



# ЛАБОРАТОРИЯ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ

**Среда, 13 ноября 2019 г., 15.00**

**Конференц-зал**

**Шефов К.С. (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 реализации 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. Исследована масштабируемость созданного программного комплекса. Получены параметры потенциала ReaxFF для модельных систем AlH и ZnOH 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.