

# Projekt niedoida

Grzegorz Mazur    Marcin Makowski



3 marca 2005

- 1 O co chodzi
- 2 Możliwości
- 3 Implementacja
- 4 Kierunki rozwoju
- 5 Kto
- 6 I to by było na tyle

## Co?

Niedoida to (docelowo) zbiór bibliotek implementujących typowe obliczenia kwantowochemiczne:

- Hartree-Fock (i metody post-HF) w bazach gaussowskich
- DFT w bazach gaussowskich
- Być może DFT w bazach slaterowskich

i inne (np mikroelektrostatyczne).

## Po co?

- Możemy się sporo nauczyć
- Możliwość szybkiej implementacji nietypowych obliczeń
- Uczenie studentów

# Metody

- RHF
- UHF
- ROHF (przybliżenie Longuet-Higginsa-Pople'a)

# Właściwości

- Energia
- Orbitale molekularne
- Analiza populacyjna (Mulliken, Löwdin)
- Rzędy wiązań (Mayer, Gopinathan-Jug, Nalewajski)
- Na wyciągnięcie ręki:
  - Momenty multipolowe
  - Przybliżona poprawka adiabatyczna

# Założenia

- Modułarna budowa
- Przejrzysta struktura
- Dobra dokumentacja
- Wydajność osiągnana przez:
  - Algorytmy
  - Poprawny kod

## W jakim języku, i czemu w C++?

- Kluczowe (dla nas) cechy C++
  - Język zarazem
    - Wysokopoziomowy (dobre abstrakcje)
    - Niskopoziomowy (generacja wydajnego kodu)
  - Umożliwia dobrą modularyzację
  - Łatwo dostępne kompilatory
  - Dostępne dobre biblioteki
  - Nadal się rozwija
- W planach jest stworzenie interfejsu do Pythona.



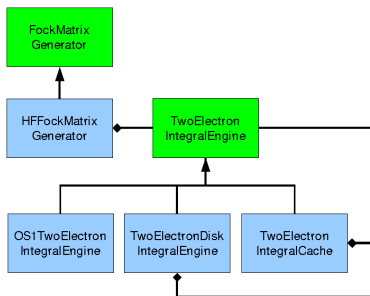
# Standing On The Shoulders of Giants

- Boost
- HDF5
- MPI

# Obiektowość

- Enkapsulacja
- Polimorfizm
- Efektywność

# Przykład



# Wydajność

- Klarowna struktura
- Efektywne algorytmy
  - Pełne wykorzystanie symetrii permutacyjnej
  - Silnik całkowy w ulepszonym schemacie Obary-Saiki
  - Przyrostowe budowanie macierzy Focka
  - Prescreening na kilku poziomach
- Równoległa architektura

# Przenaszalność

- Linux/i386
- FreeBSD/alpha
- Cygwin/i386

## Rozpoczęte projekty

- Rozpoznawanie i wykorzystywanie symetrii punktowej
- Całkowanie numeryczne i DFT
- Wprowadzenie fragmentów molekularnych

## Trochę odleglejsza przyszłość

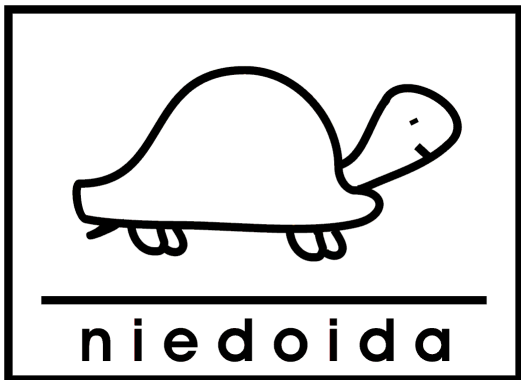
- Pierwsze pochodne, drugie pochodne...
- Stany wzbudzone
- Quasi-liniowe skalowanie

## Udział biorą

- Grzegorz Mazur
- Marcin Makowski
- Witold Piskorz
- Łukasz Ćwiklik
- Mariusz Sterzel
- Mariusz Radoń
- Barbara Jagoda-Ćwiklik



## Zapraszamy do współpracy



[www.chemia.uj.edu.pl/~niedoidea](http://www.chemia.uj.edu.pl/~niedoidea)