

ПРИМЕНЕНИЕ КОЭВОЛЮЦИОННОГО АЛГОРИТМА ГЕНЕТИЧЕСКОГО ПРОГРАММИРОВАНИЯ В ЗАДАЧЕ АППРОКСИМАЦИИ РЕФРАКТОМЕТРИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ОПТИЧЕСКИ ПРОЗРАЧНЫХ КРИСТАЛЛОВ*

Рассмотрено применение коэволюционного алгоритма генетического программирования к решению задачи аппроксимации рефрактометрических свойств оптически прозрачных кристаллов Rb_2MnCl_4 и $NaMnCl_3$.

Ключевые слова: коэволюция, алгоритм генетического программирования, прозрачные магнетики.

Высокие темпы информатизации привели к тому, что в настоящее время появилась возможность компьютерного моделирования и проектирования сложных систем, изучения их свойств и управления ими в условиях неполноты информации, ограниченности ресурсов, дефицита времени. Однако для исследования характеристик любой системы математическими методами должна быть обязательно выполнена формализация, т. е. построена математическая модель. Исследования с помощью математических моделей зачастую являются единственно возможным способом изучения сложных систем и решения важнейших задач управления. Так, например, обстоит дело при изучении процессов, протекающих в течение длительного времени, – в условиях математического моделирования подобный процесс может быть исследован в ускоренном масштабе времени.

Однако на практике сложно зафиксировать свойства функциональной зависимости выходных величин от входных и еще сложнее привести аналитическое описание такой зависимости. Если экспертные знания об объекте в явном виде отсутствуют, то обычно по имеющимся статистическим данным строится некоторая вычислительная модель. Однако недостаток численной модели при всем ее удобстве для принятия решений заключается в том, что она, по сути, является «черным ящиком», т. е. моделью, в которой перечисляются входные и выходные связи системы со средой, а информация о внутренней структуре полностью отсутствует.

Решение задачи символьной регрессии могло бы значительно улучшить сложившуюся ситуацию. Символьная регрессия дает нам не только вычислительную процедуру, но и математическое выражение в символьной форме, которое можно подвергнуть содержательному анализу, упростить и уточнить. Один из самых многообещающих подходов в данном направлении – это генетическое программирование [1]. Алгоритм генетического программирования является модификацией генетического алгоритма [2]. Основное различие заключается в представлении решений. Решения в генетическом программировании могут иметь различную форму и размер, наиболее распространенное представление – это представление в виде деревьев.

При решении задачи символьной регрессии алгоритмом генетического программирования в качестве функции пригодности используют нормированную на области значений выходной зависимой переменной ошибку аппроксимации, вычисленную с использованием какой-либо метрики, например евклидовой, Миньковского и др.

Алгоритм генетического программирования, как и генетический алгоритм, является стохастической процедурой, оценка его эффективности (надежности) осуществляется усреднением количества найденных решений по многократным запускам. Однако нельзя однозначно сказать о превосходстве определенного алгоритма, но можно выявить (по большинству лучших результатов) наиболее эффективный алгоритм и проранжировать остальные алгоритмы в порядке убывания показателя надежности [3].

Но даже после многократных решений поставленной задачи остается неопределенность в выборе параметров настройки алгоритма генетического программирования. Это подтверждает тот факт, что для каждой задачи существует свой наилучший алгоритм, т. е. своя стратегия поиска решения. Также следует отметить, что не всегда имеется возможность многократного запуска алгоритма для нахождения более точного решения по многим причинам, например из-за высокой стоимости вычислений целевой функции, отсутствия времени на перезапуск алгоритма и т. д.

Поэтому необходимо выбирать конкретный алгоритм и настраивать его параметры на решаемую задачу исходя из какой-либо априорной информации или из накопленного опыта. Но выбор конкретного алгоритма и настройка его параметров сами по себе являются очень сложными задачами, при неудачном решении которых алгоритм может не справиться с поставленной перед нами целью [4].

Коэволюционный алгоритм генетического программирования. Одним из методов разрешения проблемы выбора эффективной стратегии поиска для задачи символьной регрессии с помощью алгоритма генетического программирования является использование коэволюционной стратегии, т. е. конкуренции алгоритмов за вычислительные ресурсы.

*Работа выполнена в рамках НИР Б1.25.11 по тематическому плану ЕЗН Сибирского государственного аэрокосмического университета имени академика М. Ф. Решетнева и при поддержке ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры России» (НИР 2011-1.2.1-113-025, 2011-1.2.2-215-021).

Основная идея коэволюционного алгоритма генетического программирования (КАГП) состоит в следующем: одновременно эволюционируют несколько субпопуляций в рамках индивидуальных алгоритмов генетического программирования, каждый из которых обладает своей стратегией поиска и самостоятельно решает поставленную задачу [5; 6]. При этом алгоритмы борются за общий вычислительный ресурс, который в течение работы коэволюционного алгоритма перераспределяется в пользу более эффективного из них через заданный интервал адаптации, выраженный в количестве поколений.

Поскольку коэволюционный алгоритм основывается на конкурирующих стратегиях алгоритмов генетического программирования, то для субпопуляций необходимо ввести функцию пригодности. С помощью этой функции определяется лучшая популяция и ей дается больше ресурса для решения задачи. Пусть T – интервал адаптации, $b(k) = (k_T, k_{T-1}, \dots, k_1)$ – вектор длиной T . Если i -я популяция в момент k содержит наилучшего (по всем популяциям) индивида, то $b_i(k) = 1$, иначе $b_i(k) = 0$. Качество популяции можно оценить по формуле [7]:

$$q_i = \sum_{k=0}^{T-1} \frac{T-k}{k+1} \cdot b_i(k). \quad (1)$$

Изменение размера ресурсов происходит путем сокращения субпопуляции каждого проигравшего алгоритма на некоторый процент (определенный заранее) и увеличения субпопуляции победившего алгоритма на число, равное сумме потерь проигравших алгоритмов. Каждому из алгоритмов гарантирован некоторый заранее определенный размер субпопуляции, который не может быть уменьшен, называемый социальным минимумом. Таким образом, общий ресурс, выделенный для решения задачи, остается неизменным. После перераспределения ресурса алгоритмы продолжают свою работу с субпопуляциями, в которые входят только лучшие решения из предыдущих субпопуляций. Процесс продолжается до тех пор, пока либо не выполнится критерий останова, либо не кончится ресурс, выделенный на решение задачи [7].

Задача аппроксимации рефрактометрических свойств прозрачных магнетиков. В оптически прозрачных кристаллах Rb_2MnCl_4 и NaMnCl_3 при низких температурах (ниже 56 и 6,5 К соответственно) устанавливается антиферромагнитный порядок магнитных моментов ионов марганца. Кристаллическая структура первого кристалла (симметрия D_{4h}^{17}) слоистая, расстояние между магнитными ионами в слоях и межслоевое расстояние сильно различаются, поэтому кристалл является магнетиком с почти идеальной двумерной магнитной структурой, позволяющей проводить модельные оценки магнитных свойств, и легкоосным антиферромагнетиком с осью легкого намагничивания, направленной вдоль оси симметрии C_4 . Второй кристалл также обладает слоистой кристалли-

ческой структурой (симметрия $R\bar{3}$), но его меж- и внутрислоевой обмен близки по величине и различны по знаку. Магнитная кристаллографическая анизотропия у NaMnCl_3 типа «легкая плоскость». Из-за большого числа различающихся обменных параметров, определяющих магнитную структуру, расчет магнитных и магнитооптических свойств данного кристалла весьма проблематичен.

В этих кристаллах экспериментально изучались зависимости магнитного линейного двупреломления света (МЛД) от температуры [8; 9]. Для полученных результатов строилась аппроксимация с помощью коэволюционного алгоритма генетического программирования.

При решении задачи использовались следующие параметры коэволюционного алгоритма генетического программирования: терминальное множество – $\{x, C\}$, где $x \in R$, $C \in [-10; 10]$; функциональное множество – $\{+, -, *, \div, \sin, \cos, \text{sqrt}, \text{power}, \ln, \exp\}$; размер ресурса – 400; начальная глубина деревьев – 3; интервал адаптации – 5; размер штрафа – 10 %; размер социального минимума – 10; количество индивидуальных алгоритмов – 4.

Двупреломление света в Rb_2MnCl_4 . Анализ температурной зависимости линейного двупреломления (ЛД) Rb_2MnCl_4 (рис. 1) показывает, что свет распространяется перпендикулярно оси кристалла C_4 , длина волны света $\lambda = 632,8$ нм. Однако отсутствие дополнительных сведений о коэффициентах расширения и магнитоотрицательности кристалла не позволяет выделить магнитный вклад в ЛД. Аномальное изменение ЛД при температурах ниже 200 К можно связать с наличием в кристалле магнитного порядка и считать, что температурная производная ЛД $d\Delta n/dT$ (рис. 2) представляет собой лишь незначительно искаженную производную магнитного вклада в Δn .

Согласно общему выводу феноменологической теории, ЛД должно быть пропорционально второй степени компонент антиферромагнитного вектора или, в случае коллинеарного двухподрешеточного антиферромагнетика с малой анизотропией, квадрату подрешеточной намагниченности. Однако сравнение температурного хода ЛД с температурной зависимостью квадрата намагниченности подрешеток показывает их существенное расхождение в окрестности и выше температуры Нееля T_N . Если подрешеточная намагниченность в окрестности T_N быстро убывает и обращается в нуль, то магнитный вклад в ЛД существует при температурах, значительно превышающих T_N . Последнее указывает на большую величину среднеквадратичных флуктуации вектора l в парамагнитной фазе, отражающую влияние ближнего магнитного порядка и являющуюся следствием низкой размерности магнитного порядка кристалла.

Для более наглядного определения влияния низкой размерности магнитного порядка ЛД можно описать в терминах, зависящих от спинов поляризуемости ионов.

Полная поляризуемость кристалла, зависящая от спинов, имеет вид

$$\Delta n_m = A \sum_j \langle (S_j^z)^2 \rangle + B \sum_{j,l} \langle (\vec{S}_j \vec{S}_l) \rangle^*, \quad (2)$$

где A и B – константы, связанные соответственно с величиной одно- и двухионных поляризуемостей кристалла; S_j^z – проекция на ось z спина S_j , расположенного на j -м узле.

Из (1) следует, что если одноионные поляризуемости малы по сравнению с двухионными, то Δn_m пропорционально магнитной энергии кристалла, а $d\Delta n_m/dT \approx c_m$. Оценить зависимость $c_m(T)$ при высоких температурах можно, используя высокотемпературное разложение в ряд по степеням $x = J/(k_B T)$, где J – обменный параметр; k_B – константа Больцмана. Для этого нужно пренебречь межплоскостным обменом и рассматривать высокотемпературное разложение c_m для плоской квадратной решетки.

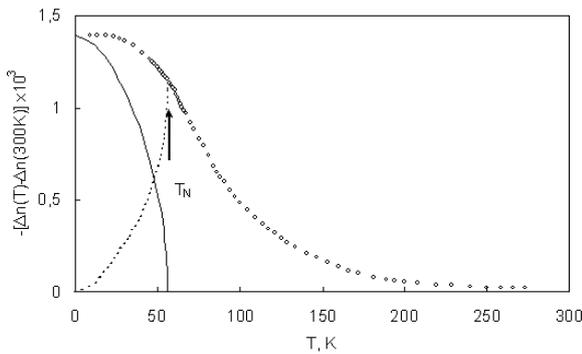


Рис. 1. Температурное поведение Δn Rb_2MnCl_4 : сплошная кривая – ход кривой квадрата подрешеточной намагниченности

Минимизируя $\| (d\Delta n/dT)_{\text{КАГП}} - (d\Delta n/dT)_{\text{МОД}} \|_{L_2}$ по параметру внутрислоевого обменного взаимодействия между ионами марганца J , можно получить его оценку. Такая минимизация дает значение $J/k_B = -5,66$ К.

Однако между экспериментальным и модельным результатами, представляющими высокотемпературное разложение, существует значительное различие (рис. 3). Намного лучше аппроксимирует экспериментальные точки зависимость, полученная с помощью коэволюционного алгоритма генетического программирования (сплошная жирная кривая на рис. 2–4).

Нижняя кривая на рис. 2 представляет разницу между модельной зависимостью, определенной для плоской квадратной решетки, и аналитическим выражением, полученным коэволюционным алгоритмом генетического программирования. Эта разница может быть использована для интерпретации несовпадения модельного описания и эксперимента, поскольку она включает в себя неучтенный решеточный вклад, т. е. вклад, связанный с отступлением от двумерного порядка в магнитной подсистеме и т. д.

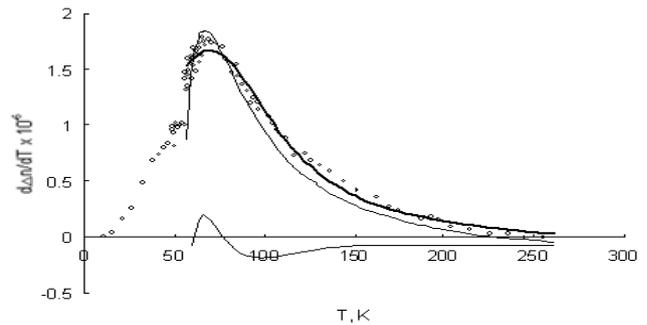


Рис. 2. Зависимость $d\Delta n/dT$ Rb_2MnCl_4 от температуры: сплошная тонкая кривая соответствует высокотемпературному разложению c_m (магнитной теплоемкости) для $J/k = -5,66$ К; сплошная жирная кривая – аппроксимация, полученная коэволюционным алгоритмом генетического программирования; нижняя кривая – различие модели и аппроксимации

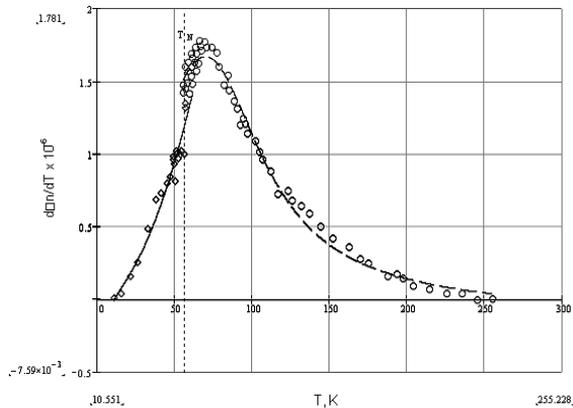


Рис. 3. Зависимость $d\Delta n/dT$ Rb_2MnCl_4 от температуры до (\diamond) и после (\circ) фазового перехода: — и - - - результат работы алгоритма

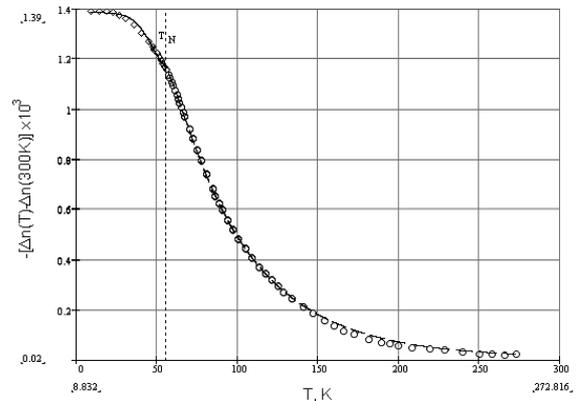


Рис. 4. Температурное поведение Δn Rb_2MnCl_4 до (\diamond) и после (\circ) фазового перехода: — и - - - результат работы алгоритма

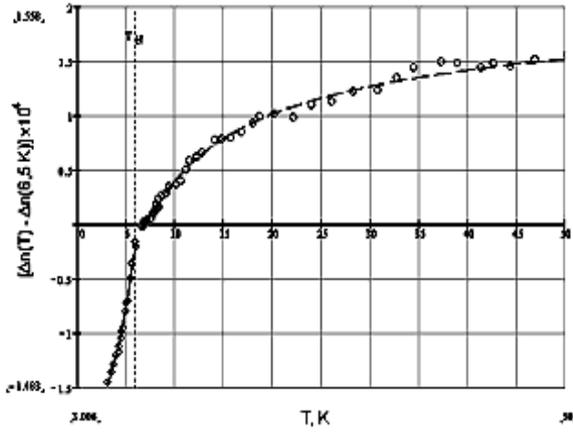


Рис. 5. Температурная зависимость линейного дупреломления света в NaMnCl₃ до (○) и после (◇) фазового перехода (длина световой волны λ = 632,8 нм):
— и — — результат работы алгоритма

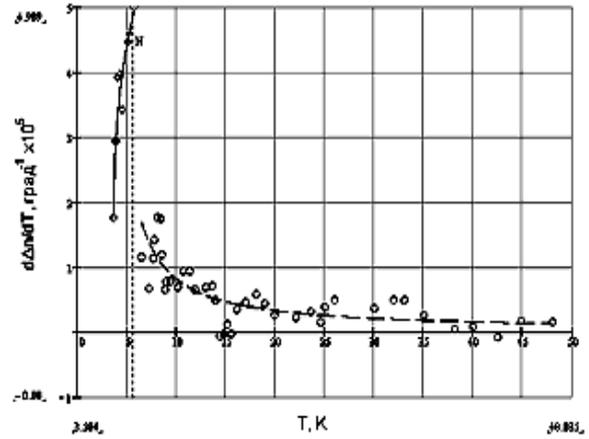


Рис. 6. Температурная зависимость производной линейного дупреломления NaMnCl₃ до (○) и после (◇) фазового перехода:
— и — — результат работы алгоритма

Дупреломление света в NaMnCl₃. Результаты измерений линейного дупреломления Δ*n* NaMnCl₃, приведенные к *T* = 6,5 К (рис. 5), показали следующее.

Поскольку температура Дебая NaMnCl₃ значительно превышает *T_N*, то можно считать, что вклад в Δ*n* за счет расширения решетки мал. Тогда изменение Δ*n* при низких температурах (*T* < 50 К) будет связано только магнитному вкладу, в том числе и стрикционному, и изменение Δ*n*(*T*) можно считать магнитным дупреломлением Δ*n_m*.

При *T_N* = 6,5 К на кривой Δ*n_m*(*T*) наблюдается излом, который соответствует установлению в кристалле магнитного порядка. Ниже *T_N* происходит аномально быстрое изменение Δ*n*, связанное с ростом подрешеточных намагниченностей. При *T* > *T_N* на кривой Δ*n*(*T*) появляется хвост, который тянется до температур *T* ≈ 40 К и обязан ближайшему магнитному порядку в кристалле – долгоживущим флуктуациям вектора *l*.

Принимая во внимание пропорциональность Δ*n_m* магнитной энергии кристалла, а следовательно, и (*d*Δ*n_m*/*dT*) ≈ *c_m*, проанализируем особенности поведения *d*Δ*n_m*/*dT* NaMnCl₃ (рис. 6). Для этого сравним ее с поведением теплоемкости *c_m*, рассчитанной для слоистых магнитных систем с различным внутри- и межплоскостным обменом.

Для NaMnCl₃ получаем, что *c_m* ≈ *T*³ при *T* << 3 К, а при более высоких температурах (*T* < *T_N*) *c_m* ≈ *T*. При *T_N* кривая *d*Δ*n_m*/*dT* имеет острый максимум, характерный для трехмерных гейзенберговских антиферромагнетиков. При *T* > *T_N* *d*Δ*n_m*/*dT* имеет вид, отличный от поведения *c_m* двумерных систем (например, Rb₂MnCl₄).

Учитывая симметрию кристалла и феноменологические особенности магнитной структуры, получим выражения для компонент симметричного тензора

диэлектрической проницаемости ε_{*ij*}, описывающие рефрактометрические свойства кристалла:

$$\begin{aligned}
 \varepsilon_{xx} &= \varepsilon_{xx}^0 + 2\lambda_2 \mathbf{l}^2 + 2\lambda_4 l_z^2 + 2\lambda_9 l_z l_y + 2\lambda_{10} l_z l_x + \\
 &+ 2\lambda_{11} (l_x^2 + l_y^2) + 2\rho_2 \mathbf{m}^2 + 2\rho_4 m_z^2 + 2\rho_9 m_z m_y + \\
 &+ 2\rho_{10} m_z m_x + 2\rho_{11} (m_x^2 + m_y^2), \\
 \varepsilon_{yy} &= \varepsilon_{yy}^0 + 2\lambda_2 \mathbf{l}^2 + 2\lambda_4 l_z^2 - 2\lambda_9 l_z l_y - 2\lambda_{10} l_z l_x - \\
 &- 2\lambda_{11} (l_x^2 + l_y^2) + 2\rho_2 \mathbf{m}^2 + 2\rho_4 m_z^2 - 2\rho_9 m_z m_y - \\
 &- 2\rho_{10} m_z m_x - 2\rho_{11} (m_x^2 + m_y^2), \\
 \varepsilon_{zz} &= \varepsilon_{zz}^0 + 2\lambda_1 \mathbf{l}^2 + 2\lambda_3 l_z^2 + 2\rho_1 \mathbf{m}^2 + 2\rho_3 m_z^2, \\
 \varepsilon_{yz} &= \lambda_5 l_z^2 l_y^2 + \lambda_6 l_z l_x + \lambda_7 (l_x^2 - l_y^2) - 2\lambda_8 l_x l_y + \\
 &+ \rho_5 m_z m_y + \rho_6 m_z m_x + \rho_7 (m_x^2 - m_y^2) - 2\rho_8 m_x m_y, \\
 \varepsilon_{xz} &= \lambda_5 l_z^2 l_x^2 - \lambda_6 l_z l_y + \lambda_7 l_x l_y + 2\lambda_8 (l_x^2 - l_y^2) + \\
 &+ \rho_5 m_z m_x - \rho_6 m_z m_y + \rho_7 m_x m_y + 2\rho_8 (m_x^2 - m_y^2), \\
 \varepsilon_{xy} &= 2\lambda_9 l_z l_x - 2\lambda_{10} l_z l_y + 4\lambda_{11} l_x l_y + 2\rho_9 m_z m_x - \\
 &- 2\rho_{10} m_z m_y + 4\rho_{11} m_x m_y,
 \end{aligned} \tag{3}$$

где ε⁰_{*ij*} – значения диагональных компонент тензора диэлектрической проницаемости в парамагнитной фазе; λ и ρ – магнитооптические коэффициенты.

Выражения (3) полностью описывают состояние оптической индикатрисы кристалла в магнитоупорядоченной фазе. Однако теоретически рассчитать температурное поведение λ и ρ невозможно, поскольку выражения (3) описывают влияние дальнего порядка на ε_{*ij*}. Получить флуктуационный вклад в парафазе из модельных соображений также нереально, так как магнитная система имеет сложную структуру и размерность, переходную от 2 к 3. Потому описание этой системы аналитическими соотношениями, получен-

ными коэволюционным алгоритмом генетического программирования, представляется полезным. Испытание алгоритма на тестовых примерах показывает, что при правильном выборе функционального множества алгоритм находит функцию, генерирующую выборку. Эта дает надежду получить символическое соотношение, являющееся истинным законом, описывающим реальные физические данные, имеющие сложную природу.

Таким образом, применение коэволюционного алгоритма генетического программирования позволило построить хорошие аппроксимации рефрактометрических свойств оптически прозрачных кристаллов Rb_2MnCl_4 и $NaMnCl_3$. Исходя из сравнения аппроксимирующих соотношений и модельных описаний определена величина обменного взаимодействия между магнитными ионами. Выделен вклад в рефрактометрические свойства магнетика в парафазе, обусловленный механизмами, не связанными с флуктуациями вектора антиферромагнетизма.

Библиографические ссылки

1. Koza J. R. Genetic Programming: On Programming Computer by Means of Natural Selection and Genetics. Cambridge, Mass. : MIT Press, 1992.
2. Holland J. H. Adaptation in Natural and Artificial Systems. 2nd ed. Cambridge, Mass. : MIT Press, 1992.
3. Жуков В. Г. Моделирование сложных систем коэволюционным алгоритмом генетического программирования : дис. ... канд. техн. наук. Красноярск, 2006.
4. Жуков В. Г. О синтетической модели эволюции дифференцированного алгоритма генетического программирования // Интегрированные модели и мягкие вычисления в искусственном интеллекте : сб. науч. тр. VI Междунар. науч.-практ. конф. М. : Физматлит, 2011. Т. 2. С. 616–622.
5. Об эволюционных алгоритмах решения сложных задач оптимизации / А. В. Гуменникова, М. Н. Емельянова, Е. С. Семенкин, Е. А. Сопов // Вестн. Сиб. гос. аэрокосмич. ун-та им. акад. М. Ф. Решетнева : сб. науч. тр. / Сиб. гос. аэрокосмич. ун-т. Вып. 4. Красноярск, 2003. С. 14–23.
6. Жуков В. Г., Жукова М. Н. Исследование коэволюционного алгоритма решения нестационарных задач оптимизации // Вестник СибГАУ. 2006. Вып. 1 (8). С. 27–30.
7. Семенкин Е. С., Лебедев В. А. Метод обобщенного адаптивного поиска для синтеза систем управления сложными объектами. М. : Макс-Пресс, 2002.
8. Попов Е. А., Котлярский М. М. Двупреломление антиферромагнитного Rb_2MnCl_4 // Физика твердого тела. 1980. Т. 20. С. 241–244.
9. Popov E. A., Kotlyarskii M. M. Magnetic Phase Diagram of $NaMnCl_3$ // Phys. Stat. Sol. (b). 1982. Vol. 111. P. K13–K19.

S. S. Aplesnin, V. G. Zhukov, E. A. Popov

COEVOLUTIONARY GENETIC PROGRAMMING ALGORITHM APPLICATION IN APPROXIMATION PROBLEM OF APPROXIMATION OF REFRACTOMETRIC PROPERTIES OF OPTICAL TRANSPARENT CRYSTALS

The authors consider the coevolution genetic programming algorithm application in the problem of approximation of refractometric properties of optical transparent crystals Rb_2MnCl_4 and $NaMnCl_3$.

Keywords: coevolution, genetic programming algorithm, transparent magnets.

© Аплеснин С. С., Жуков В. Г., Попов Е. А., 2011