

**Белорусский государственный университет**

**Химический факультет**

**Кафедра физической химии**

**Аннотация к дипломной работе**

**«Особенности применения метода Монте-Карло с матрицей переходов**

**для расчета равновесия “жидкость - пар”»**

**Шахно Дмитрий Викторович**

**Научный руководитель: доктор химических наук, профессор**

**Г.Я. Кабо**

**Минск, 2014**

## АННОТАЦИЯ

Работа 53 с., 30 рис., 6 табл., 28 источников.

МЕТОД МОНТЕ-КАРЛО, РАВНОВЕСИЕ “ЖИДКОСТЬ-ПАР”, ТММС, МОЛЕКУЛЯРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ.

Целью данной работы является изучение возможностей метода Монте-Карло с матрицей перехода (transition matrix Monte-Carlo, ТММС) для расчета равновесия «жидкость-пар». Выполнены расчеты методом ТММС с различными входными параметрами и осуществлена обработка результатов этих расчетов. Выполнена адаптация программы Towhee для процедуры reweighting по температуре и определен температурный интервал применимости данной процедуры. Предложены модификации метода ТММС, включающие

- проведение дополнительного расчета в большом ящике, который содержит только газовую фазу, что позволяет снизить погрешность метода ТММС;
- разбиение одного расчета методом ТММС на несколько независимых подзадач, которое позволяет снизить реальное время расчета за счет использования нескольких процессорных ядер;
- метод предельного разбиения, который позволяет проводить расчеты для систем при более низких температурах.

## ABSTRACT

53 pages, 30 pictures, 6 tables, 28 references.

Monte Carlo method, vapor-liquid equilibria, transition-matrix Monte Carlo, molecular simulation

The aim of this work is to study possibilities of the transition matrix Monte-Carlo method (ТММС) for calculating liquid-vapor equilibria. ТММС simulations were performed with various input parameters and the obtained results were analyzed. The temperature reweighting procedure was implemented in the Towhee software and the temperature ranges of applicability of this procedure were determined. A number of modifications of ТММС were proposed:

- An additional calculation in the "large" box, which contains only the gas phase. This modification reduces the error of the ТММС method.
- Splitting a ТММС simulation into several independent subtasks. This partition reduces the required computational time by the use of multiple processor cores.
- A method of limiting partition, which allows one to carry out simulation for systems at low temperatures.