

РЕЗОНАНСНЫЙ ХАРАКТЕР НАСТРОЙКИ УПРАВЛЯЮЩИХ ПАРАМЕТРОВ ОПТИМИЗАЦИОННОГО АЛГОРИТМА ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОЙ ЭВОЛЮЦИИ

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

Институт общей физики им. А.М. Прохорова Российской академии наук, Россия,
119991, г. Москва, ул. Вавилова 38, V.K27@yandex.ru, rpishchal@kapella.gpi.ru

¹Московский физико-технический институт, Россия, 141701, г. Долгопрудный,
Институтский пр. 9,

²МГУ им. М.В. Ломоносова, Механико-математический факультет, Россия, г. Москва,
119991, Ленинские горы, 1

Дифференциальная эволюция - один из наиболее широко применяемых эволюционных методов оптимизации, эвристическая природа которого позволяет применять его к широкому кругу задач, не вдаваясь в нюансы и подробности исследуемой модели. Нами было разработано программное обеспечение, в котором можно использовать в качестве оптимизируемой функции любую наперед заданную математическую функцию. Также были разработаны узконаправленные процедуры вычислений полуклассических квантовых параметров, необходимых для расчёта оптических свойств органических пигментов и кристаллов [1-3]. В данной работе мы исследовали сходимость алгоритма на наборе тестовых функций (как для унимодальных, так и для мультимодальных), которые представляют неразрешимую задачу для классических способов оптимизации, таких как градиентный спуск или метод наименьших квадратов. В результате был обнаружен резонансный характер возрастания скорости сходимости дифференциальной эволюции при варьировании двух основных параметров алгоритма: F (весовой коэффициент) и Cr (вероятность кроссовера). Данную особенность алгоритма всегда необходимо иметь в виду, так как неоптимальный подбор F и Cr может существенно снизить эффективность оптимизации вплоть до совершенного отсутствия сходимости.

Литература

1. 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.
2. 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.
3. Chesalin, D.D.; Kulikov, E.A.; Yaroshevich, I.A.; Maksimov, E.G.; Selishcheva, A.A.; Pishchalnikov, R.Y. Differential evolution reveals the effect of polar and nonpolar solvents on carotenoids: A case study of astaxanthin optical response modeling // *Swarm and Evolutionary Computation*, **75**, 2022, 101210, doi:10.1016/j.swevo.2022.101210.