

# Инструкции к программам системы LevInfinite

Все программы находятся в папке C:\LEVINFINITE\PROGRAMS. Программы, являющиеся скриптами MatLab и снабженные расширением .m, вызываются из рабочей среды MatLab, которая должна быть настроена на рабочую директорию C:\LEVINFINITE\PROGRAMS. В командном окне MatLab задается имя программы без расширения. Программы с расширением .exe вызываются средствами операционной системы.

## Программы для решения прямых задач теории колебаний молекул

### Программа symlev.exe

**Назначение.** Распознает группу симметрии молекулярной модели, приготавливает матрицу  $C$  для приведения колебательного гамильтониана модели к блочному виду. Каждый блок относится к одному типу симметрии колебаний, поэтому для таких блоков решения прямых задач могут получаться в независимых расчетах. В частности, для решения задач во всех блоках одновременно можно использовать суперкомпьютер в режиме параллельных вычислений. На персональном компьютере решения для блоков получаются в режиме последовательных вычислений. Вызывать программу следует после формирования матрицы  $B$  модели либо программой Bstruct.m, либо программой сшивания фрагментов JoinFragments.m. В обоих случаях формирование модели надо предварительно довести до сохранения в папке модели текстовых файлов, содержащих информацию о структуре матрицы  $B$ . В программе Bstruct.m для этого надо дать соответствующую команду, а программа JoinFragments.m делает это автоматически, если не возникло ошибок при сшивании фрагментов.

**Входные данные.** Для отыскания папки модели, с которой ей предлагается работать, программа использует информацию, содержащуюся в файле ToCalculate.ini, который надо заранее приготовить и поместить в папку Config системы LevInfinite. В этом файле должна находиться единственная строка с именем папки модели. Если модель только что сформирована программами Bstruct.m или JoinFragments.m, то имя папки модели оказывается в файле ToCalculate.ini автоматически. Программа обращается к папке модели и находит там информацию о структуре матрицы  $B$ , содержащуюся в текстовых файлах. Этой информацией программа пользуется для распознавания группы симметрии модели и для построения матрицы  $C$ .

**Выходные данные** представляют собой три файла. Файл Symmetry.txt содержит описание группы симметрии модели, перечисление генераторов группы и распределение колебательных координат симметрии по блокам. Там же находится необязательная информация о координатах атомов модели, приведенной к главным осям инерции. Программа не выполняет этого приведения модели, предоставляя пользователю решать, надо ли заменить координаты атомов в файле Bstruct.mat средствами программы Bstruct.m для дальнейших расчетов. Файл Smatrix.txt содержит записанную по блокам, а в блоках по строкам нормализованную матрицу  $S$ . Файл Errors.txt ненулевой длины возникает при обнаружении ошибки. Если группа симметрии распознана благополучно, длина этого файла равна нулю. Программа вносит изменения в файл InfTable.txt. Туда вносится найденное программой число блоков симметрии, на которое ориентируются все последующие расчетные программы.

### **Программа MatrixT.m**

**Назначение.** Формирует верхний треугольник матрицы  $T$  модели, либо записанный по блокам верхний треугольник матрицы  $T_s$  модели, для которой приготовлена матрица преобразования симметрии  $S$ .

**Входные данные.** Для отыскания папки модели, с которой ей предлагается работать, программа использует информацию, содержащуюся в файле ToCalculate.ini, который надо заранее приготовить и поместить в папку Config системы LevInfinite. В этом файле должна находиться единственная строка с именем папки модели. Если модель только что сформирована программами Bstruct.m или JoinFragments.m, то имя папки модели оказывается в файле ToCalculate.ini автоматически. Программа обращается к папке модели и находит там информацию о структуре матрицы  $B$ , содержащуюся в текстовых файлах, а также файл Smatrix.txt, если была распознана группа симметрии модели. Этой информацией программа пользуется для формирования матрицы  $T$  модели и приведения этой матрицы к координатам симметрии.

**Выходные данные** в папке модели представляют собой файл Tr.txt, либо Ts.txt. Если при симметризации возникает ошибка, то в командное окно MatLab выдается краткая диагностическая информация, и программа останавливается.

Имеется второй вариант программы. Это отдельно стоящая программа MatrixT.exe. Она вызывается из операционной системы, требует тех же исходных данных, выдает те же результаты, но работает быстрее. Ею следует пользоваться для работы с очень большими моделями. Информация об ошибке в этом случае выдается в файл Errors.txt.

## **Программа diag1.m**

**Назначение.** Диагонализует верхний треугольник матрицы  $T$  модели, либо записанный по блокам верхний треугольник матрицы  $T_s$  модели, для которой приготовлена матрица преобразования симметрии  $S$ .

**Входные данные.** Для отыскания папки модели, с которой ей предлагается работать, программа использует информацию, содержащуюся в файле ToCalculate.ini, который надо заранее приготовить и поместить в папку Config системы LevInfinite. В этом файле должна находиться единственная строка с именем папки модели. Если модель только что сформирована программами Bstruct.m или JoinFragments.m, то имя папки модели оказывается в файле ToCalculate.ini автоматически. Программа обращается к папке модели и находит там информацию о структуре матрицы  $T_s$  или  $T$ , содержащуюся в текстовых файлах.

**Выходные данные** в папке модели представляют собой файлы Bdr.txt, Tau.txt и Ms.txt с результатами первой диагонализации колебательного гамильтониана. Для пользователя может представлять интерес файл Ms.txt. В нем по блокам симметрии приводится определенной программой число независимых колебательных координат модели. Тем самым, здесь определяется число нормальных колебаний в каждом блоке симметрии. Если при диагонализации возникает ошибка, то в командное окно MatLab выдается краткая диагностическая информация, и программа останавливается.

Имеется второй вариант программы. Это отдельно стоящая программа diag1.exe. Она вызывается из операционной системы, требует тех же исходных данных, выдает те же результаты, но работает быстрее. Ею следует пользоваться для работы с очень большими моделями. Информация об ошибке в этом случае выдается в файл Errors.txt. Следует учитывать особенность диагонализации матриц  $T_s$  очень больших размеров. Такие матрицы могут иметь очень малые собственные числа, и программа может выдавать неверную диагностику о наличии отрицательных собственных чисел, которых не может быть в силу положительной определенности матрицы  $T_s$ . Отрицательные собственные числа это «испорченные» накоплением ошибок нулевые собственные числа, соответствующие зависимостям между колебательными координатами модели. Если возникает такая ситуация, то в папку модели надо для программы поместить текстовой файл Discrim.txt. Он содержит единственное число. Это дискриминатор, возможная нижняя граница положительных собственных чисел матрицы  $T_s$ . Собственные числа, по абсолютной величине меньше этого дискриминатора, программа будет отбрасывать как нулевые. Образец файла Discrim.txt. можно найти в папке Config. Величину

дискриминатора придется подбирать индивидуально для каждой крупной модели. Более подробно об этой проблеме сказано в разделе 5.2. «Алмазная пыль. Что удалось найти в алмазной пыли» главы 5.

### **Программа MatrixU.m**

**Назначение.** Формирует верхний треугольник матрицы  $U$  модели, либо записанный по блокам верхний треугольник матрицы  $U_s$  модели, для которой приготовлена матрица преобразования симметрии  $S$ . Вызывать программу следует после формирования с помощью программы `Umiu.m` файлов `Umiu.mat` и `Uqsparse.txt` в папке модели.

**Входные данные.** Для отыскания папки модели, с которой ей предлагается работать, программа использует информацию, содержащуюся в файле `ToCalculate.ini`, который надо заранее приготовить и поместить в папку `Config` системы `LevInfinite`. В этом файле должна находиться единственная строка с именем папки модели. Если силовые параметры модели только что сформированы программой `Umiu.m`, то имя папки модели оказывается в файле `ToCalculate.ini` автоматически. Программа обращается к папке модели и находит там информацию о структуре матрицы  $U$ , содержащуюся в текстовом файле `Uqsparse.txt`, а также файл `Smatrix.txt`, если была распознана группа симметрии модели. Этой информацией программа пользуется для формирования матрицы  $U$  модели и приведения этой матрицы к координатам симметрии.

**Выходные данные** в папке модели представляют собой файл `Uq.txt`, либо `Us.txt`. Если при симметризации возникает ошибка, то в командное окно `MatLab` выдается краткая диагностическая информация, и программа останавливается.

Имеется второй вариант программы. Это отдельно стоящая программа `MatrixU.exe`. Она вызывается из операционной системы, требует тех же исходных данных, выдает те же результаты, но работает быстрее. Ей следует пользоваться для работы с очень большими моделями. Информация об ошибке в этом случае выдается в файл `Errors.txt`.

### **Программа diag2.m**

**Назначение.** Вычисляет частоты колебаний модели и формы нормальных колебаний в различных представлениях. С этой целью диагонализует верхний треугольник матрицы  $U_q$  модели, либо записанный по блокам верхний треугольник матрицы  $U_s$  модели, для которой приготовлена матрица преобразования симметрии  $S$ .

**Входные данные.** Для отыскания папки модели, с которой ей предлагается работать, программа использует информацию, содержащуюся в файле `ToCalculate.ini`, который надо

заранее приготовить и поместить в папку Config системы LevInfinite. В этом файле должна находиться единственная строка с именем папки модели. Если силовые параметры модели только что сформированы программой Umiu.m, то имя папки модели оказывается в файле ToCalculate.ini автоматически. Программа обращается к папке модели и находит там информацию о структуре матрицы  $U_s$  или  $U_q$ , содержащуюся в текстовых файлах. **Выходные данные** в папке модели представляют собой файлы Freqs.txt, Lp.txt (Ps.txt), Lq.txt (Ls.txt) и Shifts.txt с результатами второй диагонализации колебательного гамильтониана. Если при диагонализации возникает ошибка, то в командное окно MatLab выдается краткая диагностическая информация, и программа останавливается.

Имеется второй вариант программы. Это отдельно стоящая программа Diag2.exe. Она вызывается из операционной системы, требует тех же исходных данных, выдает те же результаты, но работает быстрее. Ею следует пользоваться для работы с очень большими моделями. Информация об ошибке в этом случае выдается в файл Errors.txt.

### **Программа intir.m**

**Назначение.** Вычисляет абсолютные интенсивности в ИК спектре модели и составляющие изменения вектора дипольного момента модели по осям декартовых координат. Вызывать программу следует после формирования с помощью программы Umiu.m файлов Miu.txt и dmdqSparse.txt в папке модели.

**Входные данные.** Для отыскания папки модели, с которой ей предлагается работать, программа использует информацию, содержащуюся в файле ToCalculate.ini, который надо заранее приготовить и поместить в папку Config системы LevInfinite. В этом файле должна находиться единственная строка с именем папки модели. Если электрооптические параметры модели только что сформированы программой Umiu.m, то имя папки модели оказывается в файле ToCalculate.ini автоматически. Программа вводит файлы Miu.txt и dmdqSparse.txt и все результаты работы программы diag2.m.

**Выходные данные** в папке модели представляет собой файл IRSabsint.txt.

### **Программа IRcurve.m**

**Назначение.** Рассчитывает спектральную плотность ИК поглощения модели.

**Входные данные.** Для отыскания папки модели, с которой ей предлагается работать, программа использует информацию, содержащуюся в файле ToCalculate.ini, который надо заранее приготовить и поместить в папку Config системы LevInfinite. В этом файле

должна находиться единственная строка с именем папки модели. Если электрооптические параметры модели только что сформированы программой `Umiu.m`, то имя папки модели оказывается в файле `ToCalculate.ini` автоматически. Программа вводит файл `IRSabsint.txt` и файл `sigma.txt`, где в порядке следования частот колебаний записаны параметры `sigma` тех гауссовых функций, на которые будут умножены абсолютные интенсивности ИК поглощения. Такие взвешенные гауссовы функции в сумме моделируют спектральную плотность ИК поглощения на одну молекулу вещества.

**Выходные данные** в графическом окне `MatLab` представляют собой теоретический ИК спектр модели. В папке модели программа сохраняет файлы `x0.txt` и `IRcurve0.txt`. Этими двумя файлами можно воспользоваться для повторного построения спектральной кривой. Файл `x0.txt` содержит абсциссы, а файл `IRcurve0.txt` – ординаты этой кривой.