

# OPTIMIZACIÓN GEOMÉTRICA DE CÚMULOS ATÓMICOS UTILIZANDO UN ALGORITMO GENÉTICO

**Roberto Núñez González**  
Departamento de Matemáticas  
Universidad de Sonora

## Resumen

*En este trabajo se presentan los resultados obtenidos, mediante un algoritmo genético, en el cálculo de las estructuras de mínima energía de cúmulos atómicos. Se considera que los átomos dentro de cada cúmulo atómico interactúan mediante un potencial de tipo Lennard-Jones. El programa computacional fue desarrollado en la Universidad de Sonora y se describe su estructura.*

*Los resultados que se presentan muestran la estructura de mínima energía para cúmulos atómicos cuyo tamaño varía de 2 a 25 átomos, así como la energía asociada a dichas estructuras, las cuales coinciden con las reportadas en la literatura.*

## 1 Introducción

Durante los últimos años se ha estado llevando a cabo la investigación de las propiedades de los materiales cuando sus escalas son del orden atómico, y dentro de estas escalas se encuentran los cúmulos atómicos. Los cúmulos atómicos son conglomerados de átomos que pueden contener desde dos hasta miles de los mismos. Estos átomos pueden ser del mismo tipo, o de dos o más especies distintas (cúmulos monoatómicos y cúmulos binarios). Inclusive, se pueden considerar cúmulos de moléculas. En [1] se presentan los distintos tipos de cúmulos atómicos y las propiedades de los mismos.

El estudio de los cúmulos atómicos es importante por dos razones fundamentales [2].

1. Por sus propiedades intrínsecas.
2. Por su posición intermedia entre el dominio de las moléculas y el dominio de la materia condensada.

Las propiedades físicas y químicas de un cúmulo atómico están determinadas en parte por su estructura geométrica, es decir, por la configuración geométrica que adoptan sus átomos constituyentes. Para determinar la estructura geométrica que adopta un cúmulo constituido por un cierto tipo de átomos, y para la cual la energía potencial del cúmulo es mínima, se pueden utilizar distintos métodos, entre los cuales se encuentran

- Dinámica molecular
- Métodos ab-initio
- Recocido simulado
- Algoritmos genéticos

- Otros [3]

En este trabajo se realiza la optimización geométrica de cúmulos atómicos mediante un algoritmo genético, por lo que el problema es determinar las posiciones atómicas en el espacio tridimensional, con las cuales la energía potencial del cúmulo es la menor posible.

## 2 Algoritmo Genético

Los algoritmos genéticos son estrategias estocásticas de búsqueda que están basadas en la evolución natural de las especies [4]. Estos algoritmos nos permiten realizar la búsqueda de soluciones óptimas a problemas muy complicados en donde las técnicas tradicionales de optimización (tipo Newton) no dan buenos resultados. Este tipo de algoritmos se han aplicado a una gran variedad de problemas de optimización:

- Problemas que tienen un gran dominio de búsqueda
- Ajuste de datos a expresiones analíticas
- Solución de ecuaciones diferenciales
- Optimización estructural de cúmulos atómicos

Un algoritmo genético clásico consta de varios pasos (ver Figura 1). Primero se genera una *población inicial* (primera generación), la cual consta de un determinado número de individuos (cúmulos). Cada uno de estos individuos es una solución potencial al problema de optimización. Posteriormente, la población evoluciona (se modifica) mediante la *selección de individuos* (padres) y su *cruza* para generar una nueva población (nueva generación de hijos), y a la población resultante se le aplican operadores de *mutación*. El método de selección y los operadores de cruce y mutación son un punto esencial en el funcionamiento de los algoritmos genéticos. En cada generación, los individuos son evaluados para ver si resuelven el problema de manera satisfactoria (evaluación de la *aptitud*). Este proceso es repetido hasta que se obtenga un individuo que logre resolver el problema de optimización dentro de un criterio previamente establecido.

De lo anterior, se desprende que un algoritmo genético está compuesto por cinco componentes básicos [5].

1. Representación de los parámetros a optimizar
2. Creación de la población inicial
3. La función de evaluación, con la cual se mide la aptitud de cada individuo de la población
4. Los operadores genéticos
5. Otros aspectos: como seleccionar a los individuos que generarán la nueva población, tamaño de la población, porcentaje de cruce, porcentaje de mutación, número máximo de iteraciones, etc.

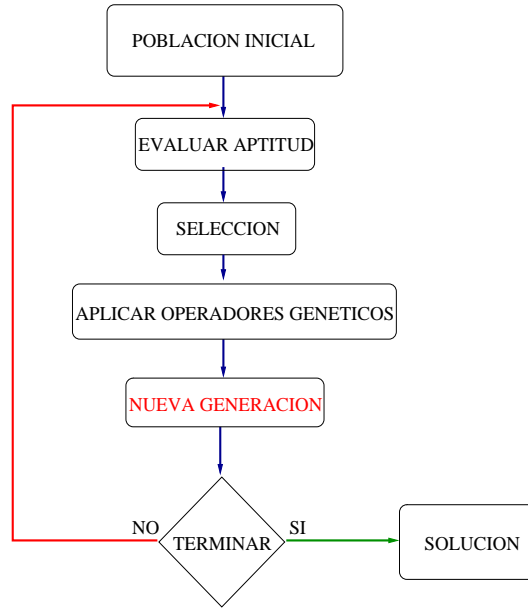


Figura 1: Diagrama de flujo de un Algoritmo Genético clásico.

Una variante que se utiliza en este trabajo, idea utilizada por primera vez en [6], es aplicar a cada cúmulo de la población una técnica de *minimización local*, con lo cual las posiciones atómicas son modificadas de tal manera que la energía potencial del cúmulo corresponde con el mínimo local más próximo. Además se aplica la idea de *elitismo*, esto es, los mejores individuos de una generación pasan sin cambio a la siguiente generación, lo que asegura que la información de los más aptos no se pierda. Si alguno de los mejores individuos es superado, simplemente es sustituido por el nuevo mejor individuo.

Para la implementación computacional de un algoritmo genético, se deben definir los elementos involucrados en cada una de las etapas anteriores.

### 3 Parámetros Computacionales

Para este trabajo, se consideraron cúmulos atómicos de tipo Lennard-Jones [7], en los cuales la interacción entre los átomos del cúmulo es de la forma

$$V_{ij} = 4 \cdot \epsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right] \quad (1)$$

tal que  $V_{ij}$  es la energía potencial entre el  $i$ -ésimo y el  $j$ -ésimo átomo, y  $r_{ij}$  es la distancia entre los mismos.  $\epsilon$  es el mínimo valor que toma la energía potencial, mientras que  $\sigma$  es la distancia a la cual la energía potencial es cero. Los cálculos se realizaron utilizando *unidades reducidas*, esto es,  $\epsilon = \sigma = 1.0$ . Con esto se logra trabajar con valores numéricos cercanos a la unidad, en lugar de con valores extremadamente pequeños normalmente asociados con la escala atómica. La *energía potencial total* de un cúmulo atómico, con  $n$  átomos, esta dada

por la expresión

$$V_T = \sum_{j>i}^n V_{ij}. \quad (2)$$

La ecuación 2 es la función que nos servirá para evaluar la aptitud de cada cúmulo (individuo) de la población.

La representación de los parámetros de la función a optimizar (ecuación 2), que son las coordenadas cartesianas de los átomos que integran el cúmulo, son representados por números de punto flotante, sin codificación de por medio [8]. La población inicial consta de  $n_c$  individuos, en los cuales las posiciones de sus átomos constituyentes son generadas en forma aleatoria, dentro de un esfera cuyo radio es proporcional a la raíz cúbica del número de átomos [1]. Para evaluar la aptitud de cada cúmulo, se utiliza una expresión de tipo exponencial [9].

$$\text{Aptitud}_k = e^{\alpha \cdot \rho_k} \quad (3)$$

donde  $\text{Aptitud}_k$  es el valor de la aptitud del  $k$ -ésimo individuo, y  $\rho_k$  es la energía potencial total *normalizada* del mismo cúmulo

$$\rho_i = \frac{\max|V_{T_i}| - |V_{T_i}|}{\max|V_{T_i}|} \quad (4)$$

$\alpha$  es una constante numérica, mediante la cual se puede modificar la frecuencia de selección de los individuos menos aptos de una población. En este trabajo se utiliza  $\alpha = 1.0$  [9], con el cual los individuos menos aptos (con mayor energía potencial) tienen una buena probabilidad de ser seleccionados.

Para construir una nueva población se realizan los siguientes pasos:

1. Se pasan a la nueva población los cúmulos más aptos de la generación anterior (elitismo), con un porcentaje de  $P_e$ .
2. Un porcentaje  $P_a$  de individuos de la nueva población se generan aleatoriamente.
3. Para generar el resto de los hijos, primero se hace una selección de los cúmulos padres utilizando la *técnica de la ruleta* [4].
4. Después, para generar los cúmulos hijos se aplica un operador de cruzamiento a los padres seleccionados, que es del tipo *cortar y empalmar* [6]. Este operador de cruza consiste en cortar en dos partes a los dos padres, y generar uno de los hijos uniendo la parte “superior” de un padre con la parte “inferior” del otro padre, y de manera similar se forma el otro hijo utilizando las partes restantes.
5. Se aplica el operador de mutación a cúmulos de la nueva población (hijos), seleccionados aleatoriamente. El operador de mutación consiste en modificar las coordenadas de algunos de los átomos seleccionados aleatoriamente, multiplicándolos por un valor aleatorio con distribución uniforme y en el rango  $[-1,1]$ . Cada cúmulo es seleccionado con una probabilidad de  $P_m$ .

6. Cada cúmulo de la nueva población es minimizado con un algoritmo de gradiente conjugado BFGS [10], de tal manera que su energía potencial corresponda con un mínimo local. Esta etapa es aplicada para generar la nueva población, indicada en la figura 1.

El cuadro 1 muestra los valores numéricos de los parámetros que se utilizan en el algoritmo genético.

Tabla 1: Valores utilizados en el algoritmo genético implementado.

Parámetro	Valor
$\epsilon$	1.0
$\sigma$	1.0
$n_c$	30
$\alpha$	1.0
$P_e$	0.1
$P_a$	0.1
$P_m$	0.1

## 4 Resultados

En el cuadro 2 se muestran las energías calculadas, con el algoritmo genético descrito anteriormente, para cúmulos con distinto número de átomos. La energía está dada en unidades reducidas (u.r) y el tamaño de los cúmulos varía desde 2 hasta 25 átomos.

Las energías calculadas en este trabajo, para cúmulos tipo Lennard-Jones, coinciden con los valores reportados en otros trabajos (ver [11]). Dado que los valores mínimos reportados en [11] han sido compilados de diversas fuentes, sirven como valores de referencia para determinar el buen funcionamiento de un algoritmo que busca determinar la estructura con la mínima energía potencial, por lo que se hace la comparación de nuestros resultados con ellos.

Las estructuras calculadas, para algunos de los cúmulos, se muestran en la figura 2.

Para determinar la eficiencia del algoritmo en calcular el valor mínimo reportado, se ejecutó varias veces el programa (específicamente 100 corridas) para un número dado de átomos, y se observó en cuantas ocasiones el valor mínimo calculado coincidía con los valores reportados en [11]. La figura 3 muestra los resultados obtenidos.

Tabla 2: Energías calculadas para cúmulos de tipo Lennard-Jones

$n$	Energía(u.r)	$n$	Energía(u.r.)
2	-1.000000	14	-47.845156
3	-3.000000	15	-52.322627
4	-6.000000	16	-56.815741
5	-9.103852	17	-61.094498
6	-12.712062	18	-66.284568
7	-16.505384	19	-70.170874
8	-19.821489	20	-74.459715
9	-24.113360	21	-80.847781
10	-28.422531	22	-83.852214
11	-31.795557	23	-91.069807
12	-37.967599	24	-95.790388
13	-44.326801	25	-101.781259

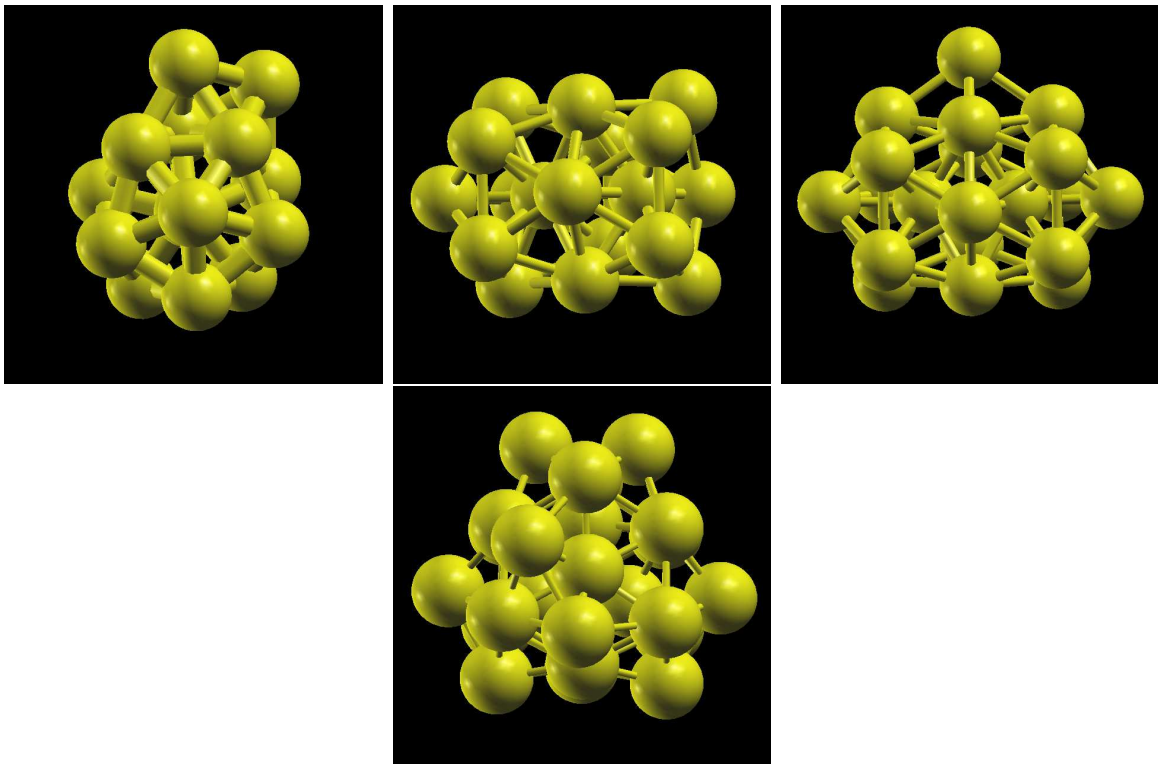


Figura 2: Estructura calculada para cúmulos con 15 (sup. izq.), 18 (sup. der.), 20 (inf. izq) y 25 (inf. der.) átomos.

## 5 Conclusiones

Los resultados obtenidos por el algoritmo genético descrito en este trabajo son satisfactorios, ya que las energías calculadas para cúmulos desde dos hasta 25 átomos coinciden con los re-

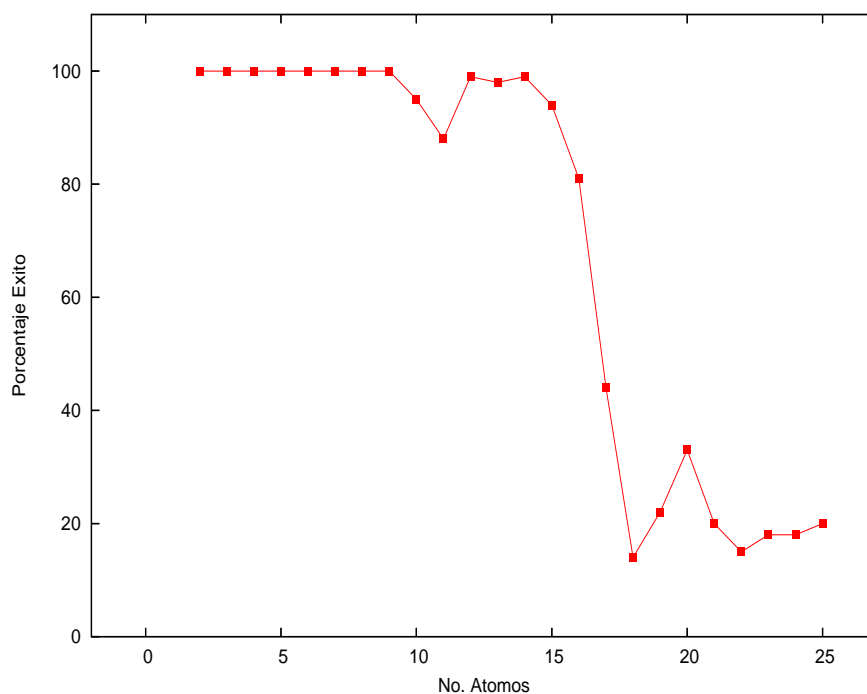


Figura 3: Porcentaje de éxito para el algoritmo genético desarrollado en este trabajo.

portados en la literatura, por lo que la implementación computacional del algoritmo genético es correcta. Con respecto a la eficiencia del algoritmo para detectar el mínimo global reportado (ver figura 3), se observa que para cúmulos de menos de 15 átomos es de más del 80% (de 100 corridas, en más de 80 de ellas logra calcular el mínimo global reportado), mientras que para cúmulos de 18 a 25 átomos es de alrededor del 20%. Esta caída drástica en la eficiencia se puede atribuir a que entre los 15 y 18 átomos hay un cambio en la tendencia estructural de los cúmulos (ver figura 2).

## Bibliografía

- [1] Johnston, Roy L.: 2002. *Atomic and Molecular Clusters*. 1ra. Edición. Taylor & Francis.
- [2] Johnston, Roy L.; Roberts, C.: 2003. *Genetic Algorithms for the Geometry Optimisation of Clusters and Nanoparticles*. En: Cartwright, H.M., Sztandera, L. Editors (2002). *Soft Computing Approaches in Chemistry*. Springer.
- [3] Ali, M.M.; Smith R.; Hobday S.:2006. *The structure of atomic and molecular clusters, optimised using classical potentials*. *Comp.Phys.Comm.* 7. 175.

- [4] Goldberg, D.E.: 1989. *Genetic Algorithms in Search, Optimisation and Machine Learning*. Addison-Wesley.
- [5] Villalobos Arias, M.A.: 2004. *Algoritmos Genéticos: Algunos Resultados de Convergencia*. Mosaicos Matemáticos No. 13. Página 53.
- [6] Deaven, D.M.; Ho, K.M.: 1995. *Molecular Geometry Optimisation with a Genetic Algorithm*. Phys.Rev.Lett. 2. 75.
- [7] Kittel, Charles:2004. *Introduction to Solid State Physics*. 8a. Edición. Wiley.
- [8] Zeiri, Y.: 1995. *Prediction of the lowest energy structure of clusters using a genetic algorithm*. Phys.Rev.E. 4. 51.
- [9] Zeiri, Y.:1997. *Study of the lowest energy structure of atomic clusters using a genetic algorithm*. Computer Physics Communications. 103. p. 28-42.
- [10] Gough, Brian (Editor): 2006. *GNU Scientific Library Reference Manual*. Network Theory Ltd. 2da. Edición .
- [11] *The Cambridge Cluster Database*. <http://www-wales.ch.cam.ac.uk/CCD.html>. Visitada el 5 de marzo de 2007.