

§7 МАТЕМАТИЧЕСКОЕ И ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ НОВЫХ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ

Бураков С.В., Залого А.Н., Панькин С.И., Семенкин Е.С., Якимов И.С. —

ПРИМЕНЕНИЕ САМОКОНФИГУРИРУЕМОГО ГЕНЕТИЧЕСКОГО АЛГОРИТМА ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ АТОМНОЙ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ ХИМИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ ПО ДАННЫМ РЕНТГЕНОВСКОЙ ДИФРАКЦИИ

Аннотация: Предметом исследования в данной работе является оценка возможности и степени эффективности применения самоконфигурирующегося генетического алгоритма глобальной оптимизации (СГА) для автоматизации задачи определения атомной кристаллической структуры новых веществ по данным порошковой рентгеновской дифракции. Предложенный вариант алгоритма СГА исследован на задаче определения известной кристаллической структуры химического соединения Ba_2CrO_4 , в которой требовалось найти расположение семи независимых атомов в элементарной кристаллической ячейке. Для анализа эффективности и определения частоты сходимости структурных моделей к истинной структуре этого вещества в процессе эволюционного поиска было сделано несколько десятков запусков СГА с различными размерами популяций структурных моделей и типами генетических операций. Суть метода самоконфигурирования состоит в том, что подбор оптимальных генетических операторов селекции, скрещивания и мутации из предложенного множества их возможных вариантов производится самим алгоритмом СГА в ходе решения задачи. Вероятности для операторов быть выбранными для генерации очередного поколения популяции структурных моделей адаптируются, исходя из успешности эволюции с помощью этих операторов на предыдущем поколении. Это приводит к автоматическому выбору наилучших операторов, обеспечивающих сходимость структурных моделей к истинной кристаллической структуре. Одной из основных проблем, препятствующих применению стохастических эволюционных генетических алгоритмов для структурного анализа, является необходимость нетривиального эмпирического подбора генетических операторов. Применение самоконфигурируемого генетического алгоритма для автоматизации выбора оптимальных генетических операторов в за-

даче моделирования атомной кристаллической структуры химических соединений по данным рентгеновской дифракции предложено впервые. При определении кристаллической структуры Va_2CrO_4 по СГА достигнута частота сходимости к истинной структуре этого вещества 80%. Это создает возможность разработки автоматизированного эволюционного генетического алгоритма структурного анализа по рентгенодифракционным данным.

Ключевые слова: эволюционные алгоритмы, генетические алгоритмы, самоконфигурация генетических алгоритмов, кристаллическая структура, рентгеновская порошковая дифракция, полнопрофильный анализ, определение кристаллической структуры, самоконфигурация, дифрактограмма, генетические операторы

Введение

Атомная кристаллическая структура вещества определяет многие физические и химические свойства материалов и представляет фундаментальное знание во многих областях физики, химии, материаловедения и других наук. Поэтому, очевидна необходимость развития новых методов получения исчерпывающей информации о структуре новых веществ и материалов. Это особенно актуально для моделирования структуры многочисленных веществ и материалов, получаемых в поликристаллической форме, где основным экспериментальным инструментом служат еще недостаточно развитые методы рентгеновской порошковой дифракции.

Главной задачей структурного исследования является определение координат атомов в элементарной кристаллической ячейке вещества. Для ее решения применительно к поликристаллам в последнее время интенсивно развиваются рентгенодифракционные методы структурного анализа в прямом пространстве [1, 2], основанные на расчете дифрактограммы вещества из моделируемых вариантов его кристаллической структуры. С математической точки зрения имеет место задача оптимизации со следующими входными данными: экспериментальная дифрактограмма, химическая формула вещества, параметры элементарной ячейки (размеры осей и углов между ними), пространственная группа симметрии. Требуется найти координаты атомов в кристаллической ячейке, которые обеспечивают соответствие расчетной дифрактограммы вещества с экспериментальной.

Для решения такой задачи используются оптимизационные процедуры, основанные на стохастических алгоритмах или методах локального поиска [3, 4]. Генетический алгоритм, как метод решения сложных оптимизационных задач, также используется для ее решения [5, 6]. Во многих работах [1, 2, 7, 8] отмечается перспективность развития именно генетических алгоритмов для структурного анализа.

Основной проблемой при использовании эволюционных методов, в частности – генетического алгоритма, является необходимость точного выбора настроек алгоритма и определения его параметров для каждой новой задачи. Возможно значительное число вариантов применения алгоритма, причем ошибка при адаптации алгоритма под задачу может привести к тому, что задача вообще не будет решена за разумное время.

Даже применение хорошо обоснованных эвристик или распараллеливание алгоритма [9] может только смягчить проблему, но не снимает ее окончательно. Выбор настроек и параметров для каждой задачи эмпирически или интуитивно требует чрезвычайно большого времени, что не позволяет автоматизировать рентгеноструктурный анализ. Таким образом, перед исследователями стоит задача автоматизации настройки генетического алгоритма под решаемую задачу моделирования атомной структуры химических соединений. В данной статье предлагается использовать для этого самоконфигурируемый генетический алгоритм [10], прошедший апробацию на сложных прикладных задачах [11-13] и рекомендованный для практического использования.

Описание метода самоконфигурирования генетических алгоритмов

Генетические алгоритмы (ГА) - адаптивные методы поиска, которые в последнее время часто используются для решения задач оптимизации функций в различных областях науки и техники [14]. ГА представляют собой стохастические процедуры обработки информации, имитирующие процессы эволюции биологических организмов: популяции развиваются в течении нескольких поколений, подчиняясь законам естественного отбора. В природе индивиды осуществляют адаптацию (приспосабливаются) к условиям окружающей среды и те особи, которые наиболее приспособлены, будут иметь относительно больше шансов воспроизвести потомков и передать по наследству свой генетический материал. Слабо приспособленные особи либо совсем не произведут потомства, либо их потомство будет очень немногочисленным. Это означает, что гены от высоко адаптированных или приспособленных особей будут распространяться в увеличивающемся количестве потомков на каждом последующем поколении, что должно привести как к увеличению общей пригодности популяции, так и к появлению высоко пригодных индивидов, которые и будут выбраны в качестве решения исходной задачи оптимизации.

Основные этапы ГА выглядят так:

1. Создать начальную популяцию случайным образом.
2. Оценить пригодность индивидов текущей популяции.
3. Если выполнен критерий останова, вывести наилучшего индивида и его оценку пригодности в качестве ответа для решаемой задачи.
4. С помощью выбранного оператора селекции отобрать кандидатов в родители в соответствии с оценкой их пригодности.
5. С помощью выбранного оператора рекомбинации (скрещивания) генерировать потомков.
6. С помощью выбранного оператора мутации изменить гены полученных потомков.
7. С помощью выбранного оператора замещения сформировать из родителей и потомков популяцию следующего поколения.
8. Перейти к шагу 2.

Поскольку отбирать особей, скрещивать и мутировать их можно множеством различных способов, приходится затрачивать ресурсы для выбора эффективных видов

операторов селекции, скрещивания, мутации и замещения. Суть метода самоконфигурирования [10] состоит в том, что подбор оптимальных операторов производится самим алгоритмом в ходе решения задачи. Вероятности для операторов быть выбранными для порождения очередного потомка адаптируются, исходя из успешности этих операторов на последнем поколении, независимо от предыдущих результатов работы. Вероятность быть задействованным на следующем поколении у лучшего типа оператора повышается, у остальных – снижается, что приводит к автоматическому выбору наилучшего типа оператора, получающего наибольшую вероятность его использования.

Работа самоконфигурируемого генетического алгоритма безусловной оптимизации, подразумевающего выбор каждого вида оператора в отдельности, может быть описана следующим образом.

1. При старте алгоритма выбор того или иного варианта для каждого вида оператора (селекция, скрещивание, мутация) являются равновероятным: $p=1/z_i$, $i=1, 2, \dots, c$, где z_i – это число всевозможных операторов i -го вида.
2. На каждом поколении оценка эффективности применения того или иного варианта операторов ГА производится по средней пригодности индивидов получаемых с его помощью: $average\ fitness_{ij} = f_{ij}/n_{ij}$, $i=1, 2, \dots, z_i$, $j=1, 2, \dots, c$, где $average\ fitness_{ij}$ – средняя пригодность потомков, порожденных с применением i -го варианта j -го оператора; f_{ij} – сумма пригодностей индивидов, полученных с помощью i -го варианта j -го оператора; n_{ij} – количество индивидов, полученных с применением i -го варианта j -го оператора; z_i – число всевозможных операторов j -го вида, c – число операторов.
3. Распределение вероятностей выбора типа оператора для генерирования следующего поколения смещается в пользу более эффективных вариантов операторов за счет менее эффективных. При этом вероятность наиболее эффективного варианта оператора увеличивается на $((z_i-1) \cdot K)/(z_i \cdot N)$, а вероятности всех остальных уменьшаются на $K/(z_i \cdot N)$, где N – число поколений, K – константа, обычно равная 2. В то же время вероятность ни одного из вариантов не может стать равной нулю (ниже заданного порога), сумма всех вероятностей для одного вида оператора всегда равна единице. При достижении заданного порога соответствующий вариант оператора перестает отдавать часть своей вероятности, а наиболее эффективный, соответственно, не получает ее.
4. Для порождения каждого потомка следующего поколения стохастически, согласно полученным распределениям вероятностей, выбираются операторы, при помощи которых он и будет сгенерирован.

Метод самоконфигурирования освобождает пользователя от подбора настроек для эволюционного алгоритма. При этом эффективность алгоритма оказывается достаточно высокой. В большинстве задач эффективность самоконфигурируемого алгоритма обычно намного выше средней эффективности стандартного алгоритма (усреднение по выбору настроек), хотя иногда и ниже эффективности стандартного алгоритма с наилучшими настройками. Напомним, что определение этих наилучших настроек требует

чрезмерных усилий и вычислительных затрат. При проведении численных экспериментов использовалась программная система [15], модуль оценки пригодности которой был модифицирован под решаемую задачу.

Результаты численных экспериментов

Решалась задача моделирования атомной кристаллической структуры соединения Ba_2CrO_4 (пространственная группа симметрии - $Pn21a$; параметры ячейки - $a=7.67 \text{ \AA}$, $b=5.89 \text{ \AA}$, $c=10.39 \text{ \AA}$) с экспериментальной дифрактограммой. Для данной структуры оптимизационный алгоритм производит поиск координат 7 атомов в общих позициях элементарной ячейки (всего 21 атомная координата). В качестве функции пригодности использовался профильный R-фактор – величина относительного отклонения расчетной дифрактограммы от экспериментальной [16]. Для структуры Ba_2CrO_4 целевой R-фактор, соответствующий истинной структуре, равен 0.76%.

В качестве решения задачи рассматривается строка, представляющая набор координат (X,Y,Z) в 21-мерном пространстве вещественных переменных. Каждая вещественная переменная кодируется пятью битами, то есть задана 5-битовая сетка по каждой оси поискового пространства, что приводит к необходимости решать задачу псевдоболевой оптимизации размерности 105. Как показано в [17], 5-битное кодирование атомных координат является оптимальным. Существенные ограничения на вещественные (а значит и на бинарные) переменные не накладываются, т.е. решается задача безусловной оптимизации. При этом целевая функция задачи оптимизации задана алгоритмически и требует значительных вычислительных ресурсов на однократное вычисление.

В результате работы алгоритма некоторые решения не дают точного требуемого значения целевой функции (0.76%), однако во многих случаях эти решения удастся улучшить до необходимого уровня в результате полнопрофильного уточнения координат атомов, реализованного в процедуре локального поиска. Локальный поиск относительно трудоемок, поэтому эта процедура применяется выборочно по отношению лишь к нескольким индивидам из популяции текущего поколения.

В некоторых случаях решение может считаться истинным, если получено решение, отличающееся от истинного перестановкой пары легких атомов на позиции друг друга. Это дает достаточно точную модель атомной структуры и может быть легко урегулировано при кристаллохимическом анализе данного решения. Значение целевой функции в таком случае составляет около 1.62%.

В случае, если отсутствует сходимость процесса локального поиска, то есть по окончании процедуры значение целевой функции заметно отличается от требуемого значения истинной структуры (в данной задаче выше 1.7%), то найденное решение неверное, т.е. алгоритм не справился с задачей.

В силу стохастичности процедуры поиска решения с применением эволюционных алгоритмов запуски программы проводились многократно в нескольких режимах: 1) 100 поколений по 100 индивидов в каждом; 2) 200 поколений по 200 индивидов в каж-

дом; 3) 300 поколений по 300 индивидов в каждом; 4) 150 поколений по 500 индивидов в каждом. Таким образом, вычислительные ресурсы, требуемые для нахождения решения в каждом случае, составляли 10, 40, 90 и 75 тысяч вычислений целевой функции (проектных структур), без учета затрат на локальный поиск.

В таблицах, приведенных ниже, даются результаты всех прогонов самоконфигурируемого генетического алгоритма. Во втором столбце приводится время проработки алгоритма (сек.), выделены минимальное и максимальное время, затраченные алгоритмом в ходе отдельного прогона. В четвертом столбце приводится значение целевой функции после уточнения решения локальным поиском (R-фактор+, %). В последней строке приводится среднее время работы алгоритма, усредненное по всем прогонам, и доля прогонов, закончившихся успешно (в процентах).

Таблица 1. Результаты численного эксперимента (100x100)

№ запуска	t(с)	R-фактор, %	R-фактор+, %
1	103	20.0452	-
2	112	14.5903	-
3	105	5.43342	1.612
4	108	17.5243	-
5	105	6.60965	1.612
6	106	15.083	-
7	182	12.9068	-
8	301	6.26944	-
9	189	12.3001	-
10	311	4.52645	0.757
t_{cp}	162	Успешность	30%

Таблица 2. Результаты численного эксперимента (200x200)

№ запуска	t(с)	R-фактор, %	R-фактор+, %
1	3953	22.9769	-
2	1076	4.8542	1.614
3	2005	5.23865	0.757
4	2000	13.6263	-
5	2000	4.37606	0.757
6	1496	10.3378	0.757
7	1752	17.6883	0.757
8	2221	17.224	-
9	2389	13.4841	0.757
10	2008	15.3863	-
t_{cp}	2175	Успешность	60%

Таблица 3. Результаты численного эксперимента (300x300)

№ запуска	t(c)	R-фактор, %	R-фактор+, %
1	5743	10.83	0.757
2	9146	14.3369	0.792
3	8301	4.00563	0.802
4	7171	22.6664	-
5	8315	5.60911	1.612
6	6898	7.31409	0.757
7	8908	12.1804	1.612
8	9784	11.3945	-
9	7524	8.5077	0.757
10	9517	8.96658	0.757
t_{cp}	8130	Успешность	80%

Таблица 4. Результаты численного эксперимента (500x150)

№ запуска	t(c)	R-фактор, %	R-фактор+, %
1	4192	14.648	1.609
2	2132	10.4169	0.757
3	3426	16.5214	-
4	3358	4.36786	0.757
5	3748	15.4726	0.757
t_{cp}	3371	Успешность	80%

Из приведенных таблиц видно, что самоконфигурируемый ГА успешно решает поставленную задачу, хотя при этом не требует ни интеллектуальных усилий и трудозатрат пользователя, ни чрезмерных вычислительных ресурсов для настройки на решаемую задачу. Кроме того, анализ первых трех экспериментов показал обычную для стандартного ГА картину – увеличение числа рассматриваемых решений (вариантов структур) приводит к большей успешности работы алгоритма. Однако это – неудачный путь повышения надежности алгоритма, т.к. основной задачей является снижение трудоемкости автоматизации моделирования атомных структур. Поэтому в четвертом эксперименте подход был изменен – количество просмотренных структур снизилось с 90 тыс. до 75 тыс., но при этом значительно увеличился размер популяции, хотя число поколений сократилось. Самоконфигурируемый ГА продемонстрировал в этом случае интересное свойство – надежность его не снизилась, хотя время, затрачиваемое на решение задачи, сократилось в 2.5 раза. Этот результат подсказывает еще одно направление повышения самоадаптивности алгоритма – оптимальное распределение вычислительных ресурсов между количеством индивидов и числом поколений с выходом на автоматическое управление размером популяции в ходе решения задачи.

Для сравнительной оценки достигнутой эффективности моделирование атомной

структуры рассматриваемого соединения Ba_2CrO_4 было также проведено с помощью альтернативных методов – FOX [3] и DASH [4]. При этом в первом случае успешных запусков оказалось 80% после просмотра 10^6 пробных конфигураций структуры, а во втором – 50% после просмотра $100 \cdot 10^6$ пробных конфигураций структуры. В то время как самоконфигурируемый ГА достигает надежности в 60% при просмотре $0.04 \cdot 10^6$ конфигураций, а надежность в 80% достигается при просмотре $0.075 \cdot 10^6$ структур. Можно утверждать, что самоконфигурируемый ГА представляется перспективным подходом для автоматизации моделирования атомных кристаллических структур химических соединений по данным рентгеновской дифракции.

Анализ поведения самоконфигурируемого генетического алгоритма

Нами были разработаны также графические средства для анализа поведения самоконфигурируемого ГА в ходе решения задачи. Для этого распределения вероятностей типов операторов сохранялись и эти данные в дальнейшем анализировались на графиках. Ниже на рисунках 1 - 3 приведены типичные примеры перераспределения вероятностей выбора различных типов операторов. На рисунке 4 показано полное соответствие расчетной и экспериментальной дифрактограмм для найденной по СГА структуры Ba_2CrO_4 , иллюстрирующее ее истинность.

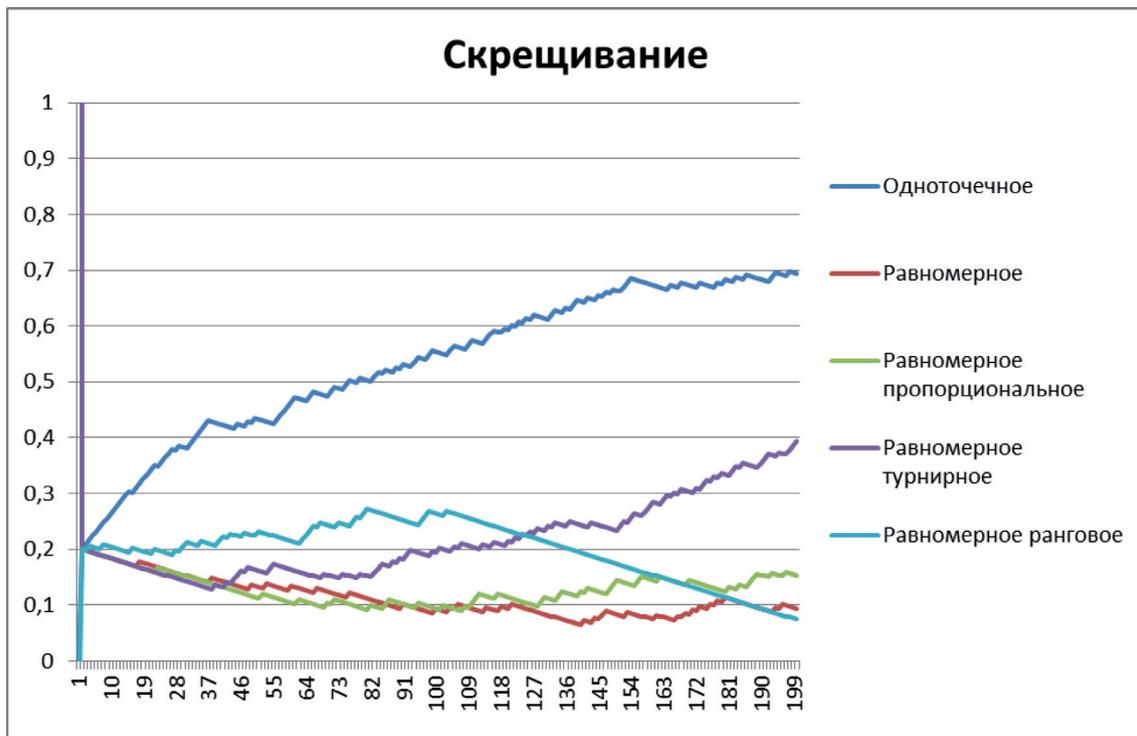


Рис. 1 – Взаимодействие различных типов оператора скрещивания в ходе работы алгоритма (одноточечное, равномерное равновероятное, равномерное пропорциональное, равномерное турнирное, равномерное ранговое, стартовая вероятность – 0,2, гарантированный минимум – 0,075)

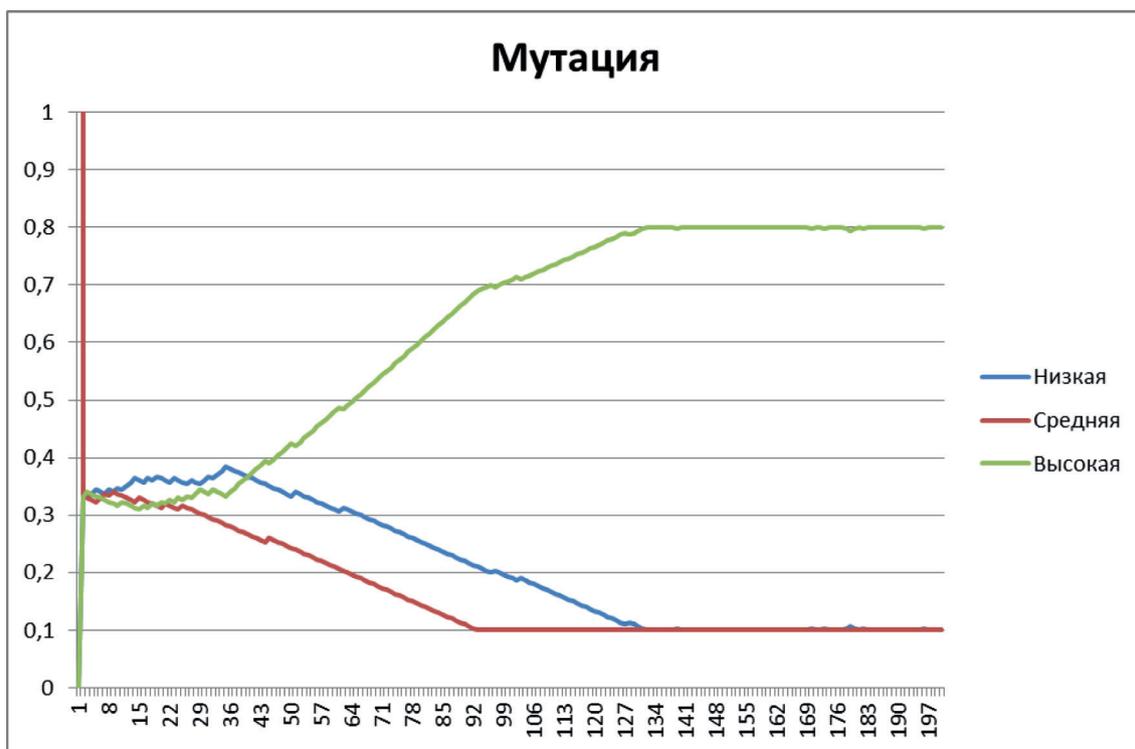


Рис. 2 – Взаимодействие различных типов оператора скрещивания в ходе работы алгоритма (одноточечное, равномерное равновероятное, равномерное пропорциональное, равномерное турнирное, равномерное ранговое, стартовая вероятность – 0.2, гарантированный минимум – 0.075)

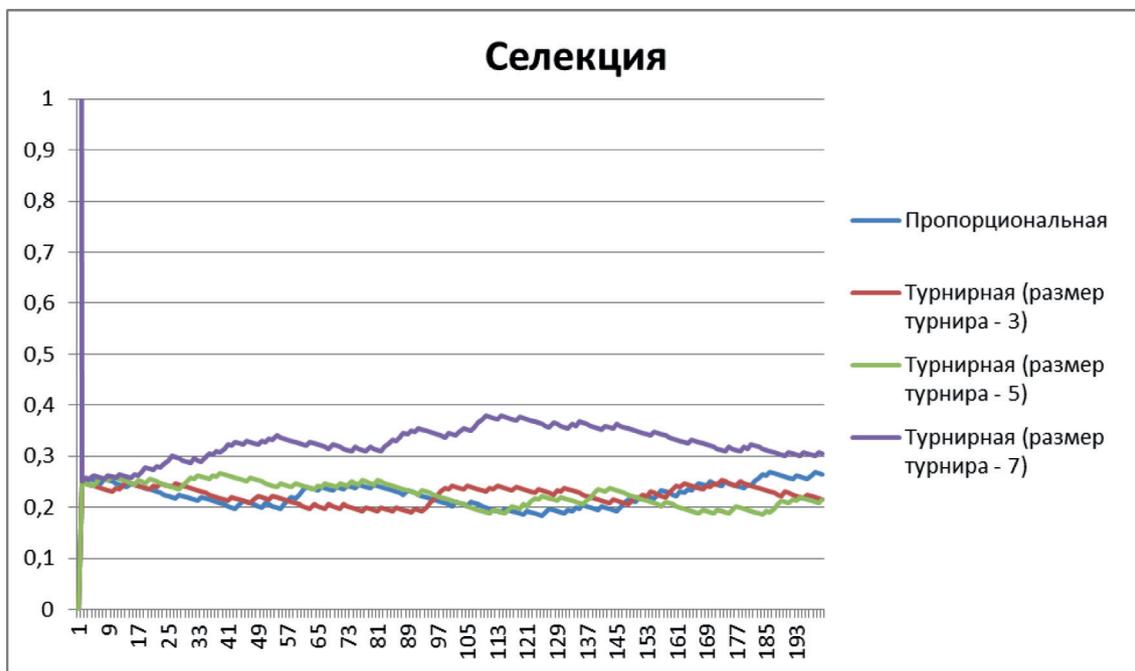


Рис. 3 – Взаимодействие различных типов оператора селекции (пропорциональная и турнирная с размером турнира в 3, 5 и 7 индивидов, стартовые вероятности – 0.25, гарантированный минимум – 0.1)

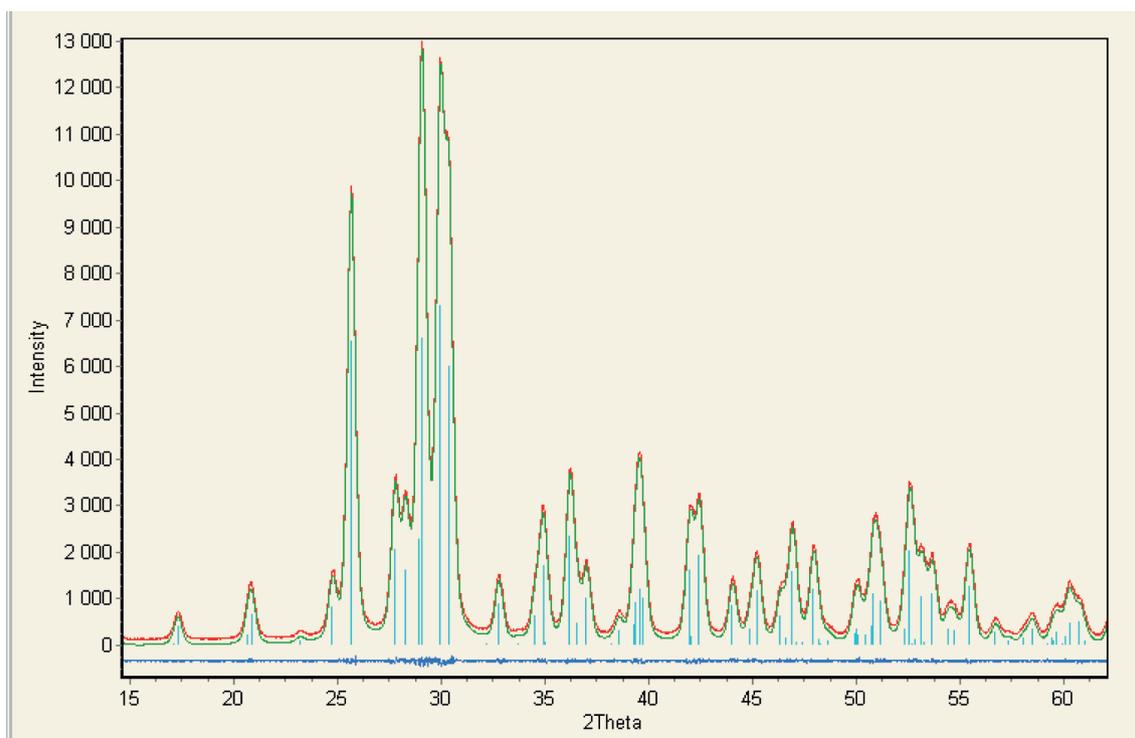


Рис. 4 – Расчетная (зеленая) и экспериментальная (красная) дифрактограммы, и их разность (синяя внизу) для найденной по СГА структуры Ba_2CrO_4

Анализ рисунков типичного поведения распределения вероятностей задействования различных типов операторов дает возможность сделать некоторые выводы. Главный вывод – вероятности операторов довольно сильно меняются в ходе работы алгоритмов, т.е. самоконфигурирование реально работает. Причем происходит это по-разному у разных операторов.

В двух случаях (селекция и мутация) существует явный лидер, который доминирует от начала работы алгоритма и до конца. Однако лидерство это совершенно различное. Оператор одноточечного скрещивания не забирает все доступные ему ресурсы, т.к. у него всегда есть «конкурент», вместе с ним отбирающий ресурсы у проигрывающих операторов. Но ни один из проигрывающих операторов не выбывает из борьбы до самого конца, их вероятности не опускаются до гарантированного минимума вероятности их применения. Следовательно, все типы оператора скрещивания важны и нужны, возможно необходимо предложить еще варианты. В то же время оператор высокой мутации довольно быстро забирает все доступные ресурсы, загоняя альтернативные варианты в гарантированный минимум. Все выглядит так, что операторы средней и низкой мутации просто не нужны. Однако на первых 35 поколениях побеждала низкая мутация. Такое поведение операторов подсказывает возможную модификацию ГА – в случае безусловной победы оператора высокой мутации следует (автоматически) добавлять оператор сверхвысокой мутации, убирая оператор низкой мутации. Интересный феномен наблюдается при взаимодействии операторов селекции. Несмотря на наличие явного лидера, он так и не становится безусловным, продолжая бороться с альтернативными до конца работы алгоритма. Альтернативные операторы также «не сдаются», активно борясь за ресурс друг с другом. Ни один из них не

упал до гарантированного минимума, а все находились недалеко от стартового состояния. Можно сделать вывод, что все операторы селекции важны, но эффективность их практически одинакова, т.е. они здесь не смогли по-разному организовать селективное давление на популяцию, что, собственно, от них требовалось. Это значит, что нужна либо более тонкая их подстройка, чтобы появилось различия в свойствах, либо введение принципиально новых видов оператора скрещивания для организации существенно различных видов селективного давления, являющегося основной движущей силой эволюции.

Заключение

В данной работе мы показали возможность применения самоконфигурируемого генетического алгоритма для решения задачи автоматизированного моделирования атомной кристаллической структуры химических соединений по данным рентгеновской дифракции. Этот алгоритм не только избавляет конечного пользователя, не являющегося экспертом в эволюционных методах оптимизации, от несвойственной ему работы по выбору эффективных настроек, но и демонстрирует на рассмотренной структуре достаточно высокую эффективность. Более того, анализ динамики его работы позволяет обосновывать направления модификации состава генетических операторов для повышения эффективности моделирования. В совокупности с общим свойством эволюционных алгоритмов, позволяющих инкорпорировать в свою структуру специфические знания человека-эксперта предметной области (в нашем случае – специалиста в области кристаллографии), специфические свойства самоконфигурируемого ГА создают возможность разработки инструментария автоматизированного решения прикладных задач в области кристаллографии.

Работа выполняется при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ в рамках государственного задания на выполнение работ по единому заказ-наряду тематического плана Сибирского федерального университета (НИР ГФ-3).

Библиография :

1. David W.I.F., Shankland K. Structure determination from powder diffraction data // Acta Cryst. 2008. A64. P. 52-64.
2. Gerny R., Favre-Nicolin V. Direct space methods of structure determination from powder diffraction: principles, guidelines, perspectives // Z. Kristallogr. Suppl. 2007. No. 222. 105-113.
3. Favre-Nicolin V., Cerny R. FOX, "free objects for crystallography": a modular approach to ab initio structure determination from powder diffraction // J. Appl. Cryst. 2002. No. 35. P. 734-743.
4. Griffin T.A.N., Shankland K., van de Streek J., Cole J. GDASH: a grid-enabled program for structure solution from powder diffraction data // J. Appl. Cryst. 2009. No. 42. P. 356-359.
5. Harris K.D.M. Fundamentals and applications of genetic algorithms for structure solution from powder X-ray diffraction data // Computational Materials Science. 2009. V. 45. Issue 1. P. 16-20.
6. Yakimov Y. I., Semekin E. S., Yakimov I. S. Two-level genetic algorithm for a fullprofile fitting of X-ray powder patterns // Z. Kristallogr. Suppl. 2009. No. 30. P. 21-26.

7. Harris K. D. M. Powder Diffraction Crystallography of Molecular Solids // *Top. Curr. Chem.* 2012. No. 315. P. 133–177.
8. Meredig B., Wolverton C. A hybrid computational–experimental approach for automated crystal structure solution // *Nature Materials*. 2013. No. 12, P. 123–127.
9. Zaloga A. N., Burakov S. V., Semenkin E. S., Yakimov I. S. A Research of Convergence of Multi-Population Binary and Real Genetic Algorithms for Solution of Crystal Structure from X-Ray Powder Diffraction Data // *Applied Mechanics and Materials. Proceedings of APMSIT Conference. Shanghai, China.* 2014.
10. Semenkin E.S., Semenkina M.E. Self-configuring Genetic Algorithm with Modified Uniform Crossover Operator // *Advances in Swarm Intelligence. Lecture Notes in Computer Science 7331.* – Springer-Verlag, Berlin Heidelberg. 2012. P. 414-421.
11. Semenkin E., Semenkina M. The Choice of Spacecrafts' Control Systems Effective Variants with Self-Configuring Genetic Algorithm. In: Ferrier, J.L. et al (Eds.): *Informatics in Control, Automation and Robotics: Proceedings of the 9th International Conference ICINCO'2012.* – Rome: Italy. 2012. Vol. 1. P. 84-93.
12. Burakov S.V., Semenkin E.S. Solving variational and Cauchy problems with self-configuring genetic programming algorithms // *International Journal of Innovative Computing and Applications.* 2013. Volume 5, Issue 3. P. 152–162.
13. Semenkin E., Semenkina M. Stochastic Models and Optimization Algorithms for Decision Support in Spacecraft Control Systems Preliminary Design // *Informatics in Control, Automation and Robotics.-Lecture Notes in Electrical Engineering, Springer-Verlag, Berlin Heidelberg.* 2014. Vol. 283. P. 51-65.
14. Гуменникова А.В., Емельянова М.Н., Семенкин Е.С., Сопов Е.А. Об эволюционных алгоритмах решения сложных задач оптимизации // *Вестник Сибирского государственного аэрокосмического университета им. академика М.Ф. Решетнева.* 2003. № 4. С. 14.
15. Семенкина М.Е., Семенкин Е.С. Программа для решения задач символьной регрессии самоконфигурируемым алгоритмом генетического программирования. – М.: Роспатент. 2012. № гос. рег. 2012619347.
16. Young R.A. *The Rietveld Method* / Oxford University Press. 1995. 298 p.
17. Якимов Я.И., Кирик С.Д., Семенкин Е.С., Соловьев Л.А., Якимов И.С. Эволюционный метод моделирования кристаллической структуры вещества по данным порошковой дифракции // *Журнал Сибирского федерального университета, Химия.* 2013. №6. С. 180-191.

References:

1. David W.I.F., Shankland K. Structure determination from powder diffraction data // *Acta Cryst.* 2008. A64. P. 52-64.
2. Cerny R., Favre-Nicolin V. Direct space methods of structure determination from powder diffraction: principles, guidelines, perspectives // *Z. Kristallogr. Suppl.* 2007. No. 222. 105-113.
3. Favre-Nicolin V., Cerny R. FOX, “free objects for crystallography”: a modular approach to ab initio structure determination from powder diffraction // *J. Appl. Cryst.* 2002. No. 35. P. 734-743.
4. Griffin T.A.N., Shankland K., van de Streek J., Cole J. GDASH: a grid-enabled program for structure solution from powder diffraction data // *J. Appl. Cryst.* 2009. No. 42. P. 356-359.
5. Harris K.D.M. Fundamentals and applications of genetic algorithms for structure solution from powder X-ray diffraction data // *Computational Materials Science.* 2009. V. 45. Issue 1. P. 16-20.

6. Yakimov Y. I., Semenkin E. S., Yakimov I. S. Two-level genetic algorithm for a fullprofile fitting of X-ray powder patterns // *Z. Kristallogr. Suppl.* 2009. No. 30. P. 21-26.
7. Harris K. D. M. Powder Diffraction Crystallography of Molecular Solids // *Top. Curr. Chem.* 2012. No. 315. P. 133–177.
8. Meredig B., Wolverton C. A hybrid computational–experimental approach for automated crystal structure solution // *Nature Materials.* 2013. No. 12, P. 123–127.
9. Zaloga A. N., Burakov S. V., Semenkin E. S., Yakimov I. S.. A Research of Convergence of Multi-Population Binary and Real Genetic Algorithms for Solution of Crystal Structure from X-Ray Powder Diffraction Data // *Applied Mechanics and Materials. Proceedings of APMSIT Conference. Shanghai, China.* 2014.
10. Semenkin E.S., Semenkina M.E. Self-configuring Genetic Algorithm with Modified Uniform Crossover Operator // *Advances in Swarm Intelligence. Lecture Notes in Computer Science 7331.* – Springer-Verlag, Berlin Heidelberg. 2012. P. 414-421.
11. Semenkin E., Semenkina M. The Choice of Spacecrafts' Control Systems Effective Variants with Self-Configuring Genetic Algorithm. In: Ferrier, J.L. et al (Eds.): *Informatics in Control, Automation and Robotics: Proceedings of the 9th International Conference ICINCO'2012.*– Rome: Italy. 2012. Vol. 1. P. 84-93.
12. Burakov S.V., Semenkin E.S. Solving variational and Cauchy problems with self-configuring genetic programming algorithms // *International Journal of Innovative Computing and Applications.* 2013. Volume 5, Issue 3. P. 152–162.
13. Semenkin E., Semenkina M. Stochastic Models and Optimization Algorithms for Decision Support in Spacecraft Control Systems Preliminary Design // *Informatics in Control, Automation and Robotics.-Lecture Notes in Electrical Engineering, Springer-Verlag, Berlin Heidelberg.* 2014. Vol. 283. P. 51-65.
14. Gumennikova A.V., Emel'yanova M.N., Semenkin E.S., Sopov E.A. Ob evolyutsionnykh algoritmakh resheniya slozhnykh zadach optimizatsii // *Vestnik Sibirskogo gosudarstvennogo aerokosmicheskogo universiteta im. akademika M.F. Reshetneva.* 2003. № 4. S. 14.
15. Semenkina M.E., Semenkin E.S. Programma dlya resheniya zadach simvol'noi regressii samokonfiguriruemym algoritmom geneticheskogo programmirovaniya. – M.: Rospatent. 2012. № gos. reg. 2012619347.
16. Young R.A. *The Rietveld Method* / Oxford University Press. 1995. 298 p.
17. Yakimov Ya.I., Kirik S.D., Semenkin E.S., Solov'ev L.A., Yakimov I.S. Evolyutsionnyi metod modelirovaniya kristallicheskoj struktury veshchestva po dannym poroshkovo difraktsii // *Zhurnal Sibirskogo federal'nogo universiteta, Khimiya.* 2013. №6. S. 180-191.