

Панченко Татьяна Вячеславовна

**Сравнительный анализ эффективности  
генетических алгоритмов и алгоритма  
Метрополиса применительно к задачам  
физики твердого тела**

05.13.18 Математическое моделирование,  
численные методы и комплексы программ

Автореферат  
диссертации на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

Астрахань – 2007

Работа выполнена в Астраханском государственном университете

НАУЧНЫЙ РУКОВОДИТЕЛЬ: доктор физико-математических наук,  
доцент Тарасевич Ю.Ю.

ОФИЦИАЛЬНЫЕ ОППОНЕНТЫ:

доктор физико-математических наук,  
профессор Мусаев Г.М.

доктор физико-математических наук,  
профессор Соловьев А.Н.

ВЕДУЩАЯ ОРГАНИЗАЦИЯ: Южный научный центр РАН

Защита состоится 2 ноября 2007 года в 10.00 на заседании диссертационного совета ДМ 212.009.03 при Астраханском государственном университете по адресу: 414056, Астрахань, ул. Татищева, 20а

Отзывы на автореферат в двух экземплярах, заверенные гербовой печатью, просим направлять ученому секретарю диссертационного совета по адресу: 414056, Астрахань, ул. Татищева, 20а, диссертационный совет.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Астраханского государственного университета.

Автореферат разослан 29 сентября 2007 года

Ученый секретарь  
диссертационного совета  
доктор технических наук, профессор

Петрова И.Ю.

# 1. Общая характеристика работы

**Актуальность проблемы.** Твердые растворы  $AB'_xV''_{1-x}O_3$  оксидов со структурой перовскита привлекают внимание исследователей несколько последних десятилетий. Эти вещества представляют интерес как с прикладной, так и с чисто научной точки зрения ввиду их уникальных электро-механических свойств. Из многочисленных твердых растворов  $AB'_xV''_{1-x}O_3$ , называемых двойными перовскитами, можно выделить важный класс гетеровалентных сплавов, т.е. растворов с элементами  $V'$  и  $V''$ , принадлежащим разным группам Периодической системы. Одним из таких соединений является  $Sr_2(FeMo)O_6$ , привлекающий к себе внимание наличием эффекта «гигантского магнитосопротивления». В двойных перовскитах этот эффект возникает в низких полях, и это активно применяется в устройствах хранения и обработки информации. Технология изготовления двойных перовскитов позволяет получать частично неупорядоченные соединения с различными свойствами. Разработка модели, позволяющей предсказать свойства частично упорядоченных двойных перовскитов, является актуальной задачей для создания соединений с заранее заданными свойствами.

Для описания магнитных свойств кристаллических соединений служат модели Изинга и Гейзенберга. Для их исследования применяют модификацию алгоритма Монте-Карло — алгоритм Метрополиса. В последние десятилетия для исследования сложных систем применяются генетические алгоритмы, относящиеся к классу эволюционных методов. Генетические алгоритмы (ГА) в некоторых областях зарекомендовали себя как более эффективные по сравнению с классическими методами. Существует опыт применения ГА для решения отдельных задач физики твердого тела (ФТТ). Однако классы задач, в которых применение ГА оправданы, не определены, также не разработаны эффективные схемы применения ГА в задачах ФТТ. Представляет практический интерес определение области применения генетических алгоритмов к задачам ФТТ и выработка рекомендаций по методике применения этих алгоритмов. В качестве перспективных объектов для применения ГА в задачах ФТТ в диссертационном исследовании рассмотрены двойные перовскиты.

**Цели и задачи работы.** Целью работы является реализация эффективных алгоритмов в виде комплексов проблемно-ориентированных программ для проведения вычислительных экспериментов по выявлению влияния разупорядочения атомов в подрешетке катионов на магнитные свойства двойных перовскитов.

Для достижения поставленной цели решаются следующие задачи:

- программная реализация алгоритма Метрополиса для исследования свойств двойных перовскитов;
- моделирование влияния степени разупорядочения атомов в подрешетке катионов на магнитные свойства  $\text{Sr}_2(\text{FeMo})\text{O}_6$  и  $\text{Pb}(\text{Fe}_{1/2}\text{Nb}_{1/2})\text{O}_3$  с использованием алгоритма Метрополиса;
- программная реализация генетического алгоритма для исследования свойств двойных перовскитов, подбор параметров ГА;
- моделирование влияния степени разупорядочения атомов в подрешетке катионов на магнитные свойства  $\text{Sr}_2(\text{FeMo})\text{O}_6$  с использованием генетического алгоритма;
- выявление наиболее эффективного алгоритма для исследования магнитных свойств двойных перовскитов путем сравнения полученных результатов;
- обобщение результатов применения генетических алгоритмов в других задачах физики твердого тела;
- разработка рекомендаций по применению генетических алгоритмов применительно к задачам физики твердого тела.

**Методы исследования.** Для решения поставленных задач в работе использовались методы математического моделирования. В частности,

- для моделирования магнитных свойств двойных перовскитов использовались модели Изинга и Гейзенберга;
- численное моделирование проводилось с помощью алгоритма Метрополиса и генетического алгоритма.

**Положения, выносимые на защиту:**

1. Предложенная модификация генетического алгоритма позволяет проводить моделирование влияния степени разупорядочения атомов в подрешетке катионов на магнитные свойства двойных перовскитов.
2. Применяемые в диссертации модели Изинга и Гейзенберга позволяют объяснить изменение магнитных свойств двойных перовскитов при

изменении степени упорядочения в подрешетке катионов, что подтверждается близостью результатов моделирования с экспериментальными данными Navarro<sup>1</sup> и García-Hernández<sup>2</sup> для Sr<sub>2</sub>(FeMo)O<sub>6</sub>.

### Научная новизна:

1. Предложены новые модификации операторов генетических алгоритмов, пригодных для моделирования влияния степени разупорядочения атомов в подрешетке катионов на магнитные свойства двойных перовскитов.
2. Впервые была использована модель Гейзенберга для определения влияния степени разупорядочения атомов в подрешетке катионов на магнитные свойства двойных перовскитов.
3. Получены зависимости температуры Кюри, намагниченности насыщения от степени разупорядочения атомов в подрешетке катионов для Sr<sub>2</sub>(FeMo)O<sub>6</sub>.
4. Показано, что Pb(Fe<sub>1/2</sub>Nb<sub>1/2</sub>)O<sub>3</sub> является спиновым стеклом.
5. Сформулированы критерии, позволяющие определить круг задач физики твердого тела, в которых применение генетических алгоритмов более эффективно, чем традиционные подходы.

### Практическая значимость:

1. Разработан универсальный программный комплекс на основе алгоритма Метрополиса и генетического алгоритма, позволяющий изучать влияние степени разупорядочения атомов в подрешетке катионов на магнитные свойства двойных перовскитов. Апробация проведена для Sr<sub>2</sub>(FeMo)O<sub>6</sub> и Pb(Fe<sub>1/2</sub>Nb<sub>1/2</sub>)O<sub>3</sub>.
2. Результаты моделирования позволяют сформулировать рекомендации по производству двойных перовскитов с заранее заданными свойствами в виде функциональных зависимостей магнитных и температурных величин от степени разупорядочения.

---

<sup>1</sup>Navarro J. Antisites and electron-doping effects on the magnetic transition of Sr<sub>2</sub>(FeMo)O<sub>6</sub> double perovskite. / J. Navarro, J. Nogués, J. S. Muñoz, J. Fontcuberta // Phys. Rev. B 67, 174416, 2003. — 6p.

<sup>2</sup>García-Hernández M. Finding Universal Correlations between Cationic Disorder and Low Field Magnetoresistance in FeMo Double Perovskite Series. / M. García-Hernández, J.L. Martínez, M.J. Martínez-Lope, M.T. Casais, J.A. Alonso// Phys. Rev. Lett., 2001, **86**(11), 2443–2446.

3. Результаты диссертационной работы использованы в учебном процессе кафедры «Прикладной математики и информатики» Астраханского государственного университета.

**Апробация работы.** Основные результаты диссертации докладывались и обсуждались на следующих конференциях и семинарах: 2nd International Conference on Material Science and Condensed Matter Physics, Chisinau, 2004; 7-й Международный симпозиум "Порядок, беспорядок и свойства оксидов" ODPO-2004, г. Сочи, 2004; 5-я Международная научно-техническая конференция "Компьютерное моделирование 2004", г. Санкт-Петербург; 6-я Международная научно-техническая конференция "Компьютерное моделирование 2005", г. Санкт-Петербург; Вторая Всероссийская научная конференция "Проектирование инженерных и научных приложений в среде MATLAB", г. Москва, 2004; Итоговые научные конференции АГУ 2004–2007 гг.

**Публикации.** По материалам диссертации опубликовано 12 работ, из них 2 в журналах, рекомендуемых ВАК, 2 в реферируемых научных журналах, 5 в сборниках научных трудов, 2 зарегистрированных программ, одно учебное пособие с грифом УМО.

Все статьи написаны в соавторстве. Панченко Т.В. принадлежат результаты, относящиеся к применению алгоритма Метрополиса и генетических алгоритмов к исследованию магнитных свойств двойных перовскитов.

**Структура и объем диссертации.** Работа состоит из введения, 3 глав, заключения, списка литературы из 49 названий, 4 приложений. Объем диссертации составляет 176 страниц, в том числе 59 рисунков, 15 таблиц и приложения на 73 страницах.

## 2. Основное содержание работы

**Во введении** обосновывается актуальность диссертационной темы, формулируются цели и задачи исследования, научные положения, выносимые на защиту; дается краткая характеристика работы, ее объем и структура.

**Первая глава**, «Генетические алгоритмы и их применение в задачах физики твердого тела» носит обзорный характер и посвящена общим вопросам применения генетических алгоритмов. В начале главы дается обзор основных положений генетических алгоритмов, вводится терминология

и приводится основная схема применения ГА в оптимизационных задачах. Затем анализируются различные модификации операторов генетических алгоритмов, примененных в последнее время в различных областях знаний. Далее проводится обзор применения генетических алгоритмов в области физики твердого тела. Рассматривается применение ГА в задачах определения основного состояния примеси квантовой точки и основного состояния спиновых стекол. Дается обзор основных проблем, возникающих при использовании генетических алгоритмов в задачах физики твердого тела. Проводится сравнительный анализ работы генетического алгоритма и алгоритма Метрополиса при расчетах магнитных свойств модели Изинга с значением спинов  $\pm 1$ . Проведенный анализ показывает, что алгоритм Метрополиса является вырожденным случаем генетического алгоритма.

### **Сравнение алгоритма Метрополиса и генетического алгоритма.**

При сравнении этапов работы генетического алгоритма и алгоритма Метрополиса (Таблица 1) можно заметить, что последний является бесполом (не использующим операторы рекомбинации и кроссинговера) генетическим алгоритмом со 100% мутациями, работающими на основе формулы Больцмана. Алгоритм Метрополиса в отличие генетического алгоритма работает только с одной особью в популяции. На каждой итерации алгоритма Метрополиса единственная особь копируется в особь-потомка. Потомок, также как и в генетическом алгоритме, подвергается мутации. Но в отличие от генетического алгоритма в алгоритме Метрополиса мутации происходят постоянно, причем у потомка мутирует только один ген, после чего вычисляется значение приспособленности (энергии). Принятие потомка в новую популяцию (замена им родительской особи) в алгоритме Метрополиса происходит также как и в генетическом алгоритме — по методу элитизма.

Таблица 1

**Сравнительный анализ этапов алгоритма Метрополиса и генетического алгоритма, применимых к построению канонического ансамбля для заданной температуры**

<b>Алгоритм Метрополиса</b>	<b>Генетический алгоритм</b>
Создание начальной системы атомов. Расположение спинов задается случайным образом. Результатом этого этапа является заполнение двумерного массива, элементы которого соответствуют атомам решетки. Вычисляется энергия для созданной системы атомов.	Создание начальной популяции из $N$ систем атомов (хромосом), где $N$ — размер популяции. На этом этапе случайным образом создается $N$ двумерных массивов, каждый из которых соответствует некоторому состоянию кристаллической решетки. Для всех хромосом вычисляется значение функции приспособленности — энергии
<b>Итерация алгоритма Метрополиса</b>	<b>Итерация генетического алгоритма</b>

Алгоритм Метрополиса	Генетический алгоритм
	Рекомбинация, кроссинговер, получение потомков.
Изменение значения случайно выбранного спина. Т.е. меняется значение случайно выбранного элемента массива. Для полученной новой конфигурации вычисляется изменение энергии $\Delta E$	Мутации потомков с вероятностью $p_m < 1$ . В каждом двумерном массиве, соответствующему какому-либо потомку, согласно вероятности $p_m < 1$ меняется группа элементов. Количество элементов в группе задается некоторым образом, например, оно может быть определено как величина $p_m \cdot Size$ , где $Size$ — количество элементов в массиве. После применения оператора мутации вычисляется приспособленность (энергия) всех потомков. Следует заметить, что при низкой вероятности какой-либо потомок может не мутировать.
Новая конфигурация принимается в том случае, если ее энергия понизилась по сравнению с энергией предыдущего состояния или если вероятность ее принятия пропорциональна вероятности Больцмана	Отбор в новое поколение методом элитизма. В новую популяцию попадают конфигурации или наиболее приспособленные, или с вероятностью выживания пропорциональной вероятности Больцмана
Если канонический ансамбль не построен, то переходим к новой итерации	Если в популяции, имитирующей канонический ансамбль, не достигнуто состояние равновесия (сходимость к некоторому состоянию), то переходим к новой итерации
Завершение процесса. Получение итоговой решетки спинов, являющейся результатом усреднения по каноническому ансамблю.	Завершение процесса. Получение итоговой популяции — совокупности решеток спинов, по которым путем усреднения получается искомое состояние системы.

Из Таблицы 1 видно, что за одну итерацию в генетическом алгоритме происходит большее количество пересчетов энергии (приспособленности), чем в алгоритме Метрополиса. Следует заметить, что пересчет энергии в алгоритме Метрополиса происходит по формуле  $E = E - 2\sigma_i \cdot S$ , где  $\sigma_i$  — значение спина выбранного атома,  $S$  — сумма спинов соседних с  $\sigma_i$  атомов, тем временем, как в генетическом алгоритме энергия пересчитывается полностью. В генетическом алгоритме могут быть созданы принципиально новые системы атомов, которые могут обладать как большим, так и меньшим значением энергии. В первом случае это приводит к ускорению сходимости, во втором случае появление мало приспособленной особи может увеличить время поиска оптимального решения. Из этого следует, что для того, чтобы генетический алгоритм был эффективнее алгоритма Метрополиса, необходимо создать операторы кроссинговера и селекции, способные привести к верному решению быстрее, чем бесполоый ГА со 100% мутациями.

**Проблемы, возникающие при применении ГА в задачах физики твердого тела.**



На пути применения генетических алгоритмов в задаче о фазовых переходах возникает несколько проблем, в связи с которыми становится невозможным создание большого ансамбля с больцмановским распределением. Первая из них связана с возникновением зеркального распределения спинов в хромосомах, т.е. таких конфигураций, в которых атомы со спинами разных знаков располагаются на одинаковых позициях.

В модели Изинга хромосома кодируется бинарной строкой из 1 и  $-1$ , в качестве функции приспособленности полагается полная энергия системы. В связи с этим наиболее приспособленные шаблоны (см. [3]) будут состоять из одинаковых генов. Рассмотрим два однородных (или однотипных т.е. содержащими только 1 или  $-1$ ) шаблона одинакового порядка с той разницей, что на тех позициях на которых у первого шаблона стоят 1 у второго стоят  $-1$ . Энергия для обоих шаблонов будет одинакова. Если эти шаблоны высокого порядка, то они обязательно попадут в новую популяцию. В новой популяции они могут:

- стать компонентами одной хромосомы, тогда приспособленность хромосомы ухудшится (энергия увеличится) в связи с взаимодействием противоположных по знаку спинов;
- рассматриваемые шаблоны могут быть разрушены в результате кроссинговера — обмен фрагментами таких шаблонов приведет к созданию непригодных шаблонов высокого порядка.

Существование симметричных шаблонов замедляет сходимость алгоритма и в итоге приводит к ложному результату.

Для избежания подобной ситуации следует рассматривать в качестве функции приспособленности полную энергию  $E_n$  системы с учетом внешнего магнитного поля  $H$ , позволяющего снять вырождение системы

$$E = - \sum_{ij} J_{ij} \sigma_i \sigma_j - H \sum_i \sigma_i. \quad (1)$$

В уравнении (1)  $J_{ij}$  — константа обменного взаимодействия между атомами  $i$  и  $j$ ,  $\sigma_i$  — значение спина  $i$ -ого атома. При использовании данной функции приспособленности шаблоны с отрицательными значениями генов становятся непригодными, и следовательно отбрасываются при формировании нового поколения. Другим вариантом функции приспособленности может служить функция

$$E_{GA} = - \sum_{ij} J_{ij} \sigma_i \sigma_j \cdot H \sum_i \sigma_i. \quad (2)$$

Ее применение также влечет удаление из популяции непригодных шаблонов с той разницей, что происходит это гораздо быстрее, чем в первом случае (разность произведений больше, чем разность сумм). Следует заметить, что в отличие от функции 1, функция 2 не имеет ясного физического смысла.

Вторая проблема связана с преждевременной сходимостью. В этом случае в генетическом алгоритме перестают создаваться принципиально новые решения и шаблоны, ведущие к увеличению приспособленности (т.е. алгоритм сходится к некоторому шаблону хромосомы). Вообще, принципиально новые хромосомы могут быть созданы посредством применения высоковероятных мутаций. С другой стороны, мутации разрушают приспособленные шаблоны хромосом. В связи с этим необходимо найти способ управления количеством мутаций для задачи с определенным размером кристаллической решетки. Это делается путем определения динамических мутаций, способных менять свою вероятность в ходе решения задачи.

Третья проблема связана с увеличением числа пересчета энергии, вызванное наличием кроссинговера, при котором создаются новые хромосомы. Следует заметить, что технически пересчет энергии при мутации хромосомы проще, чем при кроссинговере. Тем самым алгоритм Метрополиса, построенный на 100% мутациях, для данной задачи фазовых переходов на больших кристаллических решетках эффективнее. Следовательно, для решения поставленной задачи генетическим алгоритмом необходимо разработать оператор кроссинговера, способный за несколько поколений привести популяцию к глобальному минимуму, оставив при этом больцмановскую формулу в операторе селекции (вынос температуры в оператор мутации сделает алгоритм аналогичным алгоритму Метрополиса).

Основные результаты первой главы обобщены в работах [3] и [12].

**Вторая глава**, «Исследование магнитных свойств двойных перовскитов на основе моделей Гейзенберга и Изинга с помощью алгоритма Метрополиса», посвящена применению алгоритма Метрополиса к вычислению магнитных характеристик двойных перовскитов. В начале главы дается описание двойных перовскитов. Приводятся модели Изинга и Гейзенберга. Далее рассматривается применение алгоритма Метрополиса к вычислению магнитных свойств на моделях Изинга и Гейзенберга для  $\text{Sr}_2(\text{FeMo})\text{O}_6$ , и на модели Изинга для  $\text{Pb}(\text{Fe}_{1/2}\text{Nb}_{1/2})\text{O}_3$ . Определяется зависимость температуры Кюри от степени разупорядочения атомов в подрешетке катионов для  $\text{Sr}_2(\text{FeMo})\text{O}_6$ . Делается заключение о том, что  $\text{Pb}(\text{Fe}_{1/2}\text{Nb}_{1/2})\text{O}_3$  является спиновым стеклом.

В компьютерном моделировании магнитных свойств двойных 1 : 1 перовскитов  $\text{AB}'_{1/2}\text{B}''_{1/2}\text{O}_3$  учитываются только атомы сортов В' и В''. Предполагается, что атомы располагаются в узлах кубической решетки с пе-

риодическими граничными условиями. Если атом сорта  $V'$  и атом сорта  $V''$  поменять местами, то получится антиструктурный дефект. В отсутствие антиструктурных дефектов атомы обоих сортов  $V'$  и  $V''$  чередуются в шахматном порядке. При наличии антиструктурных дефектов упорядоченное чередование атомов нарушается. Каждый атом характеризуется спином (числовым значением и направлением). Магнитное взаимодействие между атомами задается обменными интегралами  $J_{ij}$ , где  $i$  и  $j$  могут принимать значения  $V'$  и  $V''$ . Модель Изинга отличается от модели Гейзенберга только тем, что проекция нормализованного спина атома может принимать значения 1 или  $-1$ , исключая  $1/2$ ,  $-1/2$  и 0. При воспроизведении алгоритма Метрополиса результаты полученные на обеих моделях различаются лишь в сотых долях, но временная сложность в случае использования модели Гейзенберга выше, чем в случае модели Изинга. Энергия и намагниченность при моделировании вычисляются по формулам

$$E = - \sum_{i \neq j} J_{ij} \sigma_i \sigma_j,$$

где сумма берётся по всем ближайшим соседним парам спинов,

$$M = \frac{\mu_B}{N} \sum_i \sigma_i,$$

где  $N$  — полное число атомов в решетке,  $\mu_B$  — магнетон Бора и сумма берется по всем спином  $\sigma_i$  решетки. На основании модели Изинга в дальнейшем проводится сравнительный анализ эффективности генетического алгоритма и алгоритма Метрополиса применительно к изучению магнитных свойств  $\text{Sr}_2(\text{FeMo})\text{O}_6$ .

В диссертационной работе использовались следующие интегралы обменного взаимодействия:  $J_{\text{Fe,Fe}}$  — свободный параметр,  $J_{\text{Mo,Mo}} = 0$ ,  $J_{\text{Fe,Mo}} = 7.84 J_{\text{Fe,Fe}}^3$ .

В результате работы алгоритма Метрополиса была получена зависимость энергии системы от температуры. Также была определена зависимость намагниченности на атом как самой кристаллической решетки, так и подрешеток атомов сортов  $V'$  и  $V''$  от температуры. Намагниченность системы вычислялась для каждого значения температуры. С использованием полученных данных была вычислена температура фазового перехода. Температура Кюри в диссертационном исследовании определялась несколькими способами: по максимуму теплоемкости, рассчитанной по формуле

$$c = \frac{1}{kT^2} (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2),$$

---

<sup>3</sup>Такое соотношение между обменными интегралами соответствует параметризации в работе A.S. Ogale, S. B. Ogale, R.T. Ramesh, Appl. Phys. Lett., 75, 4, 537 (1999)

по максимуму теплоемкости, рассчитанной как  $c = \frac{\partial E}{\partial T}$ ; по минимуму магнитной восприимчивости, рассчитанной как

$$\chi = \frac{1}{kT} (\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2),$$

и по минимуму кривой зависимости производной  $\frac{\partial M}{\partial T}$  от температуры (рис. 1). Расчеты проводились для различной степени разупорядочения атомов в подрешетке катионов. Тем самым была получена зависимость критической температуры вещества от степени разупорядочения.

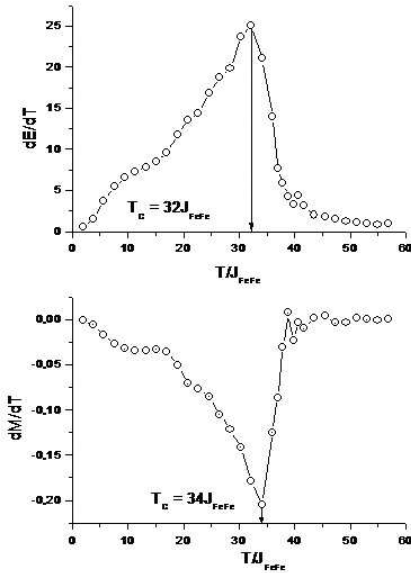


Рис. 1: Определение температуры Кюри по минимуму производной  $dM/dT$  и по пику теплоемкости

моделей, согласуются с экспериментальными данными Navarro и García-Hernández. Так зависимость, полученная с применением модели Изинга, описывается формулой

$$M_S/\mu_B = 3.8 - 0.08x,$$

а в случае использования модели Гейзенберга —

$$M_S/\mu_B = 3.96 - 0.08x,$$

В результате моделирования установлено, что при увеличении числа антиструктурных дефектов в  $Sr_2(FeMo)O_6$  происходит плавное выравнивание величины намагниченности в подрешетках. При концентрации антиструктурных дефектов 50% (неупорядоченное соединение) это антиферромагнетик, при 0% — ферромагнетик. На рис. 2 для соединения  $Sr_2(FeMo)O_6$  приводятся результаты расчетов магнитных моментов атомов в подрешетках  $B'$  и  $B''$  в зависимости от концентрации антиструктурных дефектов. Намагниченность насыщения определялась при температуре  $T = 50K$ . Зависимости для намагниченности насыщения, полученные в рамках обеих

где  $x$  — количество антиструктурных дефектов в процентах.

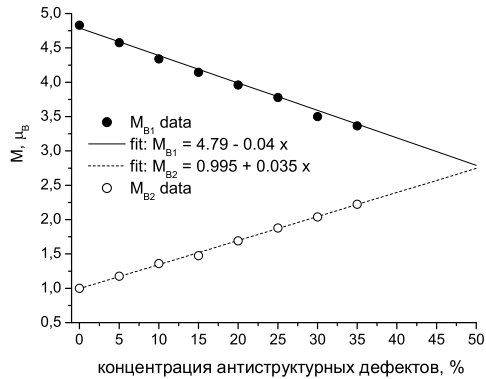


Рис. 2. Средняя намагниченность в подрешетках (на основе модели Гейзенберга)

Расчеты показали, что при увеличении концентрации дефектов температура Кюри уменьшается линейно (рис. 3).

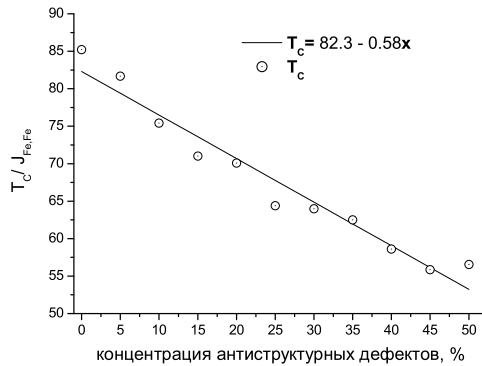


Рис. 3. Зависимость температуры Кюри для  $\text{Sr}_2(\text{FeMo})\text{O}_6$  от степени разупорядочения (на основе модели Изинга)

Проведенные расчеты для  $\text{Sr}_2(\text{FeMo})\text{O}_6$  согласуются с экспериментальными данными, полученными Alonso.

Целый ряд двойных перовскитов, например, феррониобат свинца  $\text{Pb}(\text{Fe}_{1/2}\text{Nb}_{1/2})\text{O}_3$  (PFN), являются антиферромагнетиками. В рамках модели Изинга с использованием алгоритма Метрополиса показано, что упорядоченный PFN является парамагнетиком. Проведенные расчеты частично упорядоченных соединений показали, что одинаковым или очень близким энергиям системы соответствуют различные конфигурации спинов (рис. 4). Это объясняется тем, что инверсия спинов магнитных атомов внутри антиферромагнитных кластеров — фрагментов вида Fe-O-Fe, почти не влияет на энергию системы, но существенно изменяет намагниченность в подрешетках.

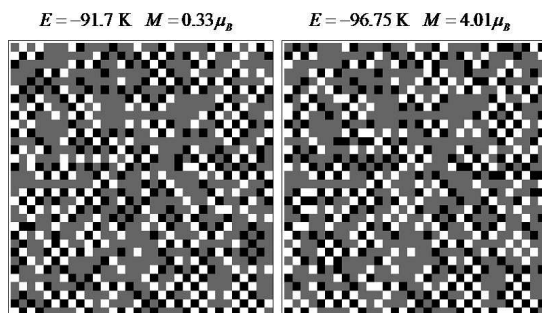


Рис. 4. Один слой решетки  $32^2$  образца PFN. Черные и белые квадраты обозначают атомы Fe с различными ориентациями спина. Серые - немагнитные атомы Nb.

Кроме того, расчеты показали, что магнитный фазовый переход в феррониобате свинца сильно размазан. Выше температуры фазового перехода можно наблюдать большие флуктуации магнитного параметра порядка (разности намагниченностей в подрешетках Fe и Nb). При низких температурах величина параметра порядка существенно зависит от параметров моделирования, в частности, от скорости модельного отжига. Полученные результаты позволяют сделать предположение о том, что неупорядоченный PFN является спиновым стеклом.

Основные результаты второй главы опубликованы в работах [1, 2, 4–9], а также продемонстрированы программами [10]– [11].

**Третья глава**, «Исследование магнитных свойств двойных перовскитов на основе модели Изинга с помощью генетических алгоритмов», посвящена применению генетических алгоритмов к изучению магнитных свойств  $\text{Sr}_2(\text{FeMo})\text{O}_6$ . Рассматриваются результаты применения генетического алгоритма и алгоритма Метрополиса. Делается вывод о том, что для больших

кристаллических решеток эффективнее использовать алгоритм Метрополиса, в то время как для небольших решеток более хорошие результаты при том же времени вычислений дает генетический алгоритм. Основные результаты третьей главы рассмотрены в работах [3] и [12].

Модель Изинга, соответствующую  $\text{Sr}_2(\text{FeMo})\text{O}_6$ , можно изучать с помощью классического ГА по следующей схеме (см. рис. 5):

1. Инициализация.

Генерируем случайным образом популяцию из  $n$  хромосом (трехмерный массив из  $n$  строк, где каждая строка представляет собой какую-либо конфигурацию системы).

2. Вычисляем для каждой хромосомы её приспособленность — например, энергию системы или какую-либо другую функцию.

3. Формируем пары хромосом-родителей.

4. Проводим кроссинговер с вероятностью  $p_c$ , производя двух потомков.

5. Проводим мутацию потомков с вероятностью  $p_m$ .

6. Повторяем шаги 3–5 пока не будет сгенерировано новое поколение популяции, содержащее  $n$  хромосом.

7. Повторяем шаги 2–6, пока не будет достигнут критерий окончания процесса.

8. Выбираем из популяции наиболее пригодную хромосому и вычисляем все интересующие величины. Значения параметров можно взять следующие  $n = 10 - 100$ ,  $p_c = 0.8 - 0.95$ ,  $p_m = 0.001 - 0.01$ .

Данный алгоритм является классическим для получения основного состояния кристаллической решетки при заданной температуре. Доля антиструктурных дефектов, как и при моделировании алгоритмом Метрополиса, учитывается на этапе инициализации, а именно при заполнении массива-хромосомы элементами-атомами двух сортов. Каждому элементу-атому приписывается произвольное допустимое значение спина. Таким образом на этапе инициализации создается массив-популяция из нескольких хромосом, представляющих различные конфигурации кристаллической решетки. Моделируя операторы генетического алгоритма, такие как оператор отбора родителей, кроссинговера, мутации и селекции можно получить различные модификации алгоритма, пригодные для решения задачи конкретного типа. Для увеличения сходимости ГА рекомендуется использовать динамические операторы кроссинговера, мутации и сегрегации. Вероятность

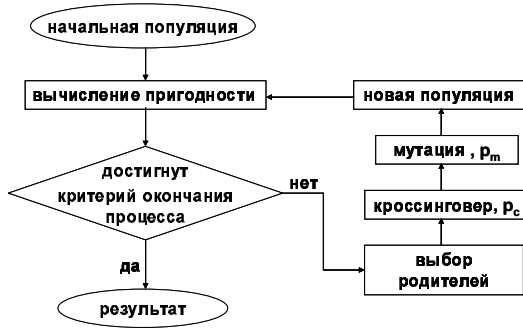


Рис. 5. Схема простого ГА

таких операторов меняется в процессе работы алгоритма и может быть различной для каждой особи.

**Кроссингвер.** В большинстве случаев в задачах ФТТ применяется триадный и одноточечный кроссингвер. *Триадный* кроссингвер применяется в задачах с маленьким размером кристаллической решетки. При его использовании дополнительно формируется дополнительная хромосома-маска. Вероятность такого кроссингвера должна возрастать по мере работы алгоритма. Например, при температурном отжиге до  $T = T_{\text{fin}}$  вероятность кроссингвера может быть выражена следующей формулой  $p_c = 0.7 \frac{T}{T_{\text{fin}}}$ , где  $T, T > T_{\text{fin}}$  — температура системы. Для реализации одноточечного кроссингвера при формировании родительских пар используют аутбридинг и инбридинг. При *инбридинге* в скрещивании участвуют наиболее похожие (близкие по Хеммингу) хромосомы. Таким образом, вероятность кроссингвера определяется для каждой пары хромосом, и является возрастающей функцией от числа итераций алгоритма (т.к. при работе ГА достигается однообразие в популяции). Наиболее эффективным является *аутбридинг*, отличающийся от инбридинга тем, что в скрещивании участвуют наиболее отдаленные хромосомы. Вероятность кроссингвера при аутбридинге убывает в процессе итераций алгоритма и также определяется для каждой пары хромосом.

**Мутации.** Мутации применяются для получения новых генотипов хромосом, т.е. для поддержания многообразия в популяции и избежания сходности ГА к локальному минимуму. Для первых поколений ГА мутации



должны быть достаточно высокими, это позволит сформировать наиболее приспособленные шаблоны хромосом. На следующих этапах вероятность мутации должна убывать для того, чтобы найденные приспособленные шаблоны не были разрушены. Вероятность мутации при температурном отжиге от  $T = T_{\text{start}}$  может быть описана, например, такой убывающей функцией  $p_m = 0.7 \frac{T}{T_{\text{start}}}$ , где  $T, T \leq T_{\text{start}}$  — температура системы. С другой стороны, большим мутациям должны быть подвержены наименее приспособленные хромосомы, а более приспособленные могут мутировать с вероятностью  $p = 0 - 0.01$ . Вероятность мутации, зависящая от приспособленности, определяется для каждой хромосомы, по следующей формуле

$$p = 1 - \frac{k - i + 1}{k}, \quad (3)$$

где  $k$  — количество отсортированных по возрастанию приспособленности (при решении задачи минимизации) мутирующих хромосом,  $i$  — номер мутирующей хромосомы в упорядоченной популяции. Для увеличения скорости сходимости ГА применяют направленные мутации. В задаче определения магнитных свойств двойных перовскитов такие мутации заключаются в присваивании положительного значения спину атома (направление вверх). Несколько таких мутаций может увеличить приспособленность хромосомы. Т.к. функция приспособленности рассматривалась в виде произведения энергии и внешнего магнитного поля, то вероятность мутации зависела от температуры  $T$ : мутации продолжались до тех пор пока не будет достигнуто состояние с приспособленностью  $e(i)$ , такое что

$$1 + \exp \frac{-e(i-1) + e(i)}{k_B T} > \text{rand}.$$

Здесь  $\text{rand} \in [0; 1]$  — случайное число,  $i$  — номер мутации,  $k_B$  — постоянная Больцмана. Мутациям подвергались только особи-потомки, количество мутаций также не превышало числа, определенного вероятностью (3).

**Сегрегация.** При использовании оператора *сегрегации* в хромосоме случайно выбранная подстрока заменяется на приспособленный шаблон. В задаче определения магнитных свойств двойных перовскитов приспособленный шаблон представляет собой строку с положительно направленными спинами. Для применения сегрегации необходимо использовать шаблоны малой длины, вероятность сегрегации в данном случае должна зависеть от количества поколений и температуры системы. Причем такая зависимость должна быть убывающей по мере возрастания количества поколений. При использовании направленных мутаций сегрегацию не используют.

**Отбор хромосом в новую популяцию.** Формирование новой популяции в рассматриваемой задаче ФТТ может происходить в основном двумя способами:

1. с помощью больцмановского отбора;
2. с применением стратегии элитизма.

В обоих вариантах выбор особей производится из числа старых хромосом и созданных хромосом-потомков. В больцмановском отборе случайно выбранная хромосома заносится в новую популяцию если ее приспособленность  $e$  удовлетворяет соотношению

$$1 + \exp \frac{-e_{\text{mean}} + e}{k_B T} > \text{rand},$$

где  $e_{\text{mean}}$  — средняя приспособленность по популяции старых хромосом и хромосом-потомков. Во втором случае все хромосомы сортируются в порядке возрастания их приспособленности, в новую популяцию выбираются наиболее приспособленные (с минимальной энергией) хромосомы, обладающие положительной намагниченностью. Последнее требование помогает избежать эпистаза в генетическом алгоритме.

**Результаты применения генетического алгоритма.** С помощью генетического алгоритма в рамках модели Изинга проводилось исследование влияния степени разупорядочения атомов в подрешетке катионов на магнитные свойства  $\text{Sr}_2(\text{FeMo})\text{O}_6$ . Согласно результатам исследования намагниченность насыщения убывает по закону

$$M_S/\mu_B = 3.98 - 0.08x.$$

Близкая зависимость была получена при моделировании с помощью алгоритма Метрополиса. Результаты численного эксперимента подтверждаются экспериментальными данными Navago. Температура Кюри определялась по максимуму теплоемкости, рассчитанной как  $c = \frac{\partial E}{\partial T}$ . В результате была получена линейная убывающая зависимость температуры Кюри от концентрации  $x$  антиструктурных дефектов в подрешетке катионов (4).

$$T_C(x)/J_{\text{Fe,Fe}} = 90.7 - 0.5x. \quad (4)$$

Используемый генетический алгоритм алгоритмически сложнее, чем алгоритм Метрополиса, за счет

1. наличия сортировок хромосом при формировании новой популяции;
2. создания новых хромосом в результате кроссинговера.

С другой стороны, временная сложность генетического алгоритма для решеток небольшого размера ниже, чем у алгоритма Метрополиса. В связи с этим алгоритм Метрополиса работает эффективнее генетического алгоритма только при исследовании кристаллической решетки, состоящей из большого числа атомов. Исследования показали, что результаты расчетов, проведенных с помощью генетического алгоритма для  $\text{Sr}_2(\text{FeMo})\text{O}_6$  на решетке с  $16^3$  атомами, практически совпадают с результатами алгоритма Метрополиса, проведенных для кубических решеток с линейным размером 32 и 52. Поэтому генетический алгоритм может быть эффективно использован в задаче определения влияния степени разупорядочения в двойных перовскитах при рассмотрении небольших кристаллических решеток.

В **заключении** суммируются основные результаты диссертационной работы, выносимые на защиту, приводятся данные о публикациях и рассматриваются направления дальнейших исследований в данной области.

В **приложении** приводятся акты об использовании, результаты расчетов и листинги программ.

### 3. Основные результаты и выводы

1. Создана программа на основе алгоритма Метрополиса, которая впервые позволила использовать модель Гейзенберга для исследования магнитных свойств двойных перовскитов в зависимости от степени разупорядочения в подрешетке катионов.
2. Создана программа, впервые реализующая применение генетических алгоритмов в области исследования магнитных свойств соединений относящихся к классу двойных перовскитов.
3. С помощью созданного программного комплекса были получены зависимости намагниченности насыщения и температуры Кюри от степени разупорядочения в подрешетке катионов для  $\text{Sr}_2(\text{FeMo})\text{O}_6$ , было установлено, что  $\text{Pb}(\text{Fe}_{1/2}\text{Nb}_{1/2})\text{O}_3$  является спиновым стеклом. Результаты проведенного численного эксперимента согласуются с экспериментальными данными Navarro и García-Hernández.
4. Проведен анализ применимости генетических алгоритмов для решения задач физики твердого тела. Получено, что в сравнении с ал-

горитмом Метрополиса для моделей с большим количеством атомов, генетические алгоритмы в задаче об определении температуры фазового перехода менее эффективны.

5. Разработаны рекомендации по применению генетических алгоритмов в оптимизационных задачах физики твердого тела.
6. Результаты использованы в учебном процессе кафедры «Прикладной математики и информатики» Астраханского государственного университета.

## **Основные публикации по теме диссертации**

1. Тарасевич, Ю. Ю. Исследование влияния степени упорядочения катионов на магнитные свойства двойных 1:1 перовскитов в рамках модели Гейзенберга / Ю. Ю. Тарасевич, Т. В. Панченко // Физика твердого тела. — 2007. — т. 49, вып. 7. — С. 653–655.
2. Тарасевич, Ю. Ю. Применение ВЕБ-технологий в физическом практикуме / Ю. Ю. Тарасевич, И. С. Пономарева, В. А. Зелепухина, Е. Н. Манжосова, Т. В. Панченко // Физическое образование в вузах. — 2006. — Т. 12, № 1. — с. 103–114.
3. Панченко, Т. В. Сравнительный анализ эффективности применения генетических алгоритмов и алгоритма Метрополиса в задачах физики твердого тела / Т. В. Панченко, Ю. Ю. Тарасевич // Вычислительные методы и программирование. — 2007. — т. 8. — С. 77–87.
4. Tarasevich, Yu. Yu. Octahedral cation antisite disorder effects in double 1:1 perovskites: Monte Carlo simulation study and percolation approach / Yu. Yu. Tarasevich, T. V. Panchenko, E. N. Manzhosova // J. Phys. (France). — 2005. — V. 4, №126. — p. 65–68.
5. Тарасевич, Ю. Ю. Моделирование магнитных свойств двойных перовскитов / Ю. Ю. Тарасевич, Т. В. Панченко, Е. Н. Манжосова // Проектирование инженерных и научных приложений в среде MATLAB : труды Второй Всерос. науч. конф. — М. : ИПУ РАН, 2004. — С. 422–430. — ISBN 5-201-14971-5,
6. Тарасевич, Ю. Ю. Моделирование методом Монте-Карло влияния степени упорядочения катионов на магнитные свойства двойных перовскитов / Ю. Ю. Тарасевич, Т. В. Панченко, Е. Н. Манжосова //

Компьютерное моделирование 2004 : труды 5-й Междунар. науч.-техн. конф. — СПб. : Изд-во "Нестор", 2004. — ч. 2 — С. 99–102.

7. Тарасевич, Ю. Ю. Влияние степени упорядочения катионов на магнитные свойства двойных 1:1 перовскитов: моделирование методом Монте-Карло и перколяционный подход / Ю. Ю. Тарасевич, Т. В. Панченко, Е. Н. Манжосова // 7-й Междунар. симпозиум "Порядок, беспорядок и свойства оксидов" : ОДРО-2004 : сборник трудов. — Ростов н/Д: Изд. Ростовского гос. пед. ун-та, 2004. — С. 217–220. — ISBN 5-8480-0450-1.
8. Тарасевич, Ю. Ю. Моделирование методом Монте-Карло влияния беспорядка на магнитные свойства двойных перовскитов / Ю. Ю. Тарасевич, Т. В. Панченко // Ученые записки : мат-лы докл. итоговой науч. конф. АГУ.– Астрахань : ИД "Астраханский университет" — 2005. — т.1. Биология. География. Физика. Математика. Информатика. — С. 153–158. — ISBN 5-88200-838-7.
9. Тарасевич, Ю. Ю. Моделирование методом Монте-Карло влияния беспорядка на магнитные свойства двойных перовскитов / Ю. Ю. Тарасевич, Т. В. Панченко // Труды VI Междунар. науч.-техн. конф. — СПб.: Изд-во Политехнического ун-та, 2005. — С. 153–158.
10. Тарасевич, Ю. Ю. Программа для моделирования магнитных свойств двойных перовскитов / Ю. Ю. Тарасевич, Т. В. Панченко // Отраслевой фонд алгоритмов и программ. Номер государственной регистрации 50200400263. 19 марта 2004.
11. Панченко, Т. В. Программа для моделирования влияния степени упорядочения в подрешетке катионов на магнитные свойства  $\text{Sr}_2(\text{FeMo})\text{O}_6$  с использованием моделей Изинга и Гейзенберга / Т. В. Панченко, Ю. Ю. Тарасевич. // Федеральная служба по интеллектуальной собственности, патентам и товарным знакам. Номер государственной регистрации 2007611264. 23 марта 2007.
12. Панченко, Т. В. Генетические алгоритмы : учебно-методическое пособие. / Т. В. Панченко, под ред. Ю. Ю. Тарасевича. — Астрахань : ИД «Астраханский университет», 2006. — 89 [3] с. — ISBN 5-88200-913-8.

Подписано в печать 21.09.2007г.

Тираж 100 экз. Заказ №1261

Уч.-изд. л. 1,3. Усл. печ. л. 1,2

---

Оттиражировано в Издательском доме  
"Астраханский университет"  
414056, г. Астрахань, ул. Татищева, 20  
тел. (8512) 54-01-89, 54-01-87