

ПРОЕКТ 823

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

ПИСАРЕВ ВАСИЛИЙ
ВЯЧЕСЛАВОВИЧ
(РУКОВОДИТЕЛЬ)

СОКОЛОВ ВЛАДИСЛАВ
МАКСИМОВИЧ
(ИССЛЕДОВАТЕЛЬ)

БПМ202

Описание

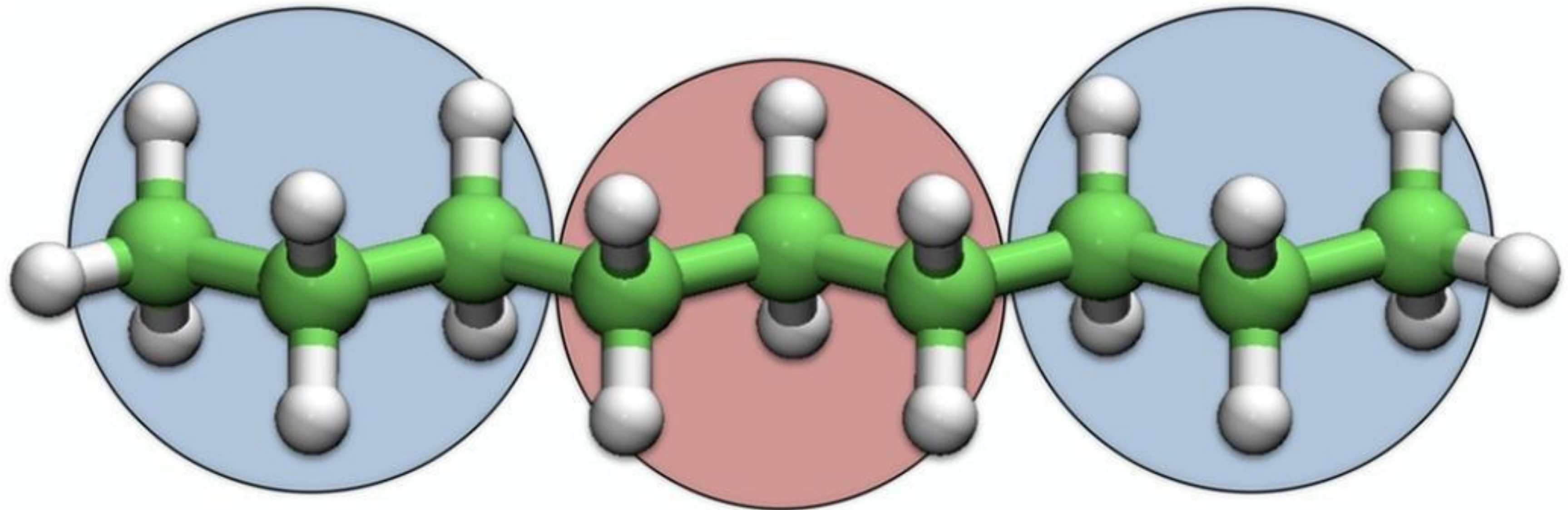
Проект представляет собой исследование и анализ 2-х молекулярных систем, расчет коэффициентов переноса жидкостей и сопоставление результатов

Личная мотивация

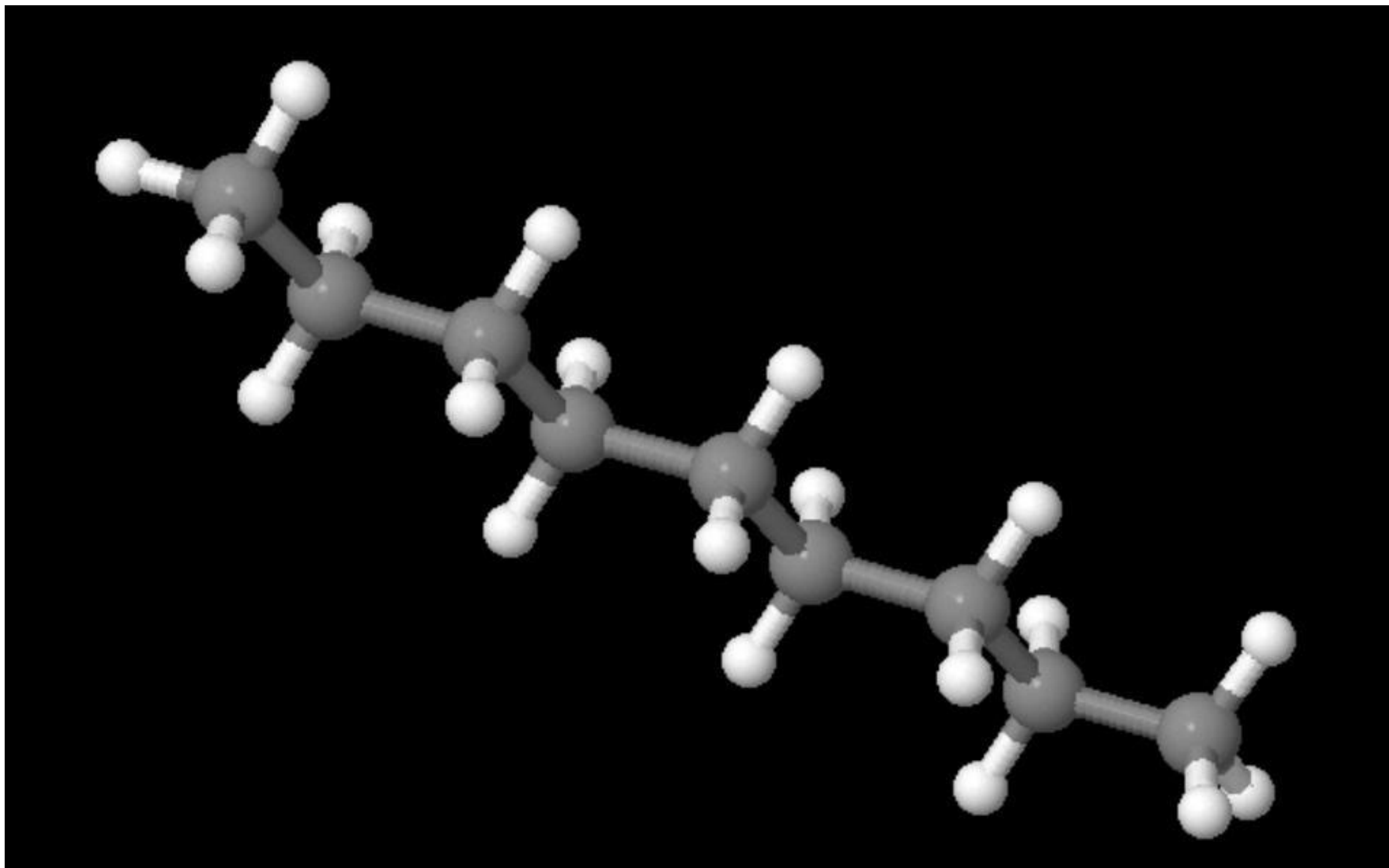
Проект интересен тем, что позволяет работать с английской литературой, получить опыт работы с вычислительным кластером суперкомпьютера ВШЭ и решать реальные задачи в области молекулярного моделирования

Актуальность

Результаты проекта могут быть применимы для хим. промышленности, для производства горюче-смазочных материалов, для добычи полезных ископаемых, поскольку всегда важно балансирование точности расчётов и затрат на молекулярное моделирование.



Крупнозернистое SAFT представление модели n-нонана. Три атома углерода основной цепи соответствуют одному шару крупнозернистой цепи (соотношение 3:1). Синий шар соответствует $(\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-})$ и красный шар – $(\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-})$. В свою очередь зелёным и серым цветом обозначено OPLS представление модели n-нонана.



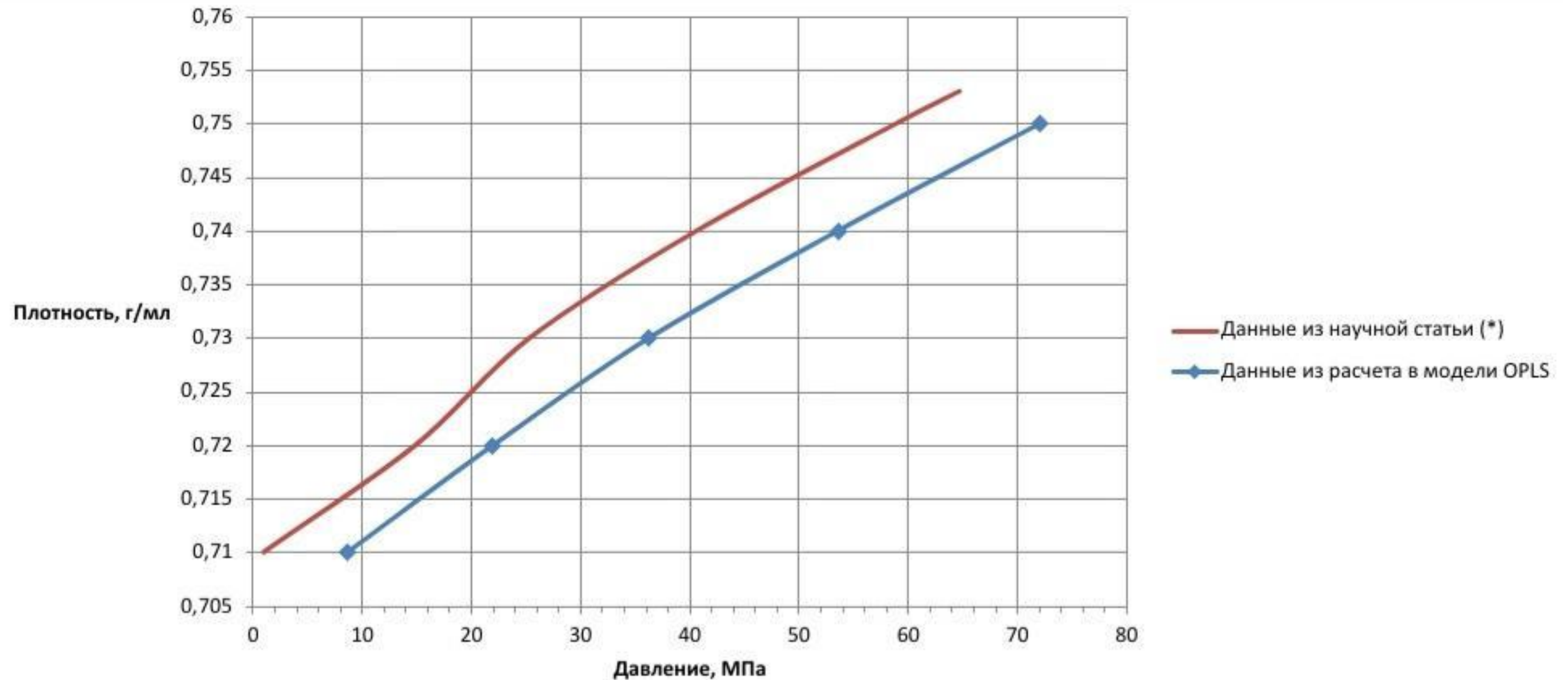
○ OPLS модель n-нонана с сайта <http://zarbi.chem.yale.edu/ligpargen/>

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 научной статьи (*). По вертикальной оси - давление в МПа, по горизонтальной оси - плотность в г/мл. Температура - 303.15К.

(*) - <https://link.springer.com/content/pdf/10.1007/BF00502407.pdf>

ОЖИДАЕМЫЙ РЕЗУЛЬТАТ

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

ЭТАПЫ РЕАЛИЗАЦИИ

- Знакомство с литературой
- Верификация модели OPLS по зависимости плотность-давление.
Расчёт вязкости в модели OPLS
- Верификация модели SAFT по зависимости плотность-давление.
Расчёт вязкости в модели SAFT
- Сопоставление моделей между собой

ПРИБРЕТАЕМЫЕ НАВЫКИ

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

Спасибо за внимание!