

Optimalizácia štruktúr chemických klastrov pomocou Soft Computing metód

Mgr. Michal Mojžiš

Autor práce

doc. RNDr. Alžbeta Michalíková, PhD.

Vedúci práce

doc. RNDr. Šimon Budzák, PhD.

Konzultant

Zadanie

Klastre atómov, molekúl a mikrosolvatovaných iónov majú dôležitý význam v mnohých oblastiach chémie, ako napríklad katalýza, separácia alebo materiálové vedy. Určiť štruktúru klastrov experimentálne je náročné, pritom je však ich znalosť kľúčová pre predpovedanie chemických vlastností. Kým na hľadanie lokálnych miním štruktúr chemických klastrov existujú efektívne metódy, hľadanie tých najstabilnejších štruktúr s najnižšou energiou stále predstavuje náročný optimalizačný problém. Jeden z hlavných limitujúcich faktorov pri tomto optimalizačnom probléme je veľkosť klastra. Klastre sa skladajú z častíc, ktorých počet môže dosahovať aj milióny, a s každou ďalšou časticou sa zväčšuje dimenzionalita problému a teda aj jeho výpočtová zložitosť. Motiváciou tejto práce bolo navrhnúť a implementovať algoritmus na efektívnu globálnu optimalizáciu štruktúr chemických klastrov. Na porovnanie dosiahnutých výsledkov bol zvolený program ORCA GOAT.

Implementácia

Na riešenie tohto problému bol navrhnutý a implementovaný genetický algoritmus GenCluster. Tento algoritmus je paralelizovaný a umožňuje používateľom efektívne optimalizovať aj väčšie klastre. Na začiatku algoritmu je vygenerovaná populácia náhodných štruktúr, ktoré sú iteratívne vylepšované v každej novej generácii. V programe sú implementované špecializované genetické operátory, ktoré umožňujú vhodne prenášať štrukturálne informácie medzi štruktúrami klastrov. Program je integrovaný s rôznymi kvantovochemickými softvérmi, ktoré umožňujú vypočítať energiu a vykonávať lokálnu optimalizáciu klastrov.

Výsledky

Program GenCluster bol porovnaný s algoritmom GOAT-EXPLORE na optimalizáciu zlatých klastrov (Au_4 , Au_6 , Au_8 , Au_{16} , Au_{32}) za rovnakých podmienok (metóda GFN1-xTB, 64 jadier) a vo všetkých prípadoch našiel energeticky ekvivalentné globálne minimum výrazne rýchlejšie než GOAT-EXPLORE. Okrem toho úspešne optimalizoval aj väčší klastor Au_{64} , ktorý už presahoval naše dostupné výpočtové prostriedky potrebné pre optimalizáciu pomocou GOAT-EXPLORE, čím sa overila jeho efektívnosť pri globálnej optimalizácii štruktúr.

