

Primerjava algoritmov QPS-PSO in jDE_r na potencialu Lennard-Jones

Jana Herzog¹, Borko Bošković², Janez Brest³

¹Fakulteta za elektrotehniko, računalništvo in informatiko,
Univerza v Mariboru, Koroška cesta 46, 2000, Maribor, Slovenija
E-pošta: jana.herzog1@um.si

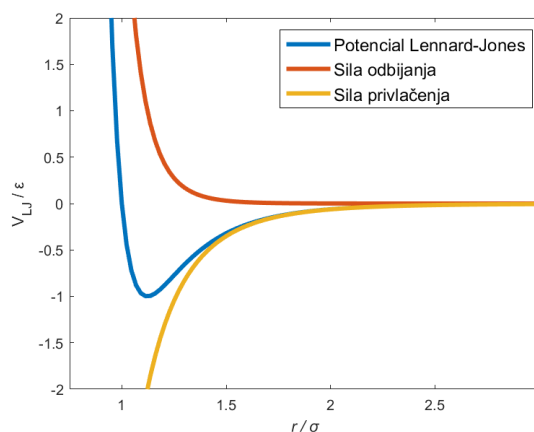
The Comparison of QPS-PSO and jDE_r algorithms for the Lennard-Jones Potential

This paper presents a statistical analysis and comparison of two algorithms, the particle swarm optimization with quasi-physical strategy and jDE algorithm with a random re-initialization, while tackling the optimization problem of Lennard-Jones potential. The algorithms are compared based on two criteria; the predetermined stopping condition and hit ratio, while also observing the quality of the solutions. The main focus was whether the stopping condition affects the quality of the solutions and the hit ratio of both algorithms.

1 Uvod

Potencial Lennard-Jones predstavlja enega izmed najzahajnejših optimizacijskih problemov [15]. Gre za iskanje najstabilnejše strukture atomov v tridimenzionalnem evklidskem prostoru. Problem je izredno multimodalen, zato ima lahko algoritem težave pri iskanju globalnega optimuma [16]. Velikokrat se zgodi, da algoritem zaide v enega izmed lokalnih minimumov, iz katerega se ne uspe rešiti. To privede do prezgodnje konvergence [12]. Število lokalnih minimumov narašča eksponentno glede na število atomov. Prikaz eksponentnega naraščanja lokalnih minimumov v razmerju s številom atomov prikazuje tabela 1. Velja, da je problem iskanja potenciala Lennard-Jones NP-težek problem [12]. Potencial Lennard-Jones predstavlja problem iz resničnega sveta in je bil leta 2011 del testnih funkcij tekmovanja CEC (IEEE Congress on Evolutionary Computation) [5].

Pri problemu potenciala Lennard-Jones matematično gledano računamo globalni minimum kar odraža stabilno stanje agregata. V skupku Lennard-Jones je vsak atom podvržen sili drugih atomov, pod vplivom katerih se bo atom premikal: ko sta dva atoma zelo blizu, se bosta odbijala; ko pa sta daleč narazen, pa se bosta privlačila. Delovanje sil odbijanja in privlačenja ter potencial Lennarda-Jonesa prikazuje slika 1. Problem opišemo z enačbama (1) in (2), kjer $v_{i,j}$ predstavlja potencialno energijo med i -tim in j -tim atomom. Evklidska razdalja med koordinatama vektorjev x_i in x_j je predstavljena z $r_{i,j}$, medtem ko x_i predstavlja koordinato i -tega atoma. Energija je izražena kot E_{LJ} , kjer $\varepsilon = \sigma = 1$. N predstavlja število atomov. Spremenljivke so podrobneje pred-



Slika 1: Graf prikazuje krivulje za potencial Lennard-Jones ter sili odbijanja in privlačenja.

stavljene v tabeli 2.

$$E_{LJ} = 4\varepsilon \sum_i v_{i,j} \quad (1)$$

$$E_{LJ} = 4\varepsilon \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N \left[\left(\frac{\sigma}{r_{i,j}}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{i,j}}\right)^6 \right] \quad (2)$$

Za reševanje tega problema so bili uporabljeni številni algoritmi, in sicer genetski algoritem [9], algoritem simuliranega ohlajanja [8] in algoritem optimizacije z rojem delcev [13].

V tem prispevku smo se lotili reševanja potenciala Lennard-Jones z dvema stohastičnima algoritmoma, in sicer z algoritmom optimizacije z rojem delcev, kateremu je dodana kvazi-fizična strategija privlačenja in odbijanja (QPS-PSO) [12] in evolucijskim algoritmom jDE [2], kateremu je dodan mehanizem naključne reinicializacije. Ta algoritem smo poimenovali jDE_r .

Algoritma smo analizirali in primerjali na podlagi kvalitete rešitve, ki jo dosežeta ob upoštevanju zaustavitvenega pogoja, kateri je določen z *največjim dovoljenim številom funkcijskih ovrednotenij (maxFEs)* in glede na uspešnost zadetkov pri doseganju najboljše znane rešitve (doslej najmanjše dosežene energije skupka atomov). Zanimal nas je vpliv zaustavitvenega pogoja na kvaliteto rešitve in na uspešnost zadetkov.

Članek ima sledečo strukturo. V drugem poglavju opišemo sorodna dela. Tretje poglavje podaja opis eksperimenta, rezultate in primerjavo algoritmov. V zadnjem poglavju sledi zaključek in zastavitev dela za naprej.

Tabela 1: Število atomov in število pripadajočih lokalnih minimumov.

Število atomov	Število lokalnih minimumov
6	2
7	4
8	8
9	21
10	57
11	145
12	366
13	988
15	10^4
25	10^6
55	10^{10}
100	10^{40}
147	10^{60}

2 Sorodna dela

Optimizacijski problem potenciala Lennard-Jonesa velja za težek, a hkrati zanimiv problem, saj je težko najti optimalno energijo atomov, ki predstavlja najstabilnejšo strukturo atomov. Matematično gledano velja problem potenciala Lennard-Jones za problem globalne optimizacije brez omejitev [19]. Za reševanje problema je bilo uporabljenih veliko različnih algoritmov. Avtorji so si prizadevali najti najboljšo globalno rešitev, tako je Wille [17] z različico algoritma simuliranega ohlajanja našel globalne optime do velikosti skupkov $N = 25$. Wales in Doye sta v prispevku [15] s pomočjo algoritma, ki uporablja Monte Carlo optimizacijo (optimizacijski algoritem), potrdila prejšnje najboljše najdene rešitve na skupkih atomov do velikosti 110 in hkrati dosegla najmanjše energije za skupke atomov 69, 78 in 107. Leary [11] je z algoritmom Big Bang našel optimalne energije skupkov velikosti $N = 69, 78, 88, 107, 113, 115$. Deaven [6] je z genetskim algoritmom našel optimalno rešitev za $N = 88$. Najboljše znane energije do atomov velikosti 45 so prikazane v tabeli 3. Za iskanje optimalne energije skupkov so bili uporabljeni številni evlucijski algoritmi: CCDE, CCPSO2, CSO, DECC-DG, EPSO, HCLPSO in VLPSO-FS [12], saj lahko z njimi rešujemo vse velikosti skupkov, prav tako pa ne zahtevajo vnaprej nastavljenih začetnih konfiguracij. Evlucijski algoritmi so se pri reševanju tega problema izka-

Tabela 2: Tabela prikazuje razlago spremenljivk, uporabljenih v enačbah potenciala Lennard-Jones.

V	medmolekularni potencial med atomoma
ϵ	globina in pokazatelj, kako močno se delca privlačita
σ	razdalja, kjer je medmolekularni potencial med obema delcema enak nič
r	razdalja ločevanja med obema delcema (merjeno od središča enega delca do središča drugega)

zali za zelo uspešne, vendar pa imajo eno pomanjkljivost – hitro zapadejo v lokalni minimum. Da bi to preprečili, so avtorji [12] razvili različico algoritma optimizacije roja delcev, ki mu je bila dodana strategija, katera posnema obnašanje atomov, in sicer je vključena operacija privlačenja in odbijanja. V dodani strategiji se simulira realno atomsko strukturo, ki vključuje medatomske sile. Algoritem so poimenovali QPS-PSO.

Tabela 3: Najboljša znana energija [15] glede na število atomov.

Število atomov	Najboljša znana energija
7	-16,50
13	-44,32
18	-66,53
24	-97,34
27	-112,87
30	-128,28
38	-173,92
44	-207,68
45	-213,78

3 Eksperiment

Za izvedbo eksperimenta smo uporabili dva stohastična algoritma QPS-PSO in jDE_r, in sicer smo ju primerjali glede na kvaliteto rešitve in uspešnost zadetkov pri reševanju problema potenciala Lennard-Jones. Za izvedbo eksperimenta smo uporabili superračunalnik Vega in računalnik z GNU C++ prevajalnikom verzija 9.3.0, Intel(R) Core(TM) i5-9400 s 3.2 GHz CPE in 6 jedri ter Matlab 2021a na sistemu Windows 11 z 16GB RAM.

Algoritem QPS-PSO predstavlja različico algoritma optimizacije roja delcev (Particle Swarm Optimization) [10], kateri vsebuje kvazi-fizično strategijo. Ta strategija ima dve operaciji, in sicer operacijo privlačenja in odbijanja ter dva sprožilna pogoja. Operacija privlačenja pomaga roju delcev najti lokalni minimum. Operacija odbijanja pa pomaga roju delcev zapustiti lokalni minimum in ponovno zagnati postopek iskanja. Končni cilj strategije je najti globalni minimum. To počne s pomočjo fizikalne medatomske sile. Torej iščemo najstabilnejšo strukturo skupka Lennard Jones v tridimenzionalnem evklidskem prostoru. Sprožilna pogoja preverjata, ali je zadoščeno kvazi-fizični strategiji. Obenem pa zagotavljata, da so rezultati iteracije algoritma konvergentni. Parametri algoritma QPS-PSO so bili nastavljeni na sledeče vrednosti $NP = 30$, $w = 0, 5$, $c_1 = 1, 5$, $c_2 = 2$, $\tau = 100$, $k = 0, 1$. Algoritem QPS-PSO je implementiran v orodju Matlab. Zaustavitveni pogoj $maxFEs$, vpliva na čas izvedbe eksperimenta. Zaradi računske zahtevnosti eksperimenta smo za večje dimenzije problema in večji zaustavitveni pogoj uporabili superračunalnik HPC Vega¹.

Algoritem jDE [2] je različica algoritma diferencialne evolucije [14], ki uporablja samo-prilagodljiv mehanizem krmilnih parametrov, kjer ima vsak posameznik v populaciji svoji vrednosti za krmilna parametra F_i in CR_i [4].

¹<http://www.sling.si/sling/>

Shema parametrov je prikazana v enačbah (3) in (4). Velikost populacije (NP) je nastavljena na 30.

$$F_{i,g+1} = \begin{cases} F_l + rand_1 \cdot F_u, & \text{če } rand_2 < \tau_1, \\ F_{i,g}, & \text{drugače.} \end{cases} \quad (3)$$

$$CR_{i,g+1} = \begin{cases} rand_3, & \text{če } rand_4 < \tau_2, \\ CR_{i,g}, & \text{drugače.} \end{cases} \quad (4)$$

Algoritmu jDE smo dodali mehanizem naključne reinicializacije [3], saj smo želeli s tem mehanizmom izboljšati učinkovitost algoritma pri doseganju najboljše znane optimalne energije potenciala Lennard-Jones. Mehanizem ponovnem reinicializacije pomaga algoritmu pri vzpostavitvi večje raznolikosti populacije, kar pri danem problemu omogoča, da algoritem ne zaide v lokalni minimum. Tovrstni mehanizem je bil uporabljen pri problemu zvijanja proteinov [1]. Algoritem smo poimenovali jDE_r. Algoritem jDE_r je implementiran v programskem jeziku C++. Tovrstna implementacija pripomore tudi k hitrejši izvedbi eksperimenta kljub veliki računski zahtevnosti optimizacijskega problema.

Izvedli smo 30 zagonov pri zaustavitvenem pogoju 10^6 ovrednotenj in beležili povprečno doseženo energijo, standardni odklon [12] ter uspešnost zadetkov. Rezultati do števila atomov 45 so prikazani v tabeli 4. Zanimalo nas je, v kolikih zagonih algoritem doseže optimalno energijo, in sicer smo izmerili uspešnost zadetkov [%], ki je prikazana v tabeli 5.

Opazimo, da algoritem jDE ne dosega najboljših znanih optimalnih energij. Da bi preverili, ali je med algoritmom jDE in jDE_r signifikantna razlika, smo uporabili Wilcoxonov test [7] s stopnjo signifikantnosti $\alpha = 0,05$. Glede na to, da velja ($p < 0,05$) lahko rečemo, da je med algoritmom signifikantna razlika. Rezultat kaže na to, da smo z mehanizmom naključne reinicializacije algoritma jDE signifikantno izboljšali (jDE_r).

V nadaljevanju primerjamo algoritma QPS-PSO in jDE_r. Pri manjših velikostih problema algoritma QPS-PSO in jDE_r dosegata 100% uspešnost, npr. pri 7 atomih. Poudariti je potrebno, da je število atomov (N) pomnoženo s 3, saj se nahajamo v tridimenzionalnem evklidskem prostoru. Oba algoritma, QPS-PSO in jDE_r imata težave pri doseganju optimalne energije od velikosti problema 27 naprej. Glede na povprečne rezultate 30 zagonov opazimo, da je algoritem QPS-PSO uspešnejši pri približevanju globalnemu minimumu, medtem ko ima algoritem jDE_r pri tem težave. Razlog je v velikem številu lokalnih minimumov, ki z velikostjo problema naraščajo. To algoritmu otežuje iskanje globalnega minimuma. Glede na uspešnost zadetkov, opazimo, da imata oba algoritma velike težave pri iskanju globalnega minimuma. Glede na to, da Wilcoxonov test pokaže ($p < 0,05$), lahko rečemo, da je med algoritmom signifikantna razlika.

Čeprav je bilo spreminjanje števila ovrednotenj na potencialu Lennard-Jones že predhodno preučevano [18], nas je kljub temu zanimal vpliv zaustavitvenega pogoja na uspešnost zadetkov. Iz tega razloga smo eksperiment

Tabela 4: Primerjava algoritmov QPS-PSO, jDE in jDE_r glede na povprečno vrednost in standardni odklon za 30 zagonov pri zaustavitvenem pogoju $maxFEs = 10^6$.

Število atomov	QPS-PSO	jDE	jDE _r
7	-16,50 ± 0,00	-15,45 ± 0,36	-16,50 ± 0,00
13	-44,23 ± 0,52	-37,40 ± 0,71	-40,61 ± 1,36
18	-66,05 ± 0,27	-52,51 ± 1,87	-62,14 ± 1,80
24	-96,33 ± 0,82	-63,28 ± 1,91	-90,57 ± 2,04
27	-111,61 ± 0,95	-76,07 ± 1,33	-103,54 ± 3,98
30	-126,86 ± 0,67	-79,87 ± 2,44	-114,94 ± 5,69
38	-169,73 ± 0,79	-109,25 ± 3,23	-145,27 ± 8,72
44	-203,10 ± 1,82	-119,29 ± 4,09	-169,92 ± 16,22
45	-209,06 ± 1,61	-124,34 ± 5,10	-172,72 ± 13,60

Tabela 5: Primerjava algoritmov QPS-PSO in jDE_r glede na uspešnost zadetkov [%] v 30 zagonih pri zaustavitvenih pogojih $maxFEs = 10^6$ in $maxFEs = 6 \cdot 10^6$.

Število atomov	$maxFEs = 10^6$		$maxFEs = 6 \cdot 10^6$	
	QPS-PSO	jDE _r	QPS-PSO	jDE _r
7	100	100	100	100
13	96	3	100	11
18	10	0	15	0
24	23	0	20	0
27	0	0	13	0
30	0	0	1	0
38	0	0	0	0

ponovili z zaustavitvenim pogojem $maxFEs = 6 \cdot 10^6$. Rezultati eksperimenta so prikazani v tabeli 6. Pri poskusu smo opazovali kvaliteto rešitve in uspešnost zadetkov, torej v koliko zagonih algoritem zadane optimalno rešitev. Glede na tabelo 5 lahko opazimo, da se pri manjših N izboljša uspešnost zadetkov pri večjem številu $maxFEs$, vendar to ne velja za večje N , kjer je uspešnost zadetkov še vedno 0. Pri obeh algoritmah se izboljša kvaliteta rešitve, čeprav se algoritem QPS-PSO še vedno bolj približa optimalnim rešitvam kot algoritem jDE_r. Z Wilcoxonovim testom smo ugotovili, da med algoritmom obstaja signifikantna razlika, in sicer ($p < 0,05$). Tako lahko potrdimo vpliv zaustavitvenega pogoja na kvaliteto rešitev. Pri obeh algoritmah se dogaja, da ne najdeta točnega globalnega optimuma. Slednje nakazuje slaba uspešnost zadetkov, zlasti pri večjih dimenzijah problema potenciala Lennard-Jones.

4 Zaključek

V prispevku smo se osredotočili na reševanje problema potencial Lennard-Jones z dvema novejšima algoritmom, in sicer z algoritmom QPS-PSO in algoritmom jDE_r, kateri vsebuje mehanizem naključne reinicializacije. Potencial Lennard-Jones velja za NP-težek problem. S povečevanjem dimenzije problema eksponentno narašča tudi iskalni prostor. Optimizacijski problem je izredno multimodal, kar se kaže v velikem številu lokalnih minimumov. Algoritmi imajo pri iskanju opti-

Tabela 6: Primerjava algoritmov QPS-PSO in jDE_r , glede na povprečno vrednost in standardni odklon za 30 zagonov pri zaustavitvenem pogoju $maxFEs = 6 \cdot 10^6$.

Število atomov	QPS-PSO	jDE_r
7	$-16,50 \pm 0,00$	$-16,50 \pm 0,00$
13	$-44,32 \pm 0,00$	$-42,15 \pm 1,07$
18	$-66,42 \pm 0,12$	$-65,03 \pm 1,05$
24	$-97,21 \pm 0,33$	$-94,35 \pm 1,70$
27	$-112,53 \pm 0,43$	$-108,73 \pm 2,10$
30	$-126,86 \pm 0,90$	$-124,01 \pm 2,30$
38	$-171,03 \pm 2,08$	$-162,95 \pm 3,53$
44	$-200,27 \pm 2,99$	$-193,56 \pm 8,33$
45	$-203,99 \pm 2,22$	$-197,26 \pm 11,99$

malne globalne energije težave, saj lahko hitro zapadejo v enega izmed lokalnih minimumov, kar pa povzroči prehitro konvergenco. Z različnimi mehanizmi so raziskovalci želeli izboljšati delovanje algoritmov. Tako je algoritmu PSO dodana strategija privlačanja in odbijanja, ki posnema obnašanje medatomskih sil. Algoritmu jDE pa je dodan mehanizem naključne reinicializacije.

Algoritma QPS-PSO in jDE_r smo analizirali iz dveh vidikov, in sicer glede na kvaliteto rešitev in na zaustavitveni pogoj. Pokazali smo, da je algoritem QPS-PSO uspešnejši pri približevanju najboljši globalni rešitvi, vendar pri tem ni natančen. Za velike dimenzije problema je uspešnost zadetkov 0. To se zgodi zaradi velikega števila lokalnih minimumov. S pomočjo statistične analize smo pokazali, da je med algoritmoma statistična razlika. Prav tako pa smo pokazali vpliv zaustavitvenega pogoja na kvaliteto rešitve. Povečanje zaustavitvenega pogoja pripomore k boljši kvaliteti rešitve.

Potencial Lennard-Jones še zmeraj predstavlja zahteven optimizacijski problem. V prihodnje nam izziv predstavlja nadaljnja izboljšava algoritma jDE_r .

5 Zahvala

Priznavamo financiranje prispevka s strani Javne agencije za raziskovalno dejavnost Republike Slovenija, raziskovalni program P2-0041- Računalniški sistemi, metodologije in inteligentne storitve.

Literatura

- [1] Borko Bošković and Janez Brest. Protein folding optimization using differential evolution extended with local search and component reinitialization. *Information Sciences*, 454-455:178–199, 2018.
- [2] Janez Brest, Sašo Greiner, Borko Bošković, Marjan Merik, and Viljem Žumer. Self-adapting control parameters in differential evolution: A comparative study on numerical benchmark problems. *IEEE transactions on evolutionary computation*, 10(6):646–657, 2006.
- [3] Janez Brest, Mirjam Sepesy Maučec, and Borko Bošković. Differential evolution algorithm for single objective bound-constrained optimization: Algorithm $j2020$. In *2020 IEEE Congress on Evolutionary Computation (CEC)*, strani 1–8. IEEE, 2020.

- [4] Janez Brest, Jan Popič, Mirjam Sepesy Maučec, and Borko Bošković. Analiza algoritma $jDE100$ za enokriterijsko globalno optimizacijo z realnimi vrednostmi. V *Zborniku osemindvajsete mednarodne Elektrotehniške in računalniške konference ERK 2019*, strani 215–218. IEEE, 2019.
- [5] Swagatam Das and Ponnuthurai N Suganthan. Problem definitions and evaluation criteria for CEC 2011 competition on testing evolutionary algorithms on real world optimization problems. *Jadavpur University, Nanyang Technological University, Kolkata*, strani 341–359, 2010.
- [6] DM Daven, N Tit, JR Morris, and KM Ho. Structural optimization of Lennard-Jones clusters by a genetic algorithm. *Chemical physics letters*, 256(1-2):195–200, 1996.
- [7] Joaquín Derrac, Salvador García, Daniel Molina, and Francisco Herrera. A practical tutorial on the use of nonparametric statistical tests as a methodology for comparing evolutionary and swarm intelligence algorithms. *Swarm and Evolutionary Computation*, 1(1):3–18, 2011.
- [8] Abdel-Rahman Hedar, Ahmed Fouad Ali, and Taysir Hassan Abdel-Hamid. Genetic algorithm and tabu search based methods for molecular 3D-structure prediction. *Numerical Algebra, Control & Optimization*, 1(1):191, 2011.
- [9] John H Holland. Genetic algorithms. *Scientific american*, 267(1):66–73, 1992.
- [10] James Kennedy and Russell Eberhart. Particle swarm optimization. V *Proceedings of ICNN'95-international conference on neural networks*, del 4, strani 1942–1948. IEEE, 1995.
- [11] Robert H Leary. Global optima of Lennard-Jones clusters. *Journal of Global Optimization*, 11(1):35–53, 1997.
- [12] Guizhen Mai, Yinghan Hong, Shen Fu, Yingqing Lin, Zhifeng Hao, Han Huang, and Yuanhao Zhu. Optimization of Lennard-Jones clusters by particle swarm optimization with quasi-physical strategy. *Swarm and Evolutionary Computation*, 57:100710, 2020.
- [13] Riccardo Poli, James Kennedy, and Tim Blackwell. Particle swarm optimization. *Swarm intelligence*, 1(1):33–57, 2007.
- [14] Kenneth V Price. Differential evolution. V *Handbook of optimization*, strani 187–214. Springer, 2013.
- [15] David J Wales and Jonathan PK Doye. Global optimization by basin-hopping and the lowest energy structures of Lennard-Jones clusters containing up to 110 atoms. *The Journal of Physical Chemistry A*, 101(28):5111–5116, 1997.
- [16] Xipeng Wang, Simón Ramírez-Hinestrosa, Jure Dobnikar, and Daan Frenkel. The Lennard-Jones potential: when (not) to use it. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 22(19):10624–10633, 2020.
- [17] LT Wille. Minimum-energy configurations of atomic clusters: new results obtained by simulated annealing. *Chemical Physics Letters*, 133(5):405–410, 1987.
- [18] Aleš Zamuda and Janez Brest. On tenfold execution time in real world optimization problems with differential evolution in perspective of algorithm design. V *2018 25th international conference on systems, signals and image Processing (IWSSIP)*, strani 1–5. IEEE, 2018.
- [19] Jun Zhang and Michael Dolg. ABCluster: the artificial bee colony algorithm for cluster global optimization. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 17(37):24173–24181, 2015.