

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ АЛГЕБРАИЧЕСКИХ СТРУКТУР ПРИ МОДЕЛИРОВАНИИ АТОМНЫХ ПРОЦЕССОВ В ФИЗИКЕ ТВЁРДОГО ТЕЛА (ФАКУЛЬТАТИВНЫЙ КУРС)

Хараджян А.А., Семериков С.А., Завизена Н.С.

Криворожский государственный педагогический институт, Украина, Днепропетровская область, г. Кривой Рог, пр. Гагарина, 54. E-mail: cc@kpi.dp.ua

В последние несколько лет в КГПИ был внедрён в практику преподавания интегрированный курс алгебры и числовых систем (АЧС). При содействии А.П. Полищука (кафедра информатики и прикладной математики), авторами был создан факультативный курс АЧС, в котором рассматриваются некоторые дополнительные вопросы линейной алгебры и векторных пространств. Необходимость такого факультатива обусловлена объективными трудностями, с которыми студенты сталкиваются при векторно-матричных вычислениях, являющихся основным аппаратом современной теоретической физики.

Наличие компьютера позволяет интенсифицировать процесс вычислений, а современные языки программирования - представить его классически, в виде операций над элементами соответствующих алгебр. Как известно, основными объектами линейной алгебры являются вектора и матрицы, которые средствами языка C++ достаточно легко превратить в соответствующие классы, сохранив при этом естественное представление матрицы как упорядоченного кортежа арифметических векторов, а вектора - как упорядоченного кортежа объектов любой природы.

На факультативе рассматриваются только арифметические вектора, элементы которых суть действительные числа, и именно их компьютерная реализация даётся студентам за образец для построения соответствующих матричных классов, в которых на обязательном уровне должны быть реализованы операции сложения, умножения, транспонирования, обращения, сравнения матриц и нахождения решения СЛАУ. На продвинутом уровне к ним добавляются функции вычисления миноров, детерминантов, собственных векторов и собственных значений, алгебраических дополнений и т.п.; кроме того, интересным заданием может быть параметризация построенных классов, позволяющая работать с такими числовыми объектами, как комплексные матрицы, матрицы матриц etc.

Усвоив этот курс, студенты старших курсов физико-математических специальностей начинают значительно лучше ориентироваться как в программировании, так и в математике, получая возможность решать сложные задачи несколькими строчками программы. В отличие от известных пакетов для символьных вычислений, которые тоже могут это делать, студент

сам проводит всю подготовительную работу для этого (при создании классов), детально разбираясь в линейной алгебре и соответствующем разделе численных методов, что и является основным заданием нашего курса.

Кроме разработки минимального набора классов для векторно-матричных вычислений, авторами был создан расширенный вариант библиотеки классов, который благодаря факультативному курсу активно распространяется среди студентов и аспирантов КГПИ, защищающих дипломные и диссертационные работы по специальности «Физика твёрдого тела». Последние благодаря этому фактически освобождены от математических и программистских тонкостей, занимаясь при этом только физической сутью моделируемых явлений.

Использование библиотеки не только значительно уменьшает объём программ, но и во многих случаях и время вычислений благодаря оптимизированным по скорости алгоритмам, что имеет не последнее значение при большом парке устаревших компьютеров. Она позволяет манипулировать любыми числовыми объектами произвольной точности, накладывая единственное ограничение - общий объём одновременно существующих в программе векторно-матричных объектов не должен превышать объёма свободного места на резидентном диске.

Если, к примеру, Вы решаете секулярное уравнение, имея при этом входным параметром действительный гамильтониан размером 1000×1000 чисел 10-байтовой точности, то на выходе получаем матрицу волновых функций той же размерности и энергетический вектор, что в простейшем случае требует 19,09 Мб памяти и около 85 минут для вычисления. Наши исследования показали, что идентичные результаты можно получить при объёме памяти в 2,5 раза меньше и всего за 50 минут на системе 386SX-40 с 4Mb RAM путём неполной диагонализации матрицы из чисел 4-байтовой точности с последующим уточнением полученных значений модифицированным методом Виландта.

Схема организации виртуальной памяти на резидентном диске, используемая нами, менее эффективна используемой оболочкой *Windows 3.1* с расширением *Win32s*, поэтому при работе программ в flat-модели памяти её желательно отключать (кстати, использование безсегментной модели памяти и переход к 32-разрядному программированию на 15-20% ускоряет счёт, что позволяет рассматривать 32-разрядные операционные системы как желаемую среду для громоздких вычислений).

Механизмы библиотеки позволяют представить матричные данные в визуальной форме как в полноцветном варианте (16 млн. цветов), так и в градациях серого, что позволяет, например, матрицу электронной плотности представить в виде понятного и удобного для печати рисунка. Другие её возможности - методы регрессионного анализа и статистической

обработки экспериментальных данных - позволили использовать библиотеку для такой области, как управление измерительным оборудованием (изотопная лаборатория Криворожского металлургического комбината «Криворожсталь»).