

Universität Bielefeld

Fakultät für Chemie

Masterarbeit

**Eine graphische Benutzeroberfläche
für hochdimensionale
Quantendynamiksimulationen**

Bearbeiter: Peter Protassow

Prüfer: Prof. Dr. Uwe Manthe

Zweitprüfer: Prof. Dr. Wolfgang Eisfeld

Abgabedatum: 18. Juni 2018



Hiermit versichere ich, die vorgelegte Masterarbeit selbstständig und ohne unzulässige Hilfe angefertigt zu haben. Die verwendeten Quellen und Hilfstexte sind vollständig angegeben und die Stellen der Arbeit, einschließlich Tabellen und Abbildungen, die anderen Werken im Sinn und Wortlaut entnommen wurden, als Entlehnung kenntlich gemacht. Die Bestimmungen der Masterprüfungsordnung sind mir bekannt. Die von mir vorgelegte Masterarbeit wurde in der Zeit vom 29. November 2017 bis 18. Juni 2018 im Arbeitskreis von Prof. Dr. Uwe Manthe an der Fakultät für Chemie der Universität Bielefeld unter der wissenschaftlichen Anleitung von Roman Ellerbrock durchgeführt.

Bielefeld, den 18. Juni 2018 .

.....
(Peter Protassow)

Danksagung

Danken möchte ich Prof. Dr. Uwe Manthe für dieses spannende Projekt. Ich bedanke mich insbesondere bei meinem Betreuer Roman Ellerbrock, ohne dessen Hilfe und Vertrauen diese Arbeit nicht entstanden wäre. Außerdem möchte ich mich auch bei der gesamten Arbeitsgruppe der theoretischen Chemie für die sehr angenehme Arbeitsatmosphäre bedanken.

Inhaltsverzeichnis

Danksagung	III
1 Einleitung	1
2 Theorie	3
2.1 MCTDH	3
2.2 Ansatz der Multilayer-MCTDH-Wellenfunktion	5
3 Implementation und Demonstration	10
3.1 Sprachen und Bibliotheken	10
3.2 Python-Interface für MCTDH	10
3.3 Graphische Benutzeroberfläche für MCTDH	16
4 Zusammenfassung und Ausblick	23
Anhang: Quellcode der GUI	25
Literaturverzeichnis	82

1 Einleitung

Das zeitabhängige Multikonfiguration-Hartree-Verfahren (MCTDH)^[1,2] und seine Multilayererweiterung (ml-MCTDH)^[3,4] sind effiziente Verfahren zur genauen Simulation mehrdimensionaler Quantendynamik, die von mehreren Forschungsgruppen verwendet werden^[5–23]. Beispiele für hochdimensionale Benchmark-Anwendungen sind die 21-dimensionalen Rechnungen, in denen die Tunnelaufspaltung des Grundzustands^[24–29] und der angeregten^[25–29] Schwingungszustände von Malonaldehyd erforscht wurde. Es wurden in 15-dimensionalen Rechnungen die Schwingungszustände von protonierten Wasserdimeren^[30–34] untersucht. Außerdem wurden in 12-dimensionalen Rechnungen die thermischen Geschwindigkeitskonstanten^[35–40], anfangszustandsausgewählte Reaktionswahrscheinlichkeiten^[41–45] und die state-to-state Reaktionswahrscheinlichkeiten^[46] für die Reaktion von Methan mit Wasserstoff untersucht. In diesen Rechnungen wurden detaillierte *ab initio* Potentialflächen verwendet. Signifikant höhere Dimensionen wurden in MCTDH-Rechnungen mit Modelhamiltonoperatoren untersucht. So wurde in wegweisenden Rechnungen die nichtadiabatischen Dynamiken von Pyrazin erforscht, in denen ein 24-Moden schwingungsgekoppelter Hamiltonoperator^[47–49] verwendet wurde. Multilayer-MCTDH-Simulationen von typischen physikalischen Modellen^[3,8,50–53] kondensierter Materie schließen üblich tausende Freiheitsgrade ein. Für die Untersuchung eines Photodissoziationsmodels wurden in einem Wirt-Gast-Komplex 189-dimensionale Multilayer-MCTDH-Rechnungen durchgeführt^[54]. Für weiterführende Literatur, in der das MCTDH-Verfahren und seine Anwendungen diskutiert werden, siehe Refs.^[55–60].

Es existieren mehrere Implementationen des MCTDH-Algorithmus' in unterschiedlichen Forschungsgruppen. Ein viel genutztes Programm paket ist das MCTDH-Programm der Universität Heidelberg^[61]. Es basiert auf einem hauptsächlich in FORTRAN77 verfassten numerischen Programmteil und einer graphischen Benutzeroberfläche. In der Arbeitsgruppe der Universität Bielefeld wurde kürzlich ein neues MCTDH-Programm entwickelt, das auf einem objektorientiertem C++-Code basiert. Es vereint einen effizienten numerischen Teil mit einer stark strukturierten Klassenarchitektur, die den

1 Einleitung

Code entwicklerfreundlich, sowie nutzerfreundlich zugleich macht. Allerdings erfordert die Nutzung des Programms selbst bei vergleichsweise einfachen Aufgaben bislang grundlegende Kenntnisse in C++.

Im Rahmen dieser Masterarbeit wurden zwei wesentliche Verbesserungen unternommen: Es wurde eine moderne Benutzeroberfläche (von englisch *graphical user interface*, GUI) erstellt, die Wissenschaftlern ohne Programmierkenntnisse die Bedienung des Programms bei Standardaufgaben ermöglicht. Des Weiteren wurde eine Python-Schnittstelle für MCTDH entwickelt, die es erlaubt, kompliziertere Aufgaben mithilfe von Skripten zu bewältigen. Python hat sich als einsteigerfreundliche Programmiersprache erwiesen. Vergleichbare Python-Schnittstellen existieren auch für viele andere bekannte und häufig genutzte numerische Programmmpakete (TensorFlow^[62], SciPy^[63] u.w.). Diese Schnittstelle ermöglicht die Nutzung des MCTDH-Programmpakets, ohne dass dessen Programmstruktur verstanden werden muss.

Diese Arbeit ist wie folgt gegliedert: In Kapitel 2 wird der Ansatz der MCTDH-Wellenfunktion beschrieben. Es werden die Unterschiede zum Multilayer-MCTDH herausgestellt. Die Implementation der Python-Schnittstelle und der MCTDH-GUI wird in Kapitel 3 erläutert und deren Anwendungen demonstriert. Schließlich wird in Kapitel 4 ein Fazit gezogen und ein Ausblick gegeben.

2 Theorie

2.1 MCTDH

Die Effizienz des MCTDH-Verfahrens resultiert aus der doppellagigen Struktur der verwendeten Wellenfunktion. In anderen Wellenpaktdynamikverfahren, wie der Standardmethode^[60], wird die Wellenfunktion direkt in einer zeitunabhängigen Basis oder einem zeitunabhängigen Gitter dargestellt. Anstatt die Wellenfunktion in einer zeitunabhängigen Basis zu entwickeln, erfolgt im MCTDH-Verfahren die Darstellung des korrelierten mehrdimensionalen Wellenpaketes in einem Satz zeitabhängiger Basisfunktionen. Diese zeitabhängigen Basisfunktionen werden Einteilchenfunktionen (von englisch *single-particle function*, SPF) genannt. Die SPFs werden in der primitiven zeitunabhängigen Basis oder dem Gitter ausgedrückt. Das MCTDH-Verfahren kann als eine Zweilagendarstellung angesehen werden: So bilden die Entwicklungskoeffizienten, die genutzt werden, um die korrelierte Wellenfunktion in dem Satz der SPF-Basis auszudrücken, die obere Lage. Die zeitabhängigen Entwicklungskoeffizienten, welche die zeitabhängigen SPFs in der primitiven zeitunabhängigen Basis darstellen, bilden die untere Lage. Die Bewegungsgleichungen, durch die gleichzeitig die optimalen Entwicklungskoeffizienten für beide Lagen bestimmt werden, ergeben sich aus dem Dirac-Frenkel-Variationsprinzip.

Dennoch ist auch das MCTDH-Verfahren durch die Anzahl der korrelierten Koordinaten limitiert. Die Effizienz des MCTDH-Verfahrens resultiert aus der Größe der SPF-Basis, welche, verglichen mit der primitiven Basis, signifikant kleiner gewählt werden kann. Allerdings skaliert der numerische Aufwand des MCTDH-Verfahrens noch immer exponentiell mit der Anzahl der korrelierten Koordinaten. Um Korrelationseffekte beschreiben zu können, sind mindestens zwei SPFs in jeder dieser Koordinaten notwendig. Die Anzahl der Konfigurationen, die in der MCTDH-Wellenfunktion enthalten ist, beträgt bei f korrelierten Koordinaten mindestens 2^f Konfigurationen. Aufgrund dieser Limitierung konnten mit dem MCTDH-Verfahren Systeme mit maximal 12-14

korrelierten Koordinaten berechnet werden.^[35–37,47,64–67]

Im von Meyer eingeführten Moden-Kombinationsverfahren kann die Anzahl der Konfigurationen reduziert werden. In diesem Verfahren werden die „logischen“ Koordinaten, die in der MCTDH-Darstellung verwendet werden, von physikalischen Koordinaten unterschieden. Es werden verschiedene physikalische Koordinaten zu einzelnen logischen Koordinaten kombiniert. Analog zur Theorie der Elektronenstruktur werden diese mehrdimensionalen logischen Koordinaten Partikel genannt. Folglich wird die MCTDH-Rechnung statt durch die korrelierten Koordinaten durch die Partikel limitiert. So konnten Systeme mit 15-24 korrelierten Freiheitsgraden^[31,32,49,68] und System-Bad-Modelle^[69–71] durch das Moden-Kombinationsverfahren behandelt werden. Zwar konnte durch dieses Verfahren die Grenze zu höherer Dimensionalität verschoben werden, dennoch bleibt die grundlegende Einschränkung: Der numerische Aufwand skaliert mindestens mit 2^p , wobei p die Anzahl der logischen Koordinaten bzw. Partikel wiedergibt. Die Anzahl an physikalischen Koordinaten, die zu logischen Koordinaten zusammengefasst werden können, ist begrenzt, da die SPFs nun mehrdimensionale Wellenfunktionen darstellen. Für molekulare Systeme stellte sich heraus, dass die Kombination von mehr als drei bis vier Koordinaten in einem Partikel ineffizient ist.

Die Begrenzung durch die Anzahl der korrelierten Koordinaten bzw. Partikel konnte durch das Multilayer-MCTDH-Verfahren^[3] überwunden werden. Die SPF des MCTDH-Verfahrens können ebenfalls als MCTDH-Wellenfunktion dargestellt werden. So kann z.B. eine MCTDH-Wellenfunktion um eine Lage erweitert werden, sodass die Wellenfunktion in drei Lagen ausgedrückt wird: Die oberste Lage wird durch die zeitabhängigen Entwicklungskoeffizienten gebildet. Die Wellenfunktion wird in der SPF-Basis der ersten Lage dargestellt, d.h. den SPF des einfachen MCTDHs. Die mittlere Lage wird durch die zeitabhängigen Entwicklungskoeffizienten gebildet, welche die SPF der ersten Lage in der SPF-Basis der zweiten Lage darstellen. D.h. die SPF der ersten Lage werden in der SPF-Basis einer zusätzlichen Lage ausgedrückt, die im Multilayer-MCTDH-Verfahren hinzugekommen ist. Schließlich werden in der untersten Lage die SPF der zweiten Lage in der primitiven zeitunabhängigen Basis dargestellt. Durch eine rekursive Anwendung des MCTDH-Verfahrens können weitere Lagen hinzugefügt werden. Mit dem Multilayer-MCTDH-Verfahren waren quantumdynamische Rechnungen von System-Bad Modellen mit bis zu 1000 korrelierten Koordinaten möglich, in denen Elektronentransferprozesse^[3,50] untersucht wurden.

Die Propagation der MCTDH-Wellenfunktion setzt die effiziente Berechnung der Ma-

trixelemente des Hamiltonoperators voraus. Solange der Hamiltonoperator der Summe von Produkten von Einteilchenoperatoren^[2] entspricht, stellt die Berechnung der Matrixelemente kein Problem dar. Im Gegensatz zu vielen Modelhamiltonoperatoren können *ab initio* Potentialenergieflächen aber nur selten in dieser Form dargestellt werden. Durch die Verwendung einer spezifischen zeitabhängigen Quadratur, welche die Matrixelemente allgemeiner Potentiale effizient auswertet, können auch Matrixelemente resultierend aus *ab initio* Potentialenergieflächen effizient berechnet werden. Dieses Verfahren wird correlation discrete variable representation (CDVR)^[72,73] genannt.

2.2 Ansatz der Multilayer-MCTDH-Wellenfunktion

Zunächst werden die Ansätze der Wellenfunktionen der Standardmethode, des Zweilagen-MCTDHs und des modenkombinierten MCTDH betrachtet, um anschließend den Ansatz der Multilayer-MCTDH-Wellenfunktion stufenweise vorzustellen.

In der Standardmethode wird die Wellenfunktion in einer zeitunabhängigen Basis bzw. in einem zeitunabhängigen Gitter dargestellt. Die mehrdimensionale Wellenfunktion wird durch das direkte Produkt von eindimensionalen Basisfunktionen $\mathcal{X}_j^\kappa(x_\kappa)$ wie folgt dargestellt:

$$\Psi(x_1, \dots, x_f, t) = \sum_{j_1=1}^{N_1} \dots \sum_{j_f=1}^{N_f} A_{j_1, \dots, j_f}^1(t) \cdot \mathcal{X}_{j_1}^{(1)}(x_1) \cdot \dots \cdot \mathcal{X}_{j_f}^{(f)}(x_f) \quad (2.1)$$

Die zeitabhängigen Koeffizienten $A_{j_1, \dots, j_f}^1(t)$ beschreiben die Bewegung der Wellenpakete. Die Darstellung der Wellenfunktion in Gleichung 2.1 kann auch als einlagige Darstellung angesehen werden und die Hochzahl 1 von $A_{j_1, \dots, j_f}^1(t)$ soll darauf hinweisen, dass $A_{j_1, \dots, j_f}^1(t)$ ein Entwicklungskoeffizient der ersten (und einzigen) Lage ist.

Im MCTDH-Verfahren wird eine zusätzliche Lage für die Darstellung der Wellenfunktion eingeführt. Die mehrdimensionale Wellenfunktion wird erst in einer orthonormalen Basis der zeitabhängigen SPF s $\phi_j^{1;\kappa}(x_\kappa, t)$ entwickelt.

$$\Psi(x_1, \dots, x_f, t) = \sum_{j_1=1}^{n_1} \dots \sum_{j_f=1}^{n_f} A_{j_1, \dots, j_f}^1(t) \cdot \phi_{j_1}^{1;1}(x_1, t) \cdot \dots \cdot \phi_{j_f}^{1;f}(x_f, t). \quad (2.2)$$

Anschließend werden diese SPF s innerhalb der zeitunabhängigen primitive Basis dargestellt:

$$\phi_m^{1;\kappa}(x_\kappa, t) = \sum_{j=1}^{N_\kappa} A_{m;j}^{2;\kappa}(t) \cdot \mathcal{X}_j^{(\kappa)}(x_\kappa). \quad (2.3)$$

Gleichung 2.3 beinhaltet einen Satz zusätzlicher Entwicklungskoeffizienten, $A_{m;j}^{2;\kappa}(t)$, der die zeitabhängigen SPF's in der zeitunabhängigen primitiven Basis darstellt. Die hochgestellte Zahl z der Koeffizienten $A^z(t)$ bezieht sich auf die Lagentiefen. In Gleichung 2.3 folgt aus $z = 2$, dass Gleichung 2.3 die zweite Lage darstellt. Das hochgestellte κ und der Index m von $A_{m;j}^{2;\kappa}(t)$ beziehen sich auf die m -te SPF der κ -ten Koordinate.

Zur Visualisierung unterschiedlicher MCTDH-Wellenfunktionen, für die unterschiedlich viele Lagen verwendet wurden, dienen Baumdiagramme^[4], wie sie in Abbildung 2.2.1 gezeigt werden. Als Beispiel soll ein siebendimensionales System dienen. Die Standardwellenpaketdarstellung aus Gleichung 2.1 und die MCTDH-Darstellung sind in Abbildung 2.2.1a und 2.2.1b schematisch dargestellt. In den Diagrammen sind die verschiedenen Sätze der A-Koeffizienten durch die ausgefüllten schwarzen Kreise gekennzeichnet. So kommt in Abbildung 2.2.1a ein Satz von Koeffizienten A_{j_1, \dots, j_7}^1 vor, der durch den einzigen schwarzen Punkt gekennzeichnet ist. Jede Linie, die von solchen Kreisen führt, entspricht einem tiefgestellten Index aus A_{j_1, \dots, j_7}^1 und die Zahl neben einer Linie gibt den maximalen Wert des Indexes an, d.h. die jeweilige Basisgröße. Die tieferliegende primitive Darstellung wird durch den Koordinatdeskriptor x_n hervorgehoben. Beispielsweise ist der Koeffizient $A_{m;j}^{2;1}$ in Gleichung 2.3, der die SPF's $\phi_{j_1}^{1;1}(x_1, t)$ spezifiziert, in Abbildung 2.2.1b mit dem Koeffizienten A^1 über eine Linie verbunden, die den m -ten Index darstellt. Über eine weitere Linie, die für den j -ten Index steht, ist $A_{m;j}^{2;1}$ mit dem Koordinatdeskriptor x_1 verbunden. In Abbildung 2.2.1a ist der Koeffizient A_{j_1, \dots, j_7}^1 durch sieben Linien mit den entsprechenden Indizes von j_1 bis j_7 direkt mit den sieben Koordinatdeskriptoren x_1, x_2, \dots, x_7 verbunden und in Abbildung 2.2.1b ist A_{j_1, \dots, j_7}^1 mit den sieben Sätzen an A-Koeffizienten $A^{2;1}, A^{2;2}, \dots, A^{2;7}$ verbunden. Die Wellenfunktion aus Abbildung 2.2.1a ist direkt in der zeitunabhängigen primitiven Basis dargestellt. In Abbildung 2.2.1b gibt es eine intermediaire Lage an zeitabhängigen SPF's.

Während in den Gleichungen 2.2 und 2.3 nur eindimensionale SPF's vorkommen, werden im modenkombinierten MCTDH-Verfahren mehrdimensionale SPF's verwendet. Hierfür werden die f physikalischen Koordinaten x_1, x_2, \dots, x_f d logischen Gruppen zugeordnet, die Partikel genannt werden. Die mehrdimensionalen Koordinaten $q_1^1, q_2^1, \dots, q_d^1$ sind wie folgt definiert:

$$\begin{aligned}
 q_1^1 &= \{q_1^{2;1}, q_2^{2;1}, q_{d_1}^{2;1}\} \\
 &= \{x_1, x_2, \dots, x_{d_1}\} \\
 q_2^1 &= \{q_1^{2;2}, q_2^{2;2}, q_{d_2}^{2;2}\} \\
 &= \{x_{d_1+1}, x_{d_1+2}, \dots, x_{d_1+d_2}\} \\
 &\vdots \\
 q_{f^1}^1 &= \{q_1^{2;d}, q_2^{2;d}, q_{d_d}^{2;d}\} \\
 &= \{\dots, x_f\}
 \end{aligned}$$

Die logische mehrdimensionale Koordinate q_κ^1 umfasst d_κ Koordinaten: $q_1^{2;\kappa}, q_2^{2;\kappa}, \dots, q_{d_\kappa}^{2;\kappa}$. Die Hochzahlen 1 und 2 in dieser Notation zeigen, ob die Koordinate eine mehrdimensionale Koordinate der ersten Lage ist oder einer Koordinate der zweiten Lage entspricht. Für die Koordinate der zweiten Lage gibt der zusätzliche hochgestellte Index κ den Index der Koordinate der ersten Lage an. Eine modenkombinierte MCTDH-Wellenfunktion mit d logischen Koordinaten wird wie folgt definiert:

$$\Psi(q_1^1, q_2^1, \dots, q_d^1, t) = \sum_{j_1=1}^{n_1} \dots \sum_{j_d=1}^{n_d} A_{j_1, \dots, j_d}^1(t) \cdot \phi_{j_1}^{1;1}(q_1^1, t) \cdot \dots \cdot \phi_{j_d}^{1;d}(q_d^1, t) \quad (2.4)$$

$$\begin{aligned}
 \phi_m^{1;\kappa}(q_\kappa^1, t) &= \sum_{j=1}^{N_\alpha} \dots \sum_{j_{d_\kappa}=1}^{N_\beta} A_{m; j_1, \dots, j_{d_\kappa}}^{2;\kappa}(t) \cdot \mathcal{X}_{j_1}^{(\alpha)}(q_1^{2;\kappa}) \cdot \dots \cdot \mathcal{X}_{j_{d_\kappa}}^{(\beta)}(q_{d_\kappa}^{2;\kappa}) \\
 &\left(\text{mit } \alpha = 1 + \sum_{i=1}^{\kappa-1} d_i \text{ und } \beta = 1 + \sum_{i=1}^\kappa d_i \right)
 \end{aligned} \quad (2.5)$$

In Abbildung 2.2.1c ist das entsprechende Diagramm der Wellenfunktion eines siebdimensionalen Systems dargestellt, dessen Koordinaten in logischen Koordinaten zusammengefasst wurden. Die physikalischen Koordinaten bilden in Abbildung 2.2.1c drei mehrdimensionale logische Koordinaten: $q_1^1 = \{x_1, x_2\}$, $q_2^1 = \{x_3, x_4\}$ und $q_3^1 = \{x_5, x_6, x_7\}$.

Im einfachsten Fall kommen im Multilayer-MCTDH zwei Lagen von SPF's vor. Anstelle die SPF's aus Gleichung 2.4 in der primitiven zeitunabhängigen Basis zu entwickeln, können die mehrdimensionalen SPF's ebenfalls durch das MCTDH-Verfahren dargestellt werden. Diese Entwicklung resultiert in einer Multilayer-MCTDH-Wellenfunktion. Der Ansatz der Multilayer-MCTDH-Wellenfunktion ist gegeben durch

$$\Psi(q_1^1, q_2^1, \dots, q_d^1, t) = \sum_{j_1=1}^{n_1} \dots \sum_{j_d=1}^{n_d} A_{j_1, \dots, j_d}^1(t) \cdot \phi_{j_1}^{1;1}(q_1^1, t) \cdot \dots \cdot \phi_{j_d}^{1;d}(q_d^1, t) \quad (2.6)$$

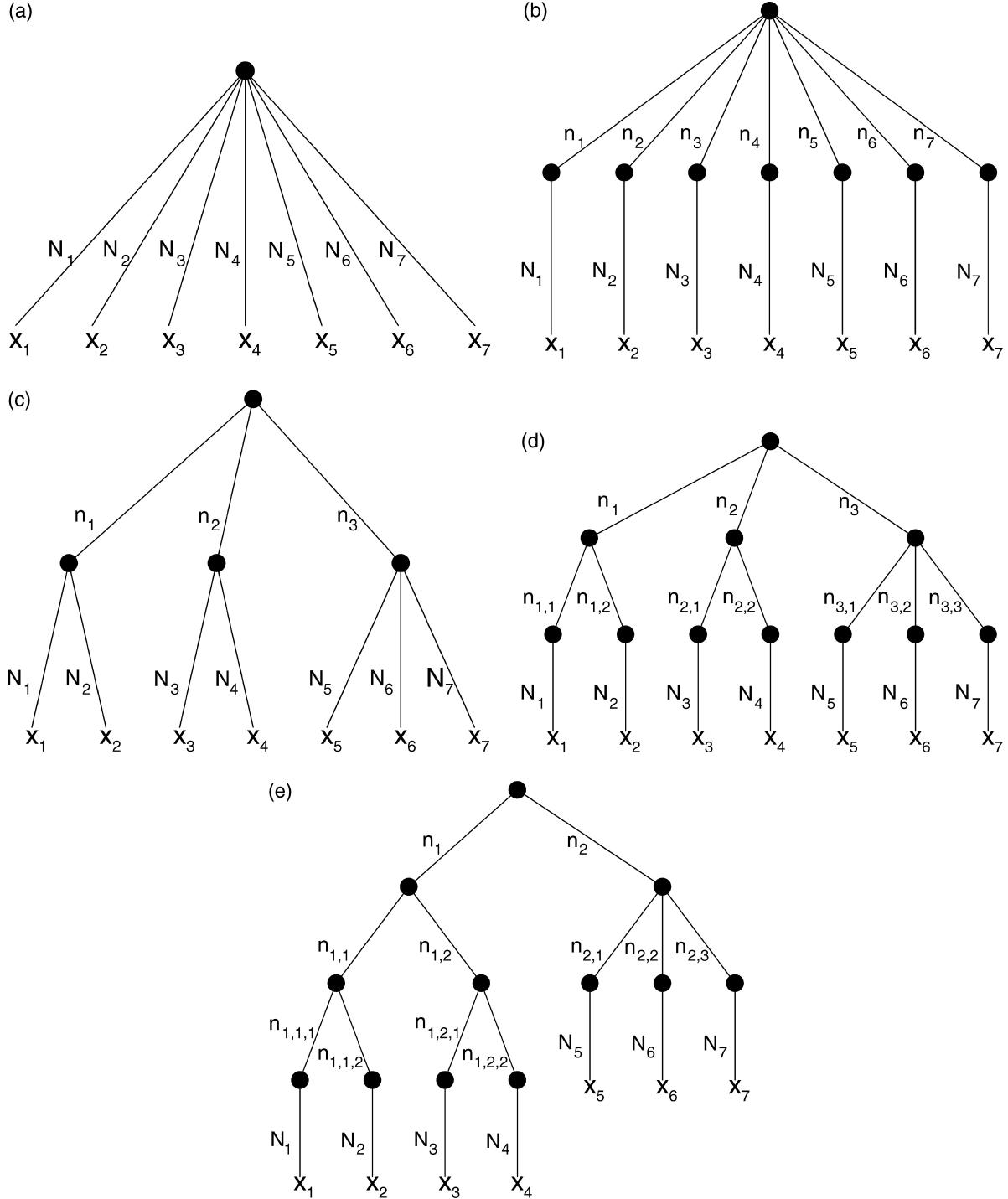


Abbildung 2.2.1: Unterschiedliche Darstellungen von Wellenfunktionen eines siebendimensionalen Systems. Dargestellt sind: (a) Eine Darstellung eines Standardwellenpakets, (b) eine MCTDH-Wellenfunktion, (c) eine moden-kombinierte MCTDH-Wellenfunktion, [(d) und (e)] eine Multilayer-MCTDH-Wellenfunktion. Die Diagramme wurden aus Ref. [4] entnommen.

$$\begin{aligned}\phi_m^{1;\kappa}(q_\kappa^1, t) &= \phi_m^{1;\kappa}(q_1^{2;\kappa}, \dots, q_{d_\kappa}^{2;\kappa}, t) \\ &= \sum_{j=1}^{n_{\kappa,1}} \dots \sum_{j_{d_\kappa}=1}^{n_{\kappa,d_\kappa}} A_{m;j_1, \dots, j_{d_\kappa}}^{2;\kappa}(t) \\ &\quad \times \phi_{j_1}^{2;\kappa,1}(q_1^{2;\kappa}, t) \cdot \dots \cdot \phi_{j_{d_\kappa}}^{2;\kappa,d_\kappa}(q_{d_\kappa}^{2;\kappa}, t),\end{aligned}\tag{2.7}$$

$$\phi_m^{2;\kappa,\lambda}(q_\lambda^{2;\kappa}, t) = \sum_{j=1}^{N_\alpha} A_{m;j}^{3;\kappa,\lambda}(t) \mathcal{X}_j^{(\alpha)}(q_\lambda^{2;\kappa})$$

$$\left(\text{mit } \alpha = \lambda + \sum_{i=1}^{\kappa-1} d_i \right). \tag{2.8}$$

In Gleichung 2.7 ist $\phi_m^{2;\kappa,\lambda}$ mit der dazugehörigen Koordinate $q_\lambda^{2;\kappa}$ eine SPF der zweiten Lage. Die Hochzahl 2 bezieht sich auf die Lagentiefe, sodass die SPF zur zweiten Lage gehört, wobei κ und λ die dazugehörigen Koordinaten kennzeichnen. Die Entwicklungskoeffizienten $A_{m;j}^{3;\kappa,\lambda}(t)$ werden verwendet, um diese SPF darzustellen und die Entwicklungskoeffizienten $A_{m;j_1, \dots, j_{d_\kappa}}^{2;\kappa}(t)$ definieren die Entwicklung der SPFs der ersten Lage, die in der SPF-Basis der zweiten Lage entwickelt werden. In Gleichung 2.3 definierten diese Entwicklungskoeffizienten die SPFs der ersten Lage in der primitiven zeitunabhängigen Basis. Abbildung 2.2.1d zeigt das entsprechende Diagramm für ein siebendimensionales System in Multilayer-MCTDH-Darstellung.

Da die Gleichungen der Multilayer-MCTDH-Wellenfunktion schnell unhandlich werden, ist es einfacher, statt der Gleichungen die Wellenfunktionen wie in Abbildung 2.2.1 als Diagramm anzugeben. Jedes Diagramm definiert die Wellenfunktionen eindeutig, sodass aus den Diagrammen die entsprechenden Gleichungen der Wellenfunktionen abgeleitet werden können. Die Notation für die SPFs, A-Koeffizienten und (mehrdimensionalen) Koordinaten, die oben in den Gleichungen angegeben wurde, kann einfach für beliebig mehrlagige Darstellungen erweitert werden. Ein Beispiel dieser Strukturen ist in Abbildung 2.2.1e dargestellt. Die Anzahl der Lagen für die jeweiligen Koordinaten kann bis zur primitiven Darstellung von Koordinate zu Koordinate variieren. So wird in Abbildung 2.2.1e das Baumdiagramm einer Multilayer-MCTDH-Wellenfunktion gezeigt, in der für die Koordinaten $x_1 - x_4$ drei MCTDH-Lagen verwendet werden (d.h. insgesamt eine Vier-Lagen-Darstellung) und für die Koordinaten $x_5 - x_7$ werden zwei MCTDH-Lagen verwendet (d.h. eine Drei-Lagen-Darstellung).

3 Implementation und Demonstration

3.1 Sprachen und Bibliotheken

Die Python-Schnittstelle für MCTDH wurde in der Programmiersprache Cython^[74] erstellt. Cython stellt eine Hybridprogrammiersprache dar, die Python und C/C++ kombiniert. Im Gegensatz zu Python wird Cython kompiliert, wobei die Cythonsyntax der Pythonsyntax ähnlich ist. In Cython kann C++-Code verwendet werden, der beim Erstellen der Cython-Programme ebenfalls kompiliert wird.

Die GUI für die MCTDH-Rechnungen wurde in Python mithilfe der Qt-Bibliothek^[75] implementiert. Der Zugriff auf die Qt-Bibliothek erfolgt über die Python-Bibliothek PyQt4^[76]. Das Design der einzelnen GUI-Fenster erfolgte in Qt-Designer^[77]. Die in Qt-Designer erstellten Fenster werden in Python miteinander verknüpft.

Neben PyQt wurden die Python-Module *networkx*^[78] und *matplotlib*^[79] verwendet. Mithilfe von Klassen aus *networkx* und *matplotlib* konnten Baumdiagramme erstellt und gespeichert werden, die in der GUI zur Visualisierung des MCTDH-Baums verwendet wurden.

3.2 Python-Interface für MCTDH

Es wurde eine Programmierschnittstelle (von englisch *application programming interface*, API) für das MCTDH-Programmpaket erstellt, welche es erlaubt Funktionen des C++-MCTDH-Codes in Python-Skripten zu verwenden. Dazu wurden neue Klassen in Python erstellt, welche stellvertretende Klassen des C++-Codes sind und die einen eingeschränkten Satz an Funktionen bereitstellen. Im Rahmen dieser Arbeit wurden Klassen erstellt, die der Verwaltung der Darstellung der MCTDH-Wellenfunktion dienen. Die Erweiterung auf andere Klassen kann nach einem einfachen Schema erfolgen. Abbildung 3.2.1 zeigt ein Klassendiagramm aller in Cython erstellter Klassen der API.

Jede Klasse der API wird in Abbildung 3.2.1 durch ein Rechteck repräsentiert. Im oberen Teil des Rechtecks ist der Klassenname angegeben und im unteren Teil sind die Methoden der Klasse aufgelistet. Die baumartige Anordnung der Rechtecke repräsentiert die Abhängigkeit der Klassen zueinander. Eine Klasse hängt von allen Klassen ab, die sich im Diagramm unterhalb der betrachteten Klasse befinden und zu denen eine Verbindung besteht. In der Klasse *controlParameters* werden die Genauigkeitsparameter der MCTDH-Rechnung verwaltet. Die Klasse *physCoor* verwaltet Informationen einer Koordinate und enthält Informationen über das primitive Gitter oder die primitive Basis. Sie ist ein Memberobjekt der Klasse *mctdhNode*, welche einen Knoten im MCTDH-Baum repräsentiert. In der Klasse *mctdhNode* wird die lokale Konnektivität des Knotens, sowie dessen Satz von Entwicklungskoeffizienten verwaltet. Die Dimensionen der Entwicklungskoeffizienten sind in Objekten der Klasse *Tdim* gespeichert. Die Klasse *mctdhBasis* enthält alle Objekte, die dem Management der Darstellung der MCTDH-Wellenfunktion dienen.

Zur Demonstration der API wird im Folgenden ein Python-Skript vorgestellt, mithilfe dessen Dimensionsinformationen einer Multilayer-MCTDH-Wellenfunktion berechnet werden können. Zuerst wird das Skript vorgestellt und anschließend wird es abschnittsweise erklärt.

```
import mctdh

config = mctdh.controlParameters()
config.initialize('mctdh.config')
basis = mctdh.MctdhBasis()
basis.initialize('basis.txt', config)

maxNodes = basis.NmctdhNodes()

nodes_spf = {}
for i in range(maxNodes):
    node = basis.MCTDHnode(i)
    tdim = node.t_dim()
    nodes_spf[i] = tdim.GetnTensor()
```

```

primitivB = {i: basis.MCTDHnode(i).t_dim().active(0) for i in \
             range(maxNodes) if \
                 basis.MCTDHnode(i).Bottomlayer() == True}

NCoefBottomNode = {}

for key in primitivB:
    NCoefBottomNode[key] = primitivB[key] * nodes_spf[key]

NCoefBottom = sum([l_[1] for l_ in NCoefBottomNode.items()])
print NCoefBottom

NCoefTopNode = 0

for i in range(maxNodes):
    if basis.MCTDHnode(i).Toplayer() == True:
        children = basis.MCTDHnode(i).NChildren()
        for j in range(children):
            NCoefTopNode *= basis.MCTDHnode(i).down(j).t_dim().GetnTensor()
            NCoefTopNode *= basis.MCTDHnode(i).t_dim().GetnTensor()

print NCoefTopNode

remnantNodeList = []
remnant = 0

for i in range(maxNodes):
    if basis.MCTDHnode(i).Toplayer() == False and \
       basis.MCTDHnode(i).Bottomlayer() == False:
        children = basis.MCTDHnode(i).NChildren()
        parent = basis.MCTDHnode(i).t_dim().GetnTensor()
        for j in range(children):
            remnant *= basis.MCTDHnode(i).down(j).t_dim().GetnTensor()
        remnant *= parent
        remnantNodeList.append(remnant)
        remnant = 0

NCoefRemnant = sum(remnantNodeList)
print NCoefRemnant

```

Die in Abbildung 3.2.1 dargestellten Klassen werden mit folgenden Befehl in Python importiert:

```
import mctdh
```

Objekte der Klassen *controlParameters* und *mctdhBasis* werden instanziert durch:

```
config = mctdh.controlParameters()
basis = mctdh.MctdhBasis()
```

Die erstellten Objekte werden mittels

```
config.initialize('mctdh.config')
basis.initialize('basis.txt', config)
```

initialisiert, wobei *mctdh.config* und *basis.txt* Dateinamen von Dateien sind, welche die Genauigkeitsparameter, bzw. die Definition der Darstellung der MCTDH-Wellenfunktion enthalten.

Die Anzahl der Knoten im MCTDH-Baum wird mit dem folgenden Befehl bestimmt:

```
maxNodes = basis.NmctdhNodes()
```

Danach wird der Maximalwert der *m*-Indizes der Entwicklungskoeffizienten $A_{m;j_1,\dots,j_{d_\kappa}}^{l;\kappa_1,\dots,\kappa_{l-1}}(t)$ bestimmt (vergleiche Gleichung 2.7). Die entsprechenden Werte sind Member der Objekte der Klasse *Tdim*. Sie werden ermittelt und in dem Dictionary *nodes_spf* gespeichert:

```
for i in range(maxNodes):
    node = basis.MCTDHnode(i)
    tdim = node.t_dim()
    nodes_spf[i] = tdim.GetnTensor()
```

Eine Liste der Größen aller primitiven Basissätze wird durch die folgenden Befehle erzeugt:

```
primitivB = {i: basis.MCTDHnode(i).t_dim().active(0) for i in \
             range(maxNodes) if \
             basis.MCTDHnode(i).Bottomlayer() == True}
```

Daraufhin wird die Anzahl aller Entwicklungskoeffizienten der untersten Lage berechnet durch

```

for key in primitivB:
    NCoefBottomNode[key] = primitivB[key] * nodes_spf[key]
NCoefBottom = sum([l_[1] for l_ in NCoefBottomNode.items()]) .

```

Die Anzahl der Entwicklungskoeffizienten der obersten Lage wird durch den folgenden Code-Abschnitt berechnet:

```

for i in range(maxNodes):
    if basis.MCTDHnode(i).Toplayer() == True:
        children = basis.MCTDHnode(i).NChildren()
        for j in range(children):
            NCoefTopNode *= basis.MCTDHnode(i).down(j).t_dim().GetnTensor()
    NCoefTopNode *= basis.MCTDHnode(i).t_dim().GetnTensor()

```

Im letzten Code-Block wird die Summe der Anzahl der Entwicklungskoeffizienten aus den übrigen Lagen gebildet:

```

for i in range(maxNodes):
    if basis.MCTDHnode(i).Toplayer() == False and \
       basis.MCTDHnode(i).Bottomlayer() == False:
        children = basis.MCTDHnode(i).NChildren()
        parent = basis.MCTDHnode(i).t_dim().GetnTensor()
        for j in range(children):
            remnant *= basis.MCTDHnode(i).down(j).t_dim().GetnTensor()
        remnant *= parent
        remnantNodeList.append(remnant)
        remnant = 0
NCoefRemnant = sum(remnantNodeList)

```

Schließlich wird die Anzahl aller Entwicklungskoeffizienten der unteren Knoten, des oberen Knoten und der restlichen Knoten berechnet und ausgegeben:

```

print NCoefBottom
print NCoefTopNode
print NCoefRemnant

```

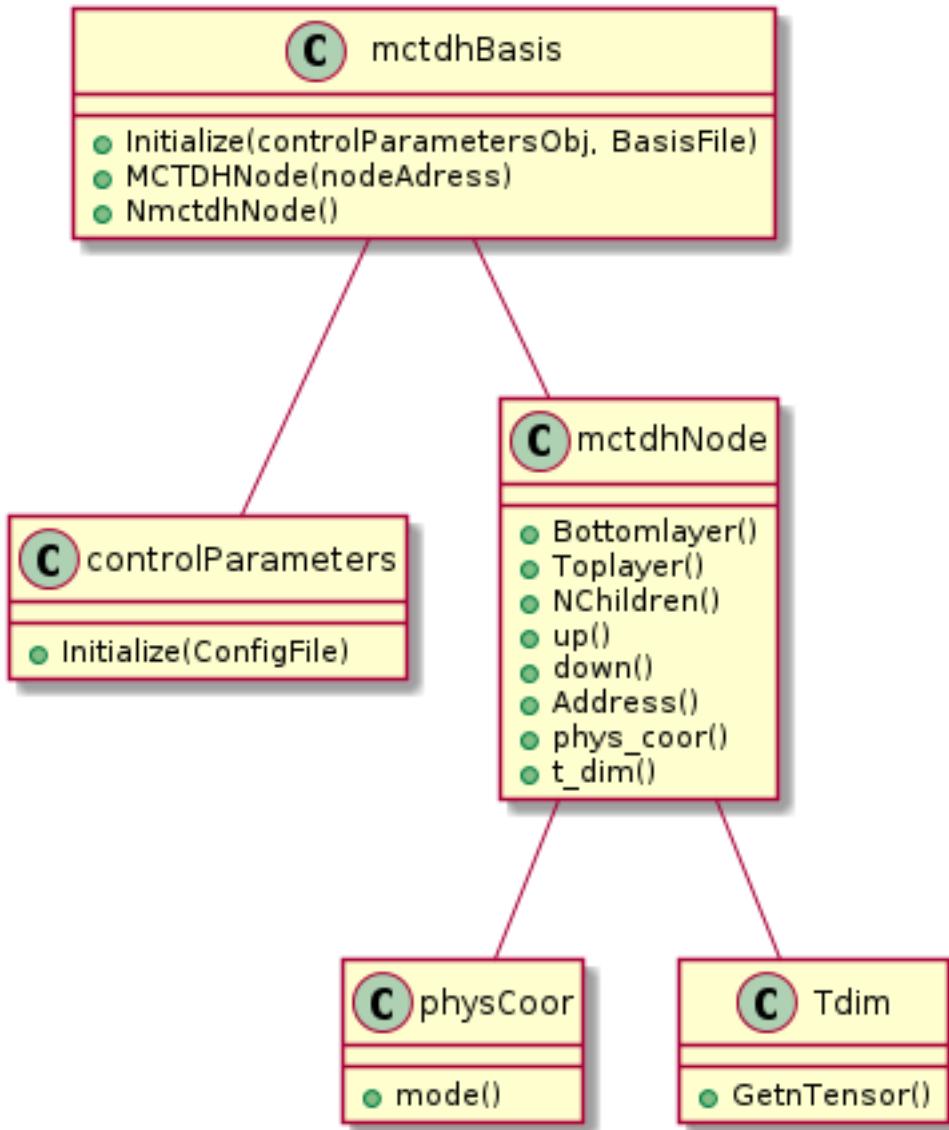


Abbildung 3.2.1: Klassendiagramm der Programmierschnittstelle (API). Die Rechtecke repräsentieren jeweils eine Klasse. Im oberen Bereich des Rechtecks befindet sich der Name der Klasse und im unteren Bereich eine Liste aller Memberfunktionen. Für eine detaillierte Beschreibung siehe Text.

3.3 Graphische Benutzeroberfläche für MCTDH

Es wurde eine GUI erstellt, welche die Anwendung der MCTDH-Methode auch Nutzern zugänglich macht, die wenig oder keine tiefergehende Kenntnis des MCTDH-Algoritmus' haben. Hierfür stehen dem Nutzer der GUI eine Projektverwaltung und Eingabefelder für die Einstellungsparameter, die für eine MCTDH-Simulation benötigt werden, zur Verfügung. Der Quellcode der GUI kann im Anhang eingesehen werden.

Zur Demonstration der graphischen Benutzeroberfläche wird im folgenden das Vorgehen zum Starten einer MCTDH-Simulation vorgeführt. Als Beispiel dient die Realzeitpropagation eines Wellenpakets auf dem ersten elektronisch angeregten Zustand (S_1) von NOCl. Diese Rechnung ist zentraler Bestandteil bei der Berechnung der Photodissociation von NOCl^[2]. Es werden das gleiche Koordinatensystem, die gleiche Potentialfläche, sowie die gleichen numerischen Parameter wie in [2] benutzt. Die Darstellung der MCTDH-Wellenfunktion ist in Abbildung 3.3.1 dargestellt.

Beim Start der GUI erscheint das Hauptfenster (siehe Abbildung 3.3.2). In Liste 1 sind alle vorhandenen Projekte aufgeführt. Nach Auswahl eines Projekts erscheinen in Liste 2 alle dem Projekt zugeordneten Rechnungen. Durch die Schaltflächen „+“ und „-“ können Projekte sowie Rechnungen jeweils hinzugefügt bzw. entfernt werden. Im Reiter „File“ (3) befinden sich zusätzliche Optionen zur Projektverwaltung (siehe Abbildung 3.3.3). Durch Klicken der Schaltfläche 5 wird ein neues Projekt erstellt. Externe Projekte werden durch die Schaltfläche 6 geladen. Betätigung der Schaltfläche 7 beendet die Benutzeroberfläche.

Zum Starten einer neuen Rechnung wird zuerst der Reiter „Project“ (Abbildung 3.3.2 4) ausgewählt. Zwei neue Buttons erscheinen (Abbildung 3.3.4). Durch Klicken von 8 erscheint ein neues Fenster mit dem Namen „MCTDH calculation“ (siehe Abbildung 3.3.5). In diesem Fenster wird die neue MCTDH-Rechnung spezifiziert.

In dem Eingabefenster „MCTDH calculation“ kann im Feld 10 der Name der Rechnung angegeben werden. Sollte beim Speichern (Abbildung 3.3.5 18) des MCTDH-Baums und der Einstellungsparameter kein Name angegeben sein, wird der Benutzer aufgefordert einen Name für die Rechnung zu wählen. Beim Speichern der Rechnung wird überprüft, ob eine Rechnung mit dem ausgewählten Namen existiert, um ein unabsichtliches Überschreiben zu verhindern. In Liste 11 wird der entsprechende Summe-von-Produkten Operator für das gegebene System ausgewählt. Dabei werden die primitiven Basisparameter festgelegt. Über die Knöpfe „on“ und „off“ (12) wird gesteuert, ob eine

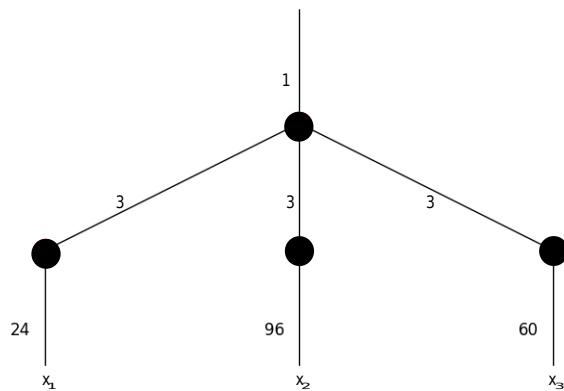


Abbildung 3.3.1: Darstellung der verwendeten MCTDH-Wellenfunktion zur Beschreibung der Photodissoziation von NOCl.



Abbildung 3.3.2: Hauptfenster der MCTDH-GUI. Es zeigt aktuell vorhandene Projekte (1), sowie zugehörige Rechnungen (2).

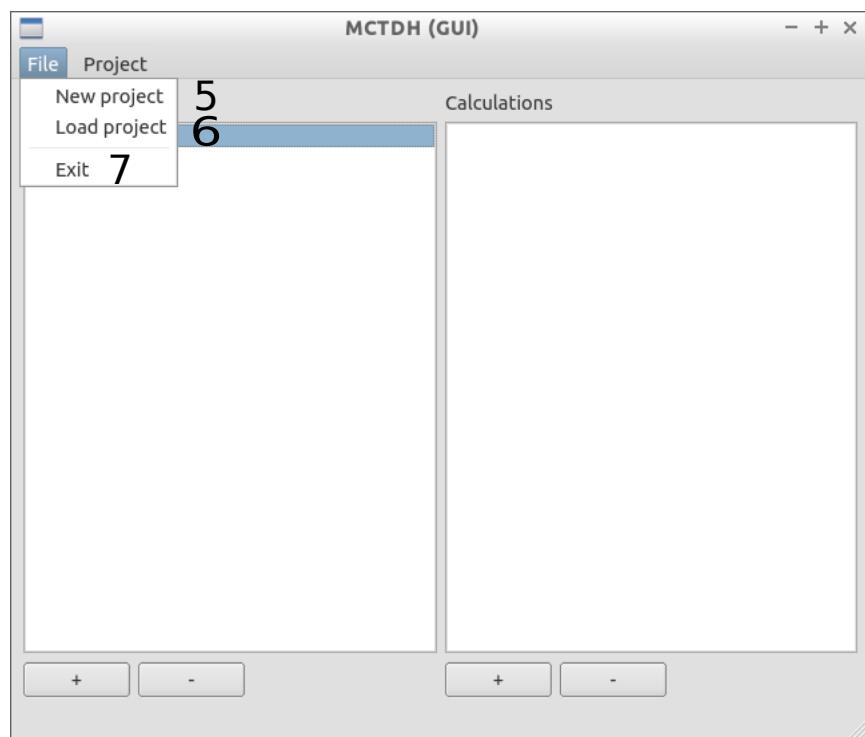


Abbildung 3.3.3: Hauptfenster der MCTDH-GUI. Nach Betätigung des Reiters „File“ stehen Optionen zur Projektverwaltung, sowie zum Beenden der GUI zur Verfügung.

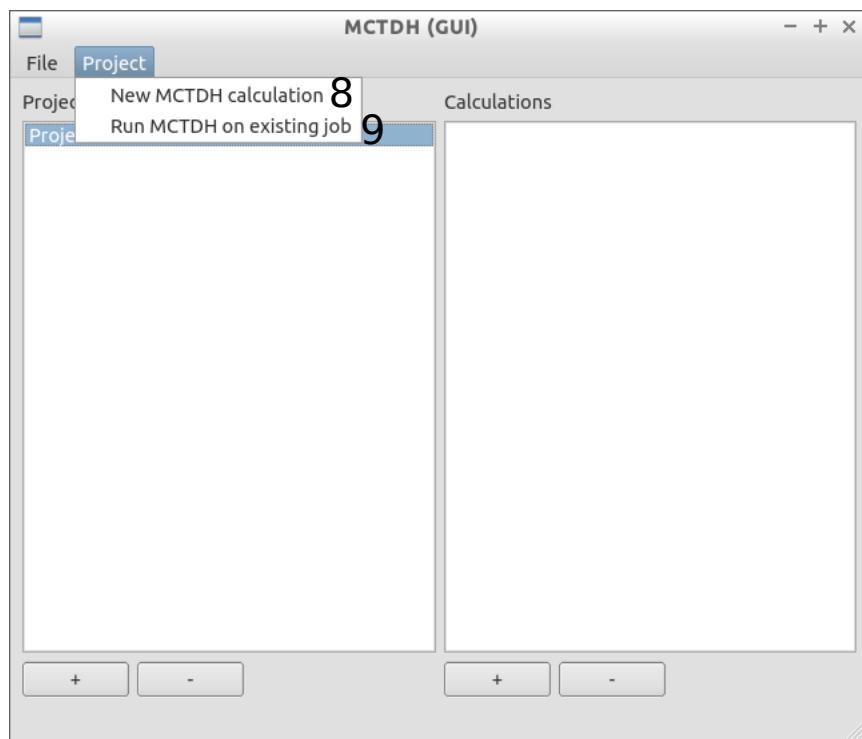


Abbildung 3.3.4: Hauptfenster der MCTDH-GUI nach Betätigung des Reiters „Project”.
Es stehen Optionen zum Erstellen und Starten einer MCTDH-Rechnung zur Verfügung.

Potentialflächenauswertung mittels CDVR erfolgt. Ist der „off“-Knopf aktiviert, werden keine Potentiale in der Liste **13** angezeigt. Bei der Standardeinstellung der GUI ist der Knopf „on“ aktiviert und es können Potentiale durch Klicken auf die Elemente der Liste **13** ausgewählt werden. Im vorliegenden Beispiel wird die Option „off“ ausgewählt. Die Erweiterung der Summe-von-Produkten Operatoren und Potentialflächen kann schematisch erfolgen.

In Liste **14** wird die Art der Rechnung ausgewählt. Im vorliegenden Beispiel wird „real-time propagation“ zum Durchführen einer Realzeitpropagation ausgewählt. Weitere Möglichkeiten sind „imaginary-time propagation“ zum Durchführen einer Imaginärzeit-propagation sowie „Eigenstate calculation“ zum Berechnen von Eigenzuständen und „Thermal flux eigenstate calculation“ zur Berechnung von thermischen Flusseigenzuständen^[80]. Des Weiteren können unter **15** Steuerungsparameter für den Integrator angegeben werden. Dazu gehören die Anfangszeit, die Endzeit, der initiale Zeitschritt und die Anzahl an Iterationen. Alle Parameter werden automatisch geladen, indem eine Eingabedatei durch die „Load“-Schaltfläche **19** eingelesen wird. Der MCTDH-Baum, welcher die aktuell gewählte Basis repräsentiert, wird unter **16** als Listendiagramm angezeigt. Hier kann durch Doppelklick die Anzahl der SPFs, der primitiven Basis und der Modelle verändert werden. Zusätzlich wird der MCTDH-Baum in Form eines Diagramms in **17** angezeigt. Die Schaltfläche „Cancel“ **21** beendet das Eingabefenster und die Schaltfläche „Start calculation“ (**20**) beginnt die MCTDH-Simulation. Alternativ kann die MCTDH-Simulation auch aus dem Hauptfenster gestartet werden, indem Schaltfläche „Run MCTDH on existing job“ (**9**) betätigt wird (siehe Abbildung 3.3.4).

Abbildung 3.3.6 zeigt das Eingabefenster, in dem nach Auswahl aller Parameter die oben genannte Rechnung durch Klicken der Schaltfläche **20** gestartet wird.

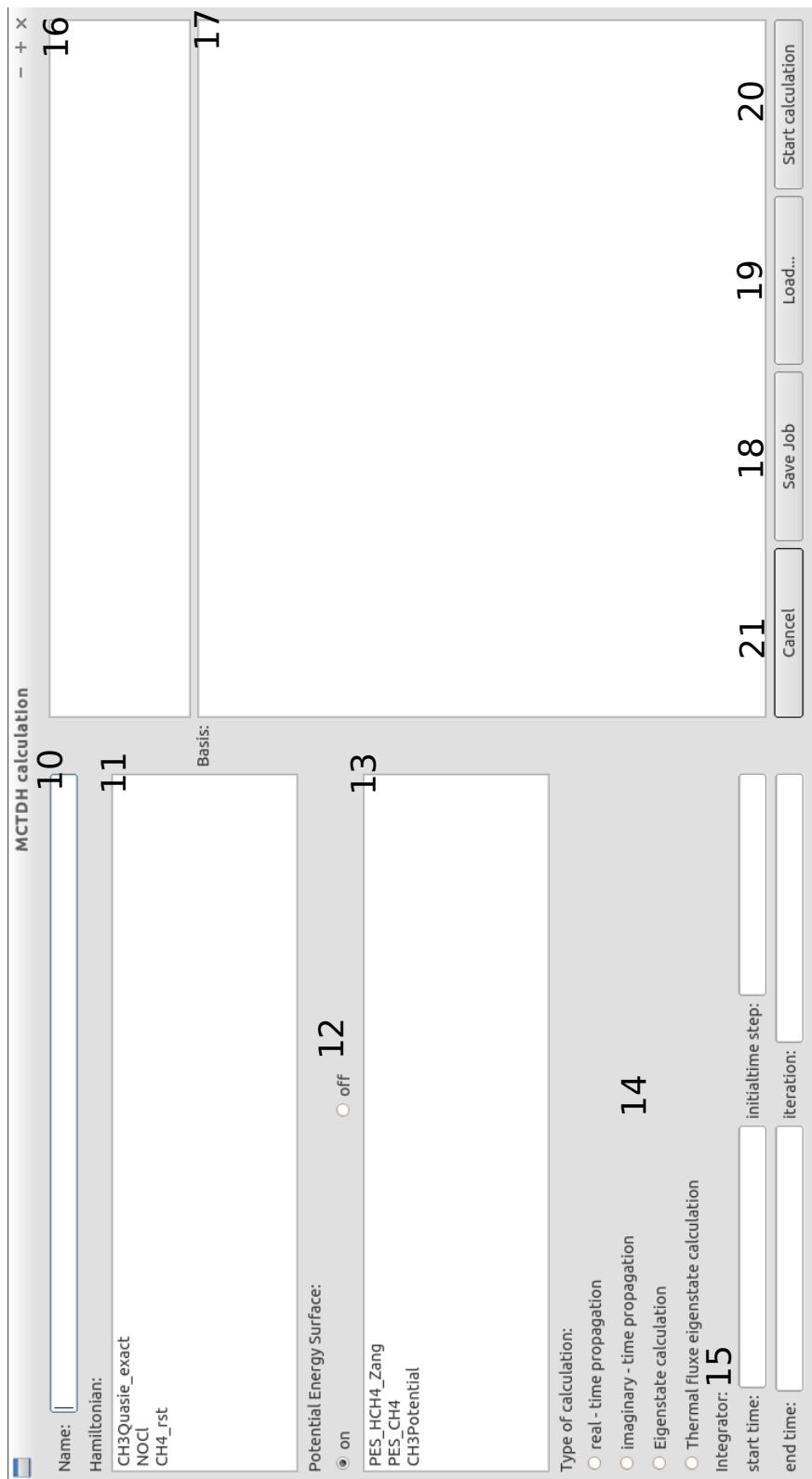


Abbildung 3.3.5: Spezifikation einer neuen MCTDH-Rechnung durch die MCTDH-GUI.

3 Implementation und Demonstration

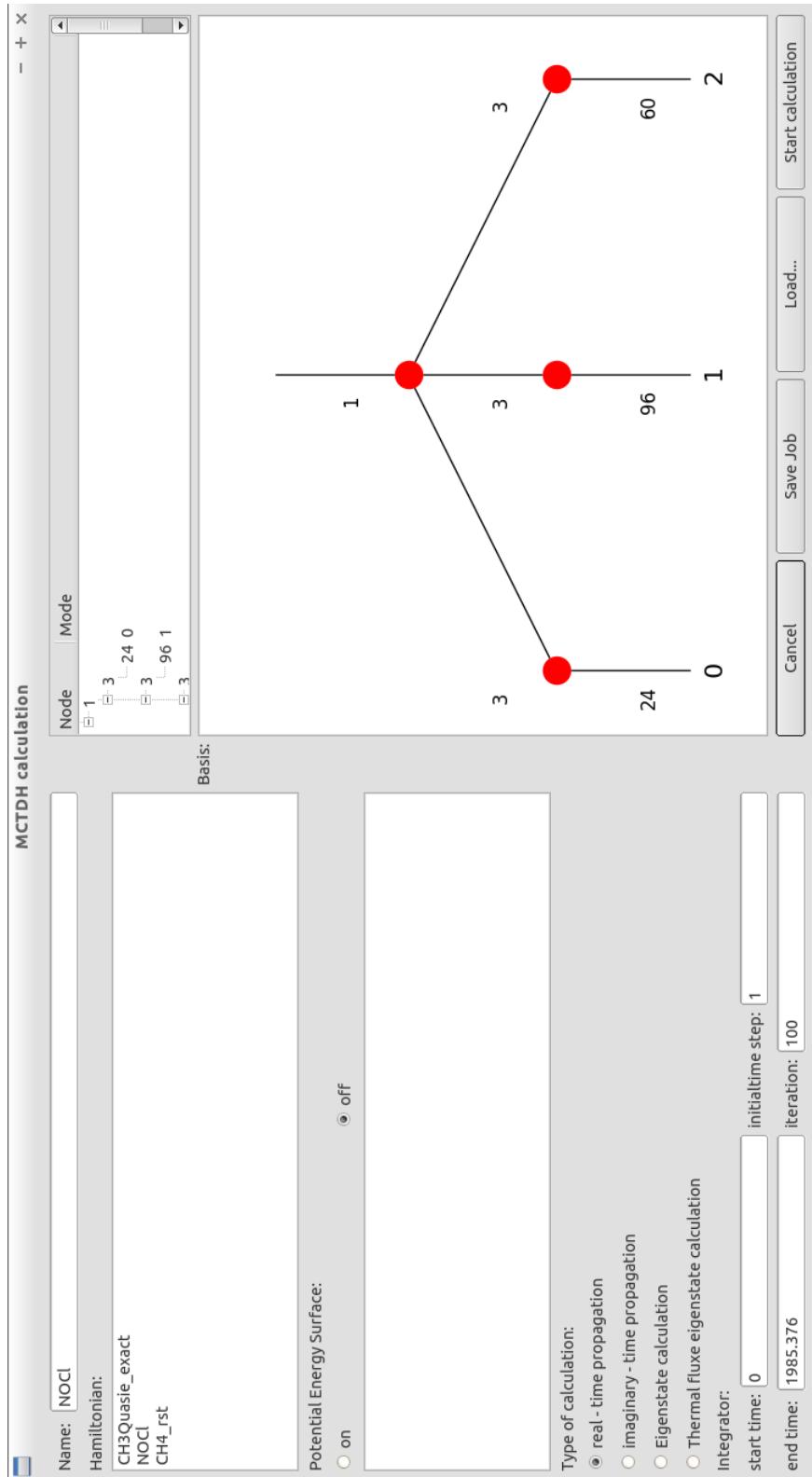


Abbildung 3.3.6: Eingabefenster der MCTDH-GUI am Beispiel der Photodissoziation von NOCl.

4 Zusammenfassung und Ausblick

In dieser Arbeit wurden zentrale Schritte ergriffen, um die MCTDH-Methode, welche bisher größtenteils Spezialisten vorenthalten war, für einen größeren Anwenderkreis nutzbar zu machen. Zuerst wurde aus den vielseitigen Anwendungsgebieten der MCTDH-Methode ein Satz generischer Operationen ermittelt, deren Nutzbarmachung für eine breitere Anwendergruppe sinnvoll ist. Dann wurden zwei wesentliche Schritte ergriffen, um diese Operationen auch Wissenschaftlern zugänglich zu machen, die keine tiefere Kenntnis der Methode und über keine, oder nur eingeschränkte Programmierkenntnisse verfügen.

Zum einen wurde eine graphische Benutzeroberfläche erstellt, welche es Nutzern ohne Programmierkenntnisse erlaubt MCTDH-Rechnungen zu starten. Dazu steht eine Auswahl von Summe-von-Produkten Operatoren, sowie von *ab initio* Potentialflächen bereit. Mithilfe der GUI können Wellenpaketspropagationen, sowie die Berechnung von Eigenzuständen und thermischen Flusseigenzuständen durchgeführt werden, was vielseitige Einsatzmöglichkeiten zulässt. Dazu zählen unter anderem die Berechnung von Photodissociationsspektren, Schwingungsenergien, thermischen Raten und vielem mehr.

Zum anderen wurde eine Pythonschnittstelle für den in C++ verfassten MCTDH-Code erstellt, welche es erlaubt Klassen in Python-Skripten zu nutzen, die der Verwaltung der MCTDH-Wellenfunktion dienen. Dadurch können Informationen zur Darstellung der MCTDH-Wellenfunktionen (z.B. Skalierungseigenschaften einer geplanten Rechnungen) mithilfe von Python-Skripten berechnet werden.

Die in dieser Arbeit erstellte GUI bietet viele sinnvolle Anknüpfungspunkte zur Erweiterung. Die Auswahl der Summe-von-Produkten-Operatoren, sowie der *ab initio* Potentialflächen kann in Zukunft erweitert werden. Zudem wäre eine Funktion zum Erstellen von benutzerdefinierten Operatoren hilfreich, um die Simulation neuer Systeme zuzulassen. Momentan wird die Baumstruktur der MCTDH-Wellenfunktion über externe Dateien eingelesen; auch hier wäre es sinnvoll eine Funktion zum Erstellen und Modifizieren der Multilayer-MCTDH-Basisstruktur (zum Beispiel mittels Drag&Drop)

4 Zusammenfassung und Ausblick

bereitzustellen.

Die Funktionen der GUI konzentriert sich bisher auf das Erstellen und Verwalten von projektbezogenen Rechnungen. Es wäre nützlich die Funktionen auf das Verfolgen und Visualisieren laufender oder beendeter Rechnungen auszuweiten. Dazu ist es sinnvoll für die Ausgabe des C++-MCTDH-Programms ein standardisiertes Protokollformat zu entwickeln, welches von externen Programmen eingelesen und interpretiert werden kann. Somit wäre beispielsweise ein Einbinden von Smartphones und Tabletts denkbar, um laufende Rechnungen unkompliziert und leicht verfolgen zu können.

In Zukunft kann die Python-Schnittstelle um weitere Klassen des MCTDH-Codes ergänzt werden, sodass diese vielseitiger eingesetzt werden können. Ein sinnvoller erster Schritt wäre die Erweiterung auf Klassen, welche der Verwaltung der MCTDH-Wellenfunktion dienen. Dadurch wären beispielsweise Modifikation der Darstellung der Wellenfunktion möglich.

Anhang: Quellcode der GUI

Der Quellcode der Python-Klassen, die für die Erstellung der GUI genutzt wurden, wurde in verschiedenen Python-Dateien gespeichert. Im Folgenden werden die Dateinamen und der dazugehörige Quellcode aufgeführt:

dialogC.py:

```
from PyQt4 import QtCore, QtGui, uic
import sys, os
from widgetA import WidgetA

base, form = uic.loadUiType("dialogNewName.ui")

class DialogC(base, form):
    def __init__(self, parent=None):
        super(base, self).__init__(parent)
        self.setupUi(self)

        self._FolderName = ""
        self._cancel = None

        self.uiWarning.setText('')
        self.uiFolderName.setText("Give name for new Folder!")
        self.uiFolderName.selectAll()
        self.uiFolderName.textChanged.connect(self.change0)
        self.uiSaveBu.clicked.connect(self.save)
        self.uiCancelBu.clicked.connect(self.esc)

    def setWarning(self, warningUi):
```

```
print warningUi
self.uiWarning.setText(warningUi)

def save(self):
    self._FolderName = self.uiFolderName.text()
    if ' ' not in self._FolderName:
        self.close()
    else:
        self.setWarning(str('Name contains whitespace'))
        print 'Name contains whitespace'

def esc(self):
    self._cancel = "Cancel"
    self.close()

def change0(self):
    self._FolderName = self.uiFolderName.text()
```

InputPro.py:

```
from PyQt4 import QtCore, QtGui
import sys, os

class ListAbstrModel(QtCore.QAbstractListModel):
    def __init__(self, data=[], parent=None):
        super(ListAbstrModel, self).__init__(parent)
        self.__data = data

    def rowCount(self, parent):
        return len(self.__data)

    def data(self, index, role):
        if role == QtCore.Qt.EditRole:
            row = index.row()
            return self.__data[row]
```

```
if role == QtCore.Qt.DisplayRole:
    row = index.row()
    value = self.__data[row]
    return value

def flags(self, index):
    return QtCore.Qt.ItemIsEditable | QtCore.Qt.ItemIsEnabled
    | QtCore.Qt.ItemIsSelectable

def setData(self, index, value, role=QtCore.Qt.EditRole):
    if role == QtCore.Qt.EditRole:
        row = index.row()
        self.__data[row] = str(value.toString())
        return True
    return False

class ListModel(ListAbstrModel):
    def __init__(self, data=[], parent=None):
        super(ListModel, self).__init__(data, parent)
        self.__data = data
        self.__dataBefore = list(data)
        self._messageBu = False

    def setData(self, index, value, role=QtCore.Qt.EditRole):
        if value not in self.__data:
            if role == QtCore.Qt.EditRole:
                row = index.row()
                self.__data[row] = str(value.toString())
                self.getValue()
                return True
        else:
            return False
```

```
def getValue(self):
    matches = list(set(self.__data).intersection(self.__dataBefore))
    new = [l_ for l_ in self.__data if l_ not in matches]
    old = [l_ for l_ in self.__dataBefore if l_ not in matches]
    print new, old
    print os.getcwd()
    self.__dataBefore = list(self.__data)
    try:
        os.rename(old[0], new[0])
    except OSError:
        raise

def removeRows(self, position, rows, parent=QtCore.QModelIndex()):
    self.beginRemoveRows(parent, position, position+rows-1)

    value = self.__data[position]
    self.showdialog(value)
    if self._messageBu == 'OK':
        for i in range(rows):
            value = self.__data[position]
            self.__data.remove(value)
        self.endRemoveRows()
        return True
    else:
        self.endRemoveRows()
        return False

def showdialog(self, value):
    msg = QtGui.QMessageBox()
    msg.setIcon(QtGui.QMessageBox.Warning)

    msg.setText("Are sure you want to delete Folder %s?" %value)
    msg.setStandardButtons(QtGui.QMessageBox.Ok | QtGui.QMessageBox.Cancel)
```

```
msg.buttonClicked.connect(self.msgbtn)
msg.exec_()

def msgbtn(self, i):
    self._messageBu = str(i.text())

class ListModel2(ListModel):
    def __init__(self, project, data=[], parent=None):
        super(ListModel2, self).__init__(data, parent)
        self.__data = data
        self.__dataBefore = list(data)
        self._changePath = os.getcwd() + '/' + project

    def setData(self, index, value, role=QtCore.Qt.EditRole):
        if value not in self.__data:
            if role == QtCore.Qt.EditRole:
                row = index.row()
                self.__data[row] = str(value.toString())
                self.getValue(row)
                return True
            else:
                return False

    def getValue(self, row):
        matches = list(set(self.__data).intersection(self.__dataBefore))
        new = [l_ for l_ in self.__data if l_ not in matches]
        old = [l_ for l_ in self.__dataBefore if l_ not in matches]
        self.__dataBefore = list(self.__data)
        os.chdir(self._changePath)
        try:
            os.rename(old[0], new[0])
        except Exception:
            self.showdialog(row)
```

```
def removeRows(self, position, rows, parent=QtCore.QModelIndex()):  
    self.beginRemoveRows(parent, position, position+rows-1)  
  
    value = self._data[position]  
    for i in range(rows):  
        value = self._data[position]  
        self._data.remove(value)  
    self.endRemoveRows()  
    return True
```

InputTree.py:

```
#####  
#      Title: PyQt4 Model View Tutorial Part 04  
#      Author: Yasin Uludag  
#      Date: 2011  
#      Availability: https://www.youtube.com/watch?v=pr1M3mP7qfI  
#####  
  
from PyQt4 import QtCore, QtGui, uic  
import sys  
from Node import Node, BottomNode, Tree  
  
class SceneGraphModel(QtCore.QAbstractItemModel):  
    def __init__(self, root, parent=None):  
        super(SceneGraphModel, self).__init__(parent)  
        self._rootNode = root  
        self._child = None  
        self._childIndex = QtCore.QModelIndex()  
        self._dictNodes = {}  
  
    def parent(self, index):  
        node = index.internalPointer()  
        parentNode = node.parent()
```

```
if parentNode == self._rootNode:
    return QtCore.QModelIndex()
return self.createIndex(parentNode.row(), 0, parentNode)

def index(self, row, column, parent):
    childItem = parentNode.child(row)

    if childItem:
        return self.createIndex(row, column, childItem)
    else:
        return QtCore.QModelIndex()

def rowCount(self, parent):
    if not parent.isValid():
        parentNode = self._rootNode
    else:
        parentNode = parent.internalPointer()

    return parentNode.childcount()

def columnCount(self, parent):
    return 2

def flags(self, index):
    return QtCore.Qt.ItemIsEnabled | QtCore.Qt.ItemIsSelectable | \
           QtCore.Qt.ItemIsEditable | QtCore.Qt.ItemIsDragEnabled | \
           QtCore.Qt.ItemIsDropEnabled

def headerData(self, section, orientation, role):
    if role == QtCore.Qt.DisplayRole:
        if section == 0:
```

```
        return "Node"
    else:
        return "Mode"

def data(self, index, role):
    if not index.isValid():
        return None

    node = index.internalPointer()

    if role == QtCore.Qt.DisplayRole or role == QtCore.Qt.EditRole:
        if index.column() == 0:
            return node.name()
        else:
            if node.typeInfo() == "Bottom":
                return node._physcoor

    if role == QtCore.Qt.DecorationRole:
        if index.column() == 0:
            typeInfo = node.typeInfo()

def setData(self, index, value, role = QtCore.Qt.EditRole):
    if index.isValid():
        if role == QtCore.Qt.EditRole:
            node = index.internalPointer()
            if index.column() == 0:
                node.setName(str(value.toString()))
                return True
            elif index.column() == 1:
                node.setPhyscoor(str(value.toString()))
                return True
    return False
```

```
def getNode(self, index):
    if index.isValid():
        node = index.internalPointer()
        if node:
            return node
    return self._rootNode

def getNode2(self, index):
    return self._rootNode

def insertRows(self, position, rows, parent=QtCore.QModelIndex()):
    parentNode = self.getNode(parent)
    oldNode = self._child
    if oldNode.typeInfo() == 'NODE':
        self.addNode(oldNode.name(), oldNode.name(), None)
    if oldNode.typeInfo() == 'Bottom':
        self.addBottomNode(oldNode.name(), oldNode.name(), None, \
                           oldNode.physcoor())
    self.copyNode(self._child)

    self.beginInsertRows(parent, position, position+rows-1)

    for row in range(rows):
        success = parentNode.insertChild(position, \
                                          self._dictNodes[oldNode.name()])

    self.endInsertRows()

    return success

def removeRows(self, position, rows, parent=QtCore.QModelIndex()):
    parentNode = self.getNode(parent)
```

```
    self.beginRemoveRows(parent, position, position+rows-1)

    for row in range(rows):

        success = parentNode.removeChild(position)

    self.endRemoveRows()

    return success

#####Drag and Drop#####
def supportedDropActions(self):
    return QtCore.Qt.CopyAction | QtCore.Qt.MoveAction

def mimeTypes(self):
    types = QtCore.QStringList()
    types.append('text/plain')
    return types

def mimeData(self, index):
    rc = ''
    self._child = index[0].internalPointer()
    self._childIndex = index[0]
    mimeData = QtCore.QMimeData()
    mimeData.setText(rc)
    return mimeData

def dropMimeData(self, data, action, row, column, parentIndex):
    if action == QtCore.Qt.IgnoreAction:
        return True

    self.insertRows(0,1, parentIndex)
    index = self._childIndex
```

```
        self.removeRows(0,1, index)
        print self._rootNode.child(0)
        return True

def copyNode(self, oldNode):
    children = oldNode.childAll()
    if children:
        for oldchild in children:
            if oldchild.typeInfo() == "NODE":
                self.addNode(oldchild.name(), oldchild.name(), \
                             self._dictNodes[oldNode.name()])
            if oldchild.typeInfo() == "Bottom":
                self.addBottomNode(oldchild.name(), oldchild.name(), \
                                   self._dictNodes[oldNode.name()], oldchild.physcoor())
                self.copyNode(oldchild)

def addNode(self, obj, SPF, parent):
    self._dictNodes[obj] = Node(SPF, parent)

def addBottomNode(self, obj, SPF, parent, physcoor):
    self._dictNodes[obj] = BottomNode(SPF, parent, physcoor)
```

LogicalNodes.py:

```
from ModelTree import ModelTree
import networkx as nx
from networkx.drawing.nx_agraph import write_dot, graphviz_layout
import matplotlib.pyplot as plt

class LogicalNodes():
    def __init__(self, layer_matr, config_file, sys_file):
        self.G = nx.DiGraph()
        self.layer_matr = layer_matr
        self.ModelTree = ModelTree(config_file, sys_file)
        self.label_mode = self.ModelTree.label_mode
```

```
    self.nodes_spf = self.ModelTree.nodes_spf
    self.Networkx()
    self.augDiGraph("SPF", self.nodes_spf)
    self.augDiGraph("Mode", self.label_mode)

def Networkx(self):
    for c_ in self.layer_matr:
        for b_ in c_:
            self.G.add_node(b_)
    l = len(c_)
    for index, b_ in enumerate(c_):
        if index < (l-1):
            self.G.add_edge(b_, c_[index + 1], weight=1)

def augDiGraph(self, str_kind, str_dict):
    for key, ele_ in str_dict.items():
        self.G.nodes[key][str_kind] = ele
```

main.py:

```
from PyQt4 import QtGui, QtCore, uic
import sys, os, shutil
from widgetA import WidgetA
from InputPro import ListModel, ListModel2
from dialogC import DialogC
from dialogD import DialogD
```

```
base, form = uic.loadUiType("main.ui")

class Main(base, form):
    def __init__(self, parent=None):
        super(base, self).__init__(parent)
        self.setupUi(self)
```

```
self._HamiltonianDir = os.getcwd() + '/' + 'Hamiltonians'
os.chdir('Projects')
self._startingPath = os.getcwd()
self._ProjectName = None
self._path2 = None
self._dir_list = None
self._proContent = []

self._model1 = None
self._model2 = None
self._itemIndex1 = None
self._itemIndex2 = None

self.getdirs()
self._WidgetA = WidgetA(self)
self._WidgetA._HamiltonianDir = self._HamiltonianDir
self._WidgetA._startingPath = self._startingPath

self.setList()
self.uiNew.triggered.connect(self.openA)
self.uiLoad.triggered.connect(self.openB)
self.uiMCTDHcalc.triggered.connect(self.openD)
self.uiMCTDHexisting.triggered.connect(self.runJob)
self.uiPlusBu.clicked.connect(self.openA)
self.uiPlusBu2.clicked.connect(self.openO)
self.uiMinusBu.clicked.connect(self.removeA)
self.uiMinusBu2.clicked.connect(self.removeO)

self.uiProjects.clicked.connect(self.on_item_select)
self.uiProjects.customContextMenuRequested.connect(self.openMenu)

self.setList2()
self.uiSessions.clicked.connect(self.on_item_select0)
self.uiSessions.customContextMenuRequested.connect(self.openMenu0)
```

```
self._dialogD = DialogD()

self._messageBu = None

def openMenu0(self, position):
    """Context menu"""
    menu = QtGui.QMenu()
    renameAction = menu.addAction("Rename")
    action = menu.exec_(self.uiSessions.mapToGlobal(position))
    if action == renameAction:
        self.uiSessions.edit(self._itemIndex2)

def openMenu(self, position):
    """Context menu"""
    menu = QtGui.QMenu()
    renameAction = menu.addAction("Rename")
    action = menu.exec_(self.uiProjects.mapToGlobal(position))
    if action == renameAction:
        self.uiProjects.edit(self._itemIndex1)

def remove0(self):
    """Removes Rows from ListModel2()"""
    rowNum = self._itemIndex2.row()
    session = str(self._itemIndex2.data().toString())
    self.showdialog(session)
    if 'OK' in self._messageBu:
        self._model2.removeRows(rowNum, 1, self._itemIndex2)

    shutil.rmtree(self._startingPath+'/'+self._ProjectName+'/'+session)

def removeA(self):
    """Removes Rows from ListModel()"""
    rowNum = self._itemIndex1.row()
```

```
key = str(self._itemIndex1.data().toString())
startingpath2 = self._startingPath + '/'
delFolder = startingpath2 + key

self._model1.removeRows(rowNum, 1, self._itemIndex1)

if self._model1._messageBu == 'OK' and delFolder != self._startingPath
and delFolder != startingpath2:
    shutil.rmtree(self._startingPath+'/'+key)

maxRow = self._model2.rowCount(self._itemIndex2)
if maxRow != 0:
    self._model2.removeRows(0, maxRow)

def showdialog(self, value):
    msg = QtGui.QMessageBox()
    msg.setIcon(QtGui.QMessageBox.Warning)

    msg.setText("Are sure you want to delete Folder %s?" %value)
    msg.setStandardButtons(QtGui.QMessageBox.Ok| QtGui.QMessageBox.Cancel)

    msg.buttonClicked.connect(self.msgbtn)
    msg.exec_()

def msgbtn(self, i):
    self._messageBu = str(i.text())

def getContent(self):
    os.chdir(self._startingPath)
    if os.path.exists(self._ProjectName):
        directories = os.walk('./'+self._ProjectName).next()[1]
        try:
            directories.remove('tmp')
        except ValueError:
```

```
        pass
        self._proContent = sorted(directories)
    else:
        print("path doesn't exists")

def on_item_select0(self, index):
    """clicked Event on Items belonging to ListModel2()"""
    os.chdir(self._startingPath)
    projectFolder = str(self._itemIndex1.data().toString())
    sessionFolder = str(index.data().toString())
    self._itemIndex2 = index
    self._ProjectName = projectFolder

    os.chdir(self._ProjectName)
    self._WidgetA._ProjectName = projectFolder
    self._WidgetA.makedirs()
    self._WidgetA.editSession(sessionFolder)
    self._WidgetA.setSessionName(sessionFolder)
    self._WidgetA.start()
    self._WidgetA.removeContent()
    SESfiles = os.walk(self._startingPath+'/'+self._ProjectName+'/'
+sessionFolder).next()[2]
    if SESfiles:
        for f_ in SESfiles:
            if 'txt' in f_:
                self._WidgetA.fromSESToTMP(f_)
    self.openC()
    os.chdir('..')

def on_item_select(self, index):
    """clicked Event on Items belonging to ListModel()"""
    self._itemIndex1 = index
    self._ProjectName = str(index.data().toString())
    self._WidgetA._ProjectName = self._ProjectName
```

```
self._WidgetA._SessionName = None
self._WidgetA.clearSession()
self.getdirs()
self.setList2()

def setList2(self):
    #####ListModelPES#####
    self.getContent()
    self._model2 = ListModel2(self._ProjectName, self._proContent)
    self.uiSessions.setModel(self._model2)
    indices = self.uiSessions.selectionModel().selectedIndexes()
    if not indices:
        index = self._model2.index(0,0)
        self._itemIndex2 = index
        self.uiSessions.selectionModel().select(index, /
QtGui.QItemSelectionModel.Select)
        self._path2 = str(self._itemIndex2.data().toString())

def setList(self):
    #####ListModelPES#####
    self.getdirs()
    self._model1 = ListModel(self._dir_list)
    self.uiProjects.setModel(self._model1)
    indices = self.uiProjects.selectionModel().selectedIndexes()
    if not indices:
        index = self._model1.index(0,0)
        self._ProjectName = str(index.data().toString())
        self._WidgetA._ProjectName = self._ProjectName
        self._itemIndex1 = index
        self._itemProxyIndex1 = index
        self.uiProjects.selectionModel().select(index, /
QtGui.QItemSelectionModel.Select)

def getdirs(self):
```

```
directories = os.walk(self._startingPath).next()[1]
self._dir_list = [dirs for dirs in directories]
self._dir_list = sorted(self._dir_list)

def open0(self, warn):
    if warn == False:
        warn = ''
    dialogC = DialogC()
    dialogC.setWarning(str(warn))
    dialogC.exec_()
    self._path2 = str(dialogC._FolderName)
    print self._path2

    if str(dialogC._cancel) != 'Cancel':
        path = self._startingPath + '/' + self._ProjectName + '/'
        + self._path2
        if not os.path.exists(path):
            try:
                os.chdir(self._startingPath+'/'+self._ProjectName)
                os.makedirs(self._path2)
                os.chdir(self._startingPath)
            except IOError as identifier:
                print (dir(identifier))
                self.getContent()
                self.setList2()
            else:
                print('Folder already exists!')
                self.open0('Folder already exists!')

def openA(self, warnings):
    if warnings == False:
        warnings = ''
    dialogC = DialogC()
    dialogC.setWarning(str(warnings))
```

```
dialogC.exec_()
self._ProjectName = str(dialogC._FolderName)

if self._ProjectName != 'Cancel':
    path = self._startingPath + '/' + self._ProjectName

    if not os.path.exists(path):
        try:
            os.makedirs(path)
            os.makedirs(path+'/tmp')
        except IOError as identifier:
            print (identifier)

        self.setList()
    else:
        print('Folder already exists!')
        self.openA('Folder already exists!')

def openB(self):
    self._ProjectName = str(QtGui.QFileDialog.getExistingDirectory(self))
    self._ProjectName = self._ProjectName.split("/")[-1]
    self.getContent()
    self.setList2()

def openC(self):
    dialog = self._WidgetA
    dialog.exec_()
    self.setList2()

def openD(self):
    self._WidgetA.clearSession()
    self._WidgetA.setSessionName(None)
    self._WidgetA.removeContent()
```

```
self.openC()

def Finder(self, path, app):
    fileList = os.walk(path).next()[2]
    return [f_ for f_ in fileList if app in f_][0]

def getRunInput(self):
    filePathList = []
    self.getContent()
    self._proContent
    for root, dirs, files in os.walk(self._startingPath+'/'
+ self._ProjectName):
        for name in files:
            filePathList.append(os.path.join(root, name))
    filePathList = [p_ for p_ in filePathList if '.in' in p_]
    filePathList = [f_.split('/')[-2:] for f_ in filePathList]
    filePathList = [f_ for f_ in filePathList if f_[0] in self._proContent]
    return ['/'.join(f_) for f_ in filePathList]

def runJob(self):
    '''Try QProcess from Qt'''
    dialog = self._dialogD
    self._dialogD._model = QtGui.QStandardItemModel(self._dialogD.uiRunList)
    self._dialogD.uiRunList.setModel(self._dialogD._model)
    self._dialogD.uiRunList.setEditTriggers(QtGui.QAbstractItemView.
NoEditTriggers)
    inputList = self.getRunInput()

    for calc in inputList:
        item = QtGui.QStandardItem(calc)
        self._dialogD._model.appendRow(item)
```

```
self._dialogD.uiRunList.clicked.connect(self.on_item_select2)
dialog.exec_()

def on_item_select2(self, index):
    inputFile = self._startingPath+'/'+self._ProjectName+'/'
    +str(index.data().toString())

    self.process = QtCore.QProcess()
    self.process.setProcessChannelMode(QtCore.QProcess.MergedChannels)
    self.process.readyReadStandardOutput.connect(self.mctdhOut)
    self.results(inputFile)

def results(self, inputFile):
    os.chdir('../Results')
    self._WidgetA.genereInput(inputFile)
    try:
        os.mkdir(self._WidgetA._mainfolder)
    except OSError:
        pass
    mctdh = '/home/piet/newRepo/QuantumDynamics/build/bin/mctdh'
    self.process.start(mctdh+' '+inputFile)
    os.chdir(self._startingPath)
    self._dialogD.close()

def mctdhOut(self):
    output = str(self.process.readAllStandardOutput())
    print output

if __name__ == '__main__':
    app = QtGui.QApplication(sys.argv)
    app.setStyle("cleanlooks")
    wnd =Main()
```

```
wnd.show()
sys.exit(app.exec_())
```

ModelTree.py:

```
import mctdh
import sys

class ModelTree(object):
    def __init__(self, config_file='mctdh.config', sys_file='CH3g1.txt'):
        self.config_file = config_file
        self.sys_file = sys_file
        self.bottom_list = []
        self.mode_list = []
        self.layer_list = []
        self.layer_matr = []
        self.lay_matr_mode = []
        self.label_mode = {}
        self.nodes_spf = {}

        print self.config_file, 'from ModelTree'
        print self.sys_file, 'from ModelTree'
        self.config = mctdh.controlParameters()
        self.config.initialize(self.config_file)
        self.basis = mctdh.MctdhBasis()
        self.basis.initialize(self.sys_file, self.config)
        self.node = mctdh.MctdhNode()
        self.phys = mctdh.PhysCoor()
        self.tdim = mctdh.Tdim()

        self.getLayerMatr()
        self.getPhysCoord()
        self.modeToGetLayer()
        self.get_SPFs()
```

```
def getBottomlayer(self):
    """Get the bottom nodes"""
    for i in range(self.basis.NmctdhNodes()):
        self.node = self.basis.MCTDHnode(i)
        if self.node.Bottomlayer() == True:
            self.bottom_list.append(i)
    return self.bottom_list #List of the i-th bottom node

def getPhysCoord(self):
    """get the Modes of the pys. Coordinates"""
    for i in range(self.basis.NmctdhNodes()):
        self.node = self.basis.MCTDHnode(i)
        if self.node.Bottomlayer() == True:
            self.phys = self.node.phys_coor()
            self.mode_list.append(self.phys.mode()) #append Modes to list

def nlayer(self, i):
    self.node = self.basis.MCTDHnode(i) #i-th Node
    self.layer_list.append(i)
    if self.node.Toplayer() == False:
        return self.nlayer(self.node.up().address())
    new_list = list(self.layer_list) #copy instead of reference
    del self.layer_list[:]
    return new_list

def getLayerMatr(self):
    self.layer_matr =
    [list(reversed(self.nlayer(b_))) for b_ in self.getBottomlayer()]

def modeToGetLayer(self):
    self.lay_matr_mode =
    [l_ + [100 + i] for i,l_ in enumerate(self.layer_matr)]
    self.lay_matr_mode = [["Top"] + l_ for l_ in self.lay_matr_mode]
```

```
#concatinates two lists
self.label_mode = [100 + i for i in range(len(self.mode_list))]
self.label_mode = dict(zip(self.label_mode, self.mode_list))

def get_SPFs(self):
    """get the SPF's of each Node"""
    for i in range(self.basis.NmctdhNodes()):
        self.node = self.basis.MCTDHnode(i)
        self.tdim = self.node.t_dim()
        self.nodes_spf[i] = self.tdim.GetnTensor() #dict

    mode_spf = [self.basis.MCTDHnode(i).t_dim().active(0) for i in \
                range(self.basis.NmctdhNodes()) if \
                self.basis.MCTDHnode(i).Bottomlayer() == True]

    mode_spf_dict = dict(zip(self.label_mode, mode_spf))
    for k, i in zip(self.label_mode.keys(), mode_spf):
        self.nodes_spf[k] = i
```

Node.py:

```
from LogicalNodes import LogicalNodes
from ModelTree import ModelTree
import numpy as np
import networkx as nx
import re, sys, os

class Parameters(object):
    def __init__(self):
        self._eps_general = None
        self._eps_1 = None
        self._eps_2 = None
        self._start = None
        self._end = None
        self._dt = None
```

```
self._iteration = None
self._hamiltonian = None
self._potential = None
self._job = None
self._parameters = None
self._treeData = None

class InPut(Parameters):
    def __init__(self, filename='example.in'):
        super(InPut, self).__init__()
        self._filename = filename
        self._filenameOld = None
        self._paradict = {}
        self._paralist = []
        self._treelist = []
        self._treeString = ''
        self._commDict = {}
        self.rmCommen()
        self.readFile()

    def readFile(self):
        self.getPara("mainfolder")
        self.getPara("Hamiltonian")
        self.getPara("Potential")
        self.getPara("job")
        self.getPara("start")
        self.getPara("end")
        self.getPara("dt")
        self.getPara("iteration")
        self.getPara("out")
        self.getPara2()
        self._paradict['para'] = self._paralist
        self._paradict['Comm'] = self._commDict
        self.getTree()
```

```
def file_len(self, fname):
    with open(fname) as f:
        for i, l in enumerate(f):
            pass
    return i+1

def getPara2(self):
    lineNumber = self.file_len(self._filename)
    with open(self._filename, "rb") as text:
        for line in text:
            if "parameters" in line:
                for i in range(lineNumber):
                    try:
                        para = text.next()
                        if bool(re.search(r'\d', para)):
                            para = para.split()
                            self._paralist.append(para)
                    except StopIteration:
                        pass
    lastLine = [x for x in self._paralist[-1] if x != ']']
    del self._paralist[-1]
    self._paralist.append(lastLine)

def rmCommen(self):
    with open(self._filename, "r") as in_put:
        with open('new_InPut.in', 'wb') as output:
            i = 0
            for line in in_put:
                i += 1
                if '//' in line:
                    self._commDict[i-1] = line
                else:
                    output.write(line)
```

```
self._filename = 'new_InPut.in'

def getPara(self, para):
    with open(self._filename, "rb") as text:
        for line in text:
            if para in line:
                try:
                    pos = line.index('=')
                    self._paradict[para] = line[pos+1:].strip()
                except ValueError:
                    pass

def getTree(self):
    lineNum = self.file_len(self._filename)
    with open(self._filename, "rb") as text:
        for line in text:
            if 'tree' in line:
                for i in range(lineNum):
                    try:
                        tree = text.next()
                        if ']' in tree:
                            break
                        self._treelist.append(tree)
                    except StopIteration:
                        pass
    self._treeString = ''.join(self._treelist)

class OutPut(Parameters):
    def __init__(self, tree, paradict, sysFile, filename="InPut.in"):
        self._mainfolder = paradict['mainfolder']
        self._start = paradict['start']
        self._end = paradict['end']
```

```
self._dt = paradict['dt']
self._out = paradict['out']
self._iteration = paradict['iteration']
self._hamiltonian = paradict['Hamiltonian']
try:
    self._potential = paradict['Potential']
except KeyError:
    self._potential = 'no Potential'
self._job = paradict['job']
self._parameters = paradict['para']
self._formated = self.formatparameter()
self._treeData = tree._treeData
self._filename = filename
self._sysFile = sysFile

def savefile(self):
    with open(self._filename, "w") as text_file:
        text_file.write("{0}".format(self.bringAllTogether()))

def savefile2(self):
    with open(self._sysFile, "w") as text_file:
        text_file.write("{0}".format(self.bringTreePara()))

def formatparameter(self):
    output = ""
    A = self._parameters
    output = '\n'.join(['' .
        join(['{:4}'.format(item) for item in row]) for row in A])
    return output

def bringAllTogether(self):

    output = "mainfolder = " + self._mainfolder + "\n" \
    "Hamiltonian = " + self._hamiltonian + "\n" \
```

```
"Potential = " + self._potential + "\n" \
"\n" \
"job = " + self._job + "\n" \
"\n" \
'integrator = { \n" \
"start = " + self._start + "\n" \
"end = " + self._end + "\n" \
"dt = " + self._dt + "\n" \
"iteration = " + self._iteration + "\n" \
"out = " + self._out + "\n" \
"} \n" \
"\n" \
"basis = \n" \
"\n" \
"tree = [ \n" \
+ self._treeData + \
"]\n" \
"\n" \
"\n" \
"parameters = [\n" \
+ self._formated + \
"]\n" \
"}"
return output

def bringTreePara(self):
    output = self._treeData + \
"\n" \
+ self._formated
    return output

def __repr__(self):
    return self.bringAllTogether()
```

```
class OutPut2(object):
    def __init__(self, paradict, treeString, filename, pathTMP):
        self._parameters = paradict['para']
        self._formated = self.formatparameter()
        self._treeString = treeString
        self._sysFile = pathTMP + '/Load.txt'
        self._TMPmctdhConfig = pathTMP + '/mctdh.config'
        self._path = pathTMP

    def savefile(self):
        with open(self._TMPmctdhConfig, "w") as text_file:
            text_file.write("{0}".format(self.bringAllEPS()))

    def savefile2(self):
        with open(self._sysFile, "w") as text_file:
            text_file.write("{0}".format(self.bringTreePara()))

    def bringAllEPS(self):
        epsList = ['1E-6', '8E-5', '5E-5', '5E-5', '0', '0']
        output = '\n'.join(epsList)
        return output

    def bringTreePara(self):
        output = self._treeString + \
                 "\n" \
                 + self._formated
        return output

    def formatparameter(self):
        output = ""
        A = self._parameters
        output = '\n'.join(['      '.
                           join(['{:4}'.format(item) for item in row]) for row in A])
```

```
    return output

class Tree(object):
    def __init__(self, mctdhConfig, sys_file):
        self._rootNode0 = Node("TOP")
        self._dictNodes = {}

        model = ModelTree(mctdhConfig, sys_file)
        logical = LogicalNodes(model.lay_matr_mode, mctdhConfig, sys_file)
        self._G = logical.G
        self._elder = None
        self.getElder()
        self.addNode(self._elder, str(self._G.nodes[self._elder]['SPF']),
                     self._rootNode0)
        self.readTree()

        self._rootNode = self._dictNodes[self._elder]
        self._treeData = self._dictNodes[self._elder].log()

    def getElder(self):
        for ele_ in self._G.nodes():
            if self._G.pred[ele_] == {}:
                self._elder = ele_
        self._elder = self._G.successors(self._elder).next()

    def readTree(self):
        for suc_ in nx.bfs_successors(self._G, self._elder):
            for brothers in suc_[1]:
                if 'Mode' in self._G.nodes[brothers].keys():
                    self.addBottomNode(brothers,
                                       str(self._G.nodes[brothers]['SPF']),
                                       self._dictNodes[suc_[0]],
```

```
        str(self._G.nodes[brothers]['Mode']))
    else:
        self.addNode(brothers, str(self._G.nodes[brothers]['SPF']),
                     self._dictNodes[suc_[0]]) #Label, SPF, parent_obj

def setRootNode(self, rootNode):
    self._rootNode = rootNode
    self.setLog()

def setLog(self):
    self._treeData = self._rootNode.log()

def addNode(self, obj, SPF, parent):
    self._dictNodes[obj] = Node(SPF, parent)

def addBottomNode(self, obj, SPF, parent, physcoor):
    self._dictNodes[obj] = BottomNode(SPF, parent, physcoor)

#####
#      Title: PyQt4 Model View Tutorial Part 04
#      Author: Yasin Uludag
#      Date: 2011
#      Availability: https://www.youtube.com/watch?v=pr1M3mP7qfI
#####

class Node(object):
    def __init__(self, name, parent=None):
        self._name = name
        self._children = []
        self._parent = parent
```

```
if parent is not None:  
    parent.addChild(self)  
  
def addChild(self, child):  
    self._children.append(child)  
  
def insertChild(self, position, child):  
    if position < 0 or position > len(self._children):  
        return False  
  
    self._children.insert(position, child)  
    child._parent = self  
    return True  
  
def removeChild(self, position):  
    if position < 0 or position > len(self._children):  
        return False  
  
    try:  
        child = self._children.pop(position)  
        child._parent = None  
        return True  
    except IndexError as e:  
        print e.message, ': from Node, 237'  
        return False  
  
def name(self):  
    return self._name  
  
def setName(self, name):  
    self._name = name  
  
def child(self, row):
```

```
        return self._children[row]

    def childAll(self):
        return self._children

    def childcount(self):
        return len(self._children)

    def parent(self):
        return self._parent

    def row(self):
        if self._parent is not None:
            return self._parent._children.index(self)

    def log(self, tabLevel=-1):
        output = ""
        tabLevel += 1

        for i in range(tabLevel):
            output += "    "
        if self.childcount() == 0:
            output += self._name + " " + str(self.childcount()) + "\n"
        else:
            output += self._name + " -" + str(self.childcount()) + "\n"

        for child in self._children:
            output += child.log(tabLevel)

        tabLevel -= 1

    return output

def __repr__(self):
```

```
    return self.log()

def typeInfo(self):
    return "NODE"

class BottomNode(Node):
    def __init__(self, name, parent, physcoor):
        super(BottomNode, self).__init__(name, parent)
        self._physcoor = physcoor

    def typeInfo(self):
        return "Bottom"

    def physcoor(self):
        return self._physcoor

    def setPhyscoor(self, physcoor):
        self._physcoor = physcoor

    def log(self, tabLevel=-1):
        output = ""
        tabLevel += 1

        for i in range(tabLevel):
            output += "    "
        if self.childcount() == 0:
            output += self._name + " " + str(self.childcount()) +
                      " " + self._physcoor + "\n"
        else:
            output += self._name + " -" + str(self.childcount()) + "\n"

        for child in self._children:
            output += child.log(tabLevel)
```

```
tabLevel == 1
```

```
return output
```

View.py:

```
import networkx as nx
from networkx.drawing.nx_agraph import write_dot, graphviz_layout
import matplotlib.pyplot as plt

import sys
from PyQt4 import QtGui

class View(object):
    def __init__(self, label_mode, nodes_spf):
        self.label_mode = label_mode
        self.nodes_spf = nodes_spf
        self._G = nx.DiGraph()

    def Display(self, G):
        top = ['Top']
        rest_nodes = [l_ for l_ in self.nodes_spf.keys()
                      if l_ not in self.label_mode.keys()]
        pos = graphviz_layout(G, prog='dot')
        nx.draw(G, pos, with_labels=False, arrows=False, node_color='w')
        nx.draw_networkx_nodes(G, pos, nodelist=top, node_color='w', alpha=1)
        nx.draw_networkx_nodes(G, pos, nodelist=rest_nodes, node_color='r',
                              alpha=1)

        pos_lower = {}
        x_off = 0
        y_off = -5
        for k, v in pos.items():
            pos_lower[k] = (v[0] + x_off, v[1] + y_off)
```

```
nx.draw_networkx_labels(G, pos_lower, self.label_mode, font_size=16)

pos_higher = {}
x_off = -7
y_off = 27
for k, v in pos.items():
    pos_higher[k] = (v[0] + x_off, v[1] + y_off)

nx.draw_networkx_labels(G, pos_higher, self.nodes_spf, font_size=12)
plt.savefig('nx_test.png')
plt.clf()

for key, ele_ in self.nodes_spf.items():
    G.nodes[key]["SPF"] = ele_
for key, ele_ in self.label_mode.items():
    G.nodes[key]["Mode"] = ele_
self._G = G
```

widgetA.py:

```
from PyQt4 import QtCore, QtGui, uic
import sys
from Node import OutPut, OutPut2, Tree
from Node import InPut
from InputTree import SceneGraphModel
from ModelTree import ModelTree
from LogicalNodes import LogicalNodes
from View import View
import os, shutil

base, form = uic.loadUiType("dialogA.ui")

class WidgetA(base, form):
    def __init__(self, parent=None):
        super(WidgetA, self).__init__(parent)
```

```
self.setupUi(self)

self._HamiltonianDir = None

#####Attributes#####
self._paradict = {}
self._integrator = []
self._tree = None
self._treeFromLoad = None

self._dictHamil = {'CH3Quasie_exact': '1', 'CH4_rst': '2', 'NOCl': '9'}
self._dictPES = {'CH3Potential': '1', 'PES_CH4': '2',
'PES_HCH4_Zang': '4'}
self._potential = 'no Potential'

self._mctdhConfig = None
self._sysTreeFile = None
self._inputFile = None
self._SESmctdhConfig = None
self._SESSysTreeFile = None
self._SESinputFile = None
self._TMPmctdhConfig = None
self._TMPsysTreeFile = None
self._TMPinputFile = None
self._dest = None

self._startingPath = None
self._ProjectName = None
self._SessionName = None
self._temporarySES = None
self._messagebut = None

#####ListModelHamilton#####

```

```
self._model = QtGui.QStandardItemModel(self.listHamilton)
for key in self._dictHamil:
    item = QtGui.QStandardItem(key)
    self._model.appendRow(item)
self.listHamilton.setModel(self._model)
self.listHamilton.setEditTriggers(QtGui.QAbstractItemView.
NoEditTriggers)
self.listHamilton.clicked.connect(self.on_item_select1)

#####RadioButtonsPES#####
self.onRadio.setChecked(True)
self.onRadio.toggled.connect(self.setPES)
self.offRadio.toggled.connect(self.unsetPES)
self.offRadio.toggled.connect(self.noPotenial)

#####ListView of PES is built###
self.setPES()

#####RadioButtonsJob#####
self.RealRadio.toggled.connect(self.setJob1)
self.RealRadio.setChecked(False)
self.ImaginaryRadio.toggled.connect(self.setJob2)
self.EigenstateRadio.toggled.connect(self.setJob3)
self.fluxEigenstateRadio.toggled.connect(self.setJob4)

self._job = None
self._dictJob = {'integrate': self.RealRadio,
'integrate': self.ImaginaryRadio,
'eigenstates': self.EigenstateRadio,
'flux eigenstates': self.fluxEigenstateRadio}

#####PushBottoms#####
self.uiCancel.clicked.connect(self.cancel)
self.uiSaveJob.clicked.connect(self.saveProject)
```

```
self.uiLoad.clicked.connect(self.FromLoadToTMP)
self.uiStartCal.clicked.connect(self.runJob)

#####Line Edits#####
self.uiStartTime.textChanged.connect(self.change1)
self.uiEndTime.textChanged.connect(self.change2)
self.uiInit.textChanged.connect(self.change3)
self.uiIter.textChanged.connect(self.change4)

#####Networkx and MCTDH#####
self.setConfig = None
self.setSystem = None
self.modelTree = None
self.scene = None

def noPotential(self):
    self._potential = 'no Potential'

def genereInput(self, inputFile):
    #####Get all Parameters from InPut.in#####
    inobj = InPut(inputFile)
    paradict = inobj._paradict
    self._treeFromLoad = inobj._treeString
    self._integrator = []
    try:
        self._integrator.append(paradict['start'])
        self._integrator.append(paradict['end'])
        self._integrator.append(paradict['dt'])
        self._integrator.append(paradict['iteration'])
        self._integrator.append(paradict['out'])
        self._mainfolder = paradict['mainfolder']
        self._hamiltonian = paradict['Hamiltonian']
        self._job = paradict['job']
        self._parameters = paradict['para']
```

```
        self._Comm = paradict['Comm']
        self._potential = paradict['Potential']
    except KeyError as e:
        pass
    if 'no Potential' in self._potential:
        #####RadioButtonsPES#####
        self.offRadio.setChecked(True)
        self.noPotenial()
    ####LineEdit#####
    self.uiStartTime.setText(self._integrator[0])
    self.uiEndTime.setText(self._integrator[1])
    self.uiInit.setText(self._integrator[2])
    self.uiIter.setText(self._integrator[3])

    self._dictJob[self._job].setChecked(True)

def getInput(self, key):
    #####Files for default Hamiltonians#####
    path = self._HamiltonianDir + '/' + key
    DotIn = self.Finder(path, 'in')
    self._inputFile = path + '/' + DotIn

    path = self._HamiltonianDir+'/'+str(key)

    sysTreeFile = self.Finder(path, 'txt')

    self._mctdhConfig = self._HamiltonianDir + '/' + key + '/'
    + 'mctdh.config'
    self._sysTreeFile = self._HamiltonianDir + '/' + key + '/'
    + sysTreeFile

    #####Files for SES calculations#####
    if self._ProjectName != None:
```

```
if self._SessionName != None:
    self._SESmctdhConfig = self._startingPath + '/'
    + self._ProjectName +'/' + self._SessionName + '/'
    + 'mctdh.config'
    self._SESSysTreeFile = self._startingPath + '/'
    + self._ProjectName +'/' + self._SessionName + '/'
    + sysTreeFile
    self._SESinputFile = self._startingPath + '/'
    + self._ProjectName +'/' + self._SessionName + '/' + DotIn

def editSession(self, name):
    self.uiProjectName.blockSignals(True)
    self.uiProjectName.setText(str(name))
    self.uiProjectName.blockSignals(False)

def clearSession(self):
    self.uiProjectName.clear()

def makeParaDict(self):
    self._paradict['mainfolder'] = str(self._SessionName) + '/'
    self._paradict['start'] = self._integrator[0]
    self._paradict['end'] = self._integrator[1]
    self._paradict['dt'] = self._integrator[2]
    self._paradict['iteration'] = self._integrator[3]
    self._paradict['out'] = self._integrator[4]
    self._paradict['Hamiltonian'] = self._hamiltonian

try:
    self._paradict['Potential'] = self._potential
except AttributeError:
    pass

self._paradict['job'] = self._job
self._paradict['para'] = self._parameters
```

```
self._paradict['Comm'] = self._Comm

def closeEvent(self, event):
    os.chdir("../")
    event.accept()

def showdialog3(self, Stringmes):
    msg = QtGui.QMessageBox()
    msg.setIcon(QtGui.QMessageBox.Information)

    msg.setText(Stringmes)
    msg.setStandardButtons(QtGui.QMessageBox.Save | 
        QtGui.QMessageBox.Cancel)

    msg.buttonClicked.connect(self.msgbtn)
    msg.exec_()

def showdialog2(self, Stringmes):
    msg = QtGui.QMessageBox()
    msg.setIcon(QtGui.QMessageBox.Warning)

    msg.setText(Stringmes)
    msg.setStandardButtons(QtGui.QMessageBox.Yes | QtGui.QMessageBox.No)

    msg.buttonClicked.connect(self.msgbtn)
    msg.exec_()

def msgbtn(self, i):
    self._messagebut = str(i.text())

def showdialog(self, stringMes):
    msg = QtGui.QMessageBox()
```

```
msg.setIcon(QtGui.QMessageBox.Information)

msg.setText(stringMes)

msg.exec_()

def managefolder(self):

    if self._inputFile != None or self._sysTreeFile != None or
    self._mctdhConfig != None:

        shutil.copy2(self._mctdhConfig, self._TMPmctdhConfig)
        shutil.copy2(self._sysTreeFile, self._TMPsysTreeFile)
        shutil.copy2(self._inputFile, self._TMPinputFile)
    else:
        pass

def changeNode(self, my_index):
    topNode = self.modelTree.getNode2(my_index).child(0)
    self._tree.setRootNode(topNode)

    self.PicGenerate()

def PicGenerate(self):
    #####Generate Outputfiles for new Pic#####
    self.output()

    #####Pic with MCTDH Code and Networkx#####
    if os.path.exists(self._TMPmctdhConfig):
        self.ModelTree = ModelTree(self._TMPmctdhConfig,
        self._TMPsysTreeFile)
    else:
        print 'Error'
    self.LogicalNodes = LogicalNodes(self.ModelTree.lay_matr_mode,
```

```
self._TMPmctdhConfig, self._TPsysTreeFile) #object
self.View = View(self.ModelTree.label_mode,
self.ModelTree.nodes_spf) #object
self.View.Display(self.LogicalNodes.G)

#####QGraphicsView#####
pixmap = QtGui.QPixmap('nx_test.png')
self.scene = QtGui.QGraphicsScene(self)
self.scene.addPixmap(pixmap)
self.uiDisplayTree.setScene(self.scene)

def New_Session(self):
    name = str(self.uiProjectName.text())
    if self._SessionName == None:
        print name

def SESfiles(self):

    path = self._startingPath + '/' + self._ProjectName + '/tmp'
    DotIn = self.Finder(path, 'in')
    sysTreeFile = self.Finder(path, 'txt')

    if self._ProjectName != None:
        if self._SessionName != None:
            self._SESmctdhConfig = self._startingPath + '/' +
            self._ProjectName + '/' + self._SessionName + '/' +
            'mctdh.config'
            self._SESSysTreeFile = self._startingPath + '/' +
            self._ProjectName + '/' + self._SessionName + '/' + sysTreeFile
            self._SESinputFile = self._startingPath + '/' +
            self._ProjectName + '/' + self._SessionName + '/' + DotIn

def saveProject(self):
    name = str(self.uiProjectName.text())
```

```
self._SessionName = name
self.SESfiles()
Profiles = os.walk(self._startingPath+'/'
+ self._ProjectName+'/').next()[1]
if name in Profiles:
    SESfiles = os.walk(self._startingPath+'/'
+ self._ProjectName+'/' + name).next()[2]

    ###Checks if SES contains files###
    if SESfiles:
        self.showdialog2('Overwriting %s?' %name)
        if 'Yes' in self._messagebut:
            self.output()
            self.fromTMPToSES()

            self.esc()
        else:
            pass
    else:
        TMPfiles = os.walk(self._startingPath+'/'
+ self._ProjectName+'/tmp').next()[2]
        if TMPfiles:
            self.output()
            self.fromTMPToSES()
            self.esc()
        else:
            self.showdialog('Nothing to save?')

    else:
        if name == '':
            print name
            self.showdialog('Please give Session name')
        else:
            os.chdir(self._startingPath+'/' + self._ProjectName)
```

```
os.mkdir(name)
os.chdir(self._startingPath)
self.output()
self.fromTMPToSES()
self.escape()

if self._potential == 'no Potential':
    with open(self._SESinputFile, 'r') as f:
        lines = f.readlines()
    with open(self._SESinputFile, 'w') as f:
        for line in lines:
            if 'Potential' not in line:
                f.write(line)

def cancel(self):
    self.removeContent()
    self.escape()

def removeContent(self):
    TMPpath = self._startingPath + '/' + self._ProjectName + '/tmp'

    try:
        shutil.rmtree(TMPpath)
    except OSError:
        raise

    sysPath = self._startingPath + '/' + self._ProjectName
    os.chdir(sysPath)
    os.mkdir('tmp')
    os.chdir(self._startingPath)

def copyLoad(self):
    LOADinputFile = str(QtGui.QFileDialog.getOpenFileName())
    try:
        shutil.copy2(LOADinputFile, self._TMPinputFile)
```

```
except Exception:  
    raise  
  
  
def FromLoadToTMP(self):  
  
    self.clearTree()  
  
    self._TMPinputFile = self._startingPath + '/' \  
    + self._ProjectName + \  
    '/tmp/InPut.in'  
  
    self._SESSysTreeFile = self._startingPath + '/' \  
    + self._ProjectName + '/' \  
    + self._SessionName + '/Load.txt'  
  
    self._SESinputFile = self._startingPath + '/' \  
    + self._ProjectName + '/' \  
    + self._SessionName + '/InPut.in'  
  
    ###removes tmp folder's content###  
    self.removeContent()  
  
    ###copies *.in file to tmp folder###  
    self.copyLoad()  
  
    ###generates Parameter from *.in file###  
    self.genereInput(self._TMPinputFile)  
    self.makeParaDict()  
    pathTMP = self._startingPath + '/' + self._ProjectName + '/tmp'  
    outobj = OutPut2(self._paradict, self._treeFromLoad, self._TMPinputFile,  
    pathTMP)  
    outobj.savefile()  
    outobj.savefile2()
```

```
####Tree will be constructed from parameters#####
self._TMPmctdhConfig = self._startingPath + '/' \
+ self._ProjectName + \
'/tmp/Load.txt'

self._TMPSysTreeFile = self._startingPath + '/' \
+ self._ProjectName + \
'/tmp/mctdh.config'

self.TreeOnly()

def checkTMP(self):
    sysPathTMP = self._startingPath +'/' + self._ProjectName + '/tmp'
    files = os.walk(sysPathTMP).next()[2]
    if files:
        return True
    return False

def fromHToTMP(self, item):
    if self.checkTMP():

        self.showdialog2('Overwriting temporary Settings?')
        if 'Yes' in self._messagebut:
            self.fromHToTMPinner(item)
        else:
            pass
    else:
        self.fromHToTMPinner(item)

def fromHToTMPinner(self, item):
    self.clearTree()
    sysPath = self._HamiltonianDir+'/' +item
```

```
sysFile = self.Finder(sysPath, '.txt')
DotIn = self.Finder(sysPath, '.in')

self._mctdhConfig = sysPath+'/'+'mctdh.config'
self._sysTreeFile = sysPath+'/'+'sysFile'
self._inputFile = sysPath+'/'+'DotIn

self._TMPmctdhConfig = self._startingPath + '/' \
+ self._ProjectName + \
'/tmp/mctdh.config'

self._TPMsyTreeFile = self._startingPath + '/' \
+ self._ProjectName + \
'/tmp/' + sysFile

self._TPMinputFile = self._startingPath + '/' \
+ self._ProjectName + \
'/tmp/' + DotIn

try:
    shutil.copy2(self._mctdhConfig, self._TMPmctdhConfig)
    shutil.copy2(self._sysTreeFile, self._TPMsyTreeFile)
    shutil.copy2(self._inputFile, self._TPMinputFile)
except Exception:
    raise

def fromSESToTMP(self, sysFile):

    self._TMPmctdhConfig = self._startingPath + '/' \
+ self._ProjectName + \
'/tmp/mctdh.config'

    self._TPMsyTreeFile = self._startingPath + '/' \
```

```
+ self._ProjectName + \
'/tmp/' + sysFile

SESpPath = self._startingPath + '/' \
+ self._ProjectName + '/' + \
self._SessionName

DotIn = self.Finder(SESpPath, '.in')

self._TMPinputFile = self._startingPath + '/' \
+ self._ProjectName + \
'/tmp/' + DotIn

try:
    shutil.copy2(self._SESmctdhConfig, self._TMPmctdhConfig)
    shutil.copy2(self._SESSysTreeFile, self._TPsysTreeFile)
    shutil.copy2(self._SESinputFile, self._TMPinputFile)
except Exception:
    raise

def fromTMPToSES(self):
    TMPpath = self._startingPath + '/' \
+ self._ProjectName + '/' + \
'tmp'

    sysFile = self.Finder(TMPpath, 'txt')
    DotIn = self.Finder(TMPpath, '.in')

    self._TMPmctdhConfig = self._startingPath + '/' \
+ self._ProjectName + \
'/tmp/mctdh.config'

    self._TPsysTreeFile = self._startingPath + '/' \
+ self._ProjectName + \
```

```
'/tmp/' + sysFile

self._TMPinputFile = self._startingPath + '/' \
+ self._ProjectName +\
'/tmp/' + DotIn

try:
    shutil.copy2(self._TMPmctdhConfig, self._SESmctdhConfig)
    shutil.copy2(self._TPsysTreeFile, self._SESSysTreeFile)
    shutil.copy2(self._TMPinputFile, self._SESinputFile)
except Exception:
    raise

def esc(self):
    self.close()

def setSessionName(self, name):
    self._SessionName = name

def folderExist(self):
    folders = os.walk(self._startingPath+'/'+self._ProjectName).next()[1]
    if self._SessionName in folders:
        self.showdialog('Folder already exists!')
        return False
    return True

def change0(self):
    self._SessionName = str(self.uiProjectName.text())

def change1(self):
    self._integrator[0] = str(self.uiStartTime.text())
def change2(self):
    self._integrator[1] = str(self.uiEndTime.text())
```

```
def change3(self):
    self._integrator[2] = str(self.uiInit.text())
def change4(self):
    self._integrator[3] = str(self.uiIter.text())

def setJob1(self):
    self._job = "integrate"
def setJob2(self):
    self._job = "integrate"
def setJob3(self):
    self._job = "eigenstates"
def setJob4(self):
    self._job = "thermalflux"

def unsetPES(self):
    self.modelPES.removeRows(0, len(self._dictPES), QtCore.QModelIndex())

def setPES(self):
    #####ListModelPES#####
    self.modelPES = QtGui.QStandardItemModel(self.listPES)
    for key in self._dictPES:
        item = QtGui.QStandardItem(key)
        self.modelPES.appendRow(item)
    self.listPES.setModel(self.modelPES)
    self.listPES.setEditTriggers(QtGui.QAbstractItemView.NoEditTriggers)
    self.listPES.clicked.connect(self.on_item_select2)

def makedir(self):
    path = self._startingPath + '/' + self._ProjectName + '/tmp'
    try:
        os.makedirs(path)
    except (IOError, OSError) as e:
        pass
```

```
def start(self):
    self.clearTree()
    name = str(self.uiProjectName.text())
    self._SessionName = name
    ##### if SES contains files, these files will be copied to TMP
    try:
        filenames = os.walk(self._startingPath+'/'+self._ProjectName+'/'
                            +self._SessionName).next()[2]
        for val in filenames:
            if 'txt' in val:
                sysTreeFile = val

        self._SESmctdhConfig = self._startingPath + '/' +
        self._ProjectName + '/' + self._SessionName + '/' +
        'mctdh.config'
        self._SESSysTreeFile = self._startingPath + '/' +
        self._ProjectName + '/' + self._SessionName + '/' +
        sysTreeFile
        self._SESinputFile = self._startingPath + '/' +
        self._ProjectName + '/' + self._SessionName + '/'
        + 'InPut.in'

        #####copies files from SES to TMP
        self.fromSESToTMP(sysTreeFile)

        #####Parameters from InPut.in in TMP will be loaded#####
        self.genereInput(self._TMPinputFile)

        #####Tree will be constructed from parameters#####
        self.TreeOnly()

    except (StopIteration, UnboundLocalError):
        self.removeContent()
        self.clearTree()
```

```
def clearTree(self):
    try:
        self.scene.clear()
        self.uiDisplayTree.setScene(self.scene)
        self.modelTree.removeRow(0)
    except (IndexError, AttributeError) as e:
        pass

def Finder(self, path, app):
    fileList = os.walk(path).next()[2]
    return [f_ for f_ in fileList if app in f_][0]

def TreeOnly(self):
    #####TreeView#####
    TMPpath = self._startingPath+'/'+self._ProjectName+'/tmp'
    self._TMPmctdhConfig = TMPpath+'/mctdh.config'
    textField = self.Finder(TMPpath, 'txt')
    self._TMPsysTreeFile = TMPpath+'/'+textField
    self._tree = Tree(self._TMPmctdhConfig, self._TMPsysTreeFile)
    self.modelTree = SceneGraphModel(self._tree._rootNode0)
    self.uiTree.setModel(self.modelTree)
    self.uiTree.expandAll()
    self.uiTree.resizeColumnToContents(0)
    self.uiTree.resizeColumnToContents(1)
    self.uiTree.clicked.connect(self.changeNode)
    #####make Pic from tmp#####
    self.PicGenerate()

def generateTree(self, item):
    key = item
    self.getInput(key)
```

```
self._hamiltonian = self._dictHamil[str(key)]  
  
#####generates Tree###  
self.TreeOnly()  
  
  
def on_item_select1(self, item):  
  
    key = str(item.data().toString())  
  
    #####Copy from default Hamilton to tmp  
    self.fromHToTMP(key)  
  
    #####Generate input from *.in to self._paradict####  
    self.genereInput(self._TMPP inputFile)  
  
    #####Building Tree###  
    self.generateTree(key)  
  
def on_item_select2(self, item):  
    key = item.data().toString()  
    self._potential = self._dictPES[str(key)]  
  
def output(self):  
    """Class OutPut takes all parameters and saves them in File by creating  
    the object of this class"""  
    self.makeParaDict()  
    outobj = OutPut(self._tree, self._paradict, self._TMPSysTreeFile,  
                    self._TMPP inputFile)  
    outobj.savefile()  
    outobj.savefile2()  
  
def runJob(self):
```

```
self.escape()
self.process = QtCore.QProcess()
self.process.setProcessChannelMode(QtCore.QProcess.MergedChannels)
self.process.readyReadStandardOutput.connect(self.mctdhOut)
inputFile = self._startingPath+'/'+self._ProjectName+'/'
+ self._SessionName
DotIn = self.Finder(inputFile, 'in')
inputFile = inputFile+'/'+DotIn
self.results(inputFile)

def results(self, inputFile):

    os.chdir(self._startingPath+'../../Results')
    self.genereInput(inputFile)
    try:
        os.mkdir(self._mainfolder)
    except OSError:
        pass
    mctdh = '/home/piet/newRepo2/QuantumDynamics/build/bin/mctdh'
    self.process.start(mctdh+' '+inputFile)
    os.chdir(self._startingPath)

def mctdhOut(self):
    output = str(self.process.readAllStandardOutput())
    print output
```

Literaturverzeichnis

- [1] H.-D. Meyer, U. Manthe, and L. S. Cederbaum, Chem. Phys. Lett. **165**, 73 (1990).
- [2] U. Manthe, H.-D. Meyer, and L. S. Cederbaum, J. Chem. Phys. **97**, 3199 (1992).
- [3] H. Wang and M. Thoss, J. Chem. Phys. **119**, 1289 (2003).
- [4] U. Manthe, The Journal of Chemical Physics **128**, 164116 (2008).
- [5] G. A. Worth, H. D. Meyer, H. Koeppel, L. S. Cederbaum, and I. Burghardt, Int. Rev. Phys. Chem. **27**, 569 (2008).
- [6] T. Westermann, J. B. Kim, M. L. Weichman, C. Hock, T. I. Yacovitch, J. Palma, D. M. Neumark, and U. Manthe, Angew. Chem. Int. Ed. **53**, 1122 (2014).
- [7] E. Y. Wilner, H. Wang, M. Thoss, and E. Rabani, Phys. Rev. B **89**, 205129 (2014).
- [8] H. Wang, J. Phys. Chem. A **118**, 9253 (2014).
- [9] K. Balzer, Z. Li, O. Vendrell, and M. Eckstein, Phys. Rev. B **91**, 045136 (2015).
- [10] M. Schroeter and O. Kuehn, J. Phys. Chem. A **117**, 7580 (2013).
- [11] M. Saab, M. Sala, B. Lasorne, F. Gatti, and S. Guerin, J. Chem. Phys. **141**, 134114 (2014).
- [12] S. Lopez-Lopez, R. Martinazzo, and M. Nest, J. Chem. Phys. **134**, 094102 (2011).
- [13] F. Bouakline, F. Lueder, R. Martinazzo, and P. Saalfrank, J. Phys. Chem. A **116**, 11118 (2012).
- [14] L. Uranga-Pina, C. Meier, and J. Rubayo-Soneira, Chem. Phys. Lett. **543**, 12 (2012).

Literaturverzeichnis

- [15] M. Moix Teixidor and F. Huarte-Larranaga, Chem. Phys. **399**, 264 (2012).
- [16] J. Wahl, R. Binder, and I. Burghardt, Comp. Theo. Chem. **1040**, 167 (2014).
- [17] J. M. Schurer, P. Schmelcher, and A. Negretti, Phys. Rev. A **90**, 033601 (2014).
- [18] V. S. Reddy, C. Camacho, J. Xia, R. Jasti, and S. Irle, J. Chem. Theo. Comp. **10**, 4025 (2014).
- [19] W. Eisfeld, O. Vieuxmaire, and A. Viel, J. Chem. Phys. **140**, 224109 (2014).
- [20] A. Valdes and R. Prosmiti, J. Phys. Chem. A **117**, 9518 (2013).
- [21] T. Mondal, S. R. Reddy, and S. Mahapatra, J. Chem. Phys. **137**, 054311 (2012).
- [22] D. Skouteris and A. Lagana, Chem. Phys. Lett. **575**, 18 (2013).
- [23] B. Zhao, D.-H. Zhang, S.-Y. Lee, and Z. Sun, J. Chem. Phys. **140**, 164108 (2014).
- [24] M. D. Coutinho-Neto, A. Viel, and U. Manthe, J. Chem. Phys. **121**, 9207 (2004).
- [25] T. Hammer, M. D. Coutinho-Neto, A. Viel, and U. Manthe, J. Chem. Phys. **131**, 224109 (2009).
- [26] T. Hammer and U. Manthe, J. Chem. Phys. **134**, 224305 (2011).
- [27] M. Schroeder, F. Gatti, and H.-D. Meyer, J. Chem. Phys. **134**, 234307 (2011).
- [28] T. Hammer and U. Manthe, J. Chem. Phys. **136**, 054105 (2012).
- [29] M. Schroeder and H.-D. Meyer, J. Chem. Phys. **141**, 034116 (2014).
- [30] O. Vendrell, F. Gatti, D. Lauvergnat, and H.-D. Meyer, Angew. Chemie Int. Ed. **46**, 6918 (2007).
- [31] O. Vendrell, F. Gatti, D. Lauvergnat, and H.-D. Meyer, J. Chem. Phys. **127**, 184302 (2007).
- [32] O. Vendrell, F. Gatti, and H.-D. Meyer, J. Chem. Phys. **127**, 184303 (2007).
- [33] O. Vendrell, M. Brill, F. Gatti, and H.-D. Meyer, J. Chem. Phys. **130**, 234305 (2009).

Literaturverzeichnis

- [34] O. Vendrell, F. Gatti, and H.-D. Meyer, *J. Chem. Phys.* **131**, 034308 (2009).
- [35] F. Huarte-Larrañaga and U. Manthe, *J. Chem. Phys.* **113**, 5115 (2000).
- [36] F. Huarte-Larrañaga and U. Manthe, *J. Phys. Chem. A* **105**, 2522 (2001).
- [37] T. Wu, H.-J. Werner, and U. Manthe, *Science* **306**, 2227 (2004).
- [38] G. Schiffel and U. Manthe, *J. Chem. Phys.* **132**, 084103 (2010).
- [39] R. van Harreveldt, G. Nyman, and U. Manthe, *J. Chem. Phys.* **126**, 084303 (2007).
- [40] G. Nyman, R. van Harreveldt, and U. Manthe, *J. Phys. Chem. A* **111**, 10331 (2007).
- [41] G. Schiffel and U. Manthe, *J. Chem. Phys.* **132**, 191101 (2010).
- [42] G. Schiffel and U. Manthe, *J. Chem. Phys.* **133**, 174124 (2010).
- [43] R. Welsch and U. Manthe, *J. Chem. Phys.* **141**, 051102 (2014).
- [44] R. Welsch and U. Manthe, *J. Chem. Phys.* **141**, 174313 (2014).
- [45] R. Welsch and U. Manthe, *J. Chem. Phys.* **142**, 064309 (2015).
- [46] R. Welsch and U. Manthe, *J. Phys. Chem. Lett.* **6**, 338 (2015).
- [47] G. A. Worth, H.-D. Meyer, and L. S. Cederbaum, *J. Chem. Phys.* **105**, 4412 (1996).
- [48] G. A. Worth, H.-D. Meyer, and L. S. Cederbaum, *J. Chem. Phys.* **109**, 3518 (1998).
- [49] A. Raab, G. A. Worth, H.-D. Meyer, and L. S. Cederbaum, *J. Chem. Phys.* **110**, 936 (1999).
- [50] H. Wang, D. E. Skinner, and M. Thoss, *J. Chem. Phys.* **125**, 174502 (2006).
- [51] I. Kondov, M. Cizek, C. Benesch, M. Thoss, and H. Wang, *J. Phys. Chem. C* **111**, 11970 (2007).
- [52] I. R. Craig, M. Thoss, and H. Wang, *J. Chem. Phys.* **135**, 064504 (2011).
- [53] H. Wang, I. Pshenichnyuk, R. Härtle, and M. Thoss, *J. Chem. Phys.* **135**, 244506 (2011).

- [54] T. Westermann, R. Brodbeck, A. B. Rozhenko, W. W. Schoeller, and U. Manthe, J. Chem. Phys. **135**, 184102 (2011).
- [55] M. H. Beck, A. Jäckle, G. A. Worth, and H.-D. Meyer, Physics Reports **324**, 1 (2000).
- [56] H.-D. Meyer and G. A. Worth, Theor. Chem. Acc. **109**, 251 (2003).
- [57] F. Huarte-Larrañaga and U. Manthe, Z. Phys. Chem. **221**, 171 (2007).
- [58] H.-D. Meyer, F. Gatti, and G. A. Worth, *Multidimensional Quantum Dynamics: MCTDH Theory and Applications* (Weinheim: Wiley-VCH, 2009).
- [59] U. Manthe, Mol. Phys. **109**, 1415 (2011).
- [60] H.-D. Meyer, Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Molecular Science **2**, 351 (2012).
- [61] G. A. Worth, M. H. Beck, A. Jäckle, and H.-D. Meyer, *The mctdh package, version 8.4* (2007), siehe <http://mctdh.uni-hd.de>.
- [62] *An open source machine learning framework for everyone* (2018), URL <https://www.tensorflow.org/>.
- [63] *Scientific computing tools for python* (2018), URL <https://scipy.org/about.html>.
- [64] F. Huarte-Larrañaga and U. Manthe, J. Chem. Phys. **116**, 2863 (2002).
- [65] T. Wu, H.-J. Werner, and U. Manthe, J. Chem. Phys. **124**, 164307 (2006).
- [66] F. Huarte-Larrañaga and U. Manthe, J. Chem. Phys. **117**, 4635 (2002).
- [67] J. M. Bowman, D. Wang, X. Huang, F. Huarte-Larrañaga, and U. Manthe, J. Chem. Phys. **114**, 9683 (2001).
- [68] C. Cattarius, G. A. Worth, H.-D. Meyer, and L. S. Cederbaum, J. Chem. Phys. **115**, 2088 (2001).
- [69] H. Wang, J. Chem. Phys. **113**, 9948 (2000).

- [70] H. Wang, M. Thoss, and W. Miller, J. Chem. Phys. **115**, 2979 (2001).
- [71] M. Nest and H.-D. Meyer, J. Chem. Phys. **119**, 24 (2003).
- [72] U. Manthe, J. Chem. Phys. **105**, 6989 (1996).
- [73] R. van Harreveld und U. Manthe, J. Chem. Phys. **121**, 5623 (2004).
- [74] S. Behnel, R. Bradshaw, C. Citro, L. Dalcin, D. S. Seljebotn, and K. Smith, Comput. Sci. Eng. **13**, 31 (2011).
- [75] *Qt 4.8* (2016), URL <http://doc.qt.io/archives/qt-4.8/>.
- [76] M. Summerfield, *Rapid GUI Programming with Python and Qt* (Prentice Hall, 2008).
- [77] *Qt designer manual* (2016), URL <http://doc.qt.io/archives/qt-4.8/designer-manual.html>.
- [78] A. A. Hagberg, D. A. Schult, and P. J. Swart, in *Proceedings of the 7th Python in Science Conference*, edited by G. Varoquaux, T. Vaught, and J. Millman (Pasadena, CA USA, 2008), pp. 11 – 15.
- [79] J. D. Hunter, Computing In Science & Engineering **9**, 90 (2007).
- [80] T. J. Park and J. C. Light, J. Chem. Phys. **88**, 4897 (1988).