



**Направления исследований,
проводимых в Дальневосточном
государственном университете
в рамках программы
«Университетский кластер»**



Институт Окружающей Среды

**исследования проводятся с помощью
WRF EMS (Weather Research and Forecast
Environmental Modeling System)
Модель WRF является мезомасштабной
численной моделью для
прогнозирования погоды,
для обеспечения оперативного
прогнозирования,
а также исследования атмосферы.**

Эксперимент

- **запустить модель WRF на кластере**
- **оценить вычислительные возможности кластера**
- **изучить инструменты и возможности для рабочего использования модели WRF**

Результаты эксперимента

- ✓ **Результаты моделирования занимают значительные объемы дискового пространства.**
- ✓ **Моделирование региона в виде квадрата с центром в г. Владивосток и длиной стороны 2400 км. с шагом сетки 20 км. выполняется в течение 9 часов с использованием всех четырех узлов кластера.**

Выводы

Опытная эксплуатация приостановлена из-за недостаточных ресурсов кластера, поскольку реальные расчеты по региону должны занимать не более полутора часов времени и на сетке с шагом 5 км.

- **В лаборатории электронного строения и квантовохимического моделирования с помощью программы GAMESS/Firefly проводятся квантовохимические расчеты: теоретическое моделирование**
 - ▶ **электронного строения,**
 - ▶ **фотоэлектронных спектров,**
 - ▶ **спектров поглощения****многоэлектронных атомных и молекулярных систем.**

Используемые методы:

самосогласованного поля Хартри - Фока (ХФ), теории функционала плотности (ТФП), конфигурационного взаимодействия (КВ).

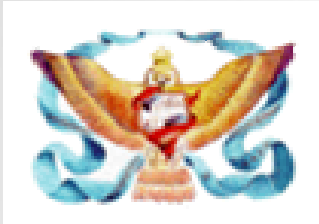
Объекты исследования:

органсилоксаны, хелатные комплексы р- и d-металлов, хелатные комплексы р- , d-, f- элементов

Выводы

ТФП расчет с оптимизацией геометрии на 2 узлах кластера выполняется в 2 раза быстрее чем на ПК (Intel Core2 Duo E6550 2.33ГГц, 2 Гб ОЗУ)

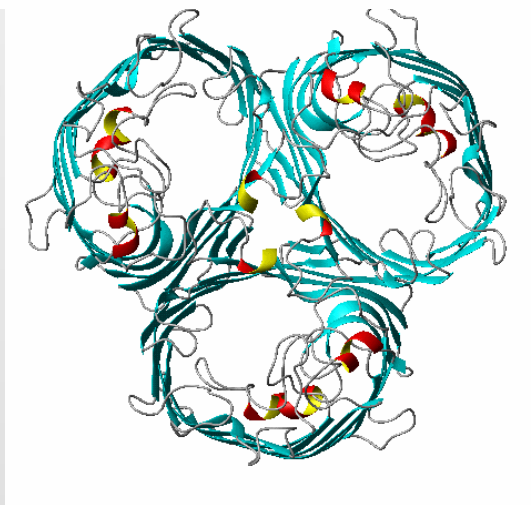
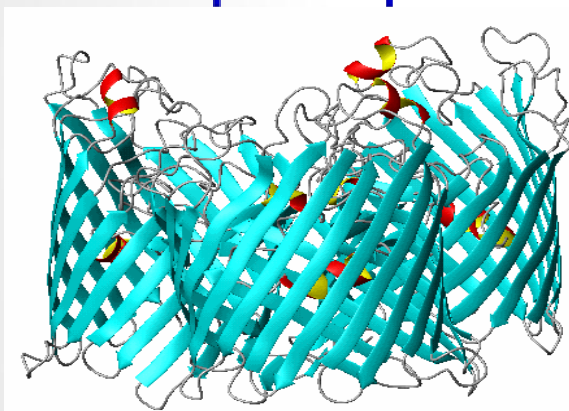
Совместная работа ИПМ ДВО РАН и Института математики и компьютерных наук (ИМКН)



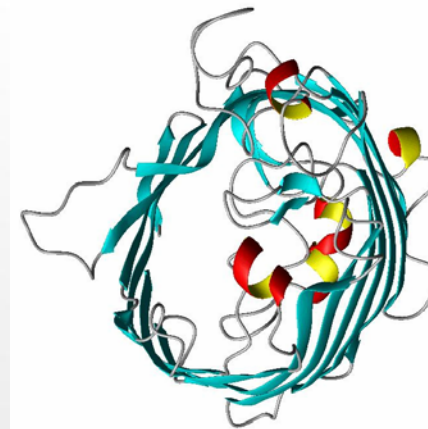
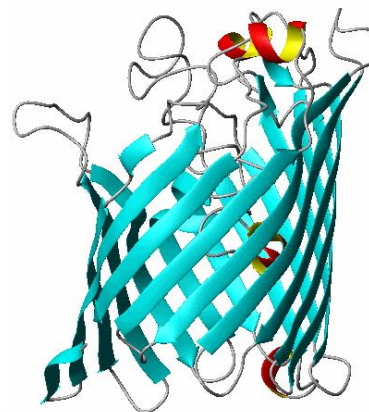
В рамках метода молекулярной динамики исследуется физико-математическая модель интегральных мембранных белков поринов, выделенных из наружной мембраны бактерий

Пространственная структура бактериального порина

тример



мономер



Метод молекулярной динамики

$$m_i \frac{\partial^2 \mathbf{r}_i}{\partial t^2} = \mathbf{F}_i, \quad i = 1 \dots N,$$

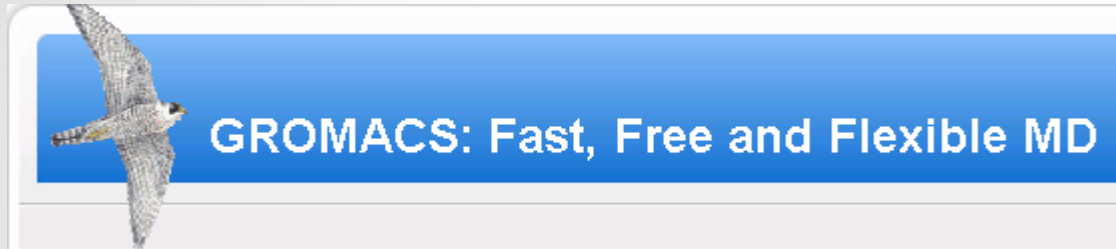
$$\mathbf{F}_i = - \frac{\partial V}{\partial \mathbf{r}_i}$$

- начальная структура молекулы
- набор межатомных потенциалов



- численная процедура решения
- вычисление траектории

GROMACS



**Программный пакет для проведения
молекулярно-динамических расчетов,
минимизации энергии и анализа
молекулярных траекторий**

<http://www.gromacs.org>

Общая схема одного моделирования

Генерация топологии

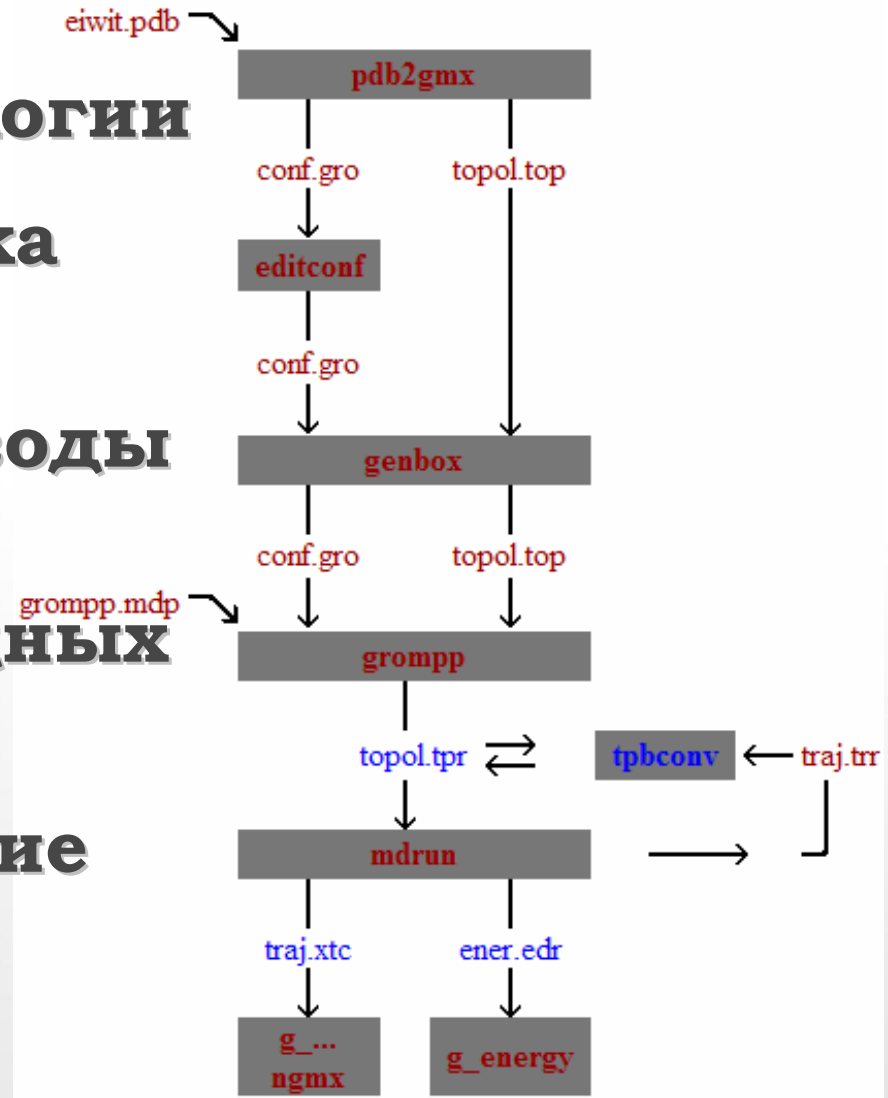
Размеры блока

Добавление воды

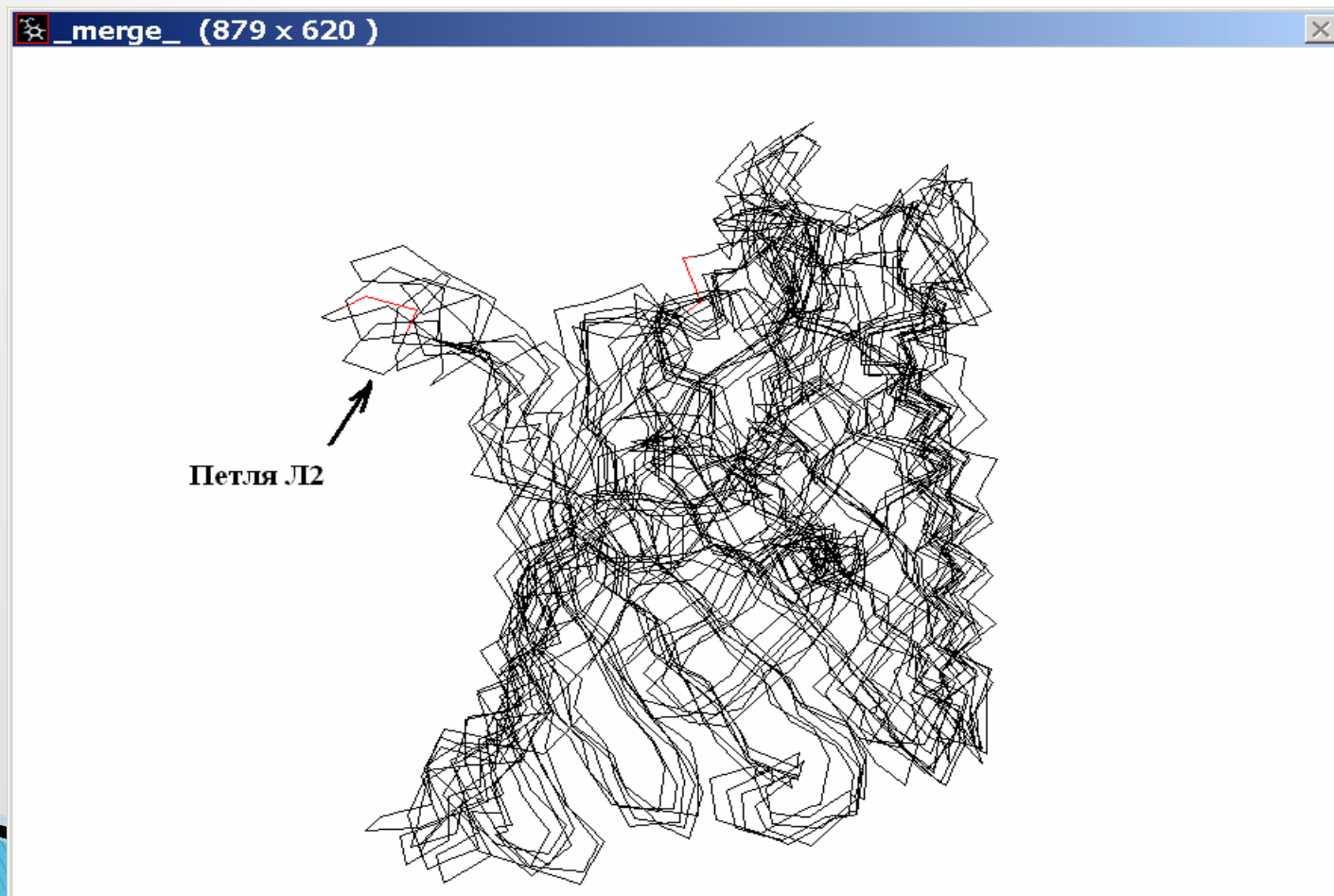
Задание входных параметров

Моделирование

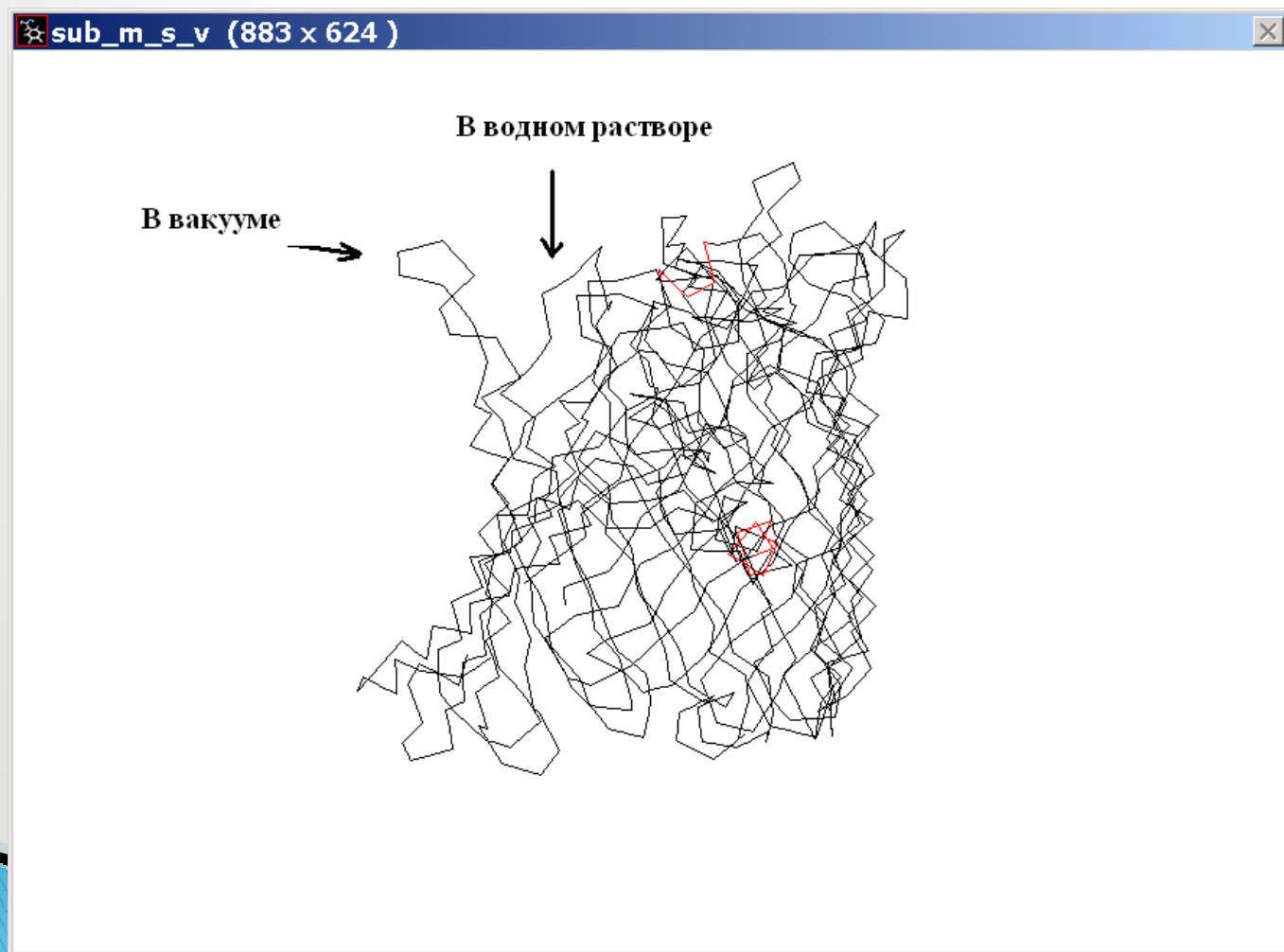
Анализ



Суперпозиция мономеров поринов после минимизации энергии и МД в вакууме при температуре 300–350 К



Конформационные изменения в области петли Л2 мономера порина в вакууме и в водном растворе



Выводы

- Энергия образования тримеров порина в воде выше, чем в вакууме
- Структурным участком, ответственным за стабильность олигомеров порина, является петля $\Lambda 2$
- Отработан подход для установления структурных особенностей

Совместная работа ИАПУ ДВО РАН и ИМКН

**Разработка вычислительной
технологии расчета процессов
распространения сверхкоротких
лазерных импульсов в сплошных и
наноструктурированных средах.
Разработан и реализован численный
алгоритм моделирования филаментов
в импульсе лазера**