

ПРОЕКТ 823

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

ПИСАРЕВ ВАСИЛИЙ  
ВЯЧЕСЛАВОВИЧ  
(РУКОВОДИТЕЛЬ)

СОКОЛОВ ВЛАДИСЛАВ  
МАКСИМОВИЧ  
(ИССЛЕДОВАТЕЛЬ)

БПМ202


# Описание

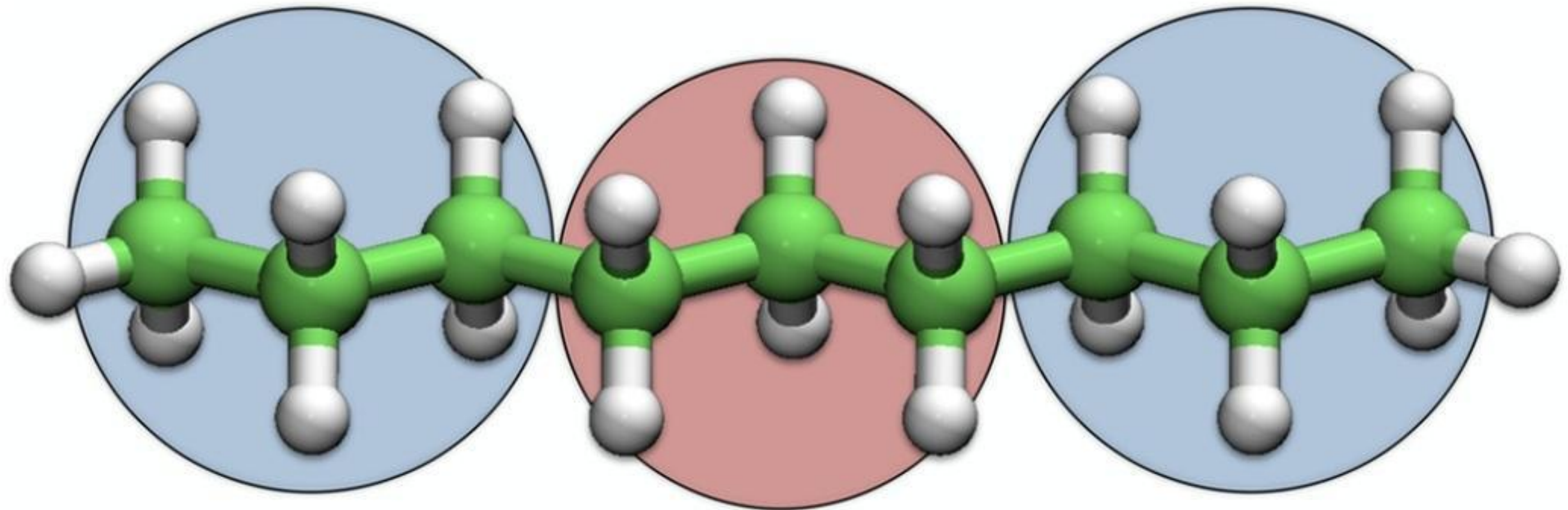
Проект представляет собой исследование и анализ 2-х молекулярных систем, сопоставление результатов и расчет коэффициентов переноса жидкостей

---

# 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





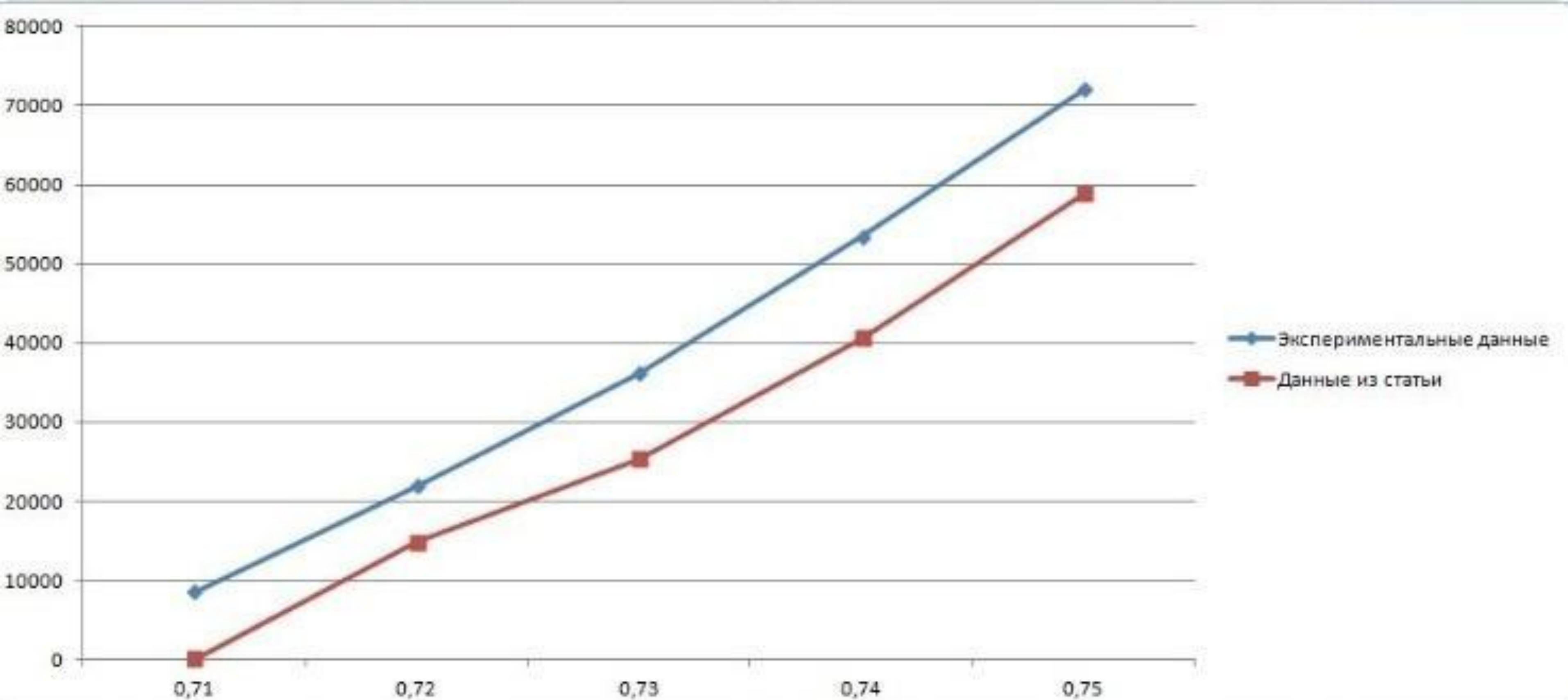
Крупнозернистое SAFT представление модели n-нонана. Три атома углерода основной цепи соответствуют одному шару крупнозернистой цепи (соотношение 3:1). Синий шар соответствует (CH<sub>3</sub>-CH<sub>2</sub>-CH<sub>2</sub>-) и красный шар – (-CH<sub>2</sub>-CH<sub>2</sub>-CH<sub>2</sub>-). В свою очередь 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-нонane
- 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



## ПРИБРЕТАЕМЫЕ НАВЫКИ

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

Спасибо за внимание!