με δευτερεύον κριτήριο την ταχύτητα εντοπισμού της λύσης. Στο Matlab ο συγκεκριμένος στατιστικός έλεγχος για δύο δείγματα υλοποιείται με την συνάρτηση `ranksum` ενώ στο Octave με την συνάρτηση `wilcoxon_test`.

Τα πλήρη αποτελέσματα της μελέτης θα πρέπει να αναλυθούν και να δοθούν σε μια ολοκληρωμένη αναφορά. Επιπλέον, θα πρέπει να περιγράφεται η λειτουργία του κώδικα, ο οποίος θα πρέπει να παραδοθεί μαζί με την αναφορά και θα πρέπει να παράγει τα ίδια αποτελέσματα με τα αναφερθέντα στην αναφορά. Οι υλοποιήσεις μπορούν να γίνουν σε γλώσσα προγραμματισμού της επιλογής σας ανάμεσα στις ακόλουθες: C/C++, Java, Fortran, Matlab/Octave, Python, R.

Ημερομηνία παράδοσης: **24 Ιανουαρίου 2021**

Η αξιολόγηση των εργασιών θα βασίζεται στην ποιότητα των αποτελεσμάτων, της παρουσίασης, του κώδικα και στην αξιοποίηση γνώσεων από το μάθημα.