

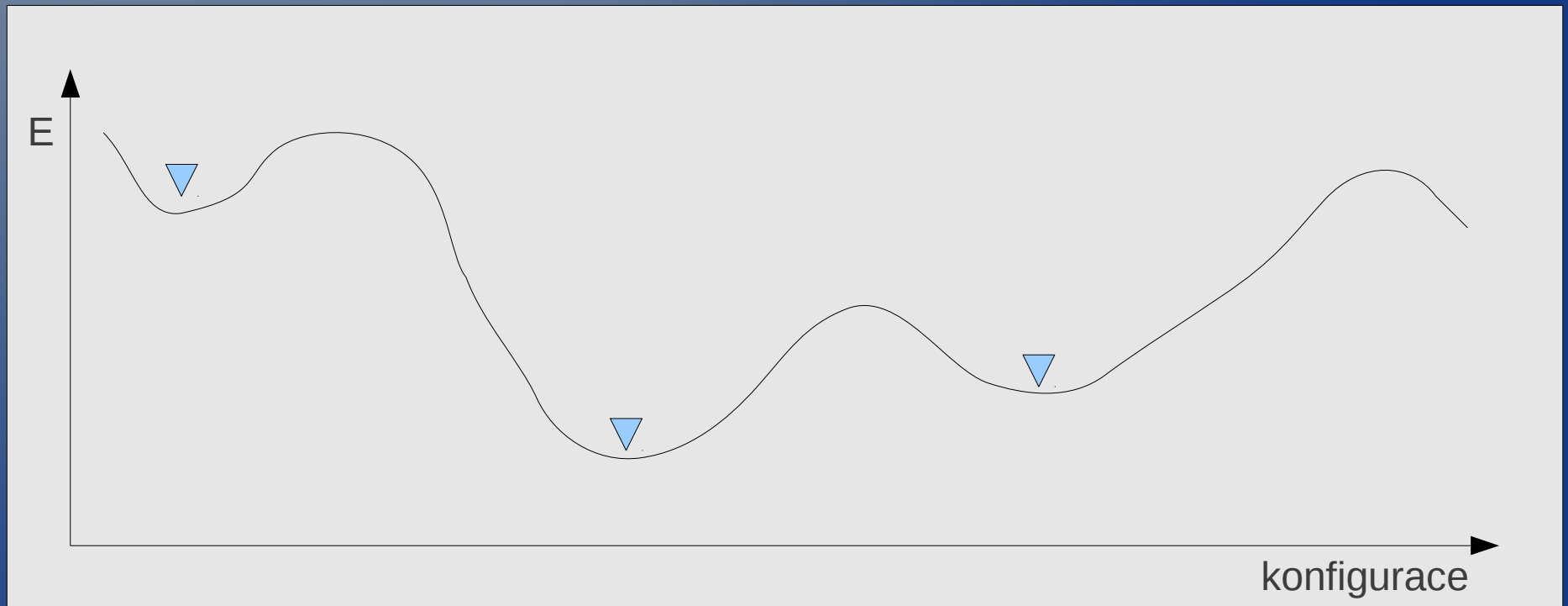
Stacionární body na nadplochách potenciální energie – propojení optimalizačních programů s kvantověchemickými balíky

Autor: Lukáš Červenka

Vedoucí práce: Doc. RNDr. René Kalus, Ph.D.

Co je cílem?

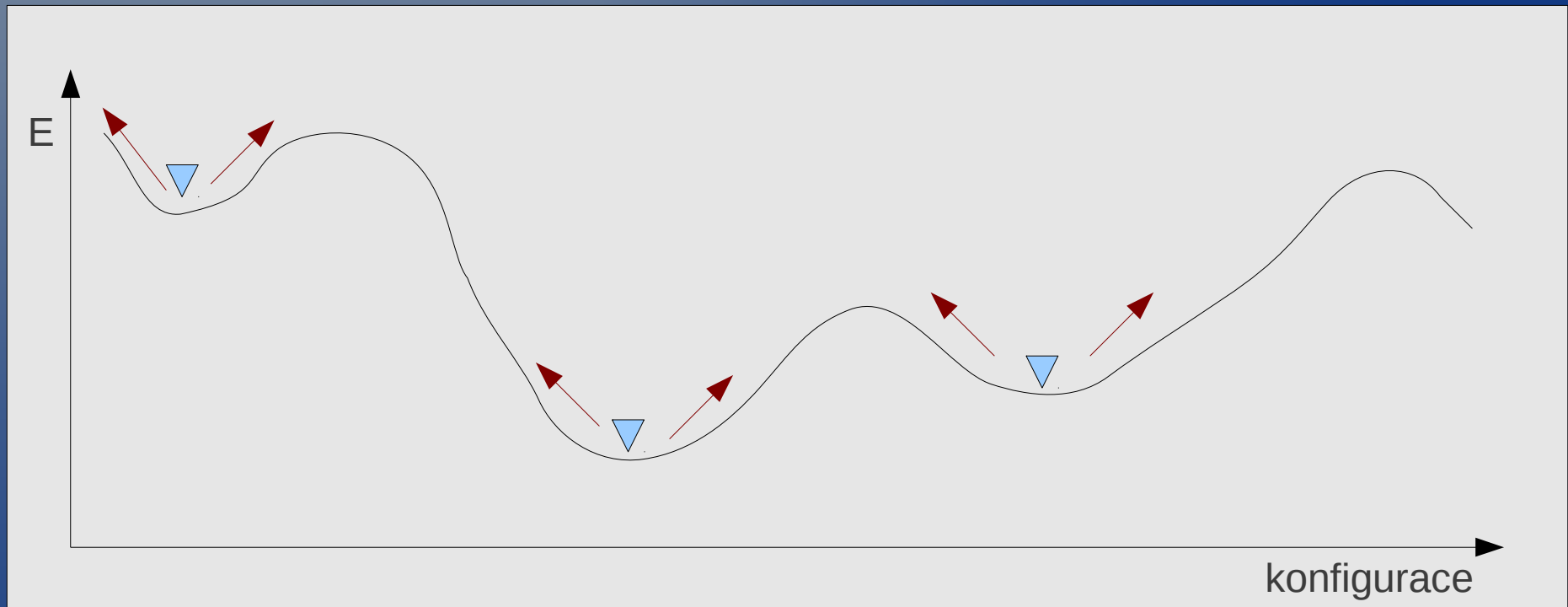
- Snaha vytvořit model a co nejlépe jej “napasovat” na skutečnost => potřeba referenčních bodů



Lokální extrémy – minima funkce

Co je cílem?

- Snaha vytvořit model a co nejlépe jej “napasovat” na skutečnost => potřeba referenčních bodů

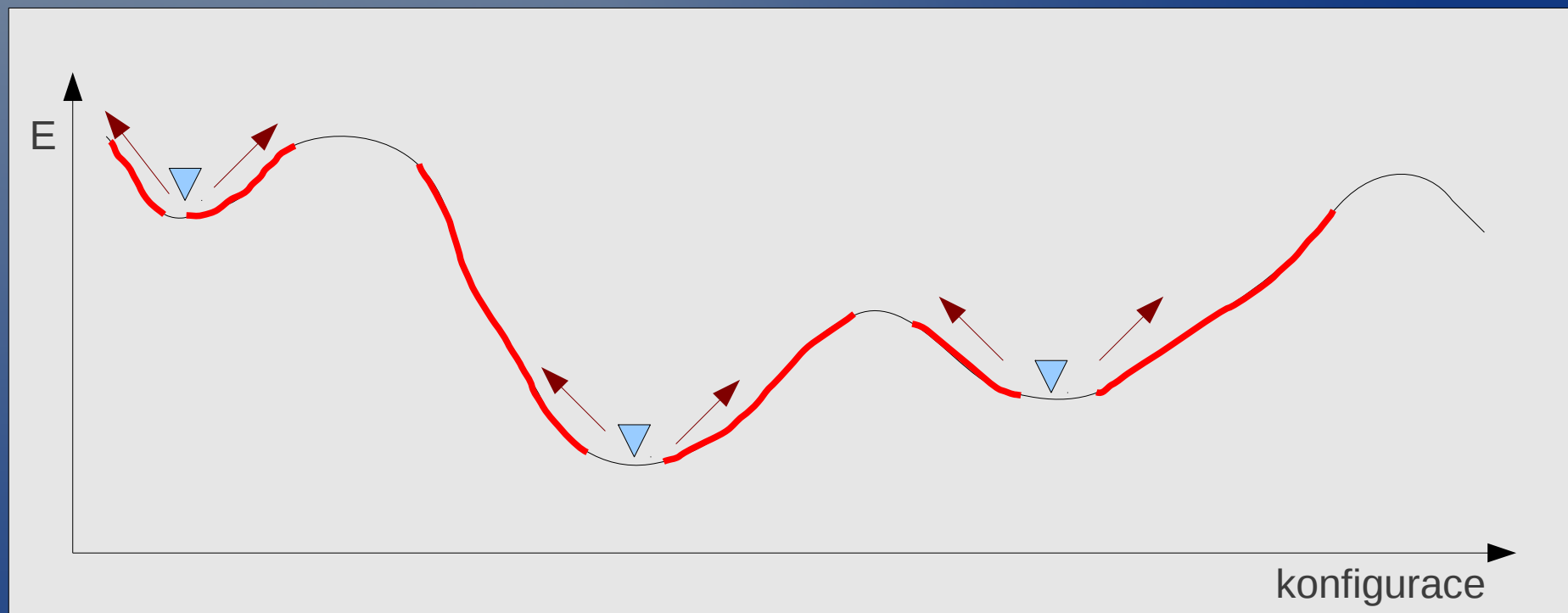


Lokální extrémy – minima funkce

Tranzitní stavy - sedlové body řádu 1

Co je cílem?

- Snaha vytvořit model a co nejlépe jej napasovat na skutečnost => potřeba zjistit způsob přechodu mezi lokálními extrémy

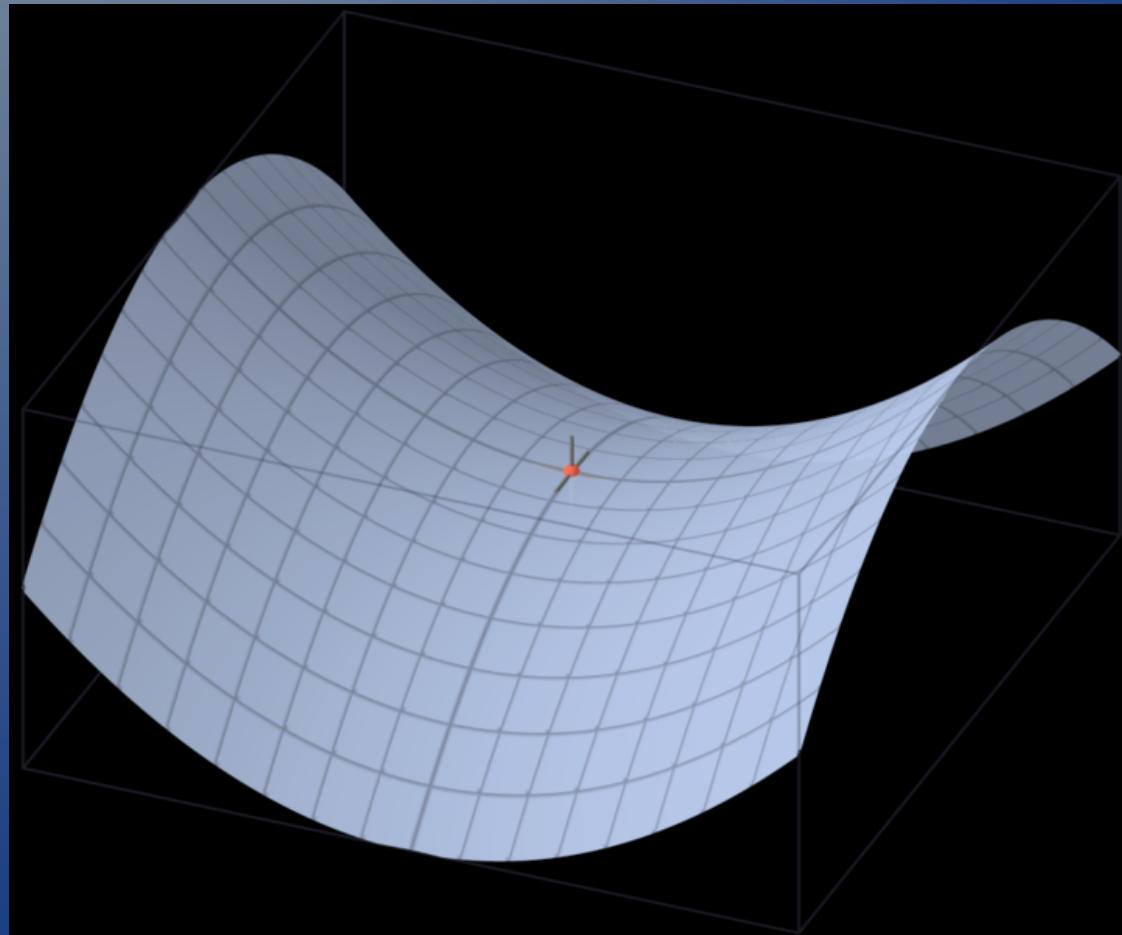


Lokální extrémy – minima funkce

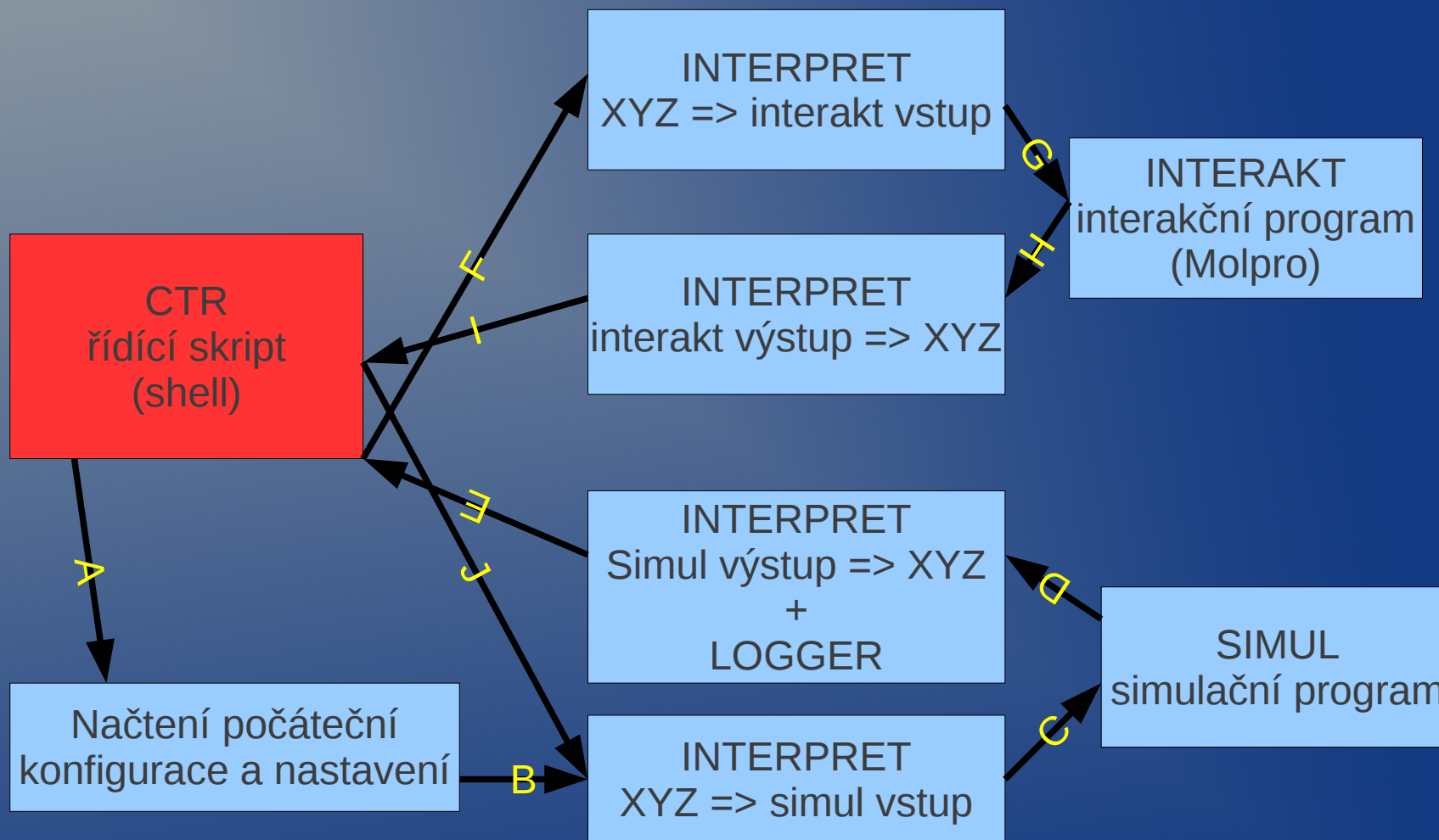
Pomocí speciálních simulačních technik nalezneme izomerizační cesty mezi jednotlivými minimy

Co je cílem?

- Cílem je najít lokální extrémy a sedlové body



Propojení jednotlivých programů



Po kroku J následuje krok C.

XYZ = univerzální formát zápisu konfigurace molekuly a jejích vlastností

CTR při každé iteraci kontroluje návratovou hodnotu programu simul = kritérium pro ukončení

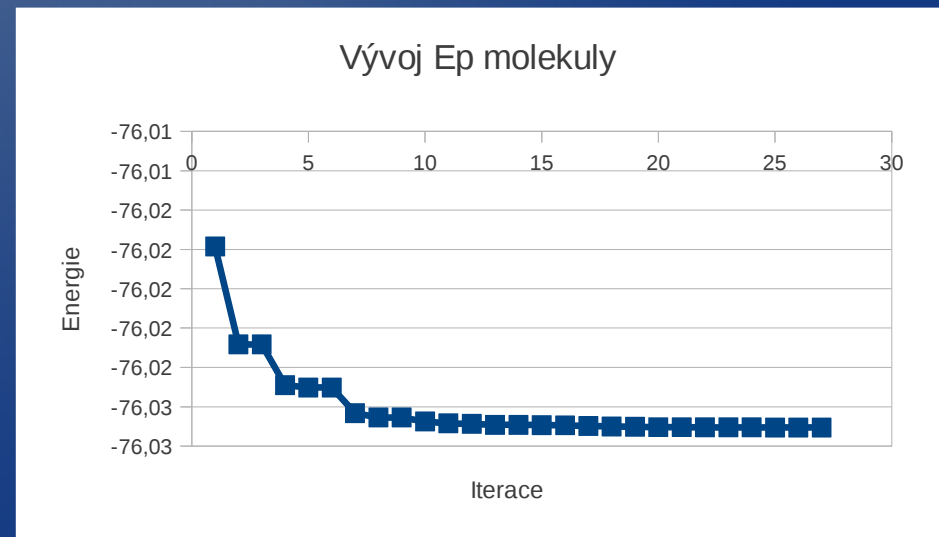
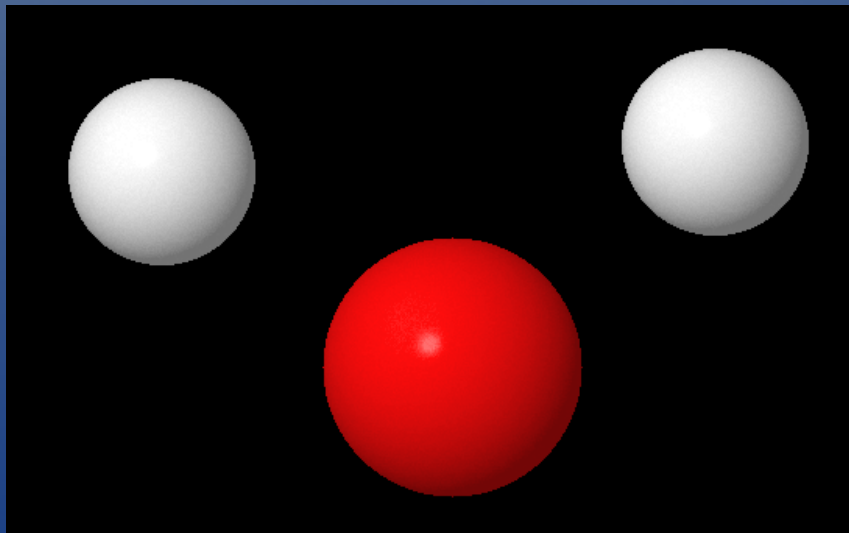
Ukázka části řídicího skriptu

```
./simul
EXIT=$(echo $?)
./inter_int_input
while [ $CONTINUE -ne 0 ]; do
    if [ $EXIT == 1 ]; then
        echo "Dokonceno."
        let CONTINUE=0
        exit
    fi
    if [ $EXIT == 2 ]; then
        echo "Zastaveno z duvodu prekroceni maximalniho poctu iteraci!"
        let CONTINUE=0
        exit
    fi
    ./run_inter.sh
    ./inter_int_output
    cat best_eng.xyz
    ./simul
    let EXIT=$(echo $?)
    ./simul_int_output
    ./inter_int_input
```

done

Simulační program

- Postup od nejjednodušších algoritmů ke složitějším za účelem ustálení komunikace programů
- Postupně verze s horolezeckým algoritmem pro dimery, horolezeckým algoritmem pro n-atomovou molekulu a Basin-Hopping

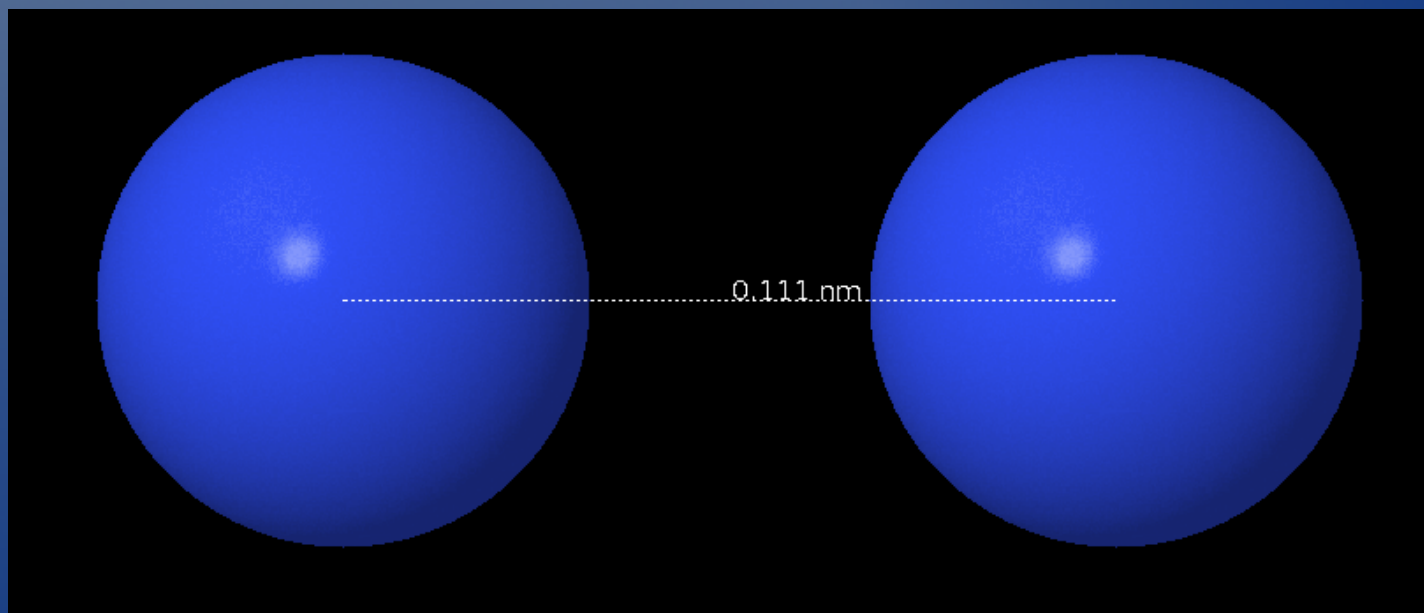


Optimalizace molekul - výpočty

- Při výpočtech byl použit horolezecký algoritmus
- Výsledek i čas výpočtu byl porovnán s výsledkem a časem výpočtu lokální optimalizace pomocí Molpro
- Výsledky byly velice blízko optimalizaci Molpro
- Pro zkoušku byly zvoleny molekuly N_2 , H_2O a NH_3

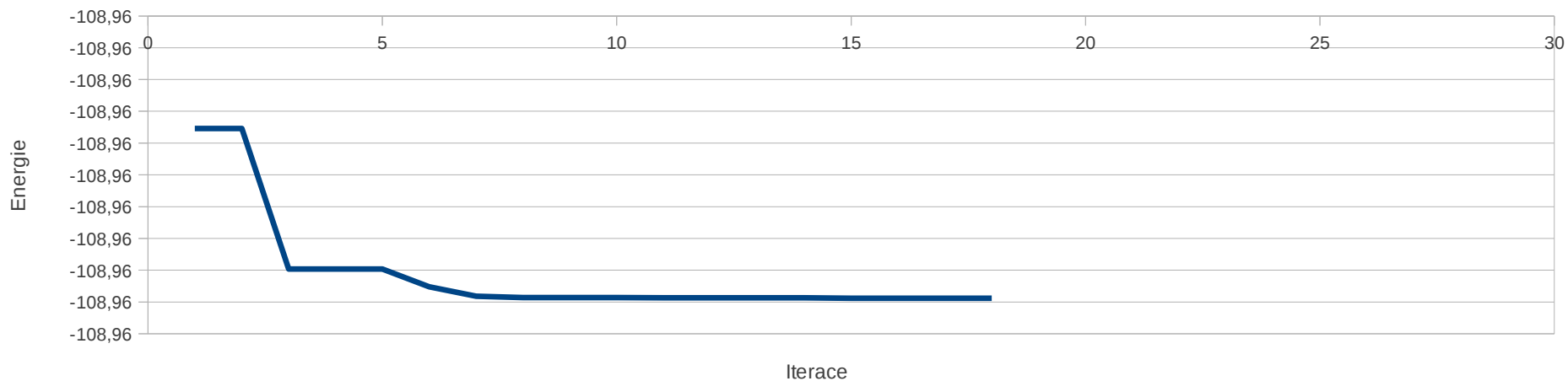
Optimalizace N₂

Metoda	Báze	Čas MOLPRO	Čas CTR	Odchylka energie
hf	cc-pVDZ	0m20.969s	0m58.487s	0mEv
hf	cc-pVTZ	0m26.070s	1m24.575s	0mEv
ks,b97r	cc-pVDZ	0m25.257s	1m32.808s	0mEv
ks,b97r	cc-pVTZ	0m29.588s	3m9.846s	$5.4 \cdot 10^{-3}$ mEv
hf;mp2	cc-pVDZ	0m21.320s	1m1.063s	0mEv
hf;mp2	cc-pVTZ	0m25.752s	1m45.445s	0mEv

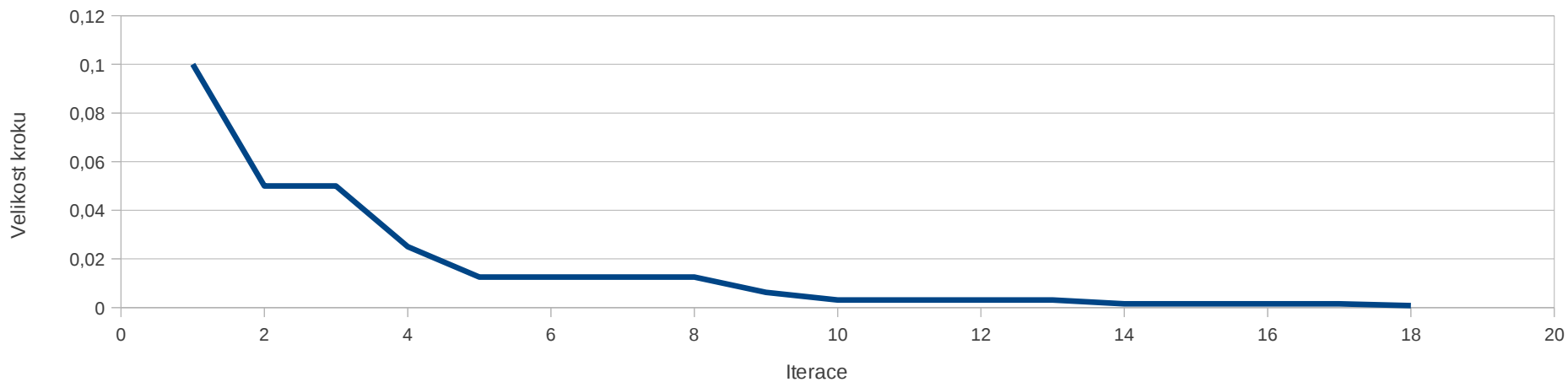


Optimalizace N₂

Vývoj Ep molekuly

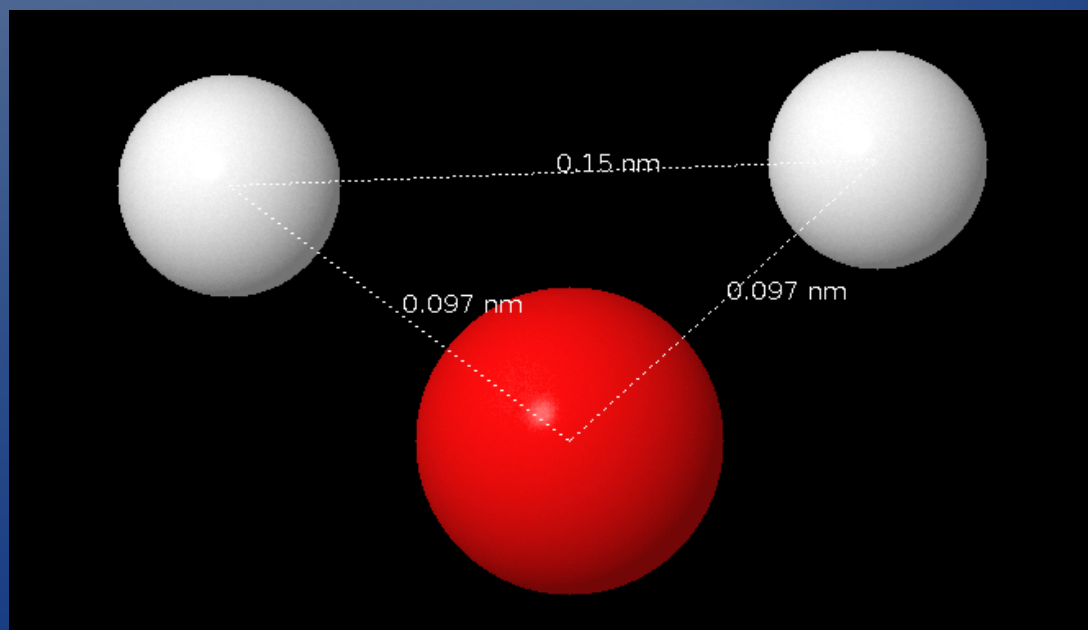


Vývoj velikosti maximálního kroku



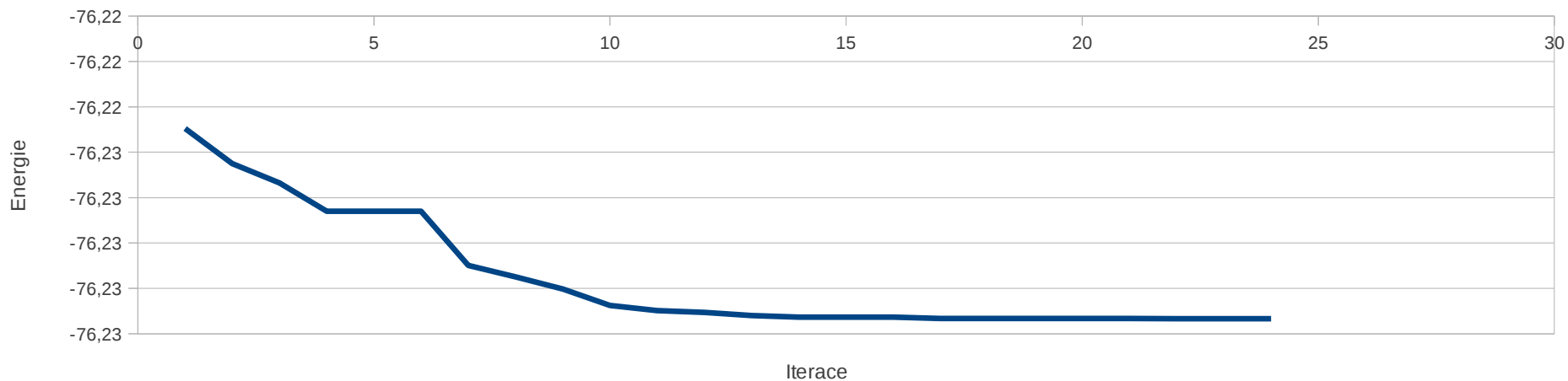
Optimalizace H₂O

Metoda	Báze	Čas MOLPRO	Čas CTR	Odchylka energie
hf	cc-pVDZ	0m12.425s	1m11.338s	$1.9 \cdot 10^{-2}$ mEv
hf	cc-pVTZ	0m17.132s	5m11.183s	$2.4 \cdot 10^{-2}$ mEv
ks,b97r	cc-pVDZ	0m19.499s	6m52.132s	$8.2 \cdot 10^{-2}$ mEv
ks,b97r	cc-pVTZ	0m29.531s	10m2.537s	$3.1 \cdot 10^{-2}$ mEv
hf;mp2	cc-pVDZ	0m12.708s	1m28.975s	$3.5 \cdot 10^{-2}$ mEv
hf;mp2	cc-pVTZ	0m18.277s	4m0.191s	$1.2 \cdot 10^{-1}$ mEv

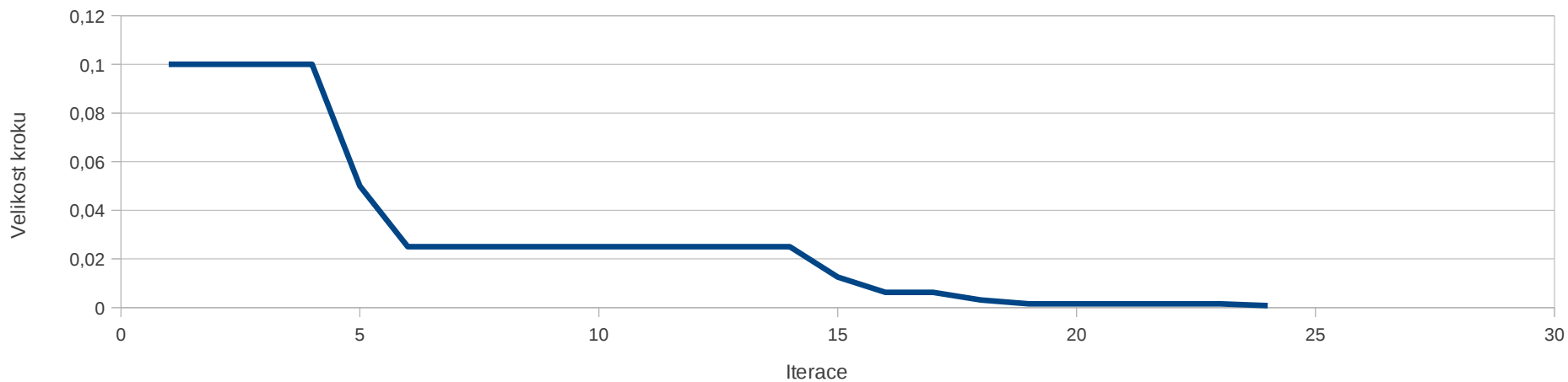


Optimalizace H₂O

Vývoj Ep molekuly



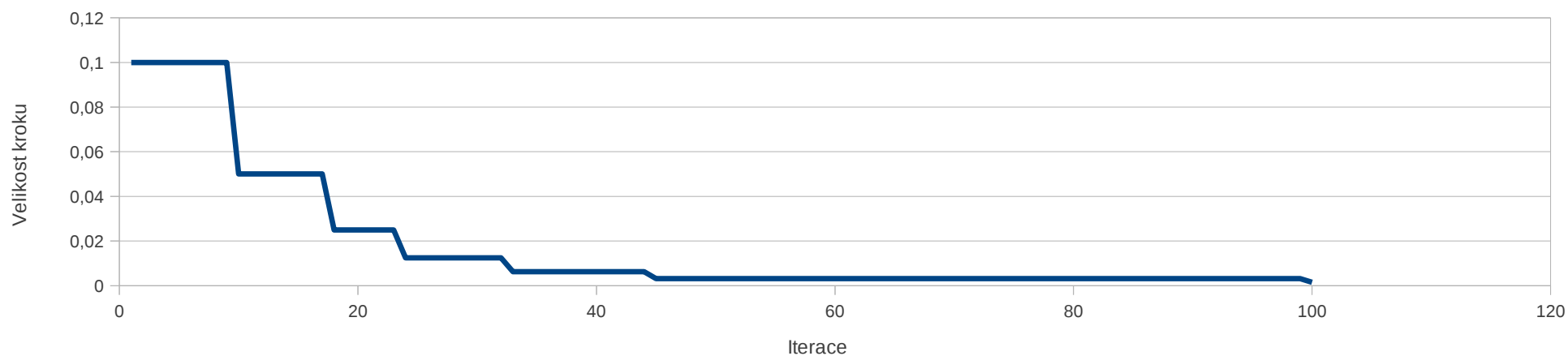
Vývoj velikosti maximálního kroku



Optimalizace NH₃

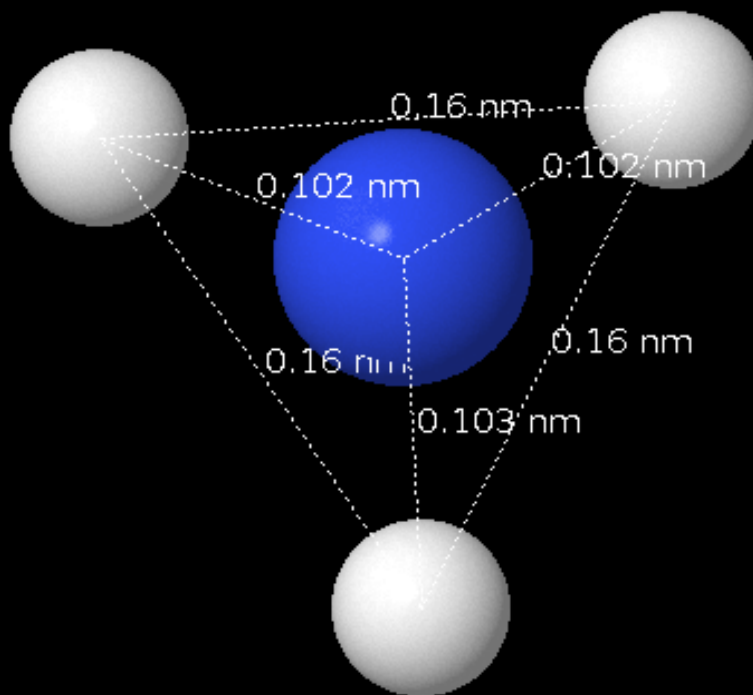
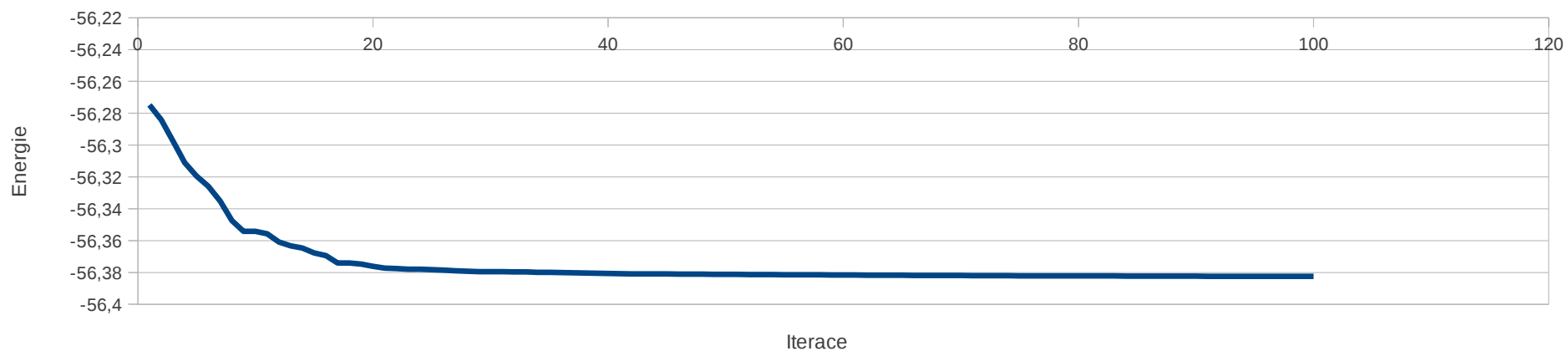
Metoda	Báze	Čas MOLPRO	Čas CTR	Odchylka energie
hf	cc-pVDZ	0m30.301s	5m46.291s	7.8 mEv
hf	cc-pVTZ	1m1.229s	37m7.731s	9.2. 10 ⁻¹ mEv
ks,b97r	cc-pVDZ	0m56.474s	25m23.486s	6.7. 10 ⁻¹ mEv
ks,b97r	cc-pVTZ	1m57.449s	78m35.946s	1.2 mEv
hf;mp2	cc-pVDZ	0m32.429s	6m59.373s	1.3 mEv
hf;mp2	cc-pVTZ	1m16.812s	30m36.809s	2.8 mEv

Vývoj velikosti maximálního kroku



Optimalizace NH₃

Vývoj Ep molekuly



Výhledy do budoucna

- Dokončit Basin-Hopping, začít s evolučními algoritmy
- Hledání sedlových bodů v další fázi stáže
- Testování různých interakčních i simulačních programů
- Paralelizace výpočtů