

ПРОЕКТ 823

«ИССЛЕДОВАНИЕ
КОЭФФИЦИЕНТОВ
ПЕРЕНОСА ЖИДКОСТЕЙ
В МОЛЕКУЛЯРНЫХ
МОДЕЛЯХ OPLS И SAFT»

ПИСАРЕВ ВАСИЛИЙ
ВЯЧЕСЛАВОВИЧ
(РУКОВОДИТЕЛЬ)

СОКОЛОВ ВЛАДИСЛАВ
МАКСИМОВИЧ
(ИССЛЕДОВАТЕЛЬ)

БПМ202

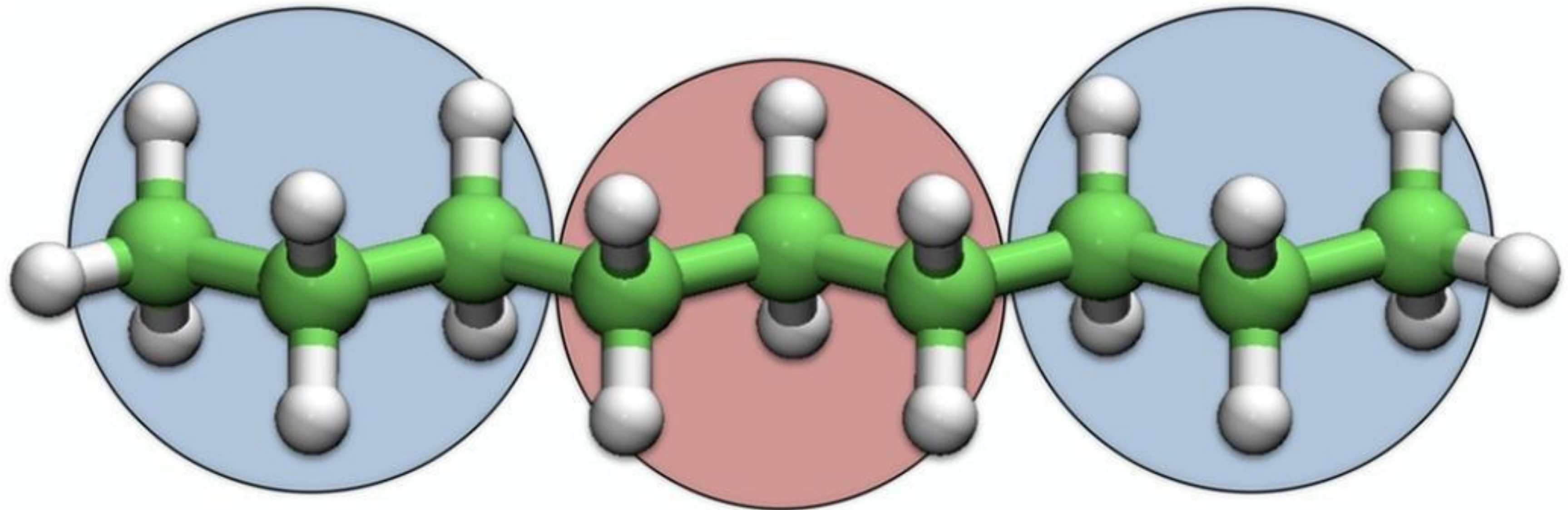
Описание

Проект представляет собой исследование и анализ 2-х молекулярных систем, сопоставление результатов и расчет коэффициентов переноса жидкостей

Мотивация

Проект интересен тем, что позволяет работать с английской литературой, получить опыт работы с вычислительным кластером суперкомпьютера ВШЭ и решать реальные задачи в области молекулярного моделирования





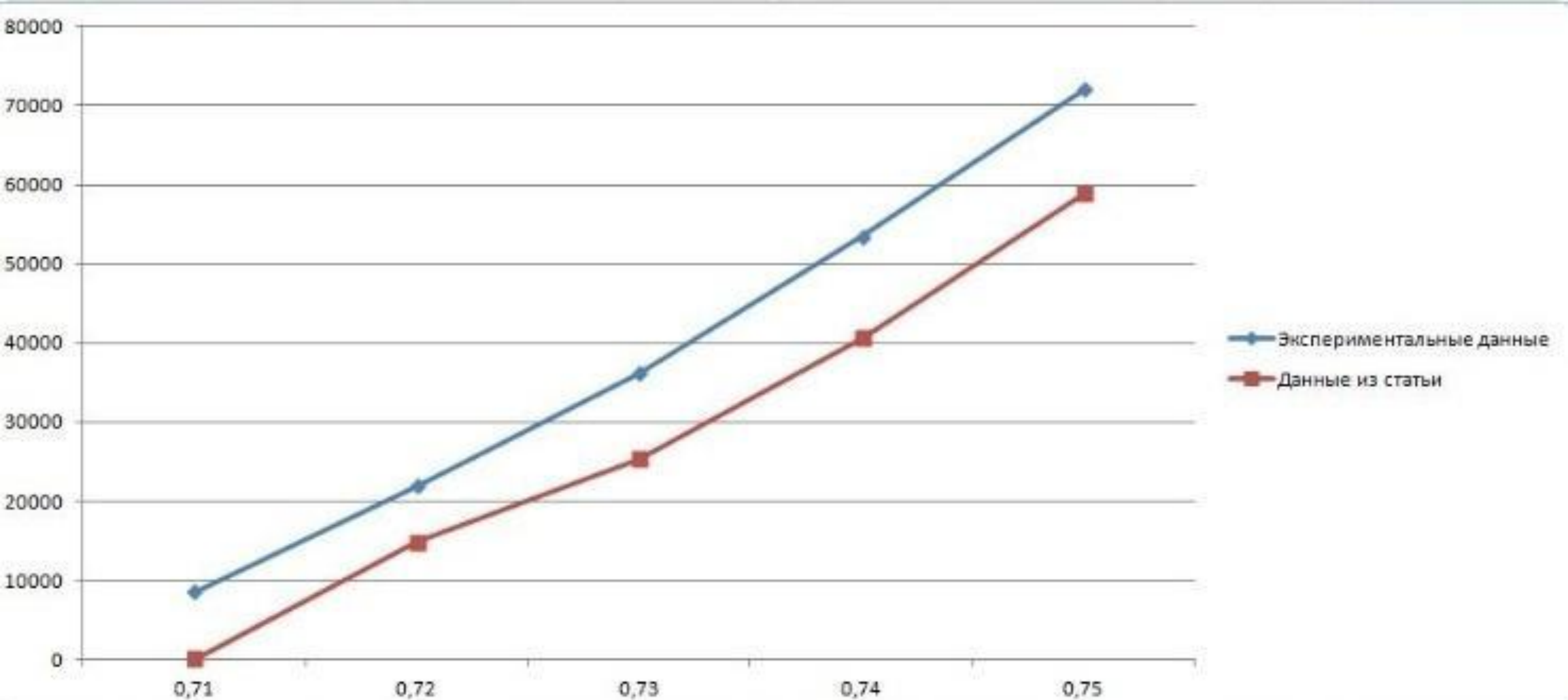
Крупнозернистое SAFT представление модели n-нонана. Три атома углерода основной цепи соответствуют одному шару крупнозернистой цепи (соотношение 3:1). Синий шар соответствует (CH₃-CH₂-CH₂-) и красный шар – (-CH₂-CH₂-CH₂-). В свою очередь зелёным и серым цветом обозначено OPLS представление модели n-нонана.

Цели

- Вычисление коэффициентов переноса органических жидкостей методом молекулярного моделирования
- Анализ двух семейств молекулярных моделей по соотношению точности и вычислительных затрат
- Установление наличия или отсутствия универсальных масштабирующих соотношений для выбранных молекулярных моделей

Выполненные задачи

- Ознакомление с базовой литературой
- Ознакомление с основными командами Linux и Slurm
- Еженедельные встречи для обсуждения промежуточных результатов
- Тест LAMMPS на n-нонане
- Презентация и видеоролик для представления проекта



Сравнение результатов, полученных при расчете на суперкомпьютере, с результатами из статьи. По вертикальной оси - давление в Па, по горизонтальной оси - плотность в г/мл



ОЖИДАЕМЫЙ РЕЗУЛЬТАТ

- Коэффициенты переноса органических жидкостей в моделях SAFT и OPLS-AA
- Сопоставление результатов с экспериментальными данными.



ЭТАПЫ РЕАЛИЗАЦИИ

- Знакомство с литературой
- Пробное задание
- Итоговое задание



ПРИОБРЕТАЕМЫЕ НАВЫКИ

- Навыки работы в Linux
- Знание английских терминов для описания физической системы
- Навыки работы с задачами в суперкомпьютере ВШЭ

Спасибо за внимание!