

Válasz Dr. Kégl Tamás bírálataira

Köszönöm bírálómnak, hogy elvállalta dolgozatom véleményezését. Köszönöm a részletes áttekintést, az észrevételeket és a támogató bírálatot.

A feltett kérdésekre az alábbiakban válaszolok.

1. Az általános jellegű erőterek közül milyen megfontolások alapján választották ki a CHARMM erőteret?

A CHARMM potenciálmodell-rendszert a kaolinnal végzett részletesebb szimulációinkhoz választottuk, némileg azért, mert a kaolinitre általunk nagyon jónak talált INTERFACE potenciálmodell lényegében ennek egy direkt kiterjesztése. Nem elvi alapon döntöttünk a hasonló, általános jellegű és hasonlóan pontos potenciálmodell-rendszerekkel szemben (pl. AMBER, GROMOS). Praktikus szempontként közrejátszott az is, hogy párhuzamosított MD szimulációkra az általunk nem sokkal korábban alkalmazni kezdett GROMACS programcsomag a CHARMM potenciálmodell-rendszerrel könnyen tudott együttműködni, továbbá a modellrendszer keretein belül és kiterjesztéseivel (pl. CGenFF) több vizsgált anyagunkra is jó teszteredményeket kaptunk. 2013-as választásunkban szubjektív szerepet játszott még az a tény is, hogy Martin Karplus, akinek nevéhez a CHARMM program és potenciálmodell-rendszer elsősorban fűződik, abban az évben kapta meg a kémiai Nobel-díjat.

2. Gyanítom, az „SPV” bázis (68. old) valójában SVP volt (felhasított vegyérték, polarizációs függvényekkel).

Természetesen itt társszerzőim egy közös kutatásunkhoz tett hozzájárulásának említésekor vétett elírásról van szó, ezért még inkább illett volna nem téveszteni.

3. Egy rövid leírás a saját fejlesztésű MC programról érdekes lenne (felépítés, input és output fájlok, a futásidő skálázódása a CPU szám függvényében, párhuzamosítás technikai megoldása).

Dolgozatom bevezetőjében említem, hogy eleinte többféle saját MC szimulációs programot használtam, amelyeket Fortran programnyelven magam készítettem, és csak a későbbi munkák mögött állt egy, általam és doktori témavezetettjeim által folyamatosan fejlesztett C++ programnyelvű házi programcsomag. A kérdés nyilván ez utóbbira vonatkozik, amely párhuzamosításra a korábbiakhoz hasonlóan nem lett felkészítve, mivel a befektetést nem éreztük arányban állónak a futási sebességben

várható nyereséggel. Tudjuk, hogy alapesetben az MC szimulációk nem alkalmasak párhuzamosításra, de persze azt is, hogy léteznek erre megoldások (több részecske léptetése egyszerre, a szimulációs rendszer tartományokra bontása, stb.), csak mindegyikük kompromisszumokkal jár (ld. pl. kisebb elfogadási valószínűségek megjelenése). Ám a legfontosabb okunk az volt, hogy a nehezebb szimulációs problémák kezelésére folyamatosan építettünk be a programcsomagba speciális (irányítós) MC mintavételezési technikákat, és ezek a párhuzamosítás tekintetében egyedi megoldásokat igényeltek volna. A programcsomag objektumorientált, egyszerűen testreszabható, és könnyen alkalmazható pl. egyszerre több szimulációs cella egyetlen számításban való kezelésére. A szoftver ezen túl is erősen strukturált (hagyományosan, nagyszámú kisebb szubrutinból, modulból áll), és ez igaz az input-output fájlok felépítésére is. Ez utóbbiak viszonylag kötött formátuma első közelítésben kényelmetlenséget jelent, ugyanakkor elősegíti az adatok jobb áttekinthetőségét, és sokkal kevesebb lehetőséget ad a véletlen hibák elkövetésére. Flexibilitásának köszönhetően, a számított eredmények és azok állományba kiírásának részletessége tekintetében a szoftvernek nagyon sok változata létezik.

4. Volt lehetőség GPU gyorsításra akár a nagyon drága MD számítás, akár a saját MC számítások esetében?

Az MD számításainkban GPU kártyás próbálkozásokra eleinte nem volt lehetőségünk, az MC számításainkban pedig ezeknek programozási okokból kevesebb értelme is lett volna. A dolgozatomban nem említettem, hogy e hardverek alkalmazását nemrégiben, kaolinnal végzett nagy számításigényű MD szimulációkban már teszteltük. Tudjuk, hogy ezek más programozási megoldásokat igényelnek (pl. a szimulációs rendszer tartományokra bontására nézve), és a számítási pontosságuk nem minden feladatra kielégítő. Tapasztalataink szerint GPU kártyás számításokat főképpen akkor érdemes végezni, ha a részfeladatokat a hagyományos többprocesszoros párhuzamosításkor alkalmazottaknál sokkal több, hasonló időigényű számítási szála lehet szétosztani (ezért pl. kedvezményezettek itt a vektorműveletek). Kutatóhelyünkön jelenleg tervben van egy ilyen komolyabb eszköz beszerzése.


5. Ahol a Szerző szabadenergiát ír, ott a Helmholtz-féle szabadenergiáról van szó?

Ahol szükséges volt, dolgozatomban megkülönböztettem a két energiafüggvényt, a szabadenergia és a szabadentalpia kezelését. Az angol szakirodalomban az első energiafüggvényre általában a „Helmholtz free energy”, a másodikra a „Gibbs free

energy” megnevezést használják, azonban gyakran mindkettőt egyszerűen „free energy” néven illetik. A pontatlanság annyiban megengedhető, hogy kondenzált fázisokra a köztük levő különbség (a pV szorzat) gyakran elhanyagolhatóan kicsi, és ezért nem fontos foglalkozni vele. Ezzel függ össze, hogy ahol dolgozatomban csak általánosságban írok NVT (kanonikus) és NpT (izoterm-izobár) sokaságokon értelmezett rendszerek egyensúlyát jellemző termodinamikai állapotfüggvényekről, ott sommásan pusztán szabadenergiát említek.

Végezetül még egyszer szeretnék köszönetet mondani bírálómnak az építő jellegű megjegyzésekért és a gondos olvasásért.

Veszprém, 2023. december 22.

A handwritten signature in blue ink that reads "Kristóf Tamás". The signature is written in a cursive style and is positioned above a horizontal dotted line.

Kristóf Tamás