6. prosince 2012

Otevřená věda II – zážitky a dojmy

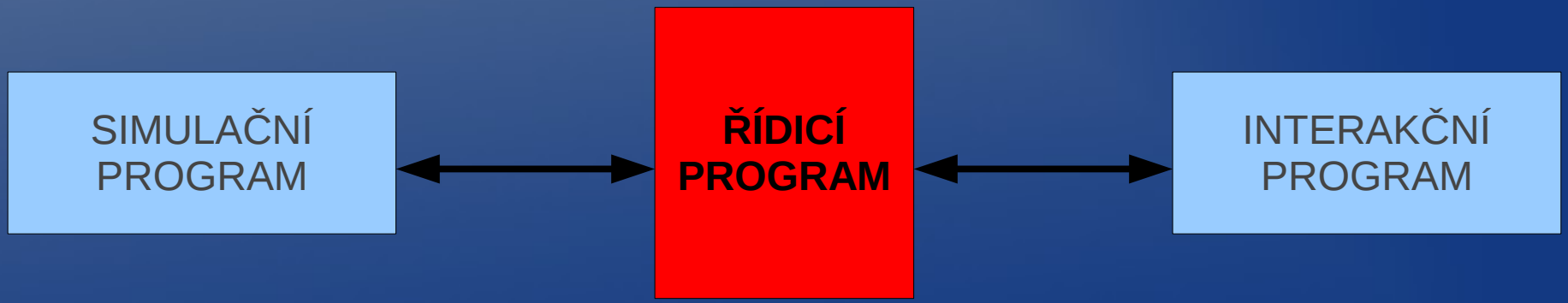
Lukáš Červenka
cerluki@seznam.cz

Studentská vědecká stáž

- Projekt Otevřená věda II
- Září 2011 až duben 2012
- Výstupem stáže je programový balík použitelný pro kohokoliv
- Další spolupráce i po ukončení stáže

Technický úvod

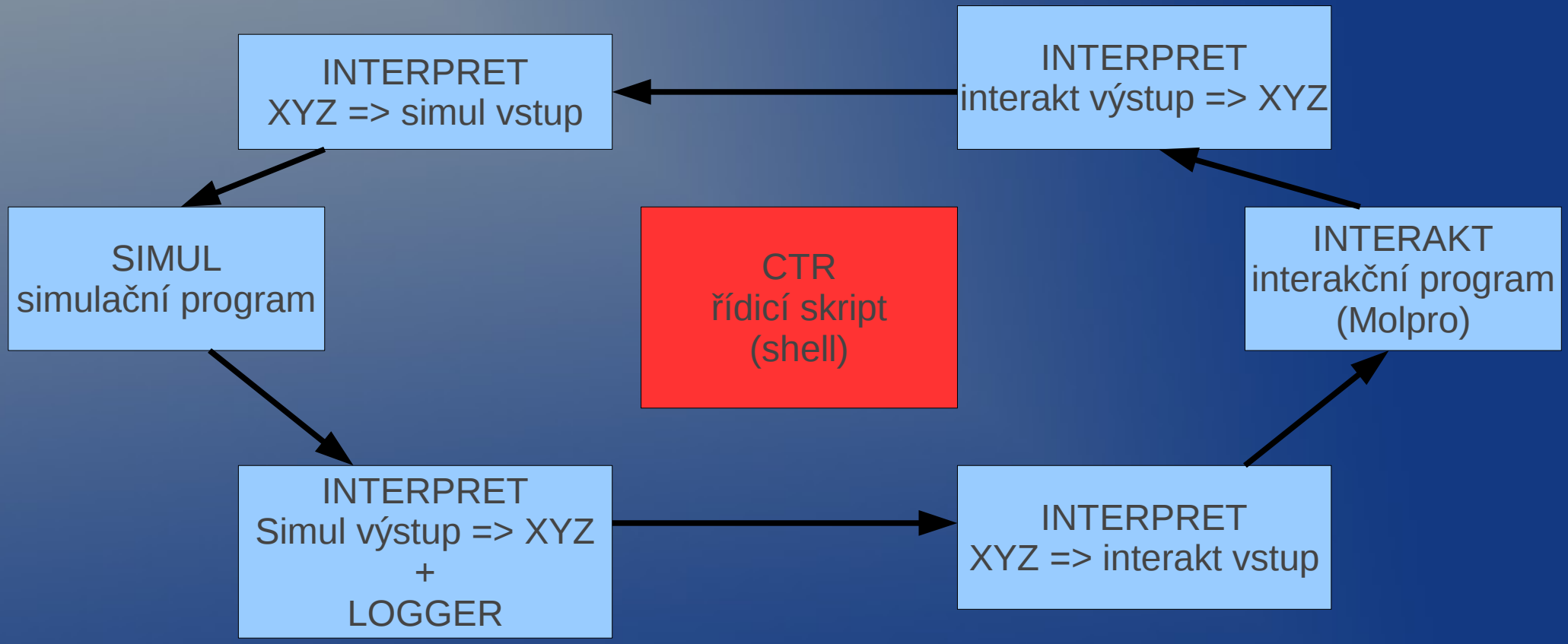
- **Existují ověřené optimalizační algoritmy k hledání stacionárních bodů**
- **Existují dobře fungující kvantověchemické softwarové balíky**



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

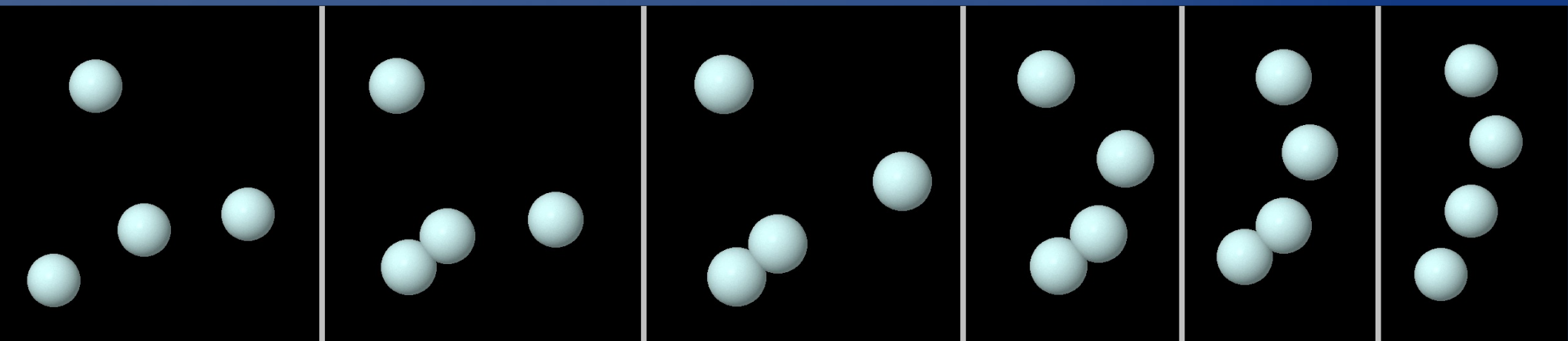
Vlastní simulační programy

- **Simul v2** – použit horolezecký algoritmus, tato verze 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 $He_{3\text{-}10}^{+}$
- 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.

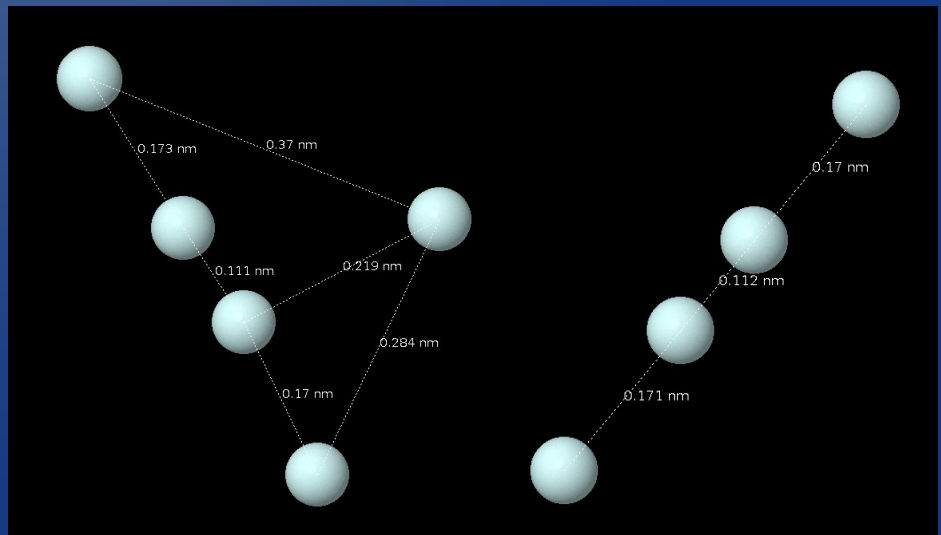


Zpracování po Basin-Hopping

- 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 He3-8+ - Molpro

- 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
- Velmi dlouhá doba výpočtu, u He8+ probíhala jedna lokální optimalizace až 90 minut



Výpočet He3-10+ - Minadjust

- Hledání strukturních izomerů pomocí Basin-Hopping
- Minadjust využívá jen jedno procesorové jádro
- acc_ratio – 0,5. Nenalezení minima interaktem bylo ojedinělým jevem
- Velmi krátká doba výpočtu v řádech jednotek sekund na jednu lokální optimalizaci
- Méně přesný model PES

Shrnutí OV II

- Velmi kladné hodnocení:
  - poznal jsem prostředí výpočtů na superpočítačích
  - možnost nahlédnout do počítačových simulací
  - přednášky z matematiky
  - skvělý přístup lektora
  - velmi dobré výsledky na soutěžích

Konference Otevřené vědy II v NTK

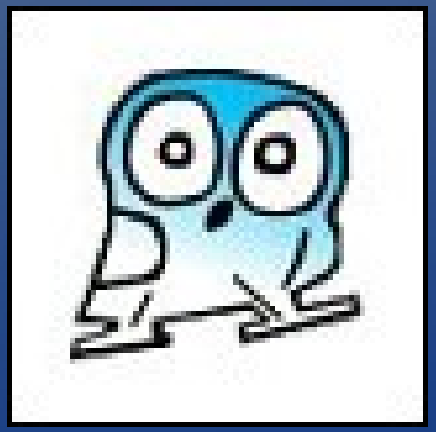
- Prezentace většiny prací z OV II ze všech oborů
- 3. a 4. dubna 2012 v Národní technické knihovně

Projev předsedy Akademie věd ČR prof. Jiřího Drahoše

HLEDÁME MLADÉ VĚDCE
Otevíráme přímou cestu ze škol k vědě
Otevřená věda II
systematické zapojení talentovaných středoškolských studentů do vědecko-výzkumné činnosti
evropský sociální fond v ČR
EVROPSKÁ UNIE
INVESTICE DO ROZVOJE VZDĚLÁVÁNÍ
www.otevrena-veda.cz
NTK
Národní technická knihovna
National Technical Library

Středoškolská odborná činnost

- Postup do celostátního kola, 1. místo
- 15. – 17. června 2012 na Gymnáziu Jiřího Ortena v Kutné Hoře
- Širší nominace na zahraniční soutěže, následně postup na EU Contest 2013 (European Union Contest for Young Scientists)



LIBRA
Microsoft
FUJITSU
brother

České hlavičky

- Výběr tří prací do finále
- Finále 17. září na VŠE v Praze
- Laureát ceny Ingenium

České hlavičky

Porota Českých hlaviček

- 1. Předseda a garant pro cenu „Merkur“: Prof. Ing. Stanislava Hronová, Csc., prorektorka pro vědu a výzkum VŠE Praha
- 2. Místopředseda a Garant pro cenu „Ingenium“: Prof. Ing. Petr Doucek, Csc., VŠE Praha
- 3. Garant pro cenu „Genus“: Prof. RNDr. Zdeněk Herman, DrSc., Ústav fyzikální chemie JH AV ČR, v. v. i.Praha, laureát Česká hlava 2003
- 4. Garant pro cenu „Futura“: Prof. Dr. Ing. Zdeněk Kůs, rektor Technické univerzity Liberec
- 5. Garant pro cenu „Abraxan“: Ing. Eva Bartoňová, 1. náměstkyně ministryně školství, mládeže a tělovýchovy ČR
- 6. Prof. RNDr. Blanka Říhová, DrSc. zástupkyně ředitele, Mikrobiologického ústavu AV ČR,v. v. i. Praha
- 7. RNDr. Jiří Grygar, Csc. astrofyzik, Fyzikální ústav AV ČR, v. v. i. Praha

České hlavičky

České hlavičky

Výhledy do budoucna

- Další zpracování výsledků výpočtů He3-10+
- Dokončit a odladit simulační program založený na metodě evolučních strategiích, který zároveň využije možnost paralelního výpočtu energií
- Hledání sedlových bodů v další fázi stáže
- Testování různých interakčních i simulačních program
- Výpočty kovových klastrů