

Hybrydowe algorytmy optymalizacji globalnej – poszukiwanie niskoenergetycznych konformacji cząsteczek chemicznych

Anna Styrz

Optymalizacja struktury geometrycznej cząsteczek jest kluczowym, pierwszym krokiem teoretycznego opisu ich własności. Niestety, w przeciwieństwie do metod poszukiwania lokalnych minimów na hiperpowierzchni energii potencjalnej cząsteczek, które są bardzo zaawansowane i rutynowo stosowane w praktyce obliczeniowej, problem znalezienia globalnie optymalnej struktury geometrycznej cząsteczek nie został do tej pory satysfakcjonująco rozwiązany.

W mojej pracy zaproponowałam nową metodę globalnej optymalizacji struktury geometrycznej cząsteczek chemicznych. W proponowanej metodzie wyróżnić można dwa kluczowe mechanizmy: dynamicznie kontrolowany sieć neuronową algorytm genetyczny służący do optymalizacji funkcji wielu zmiennych oraz wymuszanie zachowania tożsamości chemicznej optymalizowanych cząsteczek.

Inteligentna ewolucja – utworzony przeze mnie algorytm optymalizacji funkcji wielu zmiennych jest nową metodą wykorzystującą podstawowe zalety zarówno algorytmów genetycznych jak i sieci neuronowych. Sieć neuronowa dobierająca parametry algorytmu genetycznego w trakcie działania procesu optymalizacji globalnej zwiększa jego wydajność. Ponadto taka konfiguracja zwiększa uniwersalność algorytmu poprzez wykorzystanie informacji specyficznych dla badanego problemu optymalizacyjnego do dostosowywania parametrów procesu optymalizacji. Pozwala to uniknąć konsekwencji wynikających z twierdzenia NFL Wolperta i Macready’ego mówiącego o niemożności utworzenia uniwersalnego algorytmu optymalizacyjnego.

Uzyskany mechanizm został przeze mnie zaimplementowany a następnie przetestowany na zestawie modelowych funkcji matematycznych. Jako testowe problemy modelowe wybrałam cztery funkcje matematyczne standardowo używane do testowania algorytmów optymalizacyjnych: Ackleya, Rastrigina, Griewanka oraz Dixona i Price’a, które mogą być rozpatrywane w dowolnej liczbie wymiarów. Dzięki takiemu doborowi problemów uzyskałam cztery klasy funkcji o podobnych własnościach, różniące się tylko wy-

miarem dziedziny. Na podstawie wyników dotyczących wszystkich badanych funkcji modelowych można dojść do wniosku, iż dynamicznie sterowane algorytmy genetyczne są w najgorszym przypadku porównywalne (funkcja Dixon'a i Price'a) a często zdecydowanie lepsze niż algorytmy statyczne pod względem wydajności i uniwersalności. Ponieważ w dynamicznie sterowanych AG sieć neuronowa uczona była na danych pochodzących z testowych obliczeń przeprowadzonych jedynie w mniejszych liczbach wymiarów, statyczne AG były natomiast optymalizowane dla każdego przypadku, nawet porównywalna wydajność jest bardzo korzystna. W praktyce oznacza ona, że zamiast optymalizować parametry AG w każdym rozpatrywanym przypadku, można wyuczyć sieć neuronową na danych pochodzących z niektórych (reprezentatywnych choć niekoniecznie najtrudniejszych) testowych procesów, a następnie uzyskany algorytm używać do podobnych procesów optymalizacyjnych.

W następnym etapie przetestowałam utworzone oprogramowanie na wybranych cząsteczkach chemicznych dla których obliczanie energii oraz optymalizacja lokalna były przeprowadzone na poziomie mechaniki molekularnej. Układy dla których wykonałam obliczenia to dekan, ikozan, ergotamina, met-enkefalina oraz wybrane pochodne met-enkefaliny. Dla powyższych molekuł pokazałam, że nawet optymalnie sparametryzowany dla danej cząsteczki statyczny algorytm genetyczny nie przewyższa utworzonego przeze mnie algorytmu dynamicznego.

Kolejnym krokiem było zaproponowanie sposobu zachowania tożsamości chemicznej cząsteczki w trakcie optymalizacji. Dotychczasowe obliczenia dotyczące optymalizacji globalnej układów chemicznych za pomocą algorytmów genetycznych dotyczyły w większości struktur krystalicznych, układów klastrów lub wybranych grup cząsteczek chemicznych dla których tożsamość chemiczna była utrzymana poprzez optymalizację tylko części współrzędnych (na przykład tylko niektórych kątów dwuściennych). Zaproponowany przeze mnie mechanizm pozwala na przeprowadzenie optymalizacji globalnej wszystkich współrzędnych wszystkich atomów wchodzących w skład badanej cząsteczki. Umożliwia on również optymalizację na poziomie mechaniki kwantowej, gdzie wiązania chemiczne mogą ulegać rozerwaniu w trakcie optymalizacji. Dzięki zastosowaniu tej procedury udało mi się zastosować utworzony program do znalezienia najbardziej korzystnych energetycznie konformacji czterech dwurdzeniowych kompleksów nitrozylowych molibdenu, które są układami stosunkowo dużymi jak na optymalizację globalną na poziomie kwantowomechanicznym.

Dodatkowo, dzięki zdolności do dokładnego przeszukiwania przestrzeni rozwiązań, uzyskany przeze mnie program posłużył do wyszukania niskoenergetycznych konformacji kompleksu β -cyklodekstryny i jonu Mg^{2+} . W wyniku procedury optymalizacyjnej uzyskałam 619 różnych struktur, spośród których

92 zachowywały chiralność β -cyklodekstryny.

Podsumowując, połączenie dynamicznie kontrolowanego siecią neuronową algorytmu genetycznego z mechanizmem wymuszającym zachowanie tożsamości chemicznej cząsteczek pozwoliło mi uzyskać wydajny i uniwersalny algorytm będący dobrą alternatywą dla obecnie używanych metod globalnej optymalizacji struktury geometrycznej cząsteczek chemicznych.