

C7790

Počítačová chemie a molekulové modelování I

C7800 Počítačová chemie a molekulové modelování I - cvičení

Referenční manuál - CBS

Petr Kulhánek

kulhanek@chemi.muni.cz

Národní centrum pro výzkum biomolekul, Přírodovědecká fakulta
Masarykova univerzita, Kotlářská 2, CZ-61137 Brno

Extrapolace na CBS

Extrapolace

$$E(x) = E_{CBS} + Ae^{-Bx}$$

Protože máme čtyři vstupní energie (pro $x=2, 3, 4, \text{ a } 5$) a jen tři neznámé (E_{CBS} , A a B) musíme použít metodu nejmenších čtverců. Cílem metody je nalézt hodnotu parametrů E_{CBS} , A a B tak, aby účelová (chybová) funkce byla minimální.

$$f(E_{CBS}, A, B) = \sum_{x=2}^5 [E(x, E_{CBS}, A, B) - E_{HF}(x)]^2 = \min!$$

K hledání optimálních parametrů můžeme použít metodu **fit** z programu **gnuplot**.

Viz originální dokumentace gnuplotu nebo:
<http://www.root.cz/clanky/gnuplot-prikaz-fit/>

Postup

- Připravíme textový soubor **data.txt**, který bude obsahovat dva sloupce: kardinální číslo báze (2, 3, 4, ...) a vypočtenou energii metodou HF.
- Spustíme program gnuplot a zobrazíme průběh energie ze souboru **data.txt**:

```
gnuplot> plot './data.txt' using 1:2 with points
```

- Definujeme funkci pro extrapolaci:

```
gnuplot> E(x) = Ecbs + A*exp(-B*x)
```

- Nastavíme výchozí hodnoty parametru pro optimalizaci:

```
gnuplot> A=1
```

```
gnuplot> B=1
```

```
gnuplot> Ecbs=-80 # nizsi nez nejmensi vypoctena energie
```

- Provedeme před-optimalizaci parametrů (E_{CBS} a A a pak finální optimalizaci všech parametrů:

```
gnuplot> fit E(x) './data.txt' via Ecbs, A
```

```
gnuplot> fit E(x) './data.txt' via Ecbs, A, B
```

Postup, pokračování

- Zobrazíme vstupní data, funkci $E(x)$ a hodnotu E_{CBS} . Provedeme vizuální kontrolu získaných výsledů. Funkce $E(x)$ musí procházet všemi body a limitně se blížit nalezené hodnotě E_{CBS} .

```
gnuplot> set xrange[2:7]
```

```
gnuplot> plot './data.txt' using 1:2 with points, E(x), Ecbs
```

- Vypíšeme přesnou hodnotu E_{CBS}

```
gnuplot> print Ecbs
```

