

Раздел 7. Инструменты исследования

Этот раздел адресован тем, кто захочет воспроизвести наши результаты ради знакомства с использованными нами инструментами и методами.

Здесь кратко перечислим созданные нами для данного исследования компьютерные программы и молекулярные модели, являющиеся нашим единственным инструментом, кратко опишем их тактико-технические данные и порядок работы при получении результатов, подобных приведенным.

Всё наше инструментальное хозяйство организовано в виде файловой системы, помещенной в папку

c:\LevDelphi\

Там находится система папок с программами, написанными на Дельфи, с программами, работающими под управлением МатЛаба, и папки с молекулярными моделями. Со списком и содержимым папок лучше всего знакомиться, получив с сервера ГЕОХИ готовый архив программ и моделей LevDelphi.zip. Программы на МатЛабе реализованы в виде открытых текстов и поэтому легко читаются, модифицируются и интегрируются с другими программами. Программы на Дельфи написаны для нашего собственного пользования и не до конца оформлены. В частности, они не снабжены инструкциями. Однако они полностью воспроизводят программы из коллекции LevInfinite. Эта коллекция полностью документирована и подробно описана в книге. Кроме того, имеется полный набор технических инструкций для пользования этими программами. Всё это находится на сайте ГЕОХИ в вики-библиотеке LtvML. Поэтому заинтересованные коллеги могут легко присоединиться к нашему исследованию и для начала повторить наши результаты для контроля, как и принято в науке.

Проще всего это можно сделать, развернув указанный выше архив у себя на компьютере. Затем целесообразно запустить на счет те программы, которые демонстрируют конечные результаты наших экспериментов. Рекомендуем следующую последовательность знакомства с нашими результатами.

1. Из папки c:\LevDelphi\Programs\ запустить на счет программу MolDyn1.exe. Выполнить команду File – Open... В диалоговом окне найти папку MolDyn4 и в ней открыть файл InfMolDyn1.txt. Появится картина висящих друг над другом молекул водорода. Выполнить команду Animation – Animate ML steps. В появившейся диалоговой панели, сдвинув панель в сторону, нажать кнопку Play. Наблюдать движения и столкновения молекул, имея в виду, что в столкновениях шаг программы во времени резко уменьшается, и программа замедляет анимацию. При желании можно повторить наблюдение, восстановив начальное состояние системы кнопкой Reset ML steps. Для выхода из режима анимации нажать Close. Закрывать программу.
2. Для знакомства с программами анализа химической кинетики полезно сначала ознакомиться с исходными данными для расчетов. Они сосредоточены в папке c:\LevDelphi\Molecules\H2_HD_D2\. Путь к этой папке надо вписать в файл c:\LevDelphi\Config\MolDyn.txt (уже вписано). В файле c:\LevDelphi\Molecules\H2_HD_D2\InfMD2.txt находятся комментированные исходные данные для программы prepare_md2.m. Запустить МатЛаб и задать ему рабочую директорию c:\LevDelphi\ProgramsML\. Запустить на счет программу prepare_md2.m. Будет создано случайное распределение заданных молекул в фазовых ячейках клеточного автомата. С этими данными можно познакомиться, просмотрев содержимое рабочей области МатЛаб.

3. Запустить на счет программу md2.m. Программа выполнит заданное прямо в ее тексте число шагов молекулярной динамики. В конце заданной порции шагов программа собирает данные о популяциях всех типов молекул и записывает эти данные в массив для последующего построения графика. Поэтому программу md2.m надо запускать несколько раз подряд, чтобы получить кинетическую кривую.
4. Набрал нужное количество выходного материала, запустить на счет программу KinOug.m, которая и выведет на экран кривую кинетики.

По этому образцу можно составить собственный план исследования иной системы реакций.

Успехов, коллеги.