



ЛАБОРАТОРИЯ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ

Вторник, 3 июля 2018 в 15.00

ком. 310

1. Шефов Константин Сергеевич (СПбГУ)

Разработка методики и комплекса программ оптимизации молекулярно-динамического потенциала для химически реактивных систем.

(по материалам кандидатской диссертации)

Работа посвящена разработке методики оптимизации многопараметрического молекулярно-динамического потенциала для химически реактивных систем и реализация этой методики в виде комплекса программ для поиска параметров потенциала ReaxFF. Предлагаемая методика представляет собой последовательность действий для поиска параметров эмпирического МД потенциала, включая выбор целевой функции, выбор и сравнение методов поиска, получение оптимизирующего набора, анализ чувствительности целевой функции к изменению параметров и собственно процесс оптимизации потенциала. В работе были реализованы несколько методов оптимизации и проведено их сравнение. В частности, используемый автором алгоритм глобального поиска Стронгина применяется для оптимизации МД потенциала впервые. Предложена собственная целевая функция. Получены параметры потенциала ReaxFF для модельных систем АН и ZnОН и выполнено МД-моделирование этих систем. Созданная методика может быть применена как к задаче получения параметров потенциалов для произвольных классов соединений, так и для решения других сложных многопараметрических оптимизационных задач.

2. Гагин Антон Викторович (СПбГУ)

Байесовские методы в задаче определения кристаллической структуры вещества.

(по материалам кандидатской диссертации)

Уточнение параметров структурной модели кристалла в рамках дифракционных методов зачастую усложняется из-за наличия систематических ошибок (СО), являющихся признаком некорректности математической модели эксперимента. Источником СО может служить, к примеру, приближенный характер описания различных эффектов в рамках кинематической теории дифракции. Один из подходов к решению данной проблемы заключается в использовании байесовских методов, которые позволяют строить различные регуляризирующие техники на основе дополнительной информации, известной о системе. На семинаре будет рассмотрен байесовский подход к проблеме учета СО в дифракционных экспериментах на примере метода Ритвельда, а также проблемы полного нейтронного рассеяния. Будет предложена методология, расширяющая стандартный байесовский подход, и позволяющая учитывать непараметризуемые СО. В рамках данного подхода будут построены вероятностные модели для СО различных типов, позволяющие дополнить модель эксперимента информацией о возможном наличии СО. Будут продемонстрированы возможности разработанного ПО, реализующего предложенную методологию. На примере модельных и экспериментальных дифракционных данных будут показаны основные преимущества предложенной методологии.