

# TSM

# Modelování molekulárních struktur

Referenční manuál - CBS

Petr Kulháněk

[kulhanek@chemi.muni.cz](mailto: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  $x=2, 3, 4, a 5$ ) 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 ( $E_{\text{CBS}}$  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  $E_{\text{CBS}}$ . Provedeme vizuální kontrolu získaných výsledů. Funkce  $E(x)$  musí procházet všemi body a limitně se blížit nalezené hodnotě  $E_{\text{CBS}}$ .

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

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

- Vypíšeme přesnou hodnotu  $E_{\text{CBS}}$

```
gnuplot> print Ecbs
```

