

СРАВНИТЕЛЬНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ МЕТОДОВ ПОИСКА РАВНОВЕСНЫХ КОНФИГУРАЦИЙ КЛАСТЕРНЫХ СИСТЕМ, ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ ПОСРЕДСТВОМ ПОТЕНЦИАЛА ЛЕНАРДА–ДЖОНСА

Ф.И. Карманов, Д.А. Резниченко

*Обнинский государственный технический университет атомной энергетики,
г. Обнинск*



В работе рассмотрена реализация на основе метода Монте-Карло алгоритма метода запрета (Taboo Search – TS), который является методом минимизации многопараметрических функций, и сравнение его эффективности с широко применяемыми методами моделирования «отжига» и генетического поиска.

ВВЕДЕНИЕ

Исследования свойств кластеров связаны, в первую очередь, с надеждами физиков и технологов на использование информации о характеристиках кластерных систем для создания новых материалов с заданными механическими, электрическими, магнитными и другими свойствами для использования их в ядерной энергетике. Одним из важных направлений таких работ может быть исследование причин улучшения прочностных свойств материалов после их облучения пучками заряженных частиц. Как известно, в результате такого воздействия изменяется кристаллическая структура поверхностных слоев материала, причем в некоторых случаях эту измененную структуру можно рассматривать как «сверх-структуру», состоящую из кластерных образований [1–2].

Таким образом, изучение различных свойств кластерных систем позволяет продвинуться в понимании механизмов образования подобных структур и использовать результаты этих исследований для создания новых материалов с заданными свойствами и прогнозировать поведение материалов при радиационном воздействии.

Данная работа посвящена исследованию кластерных систем методами глобальной оптимизации и анализу энергетических и геометрических характеристик атомных кластеров.

Многие проблемы практически во всех областях науки, технологии, технического конструирования включают в себя задачи глобальной оптимизации, которая представляет собой определение глобального минимума функции многих независимых переменных, которые могут быть непрерывны или дискретны. В большинстве случаев для практической реализации глобальная оптимизация очень трудна. Это следствие

множественности локальных минимумов, число которых имеет тенденцию к экспоненциальному росту с увеличением размерности задачи [3–5].

В данной работе алгоритм TS применяется для минимизации атомной кластерной системы, нахождения минимальной энергии этой системы, и сравнения энергетических и геометрических характеристик полученных кластеров с данными, представленными другими авторами. Наряду с этим в работе оценивается эффективность предлагаемого алгоритма в сравнении с другими популярными алгоритмами минимизации многопараметрических функций, такими как алгоритмы «отжига» и генетического поиска.

АЛГОРИТМЫ МИНИМИЗАЦИИ МНОГОПАРАМЕТРИЧЕСКИХ ФУНКЦИЙ

В данной работе были разработаны и использовались для исследования кластерных систем три алгоритма минимизации: хорошо известные и применяемые многими авторами алгоритмы «отжига» и генетического поиска, а также алгоритм TS, который впервые был применен для подобного исследования кластерных систем. Алгоритм «отжига» был реализован аналогично методу, предложенному авторами статьи [6], но с некоторыми модификациями. При реализации алгоритма генетического поиска, за основу были приняты работы [7, 8], причем проводилось сравнение с данными результатов расчета работы [8].

Идея метода TS заимствована из исследований в области искусственного интеллекта, и представляет собой один из «интеллектуальных» методов оптимизации, получивших развитие в последние годы. Алгоритм, основанный на запрещении поиска в определенных областях фазового пространства, создает таблицу из ранее произведенных шагов в рамках поиска минимума функции и сохраняет ее в памяти, которая непрерывно обновляется. Используя предварительно накопленную информацию, новые шаги поиска могут быть запрещены или разрешены, в зависимости от успеха поиска на предыдущем шаге.

Согласно работе [9], алгоритмы, использующие условия запрета некоторых вариантов поиска минимума функции на основе предварительно накопленной «исторической» информации (TS), намного выигрывали в эффективности у алгоритмов «отжига» при оптимизации некоторых стандартных пробных функций.

Подобные алгоритмы используют модификацию «локального поиска», который начинает свою работу с некоторой начальной конфигурации и пытается найти лучшее решение. Это приводит к появлению новой конфигурации, и процесс поиска повторяется, используя эту конфигурацию как начальную.

При разработке алгоритма метода запрета за основу была взята работа [9].

КЛАСТЕРНАЯ СИСТЕМА

В этой работе в качестве объекта минимизации рассматривается система частиц, взаимодействующих между собой посредством потенциала Ленарда–Джонса (LJ или 6–12), который является достаточно хорошим приближением для описания взаимного притяжения атомов вследствие действия вандерваальсовских сил. Методами минимизации осуществляется поиск минимальной энергии данной системы атомных частиц. Потенциал Ленарда–Джонса для взаимодействия между атомами дается формулой

$$V(r) = D \left(\frac{a^{12}}{r^{12}} - 2 \frac{a^6}{r^6} \right),$$

где расстояние между атомами $r = a$ соответствует минимуму потенциала взаимодействия, который равен D при этом расстоянии. Общая энергия атомной конфигурации

рассчитывается путем суммирования энергии парных взаимодействий всех частиц N , входящих в систему

$$V_{tot} = \sum_{\substack{i,j=1 \\ (i < j)}}^N \left(\frac{1}{R_{ij}^{12}} - \frac{2}{R_{ij}^6} \right)$$

где $R_{ij} = r_{ij} / a$, выражение для V_{tot} приведено в единицах D .

Начальная конфигурация системы является случайной, т.е. несколько десятков или сотен частиц располагаются случайным образом в трехмерном пространстве. Во всех случаях, рассмотренных здесь, используются свободные граничные условия. На начальном этапе работы алгоритмов производится выбор начальных параметров [6], таких как начальная эффективная «температура», параметр скорости охлаждения, количество частиц, и затем производится соответствующее число шагов минимизации в соответствии с выбранным методом.

На рис. 1 показаны типичные 13-атомные кластеры со структурами кубоктаэдра и икосаэдра.

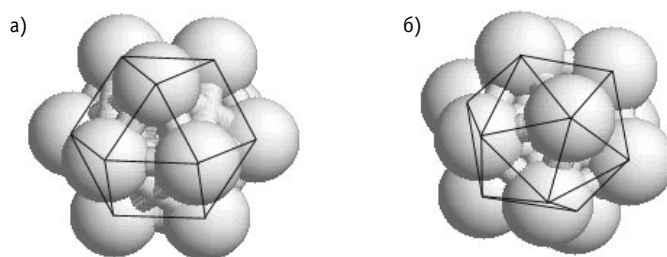


Рис. 1. 13-атомные кластеры: а) структура ГЦК (кубоктаэдр), $E_{\min} = -3,131$; б) кластер с икосаэдрической симметрией, $E_{\min} = -3,412$

АЛГОРИТМ МЕТОДА ЗАПРЕТА (TS)

В данном алгоритме реализована модель, использующая главные особенности метода запрета некоторых вариантов поиска областей конфигурационного пространства, на основе предварительно накопленной «исторической» информации (TS). Работа алгоритма включает в себе следующие шаги:

Шаг 1. Инициализация

Задается начальная конфигурация системы и начальные параметры. Вычисляется начальная энергия конфигурации.

Шаг 2. Формирование новых конфигураций

Для каждой отдельной частицы формируется заданное число новых конфигураций. Как в алгоритме «отжига» и генетического поиска, все вновь сформированные конфигурации отличаются от предыдущей случайным приращением координат выбранной частицы. В соответствии с описанием алгоритма, формирование этих новых состояний происходит с учетом ранее накопленной «исторической» информации. Создается список «запрещенных» перемещений, куда заносятся данные о предыдущих состояниях частицы. Этот список представляет собой массив, в котором хранится информация о перемещении частицы, т.е. ее координаты. На каждом последующем шаге производится анализ положения атома с «новыми» координатами – если частица попадает в область, для которой уже были сформированы предыдущие конфигурации, то такое перемещение частицы становится запрещенным и более не рассматривается. Этот подход позволяет избежать поиска в уже «отработанных» областях пространства и продолжить поиск в более перспективных областях, в которых до

этого не создавались атомные конфигурации. Кроме того задается параметр, который регулирует величину, на которую может переместиться частица в результате случайного приращения координат (приращение не должно быть слишком большим). Этот шаг предпринимается для того, чтобы не происходило резких скачков параметров атомной конфигурации, что делает более легким выход из областей локальных минимумов.

Шаг 3. Вычисление энергии системы

После цикла поиска, удовлетворяющего условиям перемещения частицы, подсчитывается общая энергия получившейся конфигурации. Энергия системы до изменения координат частиц V_{tot}^0 и энергия после этого изменения V_{tot}^1 сравниваются, и если $\Delta E = V_{tot}^1 - V_{tot}^0 < 0$, то такое изменение конфигурации принимается.

В соответствии с алгоритмом, следует произвести аналогичные операции со всеми частицами, принадлежащими конфигурации, повторяя шаги 2 и 3 для каждого атома, и, таким образом, весь атомный кластер приобретает структуру с меньшей энергией.

В свою очередь, процедура минимизации всего атомного кластера также циклически повторяется, пока не будет найден энергетический минимум системы.

Блок-схема алгоритма, использующего условие запрета, представлена на рис. 2.

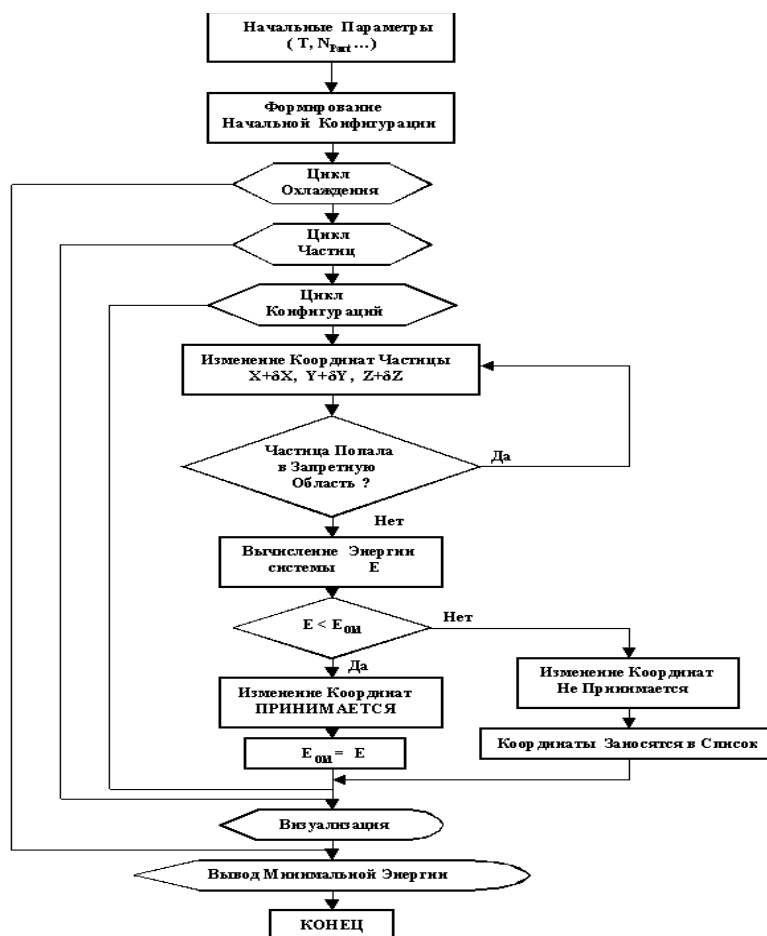


Рис. 2. Блок-схема алгоритма TS

РАСЧЕТ ЭНЕРГИИ СВЯЗИ КЛАСТЕРА

С помощью программного комплекса, подготовленного на основе описанного выше алгоритма, были получены результаты, которые позволяют оценить их пригодность к применению для исследования свойств кластеров. В работах, посвященных кластерам, взаимодействие между атомами которого отвечает потенциалу Ленарда-Джонса, наиболее полно исследован характер зависимости энергии связи кластеров с различным количеством частиц N , и с большой точностью известны ее значения. Значения энергии связи минимальной конфигурации в зависимости от количества частиц были рассчитаны и сравнивались с данными работы [8]. Авторы работы [8] приводят диаграмму зависимости минимальной энергии кластера от количества частиц в диапазоне $1 < N_{part} < 100$. При сравнении данных было обнаружено, что полученная энергия связи минимальной конфигурации достаточно точно совпадает с результатами работы [8] для числа атомов $N < 40$, и приблизительно совпадает (несколько больше) для кластеров с большим числом частиц (вплоть до 100). Диаграмма сравнения представлена на рис. 3. Энергия связи кластеров на диаграмме указана в единицах D . Более высокую энергию связи, полученную с помощью представленного алгоритма, можно объяснить тем, что форма кластера немного отличается от наиболее энергетически выгодной (самая выгодная – форма икосаэдра, менее выгодная – кубоктаэдра). Авторы статьи [8] использовали гораздо более сложный алгоритм поиска минимальной энергетической структуры с использованием симметрии, и потому получили более низкоэнергетические конфигурации атомов, которые, конечно, имели энергетически более выгодную форму, т.е. кластеры, количество частиц в которых соответствовало магическим числам для икосаэдра, имели икосаэдрическую форму, а для кластеров с отличающимися от магических чисел количеством частиц, последняя оболочка икосаэдра заполнялась не полностью.

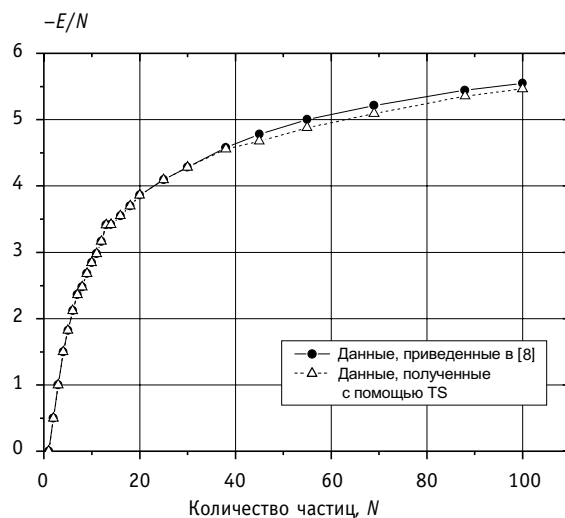


Рис. 3. Диаграмма сравнения минимальной энергии связи кластеров

АНАЛИЗ ГЕОМЕТРИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ КЛАСТЕРОВ

В работе было проведено сравнение энергии связи кластеров, полученных при помощи алгоритмов минимизации, с характеристиками типичных кристаллических решеток, целью которого было определение того, к какой из наиболее распространенных структур энергетически близок полученный нами кластер.

С этой целью были разработаны программы, позволяющие формировать кластеры со структурой типичных кристаллических решеток и формой, при которой кластер имеет наименьшую энергию. Также для сравнения формировались кластеры с икосаэдрической симметрией. Хотя такая симметрия не позволяет транслировать элементарную ячейку, она дает возможность заполнения пространства с большей плотностью, чем ГЦК-структура. Для каждой структуры формировались кластеры, содержащие определенное количество частиц, для того, чтобы его энергия была минимальной, причем в случае ГЦК-структуры и кластеров с икосаэдрической симметрией, количество частиц соответствовало магическим числам. Кроме того, для сравнительного анализа, формировались кластеры со структурой ОЦК и структурой простой кубической решетки.

Как уже упоминалось ранее, энергии атомных кластеров вычислялись с помощью представленных алгоритмов для количества частиц в интервале от 1 до 200. Поэтому кластеры с заданной структурой формировались для числа частиц $N_{part} < 200$. Для структуры гранецентрированной решетки и икосаэдрической симметрии были сформированы кластеры, число частиц в которых соответствовало магическим числам, т.е. $N_{part} = 13, 55, 147$. Для объемно центрированной решетки количество частиц в кластерах составило $N_{part} = 6, 15, 61, 163$. Кластеры со структурой простой кубической решетки содержали $N_{part} = 8, 32, 81, 160$.

Все данные, содержащие минимальные энергии кластеров с заданной структурой, были нанесены на диаграмму (рис. 4), для сравнения с энергией связи кластеров, полученных с помощью алгоритмов минимизации. Энергия связи кластеров на диаграмме указана в единицах D . Из анализа диаграммы следует, что полученные с помощью алгоритмов минимизации кластеры с количеством частиц $N_{part} < 40$ имеют икосаэдрическую симметрию (что согласуется с предыдущим сравнением с данными, приведенными в статье [8]). Особенно выделяется в этом ряду 13-атомный кластер, имеющий икосаэдрическую симметрию и энергию $E_{min} = -3,412$, в отличие от 13-атомного кластера со структурой ГЦК-кубоктаэдра и энергией $E_{min} = -3,131$ (рис. 1).

Далее, в области $40 < N_{part} < 140$, кластеры, полученные с помощью алгоритмов минимизации, имеют промежуточные значения энергии по отношению к энергиям

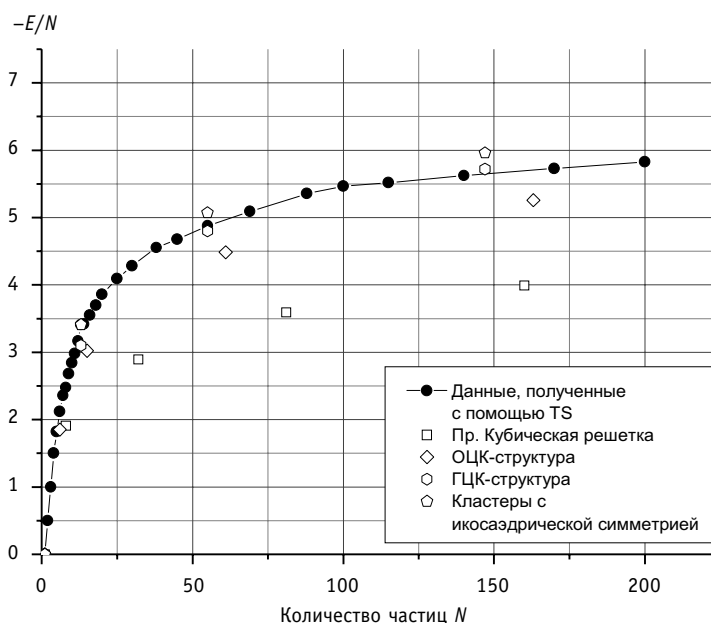


Рис. 4. Сравнение энергии связи кластеров с характеристиками типичных кристаллических решеток

систем с икосаэдрической симметрией и структурой ГЦК-кубоктаэдра. Этот факт можно объяснить тем, что при данном числе атомов в кластере, в процессе работы алгоритмов минимизации не был достигнут глобальный минимум энергии системы, но, тем не менее, атомы в кластере располагаются так, что он имеет симметрию, более близкую к икосаэдрической, хотя расстояния между некоторыми атомами уже не составляют оптимальную величину, но этого хватает, чтобы энергия кластера была меньше, чем у аналогичного кластера со структурой ГЦК.

При количестве частиц в кластере $N_{part} > 140$, энергия кластеров, полученных с помощью алгоритмов минимизации, приблизительно равна энергии кластеров с таким же количеством частиц и структурой ГЦК.

СРАВНИТЕЛЬНАЯ ЭФФЕКТИВНОСТЬ АЛГОРИТМОВ МИНИМИЗАЦИИ

Алгоритм «отжига», алгоритм генетического поиска, и алгоритм, использующий условие запрета, имеют разную скорость достижения минимума системы. В связи с этим представляет интерес сравнение эффективности данных алгоритмов.

Во всех случаях исследуемая атомная конфигурация содержала 100 частиц, т.к. для кластеров, взаимодействующих посредством потенциала Ленарда–Джонса, такое количество атомов считается довольно большим и требует эффективных методов для достижения глобального энергетического минимума системы.

Сравнение эффективности проводилось на основе анализа зависимости минимальной энергии от количества шагов «охлаждения», необходимых для достижения этой энергии. Такая зависимость строилась для каждого из алгоритмов (рис. 5). Энергия связи кластеров на диаграмме указана в единицах D .

Как видно из рис. 5, алгоритм «отжига» показал несколько худшие результаты по сравнению с другими алгоритмами. На начальном этапе, при одинаковом количестве шагов «охлаждения», энергия получаемых с помощью алгоритма «отжига» атомных конфигураций намного выше, чем у аналогичных кластеров, полученных с помощью алгоритма генетического поиска, и алгоритма, использующего условия запрета. При достижении количества шагов охлаждения ≈ 120 , значения энергий получаемых атомных конфигураций практически достигают режима насыщения, т.е. дальнейшее увеличение количества шагов охлаждения не приносит сколько-нибудь заметного уменьшения энергии конфигурации.

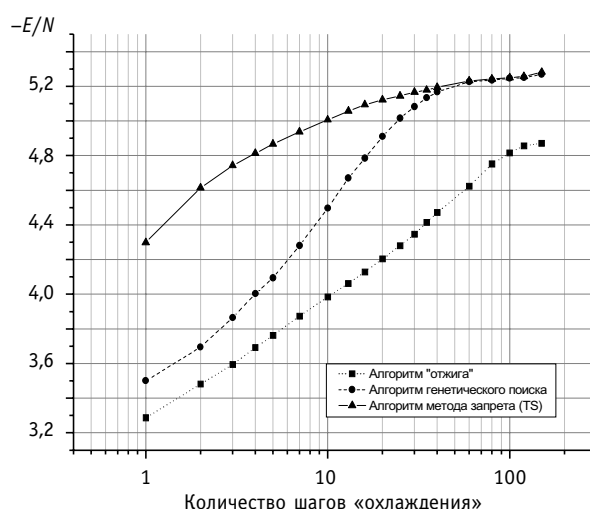


Рис. 5. Сравнительная эффективность алгоритмов минимизации

Эффективность алгоритма генетического поиска и алгоритма, использующего условие запрета, значительно выше, чем эффективность алгоритма «отжига». Для всех значений числа шагов «охлаждения» при помощи данных алгоритмов были получены энергетически более выгодные структуры. Величина минимальной энергии этих кластеров была близка к абсолютному энергетическому минимуму конфигурации для данного количества частиц, получаемой на основе симметричного анализа.

Сравнивая эффективность алгоритма генетического поиска, и алгоритма, использующего условия запрета, следует отметить, что из-за более эффективного алгоритма поиска новой атомной конфигурации с учетом ранее накопленной информации (поиск не производится в уже «отработанных» областях), эффективность поиска минимальной атомной конфигурации на начальном этапе (при небольших числах шагов «охлаждения») с помощью алгоритма, использующего условия запрета, намного выше, чем у алгоритма генетического поиска. Значительный выигрыш в эффективности алгоритма, использующего условие запрета, наблюдается в области количества шагов «охлаждения» $N_{cooling} < 50$. Однако далее значения минимальных энергий, полученных с помощью и алгоритма генетического поиска, и алгоритма, использующего условия запрета, примерно одинаковы. Отметим, что оба алгоритма выходят на режим насыщения значительно позже, чем алгоритм «отжига».

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Предложенный в данной работе алгоритм метода запрета (TS) был применен для формирования кластерных структур путем минимизации энергии кластерных систем. Проведено сравнение энергетических и геометрических характеристик полученных кластеров с характеристиками типичных кристаллических решеток.

Сравнение эффективности алгоритма метода TS с алгоритмами «отжига» и генетического поиска показало его высокую эффективность при достижении энергетического минимума системы, что делает его перспективным методом для нахождения наиболее низкоэнергетических конфигураций кластерных систем.

Литература

1. Хмелевская В.С., Куликова Н.В., Накин А.В., Малынкин В.Г. Кластерные структуры в ГЦК материалах при высоких уровнях радиационного повреждения//Известия вузов. Ядерная энергетика. – 1999. – Приложение к № 2. – С. 83-88.
2. Хмелевская В.С., Накин А.В., Малынкин В.Г. Структуры в облученных металлических материалах, армированные икосаэдрическими кластерами//Известия вузов. Ядерная энергетика. – 2001. – № 6. – С. 33-37.
3. Елецкий А.В., Смирнов Б.М. Свойства кластерных ионов//Успехи физических наук. – 1989. – Т. 159. – Вып. 1. – С. 45-81.
4. Смирнов Б.М. Системы атомов с короткодействующим взаимодействием//Успехи физических наук. – 1992. – Т. 162. – № 12. – С. 97-150.
5. Смирнов Б.М. Кластеры с плотной упаковкой и заполненными оболочками//Успехи физических наук. – 1993. – Т. 163. – № 10. – С. 29-56.
6. Silverman A., Adler J. Animated Simulated Annealing//Computers in Physics. – May/Jun 1992. – V. 6. – № 3. – P. 277-281.
7. Michaelian K. Evolving few-ion clusters of Na and Cl// Am. J. Phys. – March 1998. – 66 (3). – P. 231-240.
8. Deaven D.M., Tit N., Morris J.R., Ho K.M. Structural optimization of Lenard-Jones clusters by a genetic algorithm//Chemical Physics Letters. – 1996. – 256. – P. 195-200.
9. Cvijovic D., Klinowski J. Taboo Search: An Approach to the Multiple Minima Problem// Science. – V. 267 (3 February 1995).

Поступила в редакцию 2.03.2003

ABSTRACTS OF THE PAPERS

УДК 621.039.58

The Development of Specialized Software for Fast Radiation Conditions Analysis and Accident Evolution Forecasting in Case of Nuclear Accident \Yu.M. Volkov, S.T. Leskin, Yu.D. Baranaev, A.I. Voropaev, M.F. Vorotyntsev; Editorial board of journal «Izvestia visshikh uchebnikh zavedeniy. Yadernaya energetika» (Communications of High Schools. Nuclear Power Engineering). – Obninsk, 2005. – 5 pages, 4 illustration. – References, 5 titles.

The article describes an approach for the development of software for fast forecasting of nuclear accident consequences. The system combines the number of previous IPPE developments and models of air transfer of radioactivity. Also, described the method of giving more precise definitions of source of radioactive release using the registrations of automated monitoring system and using the measurements of radioactive conditions exploration. The system integrated with geoinformational system MapInfo using digital maps of territory.

УДК 621.039.53:544.182

Comparative Study of Equilibrium Configurations of Lennard–Jones Cluster Systems \F.I. Karmanov, D.A. Reznichenko; Editorial board of journal «Izvestia visshikh uchebnikh zavedeniy. Yadernaya energetika» (Communications of High Schools. Nuclear Power Engineering). – Obninsk, 2005. – 8 pages, 5 illustrations. – References, 9 titles.

Realization of new multiparameter minimization algorithm based on Monte Carlo Method is considered and its efficiency in comparison with widely used methods of annealing and genetic search is analyzed.

УДК 504.45:546.42

Radioecological Model of ^{90}Sr and ^{137}Cs Transfer in the River System «Iset–Tobol–Irtysh» \A.I. Kryshev, A.V. Nosov; Editorial board of journal «Izvestia visshikh uchebnikh zavedeniy. Yadernaya energetika» (Communications of High Schools. Nuclear Power Engineering). – Obninsk, 2005. – 10 pages, 7 tables. – References, 18 titles.

The complex radioecological model has been developed to describe the radionuclide transfer in the river system «Iset–Tobol–Irtysh». The model consists of two interrelated compartments: evaluation of the radionuclide migration in abiotic components of river (water, bottom sediments) and calculation of the radionuclide bioaccumulation in different ecological groups of fish. Using the model the activity concentrations of ^{90}Sr and ^{137}Cs in water, bottom sediments and fish (ide, pike) from the Iset, Tobol and Irtysh Rivers have been evaluated. Calculations have been performed for the current level of the radionuclide release from Techa to Iset River.

УДК 504.45:546.79

Up-to-date Content of ^{90}Sr , ^{137}Cs , $^{239,240}\text{Pu}$ and Tritium in Water of the River System Tobol–Irtysh (from the Iset River Mouth till Confluence with the Ob River) \A.I. Nikitin, V.B. Chumichev, N.K. Valetova, I.Yu. Katrich, A.I. Kabanov, G.E. Dunaev, V.N. Shkuro, V.M. Rodin, A.N. Mironenko, E.V. Kireeva; Editorial board of journal «Izvestia visshikh uchebnikh zavedeniy. Yadernaya energetika» (Communications of High Schools. Nuclear Power Engineering). – Obninsk, 2005. – 9 pages, 4 illustrations, 3 tables. – References, 11 titles.

Data on content of ^{90}Sr , ^{137}Cs , $^{239,240}\text{Pu}$ and tritium in water of the Tobol–Irtysh part of the river system Techa–Iset–Tobol–Irtysh–Ob (through which the radioactive wastes of the Mayak PA are transported) are presented and discussed. Data received in 2004 in frames of the ISTC Project № 2558 «Radioecological monitoring of the Tobol and Irtysh rivers. Study of biogenic transfer of radionuclides and radiation risk assessment for the population and environment».