

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ  
ФЕДЕРАЦИИ  
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО  
ОБРАЗОВАНИЯ  
«КАЗАНСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЙ  
УНИВЕРСИТЕТ»

УДК: 544.272:66.011

№ Госрегистрации АААА-А18-118032690262-8

Инв. №

УТВЕРЖДАЮ  
Проректор по научной работе  
\_\_\_\_\_ Сабирзянов А.Н.  
« \_\_\_\_ » \_\_\_\_\_ г.

Отчет о научно – исследовательской работе  
по теме: Молекулярно – статистическое моделирование процесса  
ректификации  
(промежуточный)

Руководитель темы: \_\_\_\_\_ Анашкин И.П.

Казань 2019

## Список исполнителей:

Руководитель проекта

\_\_\_\_\_ Анашкин И.П.

Исполнители:

\_\_\_\_\_ Казанцев С.В.

# Реферат

страниц – 16

рисунков – 2

таблиц – 2

приложений – 1

Ключевые слова: ректификация, метод Монте-Карло, межмолекулярное взаимодействие

# Содержание

<b>Введение</b>	<b>5</b>
<b>1 Молекулярно-статистический метод расчета процесса ректификации</b>	<b>5</b>
1.1 Молекулярно-статистические методы и программные пакеты . . . . .	5
1.2 Многопоточное вычисление и программно-аппаратная технология CUDA . .	6
1.3 Ансамбль Гиббса . . . . .	6
1.4 Алгоритм расчета ректификации . . . . .	7
<b>2 Программная реализация</b>	<b>10</b>
2.1 Ввод исходных данных . . . . .	10
2.2 Расчет свойств входящих потоков . . . . .	12
2.2.1 Генерирование стартовой ячейки . . . . .	12
2.3 Сравнение результатов расчетов с литературными данными . . . . .	13
2.4 Сравнение производительности . . . . .	13
<b>А Приложение</b>	<b>14</b>
<b>Литература</b>	<b>15</b>

## Введение

Ректификация — один из наиболее распространенных процессов разделения смесей, применяемых в химической промышленности. Для расчета процесса ректификации разработано множество подходов, в основе которых лежит использование данных о фазовом равновесии компонентов разделяемой смеси. Поэтому, расчетную схему ректификационной колонны необходимо дополнить моделями для описания давления насыщенных паров чистых компонентов и коэффициентов активности в смеси. Однако экспериментальные данные доступны не для всех комбинаций веществ, или доступны в ограниченной области состояний. Решением может выступать использование методов групповых составляющих [1, 2, 3], однако данные методы не гарантируют хорошего согласования с экспериментальными данными.

В данной работе предлагается использование молекулярно-статистических методов для моделирования процесса ректификации. В основе предлагаемого подхода лежит использование законов сохранения, метода теоретических тарелок и метода ансамбля Гиббса для вычисления фазового равновесия.

## 1 Молекулярно-статистический метод расчета процесса ректификации

### 1.1 Молекулярно-статистические методы и программные пакеты

В настоящее время молекулярно – статистические методы находят широкое применение в научных исследованиях в различных отраслях. Данные методы позволяют на молекулярном уровне исследовать свойства веществ, а также процессов, происходящих на молекулярном уровне. Для проведения моделирования разработано множество пакетов программ, отличающихся функциональностью и условиями предоставления программ [4]. Множество программных продуктов создано под коммерческой лицензией, например, Material Studio [5] , Materials Science Suite [6] и т. д. Данные программные продукты нацелены на широкое применение во многих областях, что зачастую плохо сказывается на производительности их вычислений. Однако в них есть свой интерфейс пользователя, что существенно снижает порог вхождения и простоту для конечного потребителя.

Если сравнивать два подхода молекулярного моделирования: метод молекулярной динамики и метод Монте – Карло, и их модификации — то наибольшее распространение получил метод молекулярной динамики. В первую очередь это связано с тем, что данный метод позволяет получить кинетические характеристики, такие как коэффициенты диффузии, вязкости и т. д. Также сравнивая алгоритмы расчета, метод молекулярной динамики позволяет более эффективно использовать параллельные расчеты на нескольких вычислительных ядрах. Данный факт также способствовал большему распространению вычислений с использованием метода молекулярной динамики. Среди программ с открытым исходным кодом можно выделить gromacs [7, 8, 9] и LAMMPS [10, 11] . Данные программы получили широкое распространение за счет открытого исходного кода и большого количества заинтересованных разработчиков, что привело к отличной вычислительной производительности, в том числе на специфическом оборудовании.

Метод Монте-Карло при моделировании классических (не квантовых систем) также обладает своими преимуществами. Например, проще реализовано вычисление химического потенциала системы, что позволяет проще производить вычисления фазового равновесия. Так, для вычисления фазового равновесия разработан ансамбль Гиббса [12, 13]. Среди программного обеспечения с открытым исходным кодом можно выделить towhee [14]. Данная программа изначально разрабатывалась для моделирования паро – жидкостного

равновесия и содержит множество наборов параметров для моделирования. Недостатком данного пакета является то, что во времена начала разработки данной программы не были распространены многопроцессорные компьютеры и многоядерные процессоры. Таким образом данный пакет не позволяет в полной мере использовать все достоинства многопоточного вычисления.

## 1.2 Многопоточное вычисление и программно-аппаратная технология CUDA

Использование молекулярно-статистических методов непосредственно связано с развитием вычислительных технологий еще с разработки первых ЭВМ [15]. Рассматривая развитие персональных компьютеров можно сказать, что увеличение вычислительных мощностей до середины 2000-х годов продолжалось в большей степени за счет наращивания частоты процессора. Однако накладываемые технологические ограничения не позволили превысить номинальную частоту в 4 ГГц для центрального процессора. В 2005 году на рынок выпускают процессор, содержащий два ядра. В дальнейшем происходит тенденция к наращиванию количества ядер в процессоре. Параллельно с этим развиваются программные средства, позволяющие использовать множество потоков для вычисления.

В 2008 году была представлена программно – аппаратная технология CUDA использующая для вычислений процессор видеокарты. Отличие от центрального процессора заключается в том, что видеокарта имеет множество специализированных процессоров, их количество в современных видеокартах достигает нескольких тысяч. Данная технология позволяет увеличить производительность для отдельных задач в несколько десятков и сотен раз. Позже появилась аналогичная технология OpenCL, не привязанная к оборудованию конкретного производителя.

В задачах молекулярной динамики использование видеокарт для расчета приводит к увеличению производительности в 10 раз по сравнению с использованием только центрального процессора. Данные технологии реализованы во многих программных продуктах [4].

## 1.3 Ансамбль Гиббса

Для того чтобы две фазы (обозначенные I и II) находились в равновесии необходимо выполнение следующих условий:

- термическое равновесие (равенство температур)  $T^I = T^{II}$ ;
- механическое равновесие (равенство давлений)  $p^I = p^{II}$ ;
- химическое равновесие (равенство химического потенциала каждого из компонентов)  $\mu_i^I = \mu_i^{II}$ .

Метод ансамбля Гиббса предусматривает моделирование двух ячеек с молекулами. В каждой из ячеек происходит три типа случайных изменений конфигурации:

- перемещение молекулы внутри каждой ячейки (перемещение, вращение, изменение внутренней геометрии молекулы);
- изменение объемов каждой из ячеек;
- перемещение молекул между ячейками.

После каждого изменения конфигурации рассчитывается вероятность принятия или отклонения данного изменения. После значительного количества перемещений между двумя ячейками устанавливается равновесие.

## 1.4 Алгоритм расчета ректификации

Согласно предлагаемому методу, ректификационная колонна делится на участки, аналогичные теоретическим тарелкам (теоретическим ступеням). Каждая из тарелок делится на две ячейки, которые соответствуют газовой и жидкой фазам. Суммарный объем газовой и жидкой фазы на каждой из тарелок остается постоянным. С точки зрения конструкции колонны данный указанный суммарный объем характеризует объем колонны между тарелками. При проектировании могут применяться колонны с переменным диаметром, что обеспечивает равномерность газовой фазы по высоте колонны. Таким образом, в алгоритме суммарный объем каждой из ячеек может быть задан любой, однако он не меняется во время моделирования.

На тарелке между газовой и жидкой фазами устанавливается фазовое равновесие, рассчитываемое методом ансамбля Гиббса (раздел 1.3). После достижения фазового равновесия жидкость уходит на нижнюю тарелку, пар поднимается на верхнюю. Молекулы переносят свою энергию (кинетическую и потенциальную) и исходя из этой энергии проводится пересчет температуры на новой тарелке. И расчетный цикл повторяется — заново рассчитывается фазовое равновесие.

Таким образом в колонне можно проследить за материальными (количество молекул каждого из веществ) и тепловыми потоками (энергия молекул). Также в колонне можно выделить внешние материальные и тепловые потоки: приток молекул с исходной смесью, и флегмой, уход молекул с дистиллятом и кубовым остатком.

Блок-схема алгоритма расчета представлена на рисунке 1. На первом этапе проводится чтение исходных данных для моделирования. Далее рассчитываются свойства входящих материальных потоков. При условии, что колонна работает в стационарном режиме, свойства входящих потоков не должны изменяться. И данную процедуру необходимо провести только один раз на начальном этапе. Однако можно предусмотреть динамическое изменение исходного состава. В этом случае вычисление входящих материальных потоков необходимо включить в расчетный цикл.

Далее рассчитываются внешние материальные потоки (красный блок): добавляется заданное количество молекул на тарелку питания, рассчитывается количество молекул во флегме, а также количество молекул, выводимых из куба.

Далее вычисляются условия фазового равновесия на каждой тарелке с использованием ансамбля Гиббса (синий блок).

После установления фазового равновесия на всех тарелках происходит обмен молекулами между тарелками. Жидкая фаза переходит на нижнюю тарелку, газовая фаза переходит на верхнюю тарелку (фиолетовый блок).

На каждую из тарелок можно вводить дополнительные энергетические потоки: подогрев куба колонны, введение дополнительных змеевиков охлаждения и т.д. (зеленый блок)

После перемещения молекул на каждой из тарелок вычисляется температура по внутренней энергии газовой и жидкой фаз (черный блок). Суммарная энергия молекул на тарелке высчитывается как кинетическая и потенциальная энергия молекул газовой и жидкой фаз. Кинетическая энергия может быть вычислена из температуры на тарелке, потенциальная — как сумма межмолекулярного и внутримолекулярного (потенциал валентных и торсионных углов и т.д.) взаимодействия. Новая температура на тарелке может быть вычислена из энергии молекул на тарелке с использованием ансамбля с постоянным количеством молекул, объемом и энергией  $NVE$  [16].

Альтернативный алгоритм определения температуры основан на одновременном изменении температуры во время вычисления фазового равновесия. В данном случае блок добавления энергии будет выполнен раньше, чем расчет условий фазового равновесия. Во время вычисления фазового равновесия температура на тарелке будет динамически



Рис. 1: Блок-схема алгоритма расчета



изменяться таким образом, чтобы энергия системы была равна сумме энергий поступающих на тарелку молекул с газовой и жидкой фазой и энергетических потоков. Выбор конкретной из описанных выше реализаций алгоритма определения температуры будет осуществляться на этапе программирования.

Далее алгоритм циклически повторяется до достижения условия стационарности, или любого другого заданного условия. Например при периодической ректификации может быть задано количество оставшейся жидкости в кубе, при этом будет исследован неравновесный процесс.

На рисунке 2 представлено схематическое распределение потоков в ректификационной колонне. Цвет стрелок и текста соответствует различным этапам алгоритма, представленного на рисунке 1

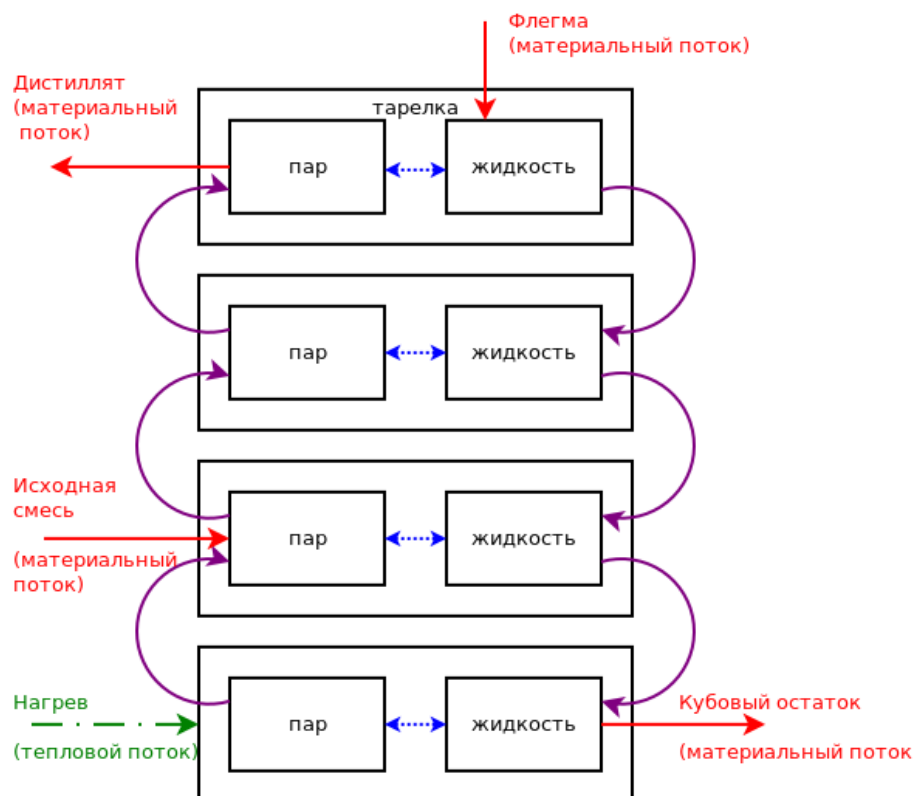


Рис. 2: Схематическое изображение ректификационной колонны (цвет соответствует различным этапам, представленным на рисунке 1)

Усреднение свойств смеси на тарелках и выходных потоках (концентрации, температуры, давления и т.д.) проводится после установления стационарности. Достижение стационарности можно отследить по неизменности составов и количества молекул на каждой тарелке.

Достоинства предлагаемого алгоритма расчета:

- не нужно заранее знать фазовое равновесие разделяемых компонентов;
- расчет ведется с учетом непостоянства мольных потоков по колонне;
- возможность исследования как непрерывной так и периодической ректификации;
- преимущества при расчете многокомпонентной ректификации (при недостатке экспериментальных данных), т.к. фазовое равновесие рассчитывается на каждой тарелке при своих условиях.

Недостатками является то, что данный метод не учитывает эффективность тарельчатых устройств реальных аппаратов, обусловленной гидродинамической обстановкой. Данную проблему можно решить в будущем.

## 2 Программная реализация

Исходный код программы доступен в репозитории открытых проектов github по ссылке [17]. Текущая ветка разработки initialsim. В качестве системы сборки приложения используется Cmake. Для увеличения производительности программы разработка велась на языке CUDA. Библиотеки для осуществления многопоточных расчетов на центральном процессоре не осуществлялись в связи с тем, что на центральном процессоре осуществляется лишь небольшая часть вычислений, связанная с подготовкой исходных данных.

### 2.1 Ввод исходных данных

Для проведения моделирования необходимо задать исходные данные, что является первым этапом на схеме 1. Исходные данные были разделены на три типа:

- исходные параметры моделирования (количество материальных потоков, составы и т.д.) хранятся в файле «data.mcr»;
- положение атомов в каждом из типов молекул хранятся в файлах «name.gro» (название файла должно соответствовать данным введенным в файл «data.mcr»);
- топология молекул (параметры внутри и межмолекулярного взаимодействия) хранятся в файле «data.top».

Файл «data.mcr» содержит последовательно представленные данные:

- количество веществ
- названия файлов с координатами атомов
- количество входящих в колонну материальных потоков
- ансамбль для расчета входящих потоков
- температура входящих потоков [K]
- плотность входящих потоков [моль/л]
- количество молекул добавляемых на тарелку в каждый цикл
- мольные доли каждого из компонентов

В дальнейшем будет реализован форматированный ввод данных после того как будут известны все параметры моделирования.

В разрабатываемой программе реализована совместимость с форматом файлов пакета gromacs (файлы разрешения «gro» и «top»). Файлы с координатами атомов имеют вид:

MD of 2 waters , t= 0.0

3

1WATER	OW1	1	0.126	1.624	1.679	0.1227	-0.0580	0.0434
1WATER	HW2	2	0.190	1.661	1.747	0.8085	0.3191	-0.7791
1WATER	HW3	3	0.177	1.568	1.613	-0.9045	-2.6469	1.3180
1.82060	1.82060	1.82060						

Первая строка является комментарием, во второй указано количество атомов в молекуле (или во всей системе). Далее идет информация по каждому атому: номер молекулы, название молекулы, номер атома,  $x$ ,  $y$ ,  $z$  координаты,  $v_x$ ,  $v_y$ ,  $v_z$  компоненты скорости. В последней строчке указаны размеры ячейки (эта строчка в данной программе не используется).

Файл топологии имеет вид:

```
[ defaults ]
1      2 no      1.00000    1.00000
[ atomtypes ]
Si      28.0000    0.9000 A    0.38264    1.25700
C2      14.0000   -0.2250 A    0.39500    0.38244
O       16.0000   -0.4500 A    0.31181    0.62850
CE1     15.0110    0.0000 A    0.36072    0.99898
CE2     14.0110    0.2526 A    0.34612    0.71746
OE1     15.9994   -0.6971 A    0.31496    0.70717
HE1      1.0080    0.4415 A    0.01000    0.00000
[ bondtypes ]
CE1     CE2      1          0.19842    500000.00000
CE2     OE1      1          0.17158    500000.00000
OE1     HE1      1          0.09505    500000.00000
OW      HW       1          0.09572    500000.00000
OW      MW       1          0.01546    500000.00000
[ angletypes ]
CE1     CE2     OE1      1   90.95000  500.00000
CE2     OE1     HE1      1  106.36800  500.00000
HW      OW      HW       1  104.52000  500.00000
MW      OW      HW       1   52.26000  500.00000
[ dihedraltypes ]
CE1     CE2     OE1      HE1      5   5.00000    0.00000    0.00000    0.00000

[ moleculetype ]
ETH  3
[ atoms ]
1  CE1      1 ETH CE1      1   0.00000   15.01100
2  CE2      1 ETH CE2      1   0.25560   14.01100
3  OE1      1 ETH OE1      1  -0.69711   15.99940
4  HE1      1 ETH HE1      1   0.44151    1.00800
[ bonds ]
1      2      1
2      3      1
3      4      1
[ pairs ]
[ angles ]
1      2      3      1
2      3      4      1
[ dihedrals ]
1      2      3      4      5
[ exclusions ]
[ position_restraints ]
[ constraints ]
```

```
[ system ]
generate
[ molecules ]
ETH      1000
```

В квадратных скобках указаны ключевые слова, после которых идет определенный блок данных. На текущий момент реализовано фиксированное расположение атомов в молекуле, и внутримолекулярная конфигурация молекул не изменяется. Поэтому с файла считываются только данные блока [atomtypes]. В данном блоке в каждой строчке содержится: название атома, молекулярная масса, заряд молекулы, тип атома (в gromacs есть виртуальные атомы не обладающие массой), параметр  $\sigma$ , параметр  $\varepsilon$ .

## 2.2 Расчет свойств входящих потоков

Для добавления на тарелки питания новых молекул необходимо знать энергию этих молекул. В случае однофазного входящего потока учитывая число степеней свободы необходимо задать покомпонентный состав, температуру и одну из двух величин: давление или плотность смеси. На текущий момент реализован  $NVT$  ансамбль для расчета свойств входящего потока.

### 2.2.1 Генерирование стартовой ячейки

Для разработки использовалась видеокарта GTX 1060, поэтому максимальное количество потоков на блок составляло 1024. Количество выделяемых блоков соответствовало количеству входящих потоков. Количество выделяемых потоков на блок выделялось так, чтобы не превысить максимальное количество потоков на видеокарту. Поэтому удобнее использовать количество молекул, кратное 512, это позволяет избежать лишних проверок в каждом цикле на соответствие максимальному количеству. В данной работе использовалось 4098 молекул при расчете.

Молекулы веществ изначально расставлялись в случайном порядке в узлах кубической кристаллической решетки.

Далее считанные из исходных файлов данные переносились в одномерные массивы для возможности обработки полученных данных на видеокарте. В связи с переносом данных в одномерные массивы были созданы дополнительные массивы, использующиеся для получения индекса определенной молекулы или атома.

На текущий момент разработки в программе реализован потенциал взаимодействия Леннард – Джонса:

$$\phi(r) = 4\varepsilon \left( \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right) \quad (1)$$

где  $\varepsilon$  — параметр, характеризующий глубину потенциальной ямы,  $\sigma$  — расстояние на котором потенциал равен нулю. Увеличение производительности при расчете проводится за счет параллельного вычисления энергии взаимодействия. Так, при выполнении алгоритма в один поток при используемых параметрах моделирования, необходимо на каждый шаг Монте – Карло вычислить 4097 энергий взаимодействия. В случае выполнения этого алгоритма на видеокарте в 512 потоков, каждый поток вычисляет лишь взаимодействия с 8 молекулами. Однако, каждый поток записывает данные в заданный элемент массива энергий взаимодействия двух молекул. Поэтому далее проводится суммирование элементов массива с использованием специальных алгоритмов разработанных для много поточных систем [18].

Таблица 1: Сравнение результатов расчетов с экспериментальными данными

$n^*$	$n^*$	Литературные данные		Данная работа			
		$p^*$	$U^*$	$p^*$	$U^*$	$\Delta p^*$	$\Delta U^*$
0.5	5	-2.365	4.654	-2.373	4.587	0.32	-1.44
0.1	2	-0.667	0.1777	-0.668	0.178	0.14	0.04
0.2	2	-1.306	0.329	-1.307	0.330	0.05	0.40
0.4	2	-2.538	0.705	-2.536	0.701	-0.07	-0.50
0.5	2	-3.149	1.069	-3.144	1.075	-0.17	0.54
0.6	2	-3.746	1.756	-3.744	1.743	-0.05	-0.73
0.7	2	-4.3	3.024	-4.288	3.011	-0.27	-0.44
0.8	2	-4.753	5.28	-4.701	5.427	-1.09	2.79
0.9	2	-5.03	9.09	-4.994	9.249	-0.71	1.75
0.1	1.2	-0.84	0.0776	-0.833	0.078	-0.82	-0.06
0.1	1.15	-0.869	0.0707	-0.866	0.071	-0.32	0.57
0.05	1	-0.478	0.0369	-0.481	0.037	0.60	0.19
0.6	1	-4.228	-0.269	-4.208	-0.264	-0.48	-1.72
0.8	1	-5.533	1.03	-5.524	1.043	-0.16	1.28
0.9	1	-6.062	3.24	-6.027	3.395	-0.57	4.77

Термодинамические свойства вычисляются каждый 20 шаг Монте – Карло. Измеренные вычисления усредняются по определенным блокам, в каждом блоке проводится 20 000 вычислений микросвойств системы. Далее в каждом блоке определяются средние значения термодинамических свойств. Вычисления производились с использованием 5 блоков. Каждый из блоков принимается как отдельный численный эксперимент, поэтому проводится статистическая обработка с определением среднего и стандартного отклонения.

Усреднение по блокам проводится только после установления термодинамического равновесия. Достижение термодинамического равновесия определяется из условия, что максимальное отклонение давления и энергии в блоке не превышает 7%.

## 2.3 Сравнение результатов расчетов с литературными данными

Для отладки приложения и исключения ошибок в результатах, было проведено сравнение результатов работы программы с результатами других авторов. Верификация работы программы проведена на примере сферически симметричного леннард-джонсовского флюида. В связи с этим в работе термодинамические величины приведены в безразмерном виде: числовая плотность  $n^* = n\sigma^3 = \frac{N}{V}$ , давление  $p^* = \frac{p\sigma^3}{\epsilon}$ , температура  $T^* = \frac{k_B T}{\epsilon}$ , энергия  $U^* = \frac{U}{\epsilon}$ , где  $N$  — количество молекулы в ячейке,  $V$  — объем ячейки.

В таблице 1 представлено сравнение результатов работы разработанной программы с литературными данными [19]. Среднее отклонение по энергии составляет 0.39% (максимальное 1.09 %) по давлению 1.15% (максимальное 4.77 %). Однако кроме одного значения под давлению результаты входят в доверительный интервал численного эксперимента. Хорошее согласование результатов между собой свидетельствует о том, что алгоритм реализован верно.

## 2.4 Сравнение производительности

В таблице 2 представлено время вычисления 400 000 шагов Монте-Карло для системы содержащей 4096 молекул. В программе не реализована возможность проведения параллельных расчетов на центральном процессоре, таким образом, влияние процессора несущего

Таблица 2: Время вычисления на компьютерах с различной конфигурацией

Конфигурация компьютера	Время вычисления, с
OS: ubuntu server 18.04 / gcc 6 Процессор: AMD FX(tm)-6200 Видеокарта: GTX 1060	43
OS: ubuntu desktop 16.04 / gcc 5 Процессор: AMD Phenom(tm) II X6 Видеокарта: GTX 1060	41
OS: ubuntu server 16.04 / gcc 5 Процессор: AMD Phenom(tm) II X4 Видеокарта: GTX 1080	40
OS: ubuntu desktop 18/04 / gcc 6 Процессор: AMD Ryzen 7 1700 Видеокарта: GTX 1060	43

щественно сказывается на производительности программы. Также сложно сделать однозначный вывод из-за того, что системы имеют различную операционную систему и компилятор. Сравнивая различные видеокарты можно сделать вывод, что видеокарта GTX 1080 немного опережает по производительности GTX 1060. Однако рассматривая отношение цены устройства к производительности видеокарта GTX 1060 лучше. Также стоит отметить, что при запуске программы на северных операционных системах, на видеокартах GTX 1060 наблюдались задержки работы графического окружения.

## А Приложение

Файлы проекта с описанием содержания (представлены только основные файлы проекта):

- build — тестовая сборка для отладки
  - A.gro — файл координат атомов в молекуле
  - data.mcr — файл с параметрами моделирования
  - B.gro — файл координат атомов в молекуле
  - data.top — файл топологии молекул
- doc — документация по проекту
- initial — моделирование входящих потоков
  - data\_from\_device.cu — перенос данных из видеокарты в хост
  - device\_prop.cu — определение свойств видеокарты
  - initial\_flows.cu — задание начальной конфигурации молекул во входящем потоке
  - read\_gro.cu — чтение gro файлов
  - read\_top.cu — чтение top файлов
  - data\_to\_device.cu — перенос данных из хоста в видеокарту
  - free\_arrays.cu — освобождение памяти на видеокарте

- rcut.cu — вычисление добавки, связанной с обрезанием потенциала взаимодействия
- read\_options.cu — чтение параметров моделирования из файла
- single\_box.cu — основной алгоритм метода Монте-Карло
- write — содержит файлы с выводом логов и выходных данных
- CMakeLists.txt — конфигурация для сборки Cmake
- global.h — глобальные константы
- initial.h — инициализация глобальных переменных программы
- mcres.cu — основной файл программы (начало программы)
- mcres.h — объявление новых типов структур

## Список литературы

- [1] Vapor-Liquid Equilibria by UNIFAC Group Contribution. Revision and Extension / Steen Skjold-Jorgensen, Barbel Kolbe, Jurgen Gmehling [и др.] // Industrial & Engineering Chemistry Process Design and Development. 1979. oct. T. 18, № 4. C. 714–722.
- [2] Vapor-liquid equilibria by UNIFAC group contribution. 4. Revision and extension / Detlef Tieg, Peter Rasmussen, Juergen Gmehling [и др.] // Industrial & Engineering Chemistry Research. 1987. jan. T. 26, № 1. C. 159–161.
- [3] Wittig Roland, Lohmann Jürgen, Gmehling Jürgen. Vapor-Liquid Equilibria by UNIFAC Group Contribution. 6. Revision and Extension // Industrial & Engineering Chemistry Research. 2003. jan. T. 42, № 1. C. 183–188.
- [4] Comparison of software for molecular mechanics modeling. URL: [https://en.wikipedia.org/wiki/Comparison\\_of\\_software\\_for\\_molecular\\_mechanics\\_modeling](https://en.wikipedia.org/wiki/Comparison_of_software_for_molecular_mechanics_modeling).
- [5] Materials Studio. URL: <http://www.3dsbiovia.com/products/collaborative-science/biovia-materials-studio/>.
- [6] Schrödinger Software. URL: <https://www.schrodinger.com/suites/materials-science-suite>.
- [7] Berendsen H.J.C., van der Spoel D., van Drunen R. GROMACS: A message-passing parallel molecular dynamics implementation // Computer Physics Communications. 1995. sep. T. 91, № 1-3. C. 43–56.
- [8] GROMACS 4.5: a high-throughput and highly parallel open source molecular simulation toolkit / Sander Pronk, Szilárd Páll, Roland Schulz [и др.] // Bioinformatics. 2013. feb. T. 29, № 7. C. 845–854.
- [9] GROMACS: High performance molecular simulations through multi-level parallelism from laptops to supercomputers / Mark James Abraham, Teemu Murtola, Roland Schulz [и др.] // SoftwareX. 2015. sep. T. 1-2. C. 19–25.
- [10] Plimpton Steve. Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics // Journal of Computational Physics. 1995. mar. T. 117, № 1. C. 1–19.

- [11] Thompson Aidan P., Plimpton Steven J., Mattson William. General formulation of pressure and stress tensor for arbitrary many-body interaction potentials under periodic boundary conditions // The Journal of Chemical Physics. 2009. oct. T. 131, № 15. С. 154107.
- [12] Panagiotopoulos Athanassios Z. Direct determination of phase coexistence properties of fluids by Monte Carlo simulation in a new ensemble // Molecular Physics. 1987. jul. T. 61, № 4. С. 813–826.
- [13] Orkoulas Gerassimos, Panagiotopoulos Athanassios Z. Free energy and phase equilibria for the restricted primitive model of ionic fluids from Monte Carlo simulations // The Journal of Chemical Physics. 1994. jul. T. 101, № 2. С. 1452–1459.
- [14] Martin Marcus G. MCCCSTowhee: a tool for Monte Carlo molecular simulation // Molecular Simulation. 2013. dec. T. 39, № 14-15. С. 1212–1222.
- [15] Allen M. P., Tildesley D. J. Computer Simulation of Liquids. Oxford University Press, 1988. URL: <https://www.amazon.com/Computer-Simulation-Liquids-M-Allen/dp/0198553757?SubscriptionId=AKIAIOBINVZYXZQZ2U3A&tag=chimbori05-20&linkCode=xm2&camp=2025&creative=165953&creativeASIN=0198553757>.
- [16] Lustig Rolf. Microcanonical Monte Carlo simulation of thermodynamic properties // The Journal of Chemical Physics. 1998. nov. T. 109, № 20. С. 8816–8828.
- [17] URL: <https://github.com/MonteCarloRect/mcres>.
- [18] Боресков А.В. Харламов А.А. Марковский Н.Д. Микушин Д.Н. Мортиков Е.В. Мыльцев А.А. Сахарных Н.А. Фролов В.А. Параллельные вычисления на GPU. Архитектура и программная модель CUDA: Учебное пособие. Издательство МГУ Москва, 2015.
- [19] Johnson J. Karl, Zollweg John A., Gubbins Keith E. The Lennard-Jones equation of state revisited // Molecular Physics. 1993. feb. T. 78, № 3. С. 591–618.