

Společný seminář  
11. června 2012

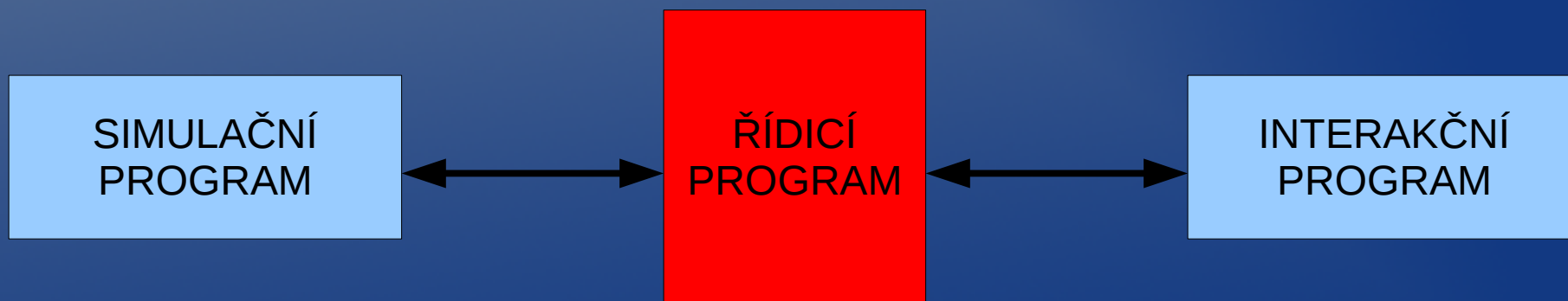
# Struktury a vazebné energie iontových klastrů helia

Autor: Lukáš Červenka

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

# Technický úvod

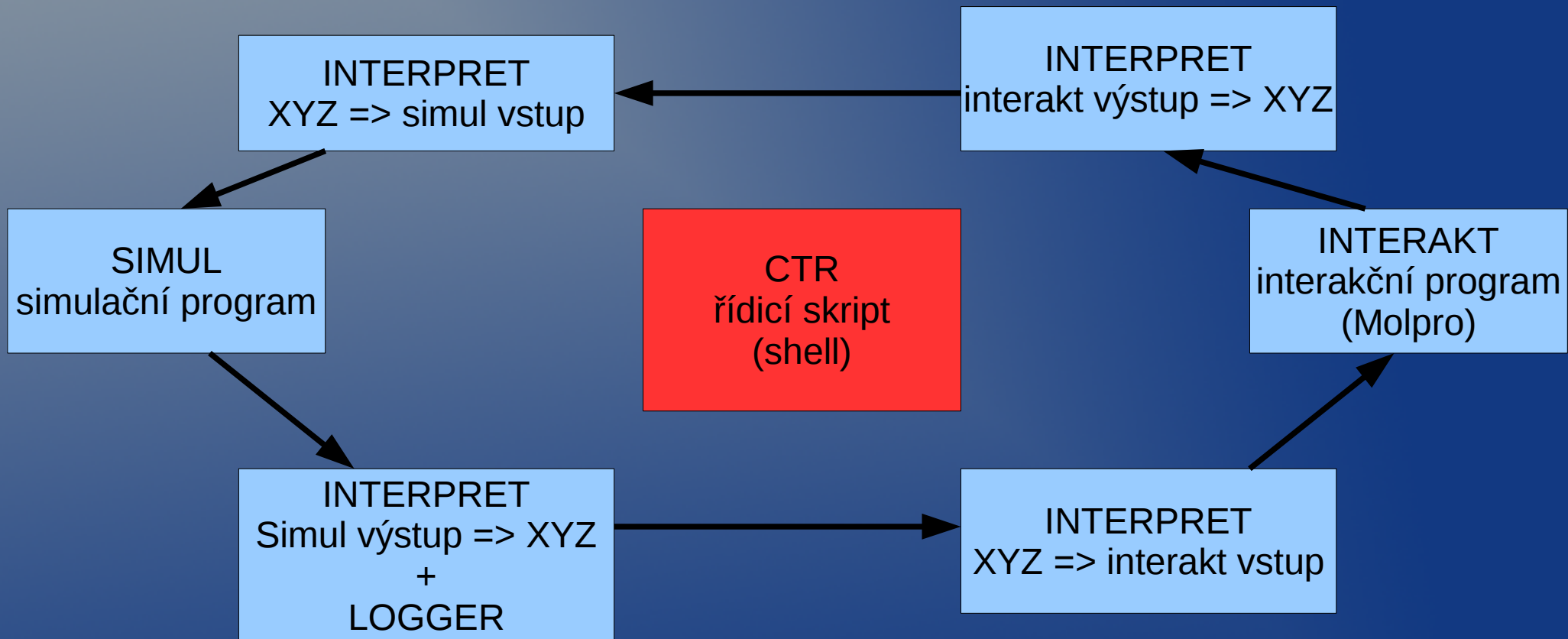
- Existují ověřené optimalizační algoritmy k hledání stacionárních bodů
- Existují dobře fungující kvantověchemické softwarové balíky



# Jednotlivé programy

- **Řídicí program (CTR)** – funguje jako spouštěč a přepínač ostatních programů, kontroluje jejich vstup a výstup, ošetřuje výjimky a kontroluje podmínky pro ukončení běhu
- **Simulační program** – zajišťuje samotnou simulaci, v každém kroku přijme vypočítaná data, provede simulaci a odevzdá nová data k výpočtu
- **Interakční program** – přijme zpracovaná data určená k výpočtu a vrátí funkční hodnotu, případně jiné informace potřebné k simulaci
- **Interpretační programy** – programy zajišťující zpracování výstupu simulačního programu do formátu vstupu programu interakčního a naopak, zároveň generují logy

# Schéma propojení



XYZ = univerzální formát zápisu konfigurace molekuly a jejích vlastností

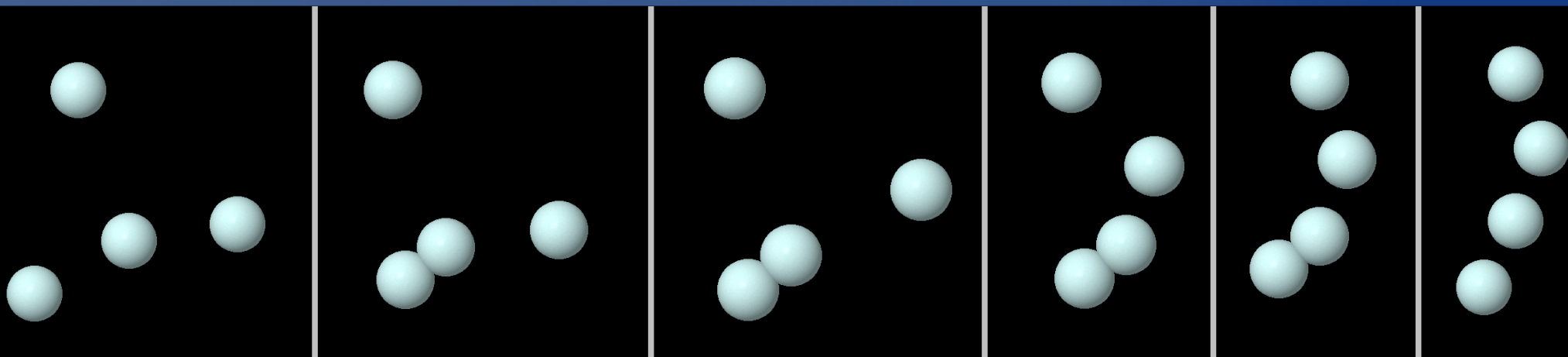
# Vlastní simulační programy

- **Simul v1** – slouží k lokální optimalizaci dvojatomové molekuly za použití horolezeckého algoritmu, účelem bylo vytvořit spolehlivý systém komunikace mezi programy
- **Simul v2** – použit rovněž horolezecký algoritmus, tato verze už ale umí lokálně optimalizovat n-atomové molekuly
- **Simul v3** – za pomocí algoritmu basin-hopping umí již efektivněji pokrýt konfigurační prostor a nacházet tak více minim => hledání strukturních izomerů
- **Simul v4** – založen na metodách evolučních strategií

*Všechny verze simulačního programu jsou psány v jazyce Fortran, stejně jako interpretační programy.*

# Basin-Hopping algoritmus

- Efektivní algoritmus pro hledání lokálních extrémů funkce, vhodný pro hledání strukturních izomerů molekul
- Pomocí něj optimalizovány molekuly  $\text{He}_{3-7}^+$
- Principem je náhodná změna polohy náhodně vybraného atomu. Tato pozměněná konfigurace je lokálně optimalizována a je-li energie této nové konfigurace nižší, přijme se tato konfigurace za výchozí pro nové generování. Pokud je energie nově optimalizované konfigurace vyšší, je přesto s určitou pravděpodobností možné, že bude přijata. Tento postup zajistí projití velké části konfiguračního prostoru. Jedná se tedy o Monte Carlo a Metropolisův algoritmus.



# Zpracování po Basin-Hopping

- Vytvoření histogramu z energií z logu
- Nalezení skupin izomerů s podobnou energií
- Vyhledání struktury s nejnižší energií v každé skupině
- Reoptimalizace struktur s nejnižší energií v rámci skupiny s použitím přesnější báze a zvýšením počtu iterací
- Výpočet energie v rámci CBS, energie nulových kmitů, vibrační frekvence



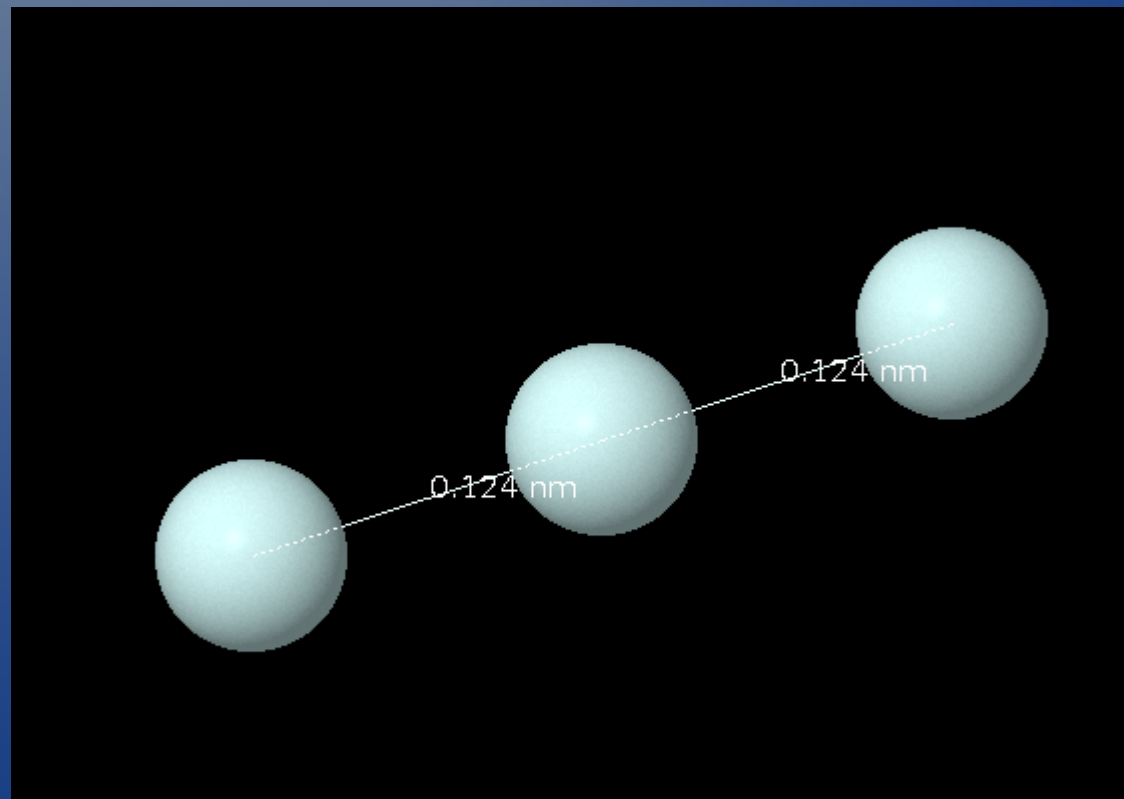
# Výpočet He3-7+

- Hledání strukturních izomerů pomocí Basin-Hopping
- Pomocí vlastního benchmarkového programu zjištěn optimální počet procesorových jader pro výpočty helia: 2 – 4 jádra
- `acc_ratio` – poměr přijatých ku nepřijatým konfiguracím nutno snížit z 0,5 na 0,1 z důvodu častých pádů Molpro, následkem čeho krok se neustále snižoval
- Pořadí izomerů dle energie se lišilo v závislosti na použité bázi



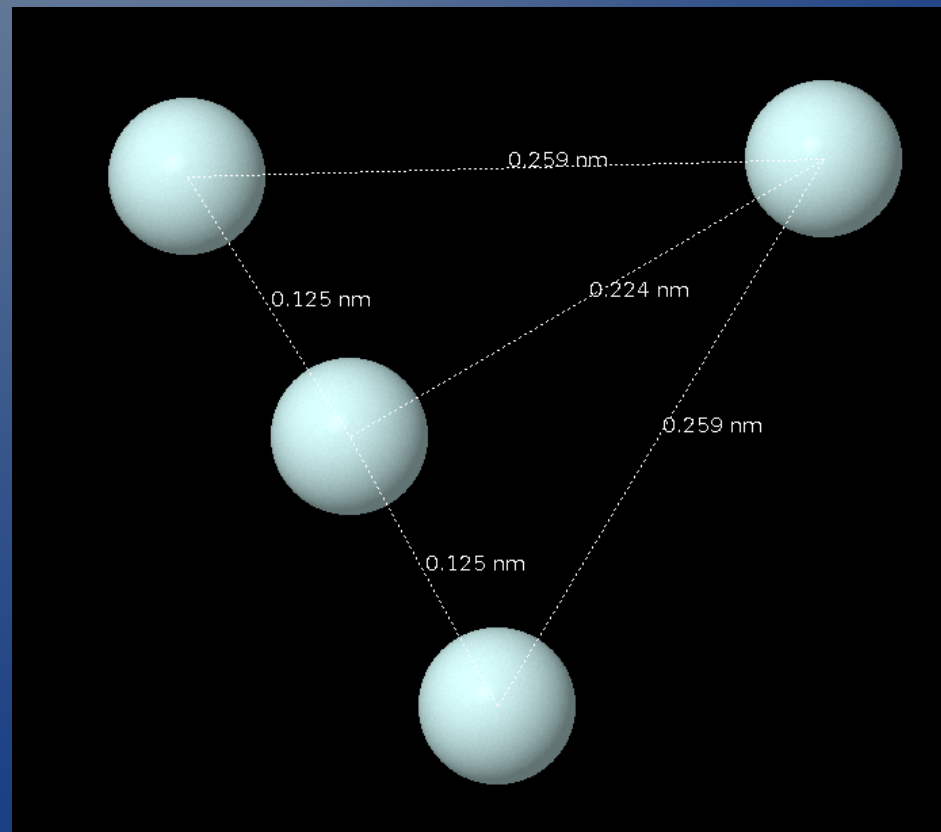
# Optimalizace $\text{He}_3^+$

- Pro výpočet byl použit algoritmus basin-hopping, kvantově chemická metoda coupled clusters, augmentovaná báze quadruple-zeta
- Byl nalezen jediný izomer

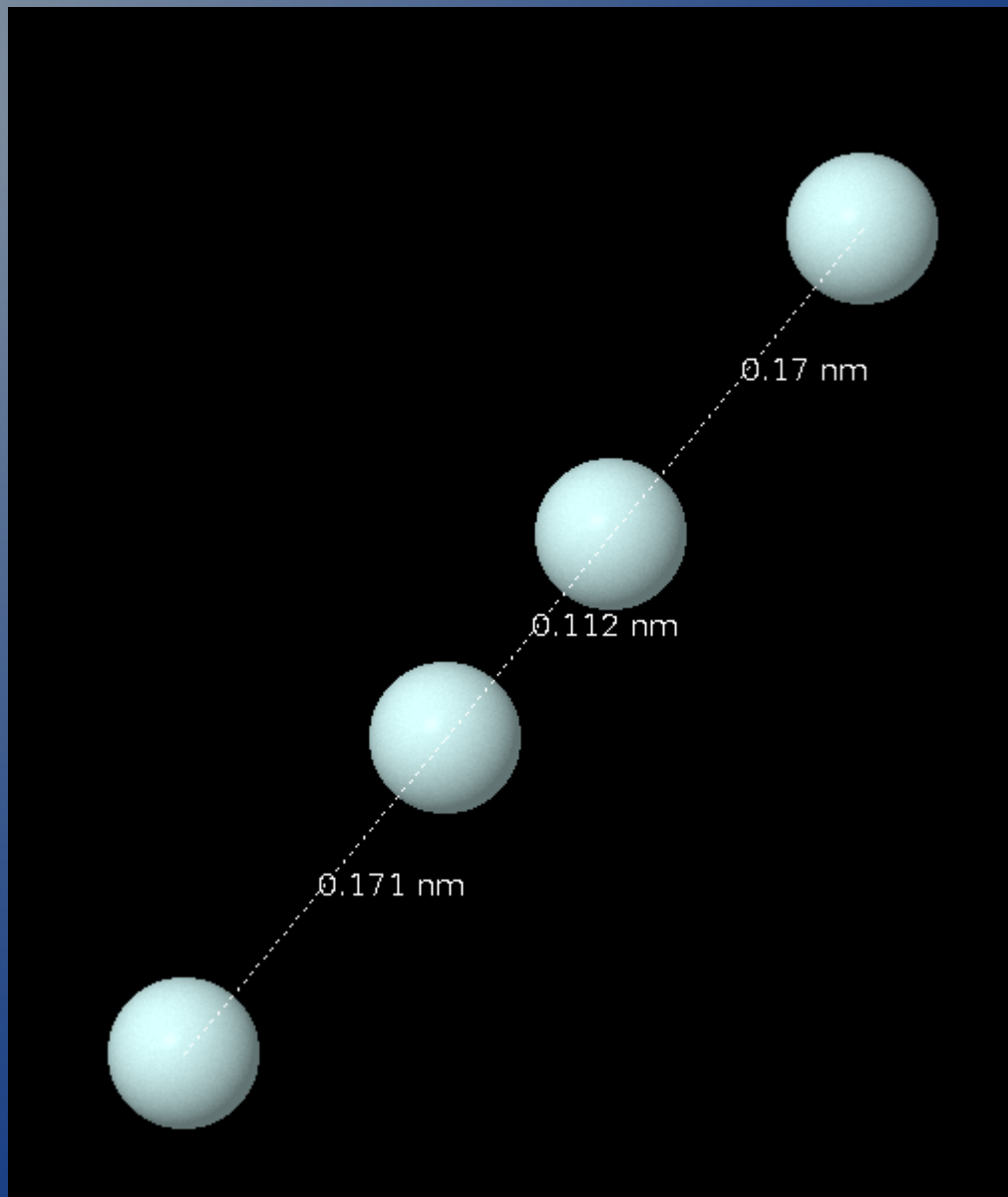


# Optimalizace $\text{He}_4^+$

- Pro výpočet byl použit algoritmus basin-hopping, kvantově chemická metoda coupled clusters, augmentovaná báze quadruple-zeta
- Byly nalezeny dva izomery

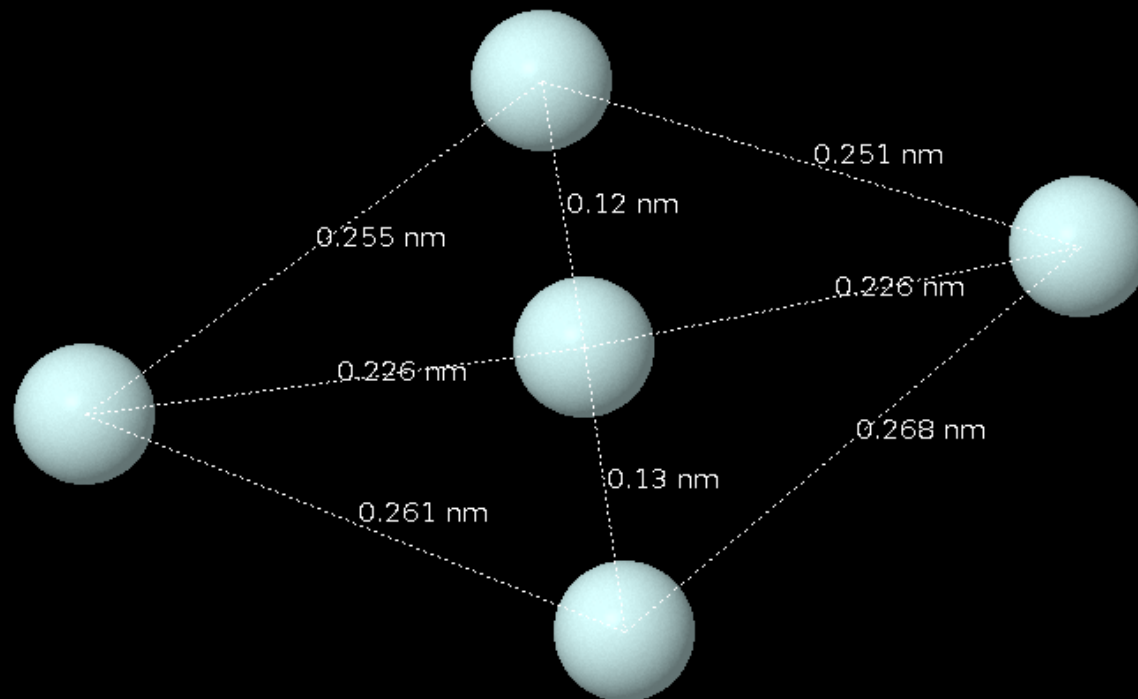


# Optimize $\text{He}_4^+$

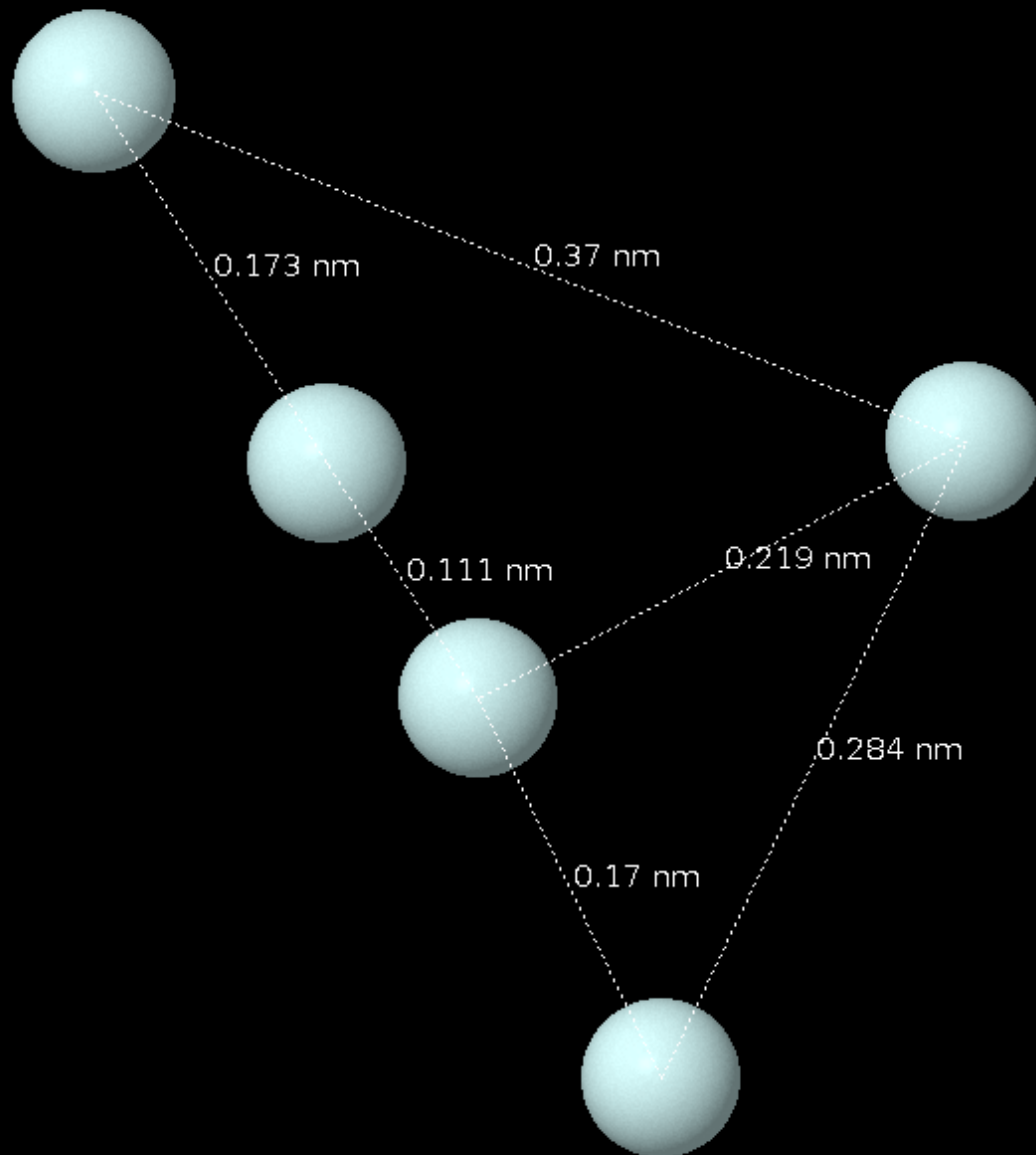


# Optimalizace $\text{He}_5^+$

- Pro výpočet byl použit algoritmus basin-hopping, kvantově chemická metoda coupled clusters, augmentovaná báze double-zeta
- Výsledky jsou podrobněji zpracovávány

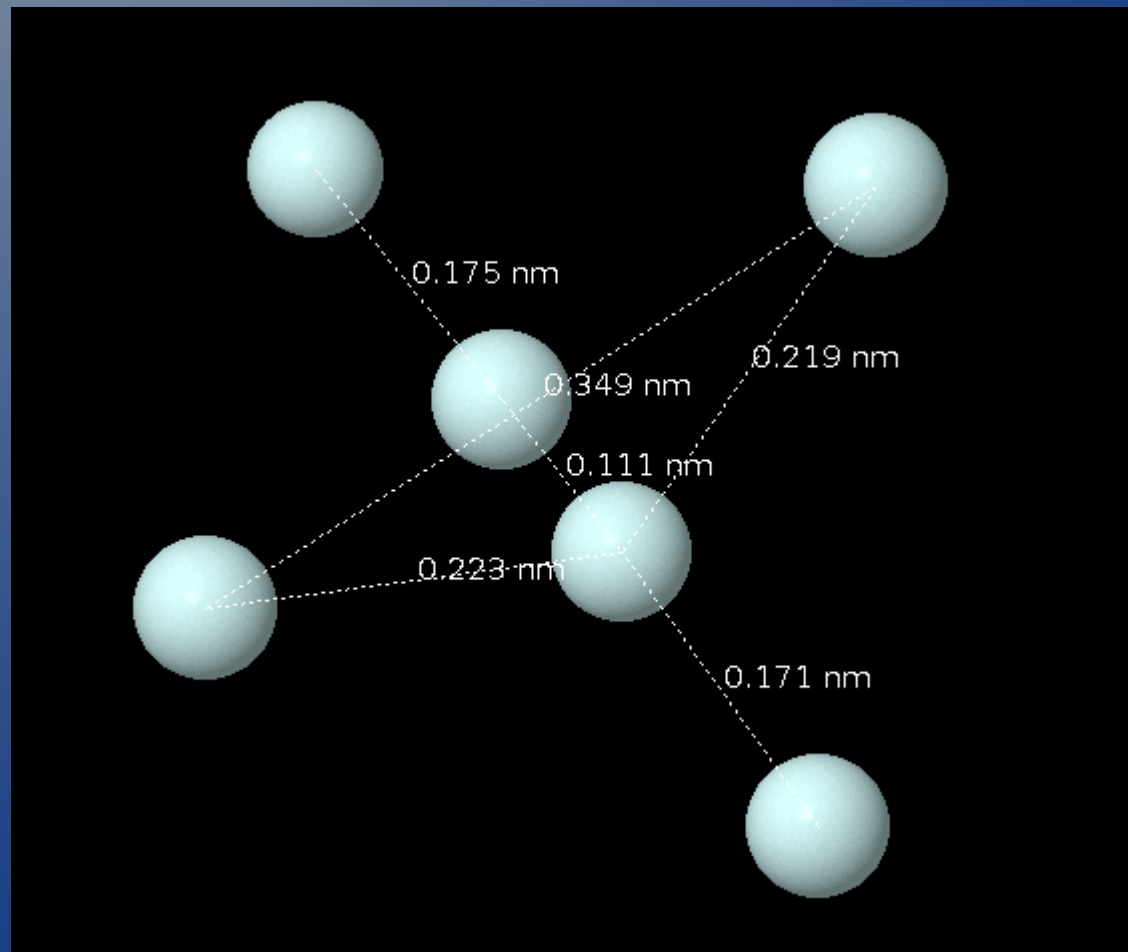


# Optimize $\text{He}_5^+$

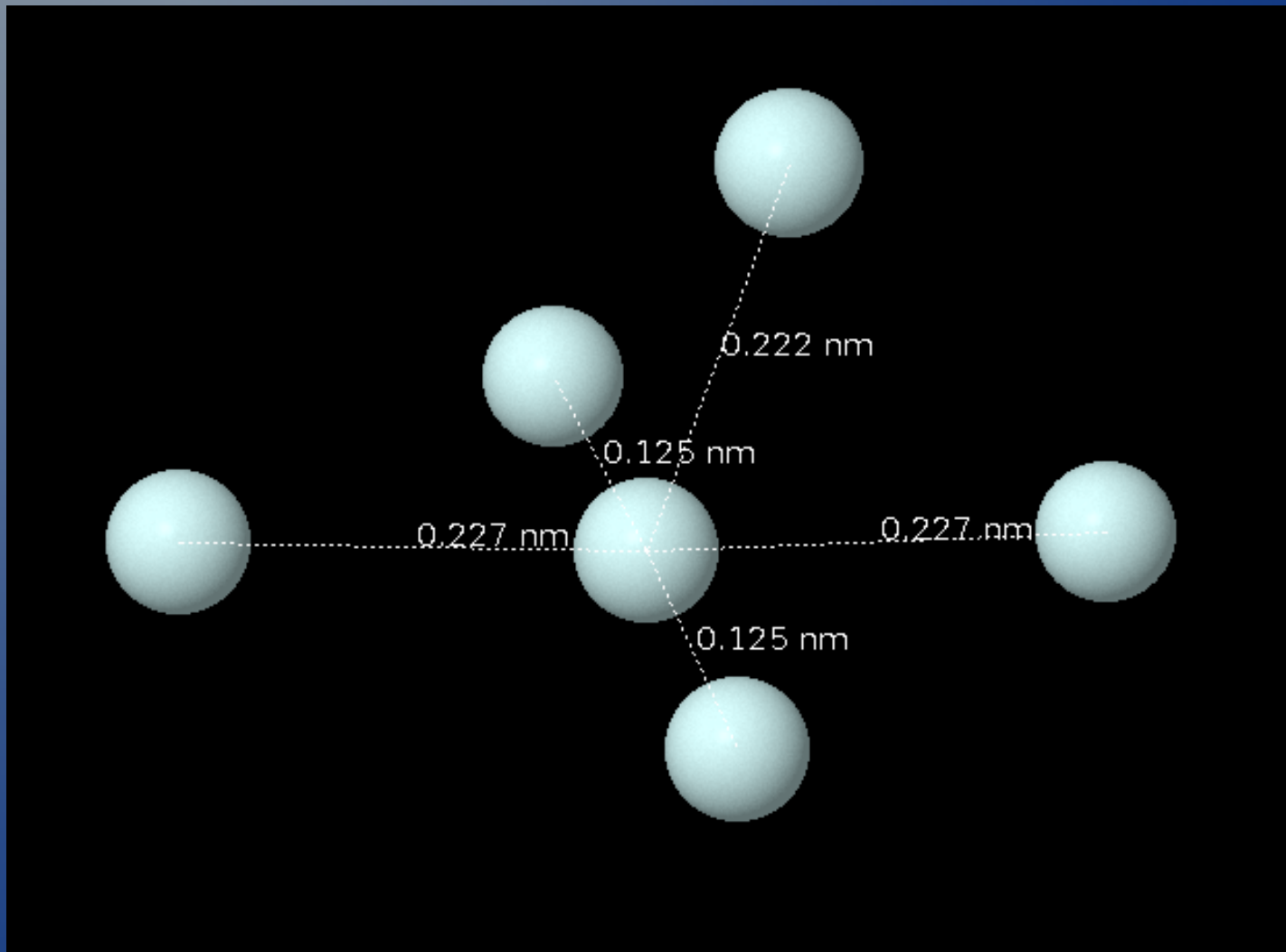


# Optimalizace $\text{He}_6^+$

- Pro výpočet byl použit algoritmus basin-hopping, kvantově chemická metoda coupled clusters, augmentovaná báze double-zeta



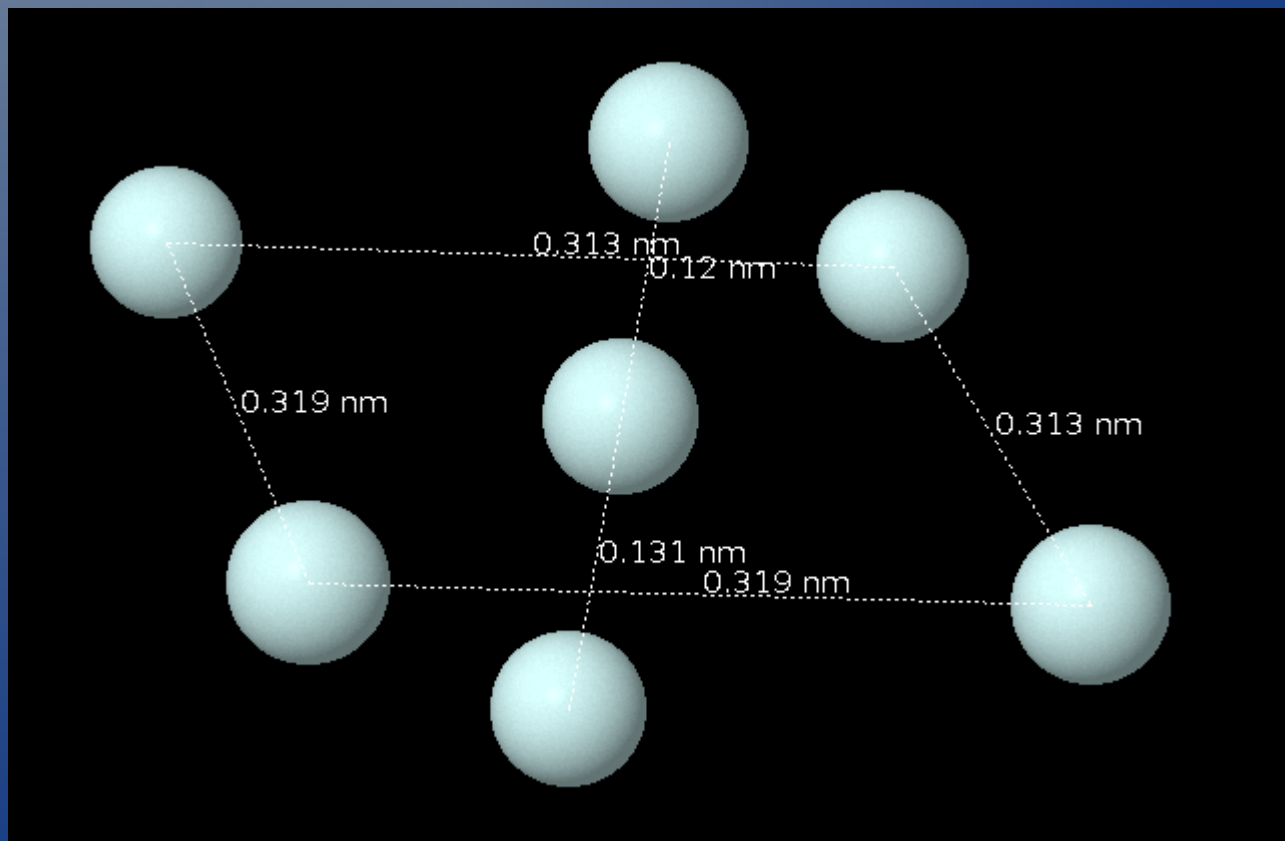
# Optimalizace $\text{He}_6^+$



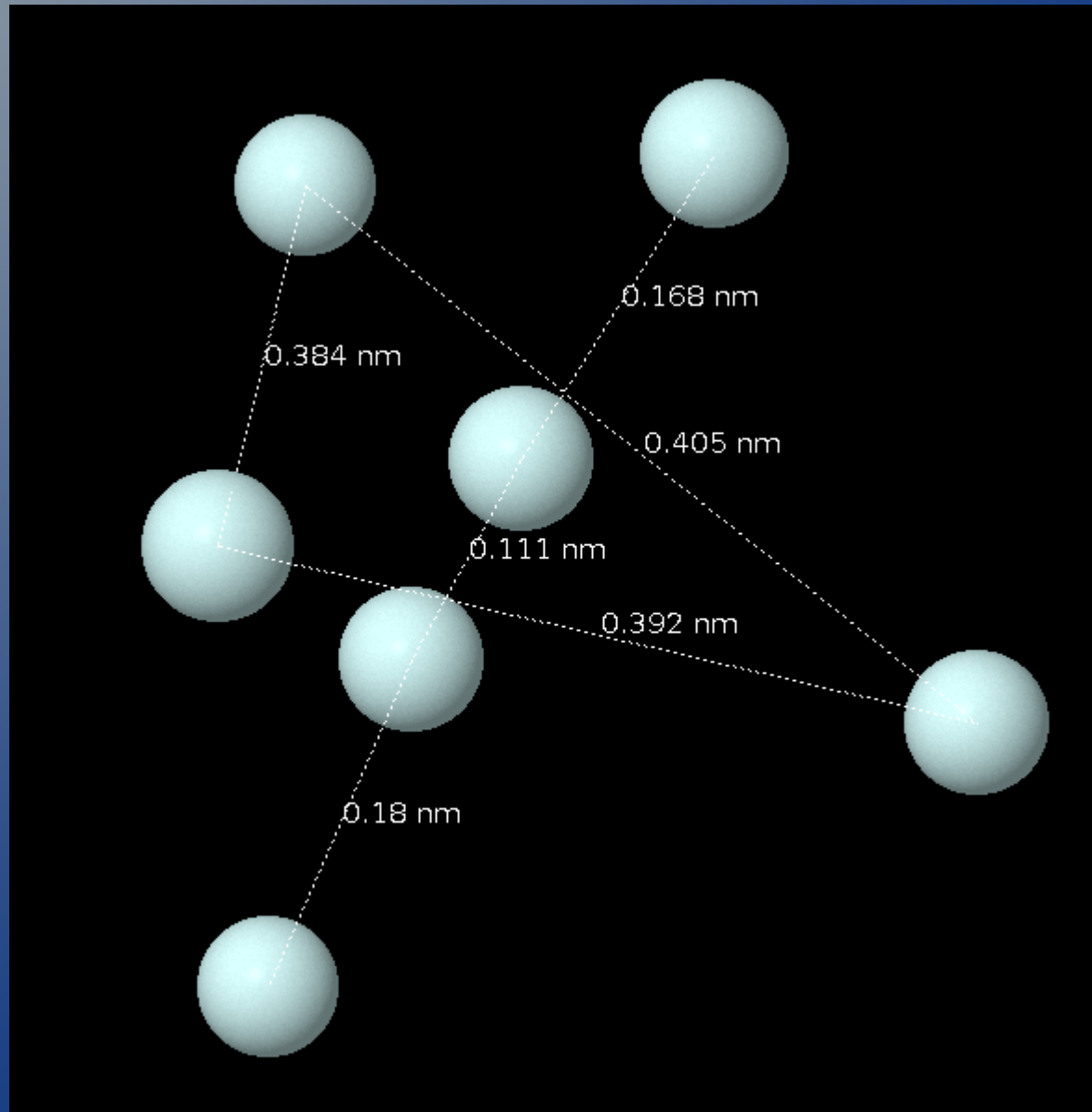


# Optimalizace $\text{He}_7^+$

- Pro výpočet byl použit algoritmus basin-hopping, kvantově chemická metoda coupled clusters, augmentovaná báze double-zeta



# Optimalizace He<sub>7</sub><sup>+</sup>



# Výhledy do budoucna

- Další zpracování výsledků výpočtů He3-7+
- Dokončit a odladit simulační program založený na metodě evolučních strategiích, který zároveň využije možnost paralelního výpočtu energií
- Spolupráce s prof. Zelinkou, jehož simulační program je založen na metodě diferenciální evoluce
- Hledání sedlových bodů v další fázi stáže
- Testování různých interakčních i simulačních program