

СИСТЕМА РАСШИРЕННЫХ КВАНТОВО-МЕХАНИЧЕСКИХ ВЫЧИСЛЕНИЙ НА БАЗЕ РЕЗУЛЬТАТОВ РАСЧЕТА ПРОГРАММЫ GAUSSIAN03

Запрягаев С.А., Карпушин А.А.

Воронежский госуниверситет, факультет компьютерных наук,
кафедра «Информационных технологий»,
Россия, 394006, Воронеж, Университетская пл.1, zsa@main.vsu.ru

В последние годы, для проведения молекулярных расчетов и наноструктурных кластеров, получил широкое распространение программный комплекс Gaussian03. Важным набором выходных данных комплекса являются значения ряда скалярных функций, таких как плотность заряда, потенциал, молекулярные орбитали и т.п., которые представляются в виде массива значений в пространственных точках (x,y,z), образующих «куб» данных. В реальных системах такой «куб» обычно содержит миллионы точек. Использование этих данных позволяет проводить квантово – механические расчеты для ряда стандартных задач квантовой теории – теории рассеяния, теории взаимодействия молекул с внешним полем и т.д., не включенные в набор процедур оболочки Gaussian03.

В настоящей работе представлена программная оболочка, позволяющая расширить перечень задач, которые могут быть решены на базе результатов расчета комплекса Gaussian03. В данной реализации включены задачи, сводящиеся к вычислению двух и трехкратных интегралов от функции содержащей в качестве сомножителя функции, записанные в «кубе» данных оболочки Gaussian03 и осциллирующие функции из класса известных специальных функций. Для реализации процедур численного интегрирования многократных интегралов, с целью контроля точности вычислений, используются ряд стандартных методов, обобщающих квадратурные формулы на многомерные квадратуры, а также вероятностные методы.

В связи с осциллирующим характером подынтегральных функций в оболочке реализована наглядная система визуализации данных и подынтегральных функций с учетом реальной структуры молекулярного объекта или кластера. Визуализация данных осуществляется путем выборки данных из «куба», лежащих на произвольно ориентированной плоскости. Секущая плоскость задается интерактивно, что позволяет следить за изменением значения функции внутри куба динамически. Данный прием позволяет установить корректный выбор шага интегрирования и обеспечивает контроль точности значения многократного интеграла.

При создании программной оболочки использовалась среда разработки Microsoft Visual Studio 2005 и языки программирования C++, Managed C++, C#. Программное обеспечение состоит из трех слоев: базовый слой (на языке C++), слой интерфейса пользователя (на языке C#) и слой-обертка (на языке Managed C++). Данная архитектура оболочки позволит работать с оболочкой и под управлением UNIX – систем, так как основная логика содержится в независимом от платформы базовом слое.