

АППРОКСИМАЦИЯ СПЕКТРОВ ПОГЛОЩЕНИЯ ГАУССОВЫМИ ФУНКЦИЯМИ, ОПТИМИЗИРОВАННАЯ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОЙ ЭВОЛЮЦИЕЙ

Шкирина У.А.¹, Чесалин Д.Д., Курков В.А.² Пищальников Р.Ю.

Институт общей физики им. А.М. Прохорова Российской академии наук, Россия, 119991, г. Москва, ул. Вавилова 38, shkirinajuliana@gmail.com, rpishchal@kapella.gpi.ru
¹МГУ им. М.В. Ломоносова, Механико-математический факультет, Россия, г. Москва, 119991, Ленинские горы, 1

²Московский физико-технический институт, Россия, 141701, г. Долгопрудный, Институтский пр. 9,

Гауссовы функции являются ключевыми для описания множества физических процессов и явлений. В частности, они применяются при моделировании спектров поглощения органических и неорганических молекул. В простейшем случае спектр может быть аппроксимирован одиночной гауссовой функцией, определяемой всего тремя параметрами. Однако в большинстве случаев спектр поглощения описывается более комплексной формой линии, и его аппроксимация требует использования большего числа гауссовых функций. Процедура подбора параметров в таком случае требует существенных затрат, в результате чего возникает потребность в использовании эволюционных алгоритмов, таких как дифференциальная эволюция. Нами было разработано программное обеспечение, позволяющее успешно оптимизировать процесс аппроксимации [1,2]. Особенностью оптимизационного алгоритма является необходимость настройки внутренних параметров алгоритма и стратегии выбора мутантных векторов, влияющих на скорость сходимости. Используя в качестве экспериментальных спектров смоделированные, мы провели анализ устойчивости алгоритма. Оказалось, что для некоторых стратегий дифференциальной эволюции параметры, обеспечивающие быструю сходимость, находятся в достаточно узком диапазоне. Таким образом, предварительное тестирование стратегий является необходимым, прежде чем алгоритм будет обрабатывать реальные экспериментальные данные.

Литература

1. Pishchalnikov, R.Y.; Yaroshevich, I.A.; Zlenko, D.V.; Tsoraev, G.V.; Osipov, E.M.; Lazarenko, V.A.; Parshina, E.Y.; Chesalin, D.D.; Sluchanko, N.N.; Maksimov, E.G. The role of the local environment on the structural heterogeneity of carotenoid β -ionone rings // *Photosynthesis Research*, том **156**, номер 1, 2022, Стр. 3-17, doi:10.1007/s11120-022-00955-2.
2. Pishchalnikov, R. Application of the differential evolution for simulation of the linear optical response of photosynthetic pigments // *Journal of Computational Physics* том **372**, 2018, Стр. 603-615, doi:10.1016/j.jcp.2018.06.040.