

Lukáš Červenka – vítěz soutěže Česká hlavička 2012

17. října byly v Brně vyhlášeny ceny za nejlepší vědecké práce středoškoláků za letošní rok - České hlavičky. K naší velké radosti se v kategorii Ingenium, do níž spadají projekty z oblastí informatiky, matematiky, elektrotechniky, programování a komunikace, stal vítězem student Lukáš Červenka z Gymnázia ve Frýdlantu nad Ostravicí.



(Zdroj: <http://www.soc.cz/>)

Odborná porota složená ze zástupců vysokých škol a Akademie věd ocenila práci s dlouhým názvem [Propojení optimalizačních programů s kvantověchemickými softwarovými balíky](#), která vznikla v rámci stáže, kterou student absolvoval pod vedením doc. RNDr. Reného Kaluse, Ph. D. na Katedře aplikované matematiky, Fakultě elektrotechniky a informatiky Vysoké školy báňské – Technické univerzity Ostrava.

Stáž byla součástí projektu Otevřená věda, který je zaměřen na popularizaci přírodovědných a technických oborů. V rámci projektu je umožněno talentovaným studentům SŠ a VŠ docházet na stáže na vědeckých pracovištích a podílet se pod odborným vedením na vědeckém výzkumu.

A čím se vlastně Lukáš Červenka na své stáži zabýval?

Ve fyzice molekul reprezentují jednotlivá minima potenciální energie strukturní izomery a sedlové body na nadploše této energie takové body, kterými při změně prochází jeden strukturní izomer v izomer druhý. Existuje mnoho algoritmů, které dokáží spolehlivě najít minima funkce, a méně algoritmů, které jsou schopny nalézt sedlové body. Současně existuje několik kvantověchemických softwarových balíčků, které jsou schopny velmi přesně numericky vypočítat potenciální energii určité konfigurace molekuly, gradient této energie apod. Hlavním přínosem Lukášovy práce je skutečnost, že dokázal propojit programy implementující optimalizační algoritmy s kvantověchemickými programy, zajistit vzájemnou výměnu dat, výpočet paralelizovat, zaznamenávat průběh výpočtu a ošetřit výjimky běhu. Byla zachována obecnost řešení, libovolný program je tedy možno nahradit programem jiného dodavatele. Vytvořil rovněž několik vlastních optimalizačních programů. Vyvinuté programy byly použity k lokální optimalizaci vybraných molekul a k hledání strukturních izomerů iontových klastrů vzácných plynů argonu a helia.

Lukášovi Červenkovi i jeho konzultantovi, doc. RNDr. Renému Kalusovi, Ph.D., gratulujeme!