

基于克隆选择的混合遗传算法在 碳纳米管结构优化中的研究^{*}

保文星¹⁾²⁾ 朱长纯¹⁾ 崔万照¹⁾

¹⁾ 西安交通大学电子与信息工程学院, 西安 710049)

²⁾ 西北第二民族学院计算机系, 银川 750021)

(2004 年 11 月 30 日收到, 2005 年 3 月 28 日收到修改稿)

针对分子动力学模拟中碳纳米管的结构优化问题, 提出了一种新的优化算法. 新的优化算法在遗传算法的基础上, 引入了克隆选择机理和模拟退火技术. 对五个典型函数的优化测试结果表明, 该算法搜索过程稳定性好, 可较好地实现全局最优. 将其应用于碳纳米管原子结构优化, 加快了能量优化速度, 提高了优化质量. 模拟结果说明, 混合遗传算法的优化时间随原子数增加而呈线性增长. 在碳纳米管原子数较多时, 结构优化时间比共轭梯度法降低一个数量级左右, 大大降低了系统的模拟时间.

关键词: 分子动力学, 碳纳米管, 能量优化, 遗传算法, 克隆选择算法

PACC: 6185, 6148

1. 引 言

自从 1991 年 Iijima 发现碳纳米管以来, 对碳纳米管性能的研究一直是国际新材料研究领域的热点^[1]. 研究表明, 碳纳米管具有优越的电学和力学性能^[2-4]. 然而, 碳纳米管的许多性质用现有的实验方法无法精确测量, 因此, 理论模拟计算成为研究碳纳米管性质的有力工具.

在原子结构的理论模拟计算中, 常用从头算方法和分子动力学方法进行研究. 从头算使用量子力学方法, 计算量大, 只能计算几十到几百个原子的系统, 难以满足实际碳纳米管结构(几千到几十万原子)的计算要求. 分子动力学方法采用经典力学原理来计算, 计算量小, 可计算多达几十万原子的碳纳米管结构, 在一定程度上可定量再现纳米尺度下的原子运动细节, 揭示碳纳米管在变形过程中的微观机理^[5].

在分子动力学模拟碳纳米管的过程中, 根据碳纳米管的原子间相对位置可以计算出初始的原子结构. 在模拟过程中, 需要对初始原子结构进行能量优化. 能量优化的目的是使分子或原子间的结构优化,

系统势能能达到最小, 从而获得稳定的几何结构. 在能量优化中, 主要通过计算原子间势能来获得优化后原子的几何位置. 原子间的势能是关于原子坐标的一个复杂的多维函数, 势能函数 $V(r_1, r_2, \dots, r_n)$ 是多个独立变量的函数, 能量优化就是在函数 V 中找到一个最小值点. 在该点处, 函数的一阶偏导数为零, 而二阶偏导数大于零.

$$\frac{\partial V}{\partial r_i} = 0, \quad \frac{\partial^2}{\partial r_i^2} > 0. \quad (1)$$

碳纳米管几何结构的能量优化过程是一个较复杂的过程, 是典型的不确定多项式(NP)问题, 涉及到整体与局部能量的最小点问题. 虽然现有的程序都有内在的能量优化搜索方式, 但实际应用时往往有各自的最佳实用范围, 同时也有各自的局限性. 模拟退火、线性搜索、共轭梯度等方法局部搜索能力强, 但全局搜索能力弱, 且在原子数规模大时, 运行时间会相当长^[5-7]. 遗传算法具有较强的全局搜索能力, 但容易出现早熟现象^[8]. 本文将克隆选择算法^[9]、遗传算法和模拟退火的思想综合应用到碳纳米管几何结构的能量优化中, 缩短了优化时间, 并得到了质量较高的碳纳米管几何优化结构.

^{*} 国家自然科学基金(批准号 60036010)资助的课题.

2. 碳纳米管的势能计算模型

在分子动力学中,原子间的位置、速度、加速度等模拟参数使用经典力学方程来求解,而原子间的相互作用力是势能函数的一阶导数.势函数的准确性决定了分子动力学模拟结果的准确程度.

在碳纳米管的分子动力学模拟中,常用 Tersoff-Brenne(TB)势函数^[10]计算其原子间势能. TB 势函数的准确性和可靠性已在碳纳米管的性质计算中得到验证^[11,12]. TB 势函数由 Tersoff(1988)提出,并由 Brenne(1990)修改而成,主要用于描述碳氢等原子组成的小分子之间的化学键作用势.该势函数的简化形式如下:

$$V_b = \sum_i^k \sum_{j>i}^k [V_R(r) - \bar{b}_{ij} V_A(r)], \quad (2)$$

式中 r 为原子 i 和原子 j 之间的距离. $V_R(r)$, $V_A(r)$ 分别是成键原子对的排斥势和引力势,可表示为

$$V_R(r) = f_c(r) \frac{D^{(e)}}{S-1} e^{-\sqrt{2S}\beta(r-R^{(e)})}, \quad (3)$$

$$V_A(r) = f_c(r) \frac{D^{(e)}}{S-1} e^{-\sqrt{2S}\beta(r-R^{(e)})}, \quad (4)$$

式中 $D^{(e)}$ 为势阱深度, $R^{(e)}$ 为原子间平均距离, S 和 β 是拟合参数.对于碳原子, Brenner 根据局域密度函数计算给出了相应参数值,见文献 [10]. $f_c(r)$ 为截断函数,用来限制共价键相互作用的距离,它的值由 1 衰减到 0. \bar{b}_{ij} 为原子间的经验键序函数,它表示 i 原子和 j 原子的局部环境对两原子形成的共价键的多体作用.对于多原子系统,用(2)式即可计算系统的总势能.

3. 混合遗传算法

3.1. 三种优化算法的比较

人体免疫系统的主要目标是保护人体免受外部组织或有害物质的侵入,免疫系统能够区分正常细胞和对人体有害的细胞(癌细胞),能够引起自适应免疫反应且能被免疫系统识别的细胞称为抗原;在免疫反应中起主要角色作用的细胞称为抗体,抗体只对某一特定的抗原起免疫反应作用.当外部抗原侵入后,能够较好地识别抗原的抗体将被克隆而增生扩散,这一过程称为克隆选择原理.克隆选择算法就是在模拟生物进化的人工免疫系统中发展出来的

一种算法.克隆选择算法可以用来解决复杂问题,该算法在机器学习、模式识别及全局优化问题上已经获得应用^[9].克隆选择算法的步骤为

1) 针对问题的模型,产生一个抗体候选集 P_t , P_t 由两部分组成,保留单元 P_r 和记忆单元 M .

2) 根据抗体亲和力的大小,从候选集 P_t 中选择 k 个最好的个体,组成子群体 P_k .

3) 对子群体 P_k 进行克隆(复制),克隆生成的群体为 C .每个个体的克隆次数与其亲和力的大小成正比.

4) 对克隆群体 C 中的每个个体实施高频变异,高频变异率反比于抗体对抗原的亲和力大小.从而产生高频变异抗体群体 C^* .

5) 从 C^* 中选择改善后的 d 个抗体个体加入记忆群体 M , 构成候选集 P .

6) 从候选集 P 中选择 $|P_t|$ 个个体组成新的抗体候选集 P_{t+1} .计算当前代与上一代的适应度差值,若小于设定值则停止进化,否则回到 2),继续进化.

克隆选择算法的特点是以克隆和变异为主要操作,优秀的个体被复制的次数多,而变异的概率低,这样可保证父代的特征被子代完全继承.但其缺点是函数定义困难,可扩展性不高.

遗传算法是从代表问题可能潜在解集的一个种群开始的,种群由基因编码的一定数目的个体组成.首先需要实现从表现型到基因型的映射即编码工作.编码通常采用二进制编码或实数编码.初代种群产生之后,按照适者生存和优胜劣汰的原理,逐代演化产生越来越好的近似解.在每一代,根据群体中个体的适应度大小选择个体,并借助于自然遗传学的遗传算子进行交叉和变异,产生出代表新的解集的种群^[13-15].

遗传算法具有较强的全局优化能力,但是在优化中存在着容易早熟而过早收敛的问题,遗传算法在运行早期个体差异较大,当采用经典的选择方式选择后,后代产生个数与个体适应度大小成正比,因此在早期使个别好的个体后代充斥整个种群,造成早熟,在遗传算法后期,适应度趋于一致,优秀的个体在产生后代时,优势不明显,从而使整个种群进化停滞不前.因此,单纯采用遗传算法进行优化,存在着优化时间长,优化质量低的问题.

模拟退火算法是基于固体退火过程的研究而提出,这种算法模拟固体的退火过程.对于组合优化问

题的一个解 i 及其目标函数 $f(i)$, 分别与固体的一个微观状态 i 及其能量 E_i 等价. 令随算法进程递减其值的控制参数 t 担当固体退火过程中的温度 T 的角色, 则对于控制参数 t 的每一取值, 算法持续进行“产生新解-判断-接受/舍弃”的迭代过程, 对应着固体在某一恒定温度下趋于热平衡的过程, 也就是执行了一次 Metropolis 算法. 由于固体退火必须“徐徐”降温, 才能使固体在每一温度下都达到热平衡, 最终趋于能量最小的基态, 因此, 控制参数的值也必须缓慢衰减, 才能确保模拟退火算法最终趋于组合优化问题的整体最优解集^[16,17].

模拟退火法具有较强的局部搜索能力, 遗传算法具有较好的全局搜索能力, 克隆选择算法可以搜索问题的多个极值, 如果将三者结合, 则可以明显提高算法的运行效率和求解质量. 在构成混合遗传算法时, 尽量保持原有遗传算法的编码, 利用原有算法全局搜索的优点, 并改进遗传算子. 遗传算法中的交叉算子、变异算子的作用是宏观搜索, 处理的是大范围搜索问题, 而克隆选择算法和模拟退火算法的作用是处理加速搜索和防止遗传陷入早熟收敛.

在上述三种算法的基础上, 提出了本文的基于克隆选择的混合遗传算法. 其整体算法以遗传算法为主, 首先初始化群体, 然后进行实数编码, 计算适应度, 根据适应度选择较好的个体, 进行遗传交叉和变异, 接着进行克隆、高频变异, 以增强个体的多样性. 在克隆的基础上, 加入模拟退火机理, 对个体进行重新判断, 从而获得较优的个体. 重复上述遗传过程, 直到达到误差要求.

3.2. 克隆选择的混合遗传算法的寻优过程

克隆选择的混合遗传算法在遗传算法的基础上, 加入克隆选择和模拟退火机理, 使算法的进化速度提高, 其算法步骤为:

步骤 1 初始化. 随机生成一个初始群体 P_1 , 个体数为 N , 长度为 L , L 为待优化函数的自变量个数, 染色体个体采用实数编码.

步骤 2 计算个体适应度的大小, 采用基于适应度的排序选择方法, 从群体 P_1 中选择 N 个优良的个体组成下一代预选群体 P_{a1} , 适应度高的个体被复制的次数多.

步骤 3 遗传交叉操作, 对下一代预选群体 P_{a1} 中的个体进行配对交叉, 生成交叉群体 P_{a2} .

步骤 4 遗传变异操作, 对交叉群体 P_{a2} 中的个

体进行变异, 生成变异群体 P_{a3} .

步骤 5 以群体 P_{a3} 作为克隆操作的基础群体, 计算群体 P_{a3} 中抗体个体(染色体)亲和力(适应度)的大小, 从 P_{a3} 中选择 k 个最好的抗体个体组成子群体 C_1 ($k < N$)

步骤 6 克隆操作:

步骤 6.1. 对子群体 C_1 按亲和力大小进行降序排序, 然后克隆(复制)个体, 每个个体的克隆次数为 $C_3(i) = \text{round}(\eta \cdot N/i)$, η 为系数, i 为个体亲和力序号. 克隆生成的群体为 C_2 .

步骤 6.2. 对群体 C_2 中的每个个体实施高频变异, 变异函数为

$$C_3(i) = C_2(i) + \delta \times \text{rand}, \quad (5)$$

其中 $\delta = \alpha e^{-\beta \cdot f(i)}$, $\text{rand} \in [-1, 1]$, α, β 为系数, f 为亲和力函数. 高频变异率反比于亲和力大小, 即亲和力大的个体其变异率小, 从而产生高频变异抗体群体 C_3 .

步骤 7 二次选择: 从群体 C_3 中选择 k 个最好的抗体个体加入到群体 P_{a3} .

步骤 8 随机产生 d 个抗体个体加入 P_{a3} , 构成候选集 CP.

步骤 9 从候选集 CP 中选择 N 个个体组成群体 P_{a4} .

步骤 10 模拟退火: 对群体 P_{a4} 进行模拟退火, 生成群体 P_{t+1} .

步骤 11 计算当前代 P_{t+1} 与上一代 P_t 的适应度差值, 若小于设定值则停止进化, 否则回到步骤 2 继续进化.

遗传算法是一种有性繁殖的进化算法, 有性繁殖的优越性在于遗传和变异大大增强了物种对环境的适应能力. 克隆选择算法是一种无性繁殖的免疫进化算法, 由于物种的无性繁殖能够克隆自己, 不需要基因的重新组合, 因而比有性繁殖的物种繁殖得更快, 并且有益的基因能够代代相传下去. 在遗传算法中加入克隆操作, 可以提高群体的多样性和加快收敛速度. 将无性生殖和有性生殖结合, 实现物种的优胜劣汰.

4. 结果和讨论

4.1. 标准优化函数的测试结果

为了验证基于克隆选择的混合遗传算法对全局

优化问题的优化性能,本文使用 5 个不同类型的标准优化函数对该算法进行测试.其中,标准遗传算法采用文献[15]中提供的程序,遗传操作使用算术交叉和非一致变异;基本克隆选择算法的程序根据文献[9]中提出的算法思想而编写,其中抗体与抗原间的亲和力用函数值来表示,克隆参数 $k=10$, $d=10$, $\alpha=1$, $\beta=20$, $\eta=0.5$;混合遗传算法中遗传操作采

用算术交叉和非一致变异,克隆参数与基本克隆选择算法相同;模拟退火的冷却参数表中控制参数 t 的初值为 300,控制参数 t 的衰减函数为 $t_{k+1} = t_k \alpha^{\text{gen}}$, gen 为当前代,控制参数 t 的终值为 10^{-10} .三种算法的群体规模 N 均为 40,个体采用实数编码,最大进化代数为 500,每种算法的测试重复 20 次.表 1 给出了 5 个标准优化测试函数.

表 1 标准优化测试函数

序号	函数表达式	参数范围	极大值或极小值	极值点
F_1	$f_1(x) = \sum_{i=1}^3 x_i^2$	$-512 \leq x_i \leq 512$	0	(0 0 0)
F_2	$f_2(x, y) = (4 - 2.1x^2 + x^4/3)x^2 + xy + (-4 + 4y^2)y^2$	$x > -100, y < 100$	-1.031628	(-0.0898 0.7126) (0.0898, -0.7126)
F_3	$f_3(x, y) = 0.5 - \frac{\sin^2 \sqrt{x^2 + y^2} - 0.5}{(1 + 0.001(x^2 + y^2))^2}$	$-100 < x, y < 100$	1.0	(0 0)
F_4	$f_4(x_i) = 0.02 + \frac{1}{\sum_{j=1}^{25} j + \sum_{i=1}^2 (x_i - a_{ij})^2}$	$-65536 < x_i < 65536$	1.02	很多
F_5	$f_5(x_i) = \sum_{i=1}^6 (x_i^2/4000) - \prod_{i=1}^6 \cos(x_i/\sqrt{i}) + 1$	$-512 \leq x_i \leq 512$	0	很多

在表 1 中,函数 F_1 是一个简单的平方求和函数,有 1 个极小值点(0,0,0),极小值为 0;函数 F_2 有 6 个局部最小点,其中(-0.0898, 0.7126)和(0.0898, -0.7126)为全局最小点,极小值为 -1.031628;函数 F_3 在其定义域内有无限个局部极大点,其中只有 1 个全局最大点(0,0),最大值为 1,但由于自变量的取值范围大,且最大值峰周围有一圈脊,它们的取值均为 0.990283,因此很容易使算法停滞在此局部极大点;函数 F_4 有多个局部极大点,通常其函数值大于 1 即可认为已收敛;函数 F_5 为 Griewank 函数^[14],该函数是一个可扩展的、多变量的非线性复杂函数.用标准遗传算法(GA)克隆选择

算法(CA)及克隆选择的混合遗传算法(CGASA)分别对五个测试函数求解 20 次得到的平均结果见表 2.

比较表 2 中三种算法对五个测试函数求解的执行结果,可以看出,克隆选择的混合遗传算法的平均迭代次数少于标准遗传算法和克隆选择算法,只有 F_2 函数例外.另外,克隆选择的混合遗传算法其收敛率及最优解的质量均高于标准遗传算法和克隆选择算法,对 5 个测试函数的优化均找到了极大值或极小值.说明本文提出的混合遗传算法具有很强的寻优能力,能较好地解决复杂函数的全局优化问题,优化的稳定性也有显著提高.

表 2 不同算法对五个测试函数求解 20 次得到的平均结果

函数	平均迭代次数			收敛率/%			最优解		
	GA	CA	CGASA	GA	CA	CGASA	GA	CA	CGASA
F_1	475.4	165	65.3	40	100	100	0	0	0
F_2	498	94	197.8	100	60	100	-1.031628	-1.031624	-1.031628
F_3	475.4	165	65.3	75	80	100	0.990283	0.990283	1.0
F_4	500	207.6	198.3	10	50	75	1.02	1.02	1.02
F_5	500	-	115.2	15	0	100	0.0172	-	0

注: - 表示进化 500 代后,该算法仍无法收敛到最优解.

4.2. 碳纳米管结构的优化结果

在温度为 300K 下,应用克隆选择的混合遗传算

法对结构为(n, n)的单壁碳纳米管的几何结构进行了能量最小化处理.分子动力学的势函数模型采用 TB 势函数,原子坐标采用笛卡尔表示形式,对于具

有 m 个原子的系统,其坐标表示为

$$\mathcal{N} = \{x_1, x_2, \dots, x_m\}. \quad (6)$$

由于每个原子有 3 个坐标变量,因而系统共有 $3m$ 个变量.对所有变量参数采用实数编码,以初始值为基础,在区间 $[-0.1r_0, 0.1r_0]$ 内变化,其中 r_0 为碳原子之间的最近邻距离,其值为 0.141nm .

图 1 给出了碳纳米管优化前后的几何结构.从图 1 可以看出,碳纳米管优化前后的几何结构略有不同,初始结构的原子位置排列整齐,各原子位置键角和键长相同,其中键角为 119.63° ,键长为 0.142nm .而经过能量优化后的碳纳米管的几何结构在端头和管内有所不同,原因是端头原子的局部环境和管内原子的局部环境有很大的不同.在管内的碳原子都与其他 3 个碳原子形成价键,1 个在相同的六边形环上,另 2 个在相邻的环上;在开口端头上的碳原子只和 2 个碳原子成键,1 个在相同的环上,另 1 个在相邻的环上.由于原子在不同位置的局部环境差异,导致开口端和管内碳原子之间共价键的键长和键角有所差别.经统计计算,开口端的平键长为 0.1375nm ,斜键长为 0.1419nm ,平均键角为 122.68° ;管内的平键长为 0.1426nm ,斜键长为 0.1423nm ,平均键角为 120.35° ;图 2 给出了展开的碳纳米管的原子结构示意图, θ 为键角, r_1 为平键长, r_2 为斜键长.从模拟结果给出的几何结构示意图上可以看出,碳纳米管在开口端略微向外膨胀.

为了比较不同优化算法在分子动力学模拟中对碳纳米管原子结构的优化过程.本文采用共轭梯度法(CGA)、模拟退火算法(SA)、遗传算法和克隆选择的混合遗传算法分别对 (n, n) 型的碳纳米管几何结构进行了能量优化,图 3 为各算法优化所需 CPU 时间随原子数的变化曲线.模拟的计算机为 P III 800,内存为 256MB .图 3 的曲线说明,在原子数相同的情况下,CGASA、GA、SA 三者的优化时间基本相同,在原子数少于 500 时,共轭梯度法的优化时间与其他算法基本相同,随着系统原子数的增加,共轭梯度法执行时间快速增长,使系统优化时间变得更长.CGASA 的优化时间则随着原子数的增加呈线性增长.

表 3 给出了各种算法执行的 CPU 时间和优化能量随原子数变化的情况,表 3 中数据说明,用 CGASA 对碳纳米管结构进行优化,优化的能量最小值优于共轭梯度法的结果,也比遗传算法和模拟退火算法的质量高,说明 CGASA 的全局搜索能力强.

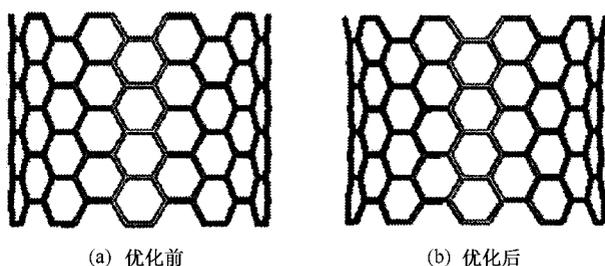


图 1 碳纳米管优化前后的结构示意图

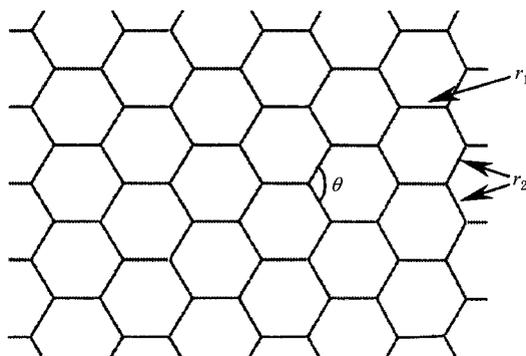


图 2 碳纳米管几何结构展开示意图

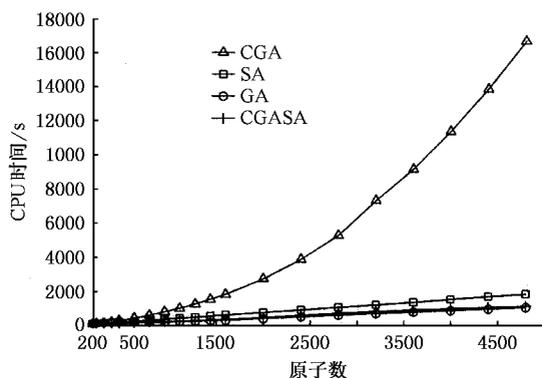


图 3 各算法优化所需 CPU 时间随原子数的变化曲线

表 3 的数据同时说明,随着原子数的增加,局部极值的个数呈指数增加,共轭梯度法、模拟退火算法和遗传算法极易陷入局部最优,容易早熟或收敛时间过长,而 CGASA 则始终能找到最优值.在碳纳米管原子数从 400 到 4800 增大了 12 倍时,相应的共轭梯度法执行时间增大了 87 倍,而 CGASA 的执行时间只增加了 10 倍左右.

在模拟实验中发现,自变量取值范围变大时,遗传算法出现了早熟或陷入局部最小点的情况,使用 CGASA 则不会出现上述问题,始终能找到全局能量

最小值点.在变量取值范围较小时,例如在 $[-0.03, 0.03]$ 区间,遗传算法找到的最优点的质量仍然比 CGASA 差,其最优点的能量还是略高于后者.与模拟退火法比较,也出现了同样情况,其最优点的质量比混合遗传算法的差.两者所需的遗传代数也不同,

对相同结构和原子数的碳纳米管,使用遗传算法需要 500 次世代才能达到能量最小,而使用 CGASA 只需 25 次世代即可达到能量最小,而且其解的质量高于遗传算法.与模拟退火算法比较,CGASA 得到的势能值更小,而两者执行时间基本相同.

表 3 各种算法的执行时间随原子数规模的变化

拓扑结构	原子数	CGA		SA		GA		GASA	
		<i>T/s</i>	<i>E/eV</i>	<i>T/s</i>	<i>E/eV</i>	<i>T/s</i>	<i>E/eV</i>	<i>T/s</i>	<i>E/eV</i>
(10,10)	400	172.21	-2851.08	149.36	-2851.53	129.15	-2849.81	105.21	-2852.34
(10,10)	800	597.35	-5802.37	284.58	-5802.78	185.05	-5797.62	177.57	-5803.04
(10,10)	1600	1827.14	-11598.77	608.71	-11600.23	305.16	-11594.60	330.68	-11606.09
(10,10)	3200	7528.63	-23448.26	1198.90	-23496.36	693.95	-23492.13	819.32	-23507.24
(10,10)	4800	16687.90	-35217.65	1840.31	-35290.75	1046.82	-35283.84	1123.02	-35310.03

表 4 给出了 CGASA 算法的运行时间和优化能量随种群规模的变化数据,表中数据说明随着种群规模的增大,CGASA 的运行时间也随之线性增长,但得到的势能优化结果是相同的.因此,在保证解的质量的情况下,选较小的种群规模,可以获得较快的优化速度和相同的优化质量.

表 4 CGASA 运行时间随种群规模的变化(320 个原子)

种群规模	遗传世代数	<i>T/s</i>	<i>E/eV</i>
10	25	64.26	-2281.87
20	25	101.53	-2281.87
40	25	205.59	-2281.87
60	25	253.36	-2281.87
80	25	323.92	-2281.87

5. 结 论

碳纳米管的几何结构优化是典型的多变量全局优化问题,其过程是一个能量弛豫过程.现有的优化方法主要采用共轭梯度法或模拟退火法,由于共轭梯度法和模拟退火法属于局部优化方法,优化的质量不高,同时优化时间很长;单纯采用遗传算法,存在着优化时间过长,易早熟的问题.本文结合克隆选择算法、遗传算法和模拟退火算法的特点,将克隆选择和模拟退火的思想融入到遗传算法中,加快了搜索时间,提高了优化效率和优化质量.经实际测量,其优化时间随原子数的增加呈线性增长.本文提出的克隆选择的混合遗传算法可以有效地解决碳纳米管几何结构优化的问题.如果应用于多壁碳纳米管,则其势函数需计入范德瓦耳斯力的作用.该算法也可应用于其他物质分子结构的优化.

- [1] Iijima S 1991 *Nature* **354** 56
- [2] Krishnan A, Dujardin E, Ebbesen T W *et al* 1998 *Phys. Rev. B* **58** 14013
- [3] Pan Z W, Au F C K, Lai H L *et al* 2001 *J. Phys. Chem. B* **105** 1519
- [4] Zhang Z X, Hou S M, Zhao X Y *et al* 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 434 (in Chinese) [张兆祥、侯士敏、赵兴钰等 2002 物理学报 **51** 434]
- [5] Rafii-Tabar H 2004 *Phys. Rep.* **390** 235
- [6] White R P, Niesse J A and Mayne H R 1998 *J. Chem. Phys.* **108** 2208
- [7] Sayle D C and Johnston R L 2003 *Curr. Opin. Solid State Mater. Sci.* **7** 3
- [8] Zacharias C R, Lemes M R and Pino A D 1998 *J. Mol. Stru: THEOCHEM* **430** 29
- [9] de Castro L N and Von Zuben F J 2002 *IEEE Trans. Evol. Comput.* **6** 239
- [10] Brenner D W 1990 *Phys. Rev. B* **42** 9458
- [11] Wang Y, Wang X X, Ni X G *et al* 2003 *Acta Phys. Sin.* **52** 3120 (in Chinese) [王宇、王秀喜、倪向贵等 2003 物理学报 **52** 3120]
- [12] Cornwell C F and Wille L T 1997 *Solid State Commun.* **101** 555

- [13] Goldberg D E 1989 *Genetic algorithms in search , optimization and machine learning* (Boston :Addison-Wesley Publishing Co.) p59
- [14] Kristinsson K and Dumont G A 1992 *IEEE Trans . Syst . Man , and Cybern .* **22** 1033
- [15] Houck C R , Joines J A and Kay M G 1996 *Computers Ops . Res .* **23** 587
- [16] Lin F T , Kao C Y and Hsu C C 1993 *IEEE Trans . Syst . Man , and Cybern .* **23** 1752
- [17] Li S Y , Du Z H , Wu M Y *et al* 2001 *Acta Phys . Sin .* **50** 1260 [李树有、都志辉、吴梦月等 2001 物理学报 **50** 1260]

Study of structure optimization of carbon nanotubes using hybrid genetic algorithm based on clonal selection principle^{*}

Bao Wen-Xing^{1,2)} Zhu Chang-Chun¹⁾ Cui Wan-Zhao¹⁾

¹⁾*School of Electronics and Information Engineering , Xi 'an Jiaotong University ,Xi 'an 710049 ,China)*

²⁾*Department of Computer Science ,the Second North-West University for Minorities ,Yinchuan 750021 ,China)*

(Received 30 November 2004 ; revised manuscript received 28 March 2005)

Abstract

Focusing on the problem of carbon nanotube structure optimization by molecule dynamics simulation , a novel algorithm is proposed which combines the genetic algorithm with simulated annealing and the clone select algorithm. Test results of five typical functions show that this algorithm has high stability and gives good global optimization. Applied to structure optimization of carbon nanotubes , it can accelerate the process of energy optimization and improve the quality of structure optimization. The simulation results show that the optimizing time increases linearly with the number of atoms. The time of structure optimization is reduced one order of magnitude compared with the conjugate gradient methods.

Keywords : molecular dynamics , carbon nanotube , energy optimization , genetic algorithm , clone select algorithm

PACC : 6185 , 6148

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 60036010).