

4P110 遺伝的アルゴリズムによるベンゼンクラスターの構造最適化

(北大院理) ○竹内 浩

【序】 原子や分子からなるクラスターには多くの安定構造が存在するため、それらの中から最安定構造を決定するのは困難である。このような複雑なエネルギー景観を持つ系における最適解検索方法の開発は、これがたんに質や結晶の構造を推定する際にも応用することができるので、重要である。本研究では、遺伝的アルゴリズムにrestart operator¹⁾を導入した最適解検索法を開発した。このオペレーターにはいくつか手法が提案されているが、本研究での特徴は、これに伴うパラメーターを事前に設定しないで、自己適応性を持たせている点である。

本研究で扱うベンゼンクラスター(C₆H₆)_nは、芳香族環が形成する基本的なクラスターであるため、その構造は実験や計算により研究されている。計算による研究²⁻⁴⁾では、Williamsのexp-6-1ポテンシャルを用いてnが15まで構造最適化が行われている。本研究では、上記のポテンシャルを用いて、nが20までのクラスターについて最安定構造を計算し、文献値との比較により本研究で開発した最適解検索法について検討した。

【計算方法】 クラスターにおける最安定構造の検索は以下の手順で行った。

- 1) ランダムにクラスターの初期配置を1個生成し、その構造を最適化する。この個体をtemplateにして、初期集団を生成する。
- 2) 得られたtemplate中のベンゼンiとjの間のポテンシャルエネルギー V_{ij} から $V(i) = \sum_{j \neq i} V_{ij}$ を計算し、その値が大きい順にR個(最初はR=1)のベンゼンの配置をランダムに変化させ、構造最適化を行う。
- 3) 最適化後の個体が新しい個体であれば、それを検索集団に加える。そうでないときには、Rを一つ増加させて、ステップ2に戻る。検索集団の個体数が予め設定した値 n_p になるまでステップ2と3を繰り返す。
- 4) 得られた集団から、最適個体とそれ以外の2個体を選ぶ。それらからparent-centric recombination operator⁵⁾により新しい個体を2個生成し、その構造を最適化する。世代交代は、generalized generation gapモデル⁵⁾で行う。
- 5) 集団が収束するまで、または、最適個体に改善が見られなくなるまで、ステップ4を繰り返す。
- 6) 最適個体をもとに、リスタート後の集団のtemplateを生成する。最適個体でのV(i)を計算し、ステップ2と3を繰り返す。これにより得られた n_p 個の個体の中で最適な個体をリスタート後の集団のtemplateとする。
- 7) ステップ2に戻る。

集団の個体数 n_p をnとし、各クラスターサイズで計算を10から20回実行した。得られた最適個体のエネルギーを表1に示す。

【結果と考察】(C₆H₆)₁₁については、文献4よりエネルギーが1.4 kJ mol⁻¹低い構造が得られた。また、第二安定構造として、エネルギーの値が-253.0 kJ mol⁻¹である構造も新たに求めることができた。(C₆H₆)₁₄と(C₆H₆)₁₅については、それぞれ文献値より8.5と17.6 kJ mol⁻¹エネルギー

が低い構造を得ることができた。これらの結果から、今回開発した最適解探索法が有効であることがわかった。

図1に $(C_6H_6)_{20}$ について最適個体のエネルギーの世代による変化を示す。21世代が終了した後に restart operator を作用させることにより、34世代目で最適解が得られるようになったことがわかる。図2に3種類のクラスターの最安定構造を示す。 $(C_6H_6)_{17}$ の中で $(C_6H_6)_{13}$ から増えた4個のベンゼンの配置が、 $(C_6H_6)_{20}$ の中で増えた7個のベンゼンの配置に全て含まれていない。これは、 n が17から18に変化した時にクラスターの最安定構造に不連続な変化があるためである。これは、Lennard-Jones クラスターでは見られない特徴である。

表1 $(C_6H_6)_n$ のポテンシャルエネルギー
 $V / \text{kJ mol}^{-1}$

n	ref. 2	ref. 3	ref. 4	本研究
6		-106.4	-106.5	-106.5
7		-134.1	-134.1	-134.1
8		-161.4	-161.7	-161.7
9		-190.8	-191.5	-191.5
10		-221.5	-221.5	-221.5
11		-251.8	-252.2	-253.6
12		-286.3	-286.3	-286.3
13	-325.3	-324.6	-324.7	-325.3
14		-347.5		-356.0
15		-371.3		-388.9
16				-421.6
17				-454.6
18				-488.3
19				-526.4
20				-561.4

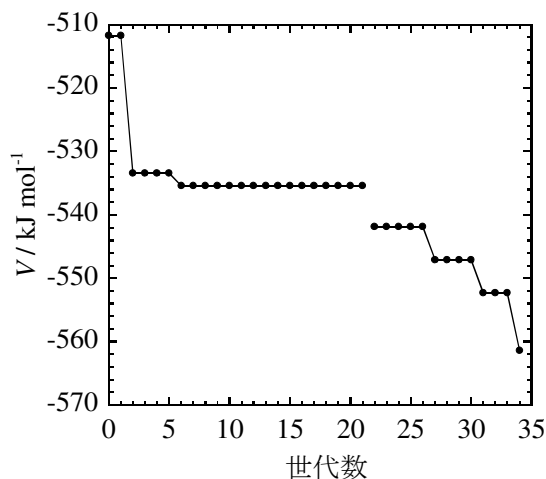


図1 $(C_6H_6)_{20}$ の最適個体のエネルギーの変化

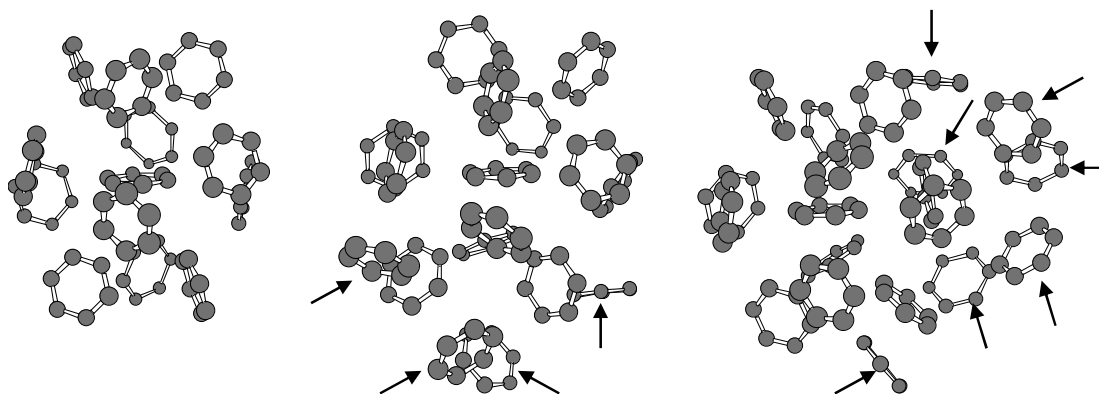


図2 ベンゼンクラスターの最安定構造 ($n = 13, 17, 20$). $(C_6H_6)_{13}$ と比べて増えたベンゼンを矢印で示している。

【参考論文】 1) F. Herrera and M. Lozano, *Applied Intelligence*, 13, 187 (2000). 2) D. C. Easter, *J. Phys. Chem. A*, 107, 2148 (2003). 3) W. J. Pullan, *J. Chem. Inf. Comput. Sci.*, 37, 1189 (1997). 4) R. P. White, J. A. Niesse and H. R. Mayne, *J. Chem. Phys.*, 108, 2208 (1998). 5) K. Deb, A. Anand and D. Joshi, *Evolutionary Computation*, 10, 371 (2002).