Облікова картка ДіР

Image not found or type unknow

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0213U003717

Державний реєстраційний номер: 0112U005153

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 27-02-2013

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Програмно-апаратний комплекс для моделювання та аналізу природних та штучних нано-систем у грід-середовищі.

Початок етапу: 04.2012

Закінчення етапу: 12.2012

Вид звітного документа: Остаточний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Інститут фізики НАН України

Код за ЄДРПОУ: 05417302

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 525-12-20_____

IV. Відомості про співвиконавців ДіР

V. Відомості про замовника ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Національна академія наук України

Код за ЄДРПОУ: 00019270

Місцезнаходження: вул. Володимирська, 54, м. Київ, Київська обл., 01030, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380442396594

VI. Джерела, напрями та обсяги фінансування ДіР

Підстава для проведення ДіР: 34 - договір (замовлення) з центральним органом виконавчої влади, академією наук (головними розпорядниками бюджетних коштів на проведення НДДКР)

Напрям фінансування: 2.3 - виконання робіт за державними цільовими програмами

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 6541030

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 169

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Програмно-апаратний комплекс для моделювання та аналізу природних та штучних нано-систем у грід-середовищі.

Назва роботи англійською:

Hardware-software system for modeling and analysis of natural and synthetic nano-systems in a Grid environment.

Реферат українською:

Грід-технології на сьогодні активно використовується для моделювання природних та штучних наносистем, зокрема біологічних макромолекул та штучних наноструктур. Найбільш активно використовуються методи молекулярної динаміки та квантової хімії, що дозволяють моделювати структуру та динаміку складних надмолекулярних систем та отримувати траєкторії всіх атомів системи у часі. Розмір типової траєкторії молекулярної динаміки по мірі розвитку розрахункових потужностей стає все більшим і зараз сягає десятків гігабайт. Обробка таких траєкторій може займати декілька годин чи навіть днів. Це робить етап аналізу даних досить складним технічно та інтенсивним чисельно. Відповідно виникає потреба у переносі задач аналізу траєкторій до грід-середовища. Інтеграція аналізу траєкторій молекулярної динаміки до грід-середовища вимагає вирішення кількох задач: 1) створення нового програмного забезпечення для аналізу траєкторій; 2) оптимізація його роботи на окремих обчислювальних кластерах; 3) забезпечення доступу до локальних та віддалених ресурсів, де фізично зберігаються траєкторії; 4) створення інтерфейсу для взаємодії користувача з системою аналізу. На даному етапі проекту продовжувались роботи по розробці бібліотеки молекулярного моделювання та аналізу Pteros. Реалізовано асинхронне читання великих траєкторії МД з паралельною диспечеризацією прочитаних кадрів між довільною кількістю аналітичних процедур, які виконуються у незалежних дочірніх потоках. Реалізовано буфер з підрахунком посилань, який накопичує і зберігає прочитані кадри доти, доки вони не оброблені хоча б одним з аналітичних потоків та видаляє їх після використання. Реалізовано єдиний універсальний API для читання будь-яких форматів даних МД, який дозволяє дуже просто і прозоро додавати нові формати файлів до бібліотеки. Реалізовано обгортку для плагінів вводу-виводу molfile plugins програми VMD сумісну з універсальним API вводу-виводу Pteros. Значно покращено прив'язки до мови програмування Python. Було розроблено додаткову систему інтерпретації параметрів запуску аналітичних програм. Реалізовано Веб-інтерфейс для бібліотеки. Розпочато перенос розробки на більш прогресивну розподілену систему контролю версій GIT. Кардинально перероблено реалізацію алгоритму grid search, додано повну підтримку періодичних граничних умов. Оновлено документацію на сайті http://pteros.sourceforge.net/. Кластери, що складаються з невеликої кількості атомів - менше декількох сотень, мають суттєво іншу структуру і властивості у порівнянні з об'ємним матеріалом. Наприклад, добре відомі фулерени мають принципово відмінну структуру від графіту і алмазу, так само як недавно відкриті вкладено-оболонкові наночастинки (CdSe)33, (CdSe)34 не мають вюрцитної структури об'ємного CdSe. Раніше нами було опубліковано результати часопролітної мас-спектроскопії кластерів ZnO, отриманих лазерною абляцією порошку пероксиду цинку (ZnO2), і показано, що суттєво більша різноманітність кластерів може бути сформована з цього запропонованого прекурсору. Серед інших було виявлено кластери підвищеної стабільності - "магічні кластери" - (ZnO)34, (ZnO)60 та (ZnO)78, а також знайдено спосіб підвищення їх відносної кількості завдяки додаванню алкиламінів. Запропонований нами підхід до вирішення проблеми встановлення структури малих атомарних кластерів наступний. За основу ми беремо експериментальні дані, а саме мас-спектри сполук, що розглядаються. Вибираємо ділянку спектру, що містить інформацію про поширеність (стабільність) деяких характерних (магічних, якщо такі є) кластерів малого розміру. Конструюємо всі можливі ізомери для обраних кластерів. Проводимо попередній відбір "кращих" ізомерів, тобто тих, що мають найменшу можливу загальну енергію. За результатами

квантово-хімічних обчислень, проводимо остаточний відбір найстабільніших ізомерів для даних кластерів. На основі порівняння результатів обчислень (енергій зв'язку кластерів) з експериментальними даними (поширеністю кластерів) робимо висновки щодо реалістичності вибраного методу обчислень. Якщо результати задовільні - проводимо квантово-хімічні обчислення більших кластерів вибраним методом. Вважаємо, що отриманим у такий спосіб результатам обчислень можна довіряти. За допомогою спеціально розробленого програмного забезпечення та стандартних програмних пакетів для квантово-хімічних розрахунків (Firefly) проведено комплекс обчислень і встановлено найбільш енергетично вигідні структури атомарних кластерів (ZnO)n і (ZnS)n, де n=12, 13. З порівняння результатів обчислень з експериментом (мас-спектри відповідних кластерів при лазерній абляції твердої мішені) зроблено висновок щодо раціонального вибору методу обчислень і набору базисних функцій для досліджених сполук: для ZnO можна застосовувати прості базиси в обчисленнях з перших принципів, в той час як для ZnS такі обчислення погано відповідають експериментальним даним, а напівемпіричний метод AM1 дає задовільне співпадіння результатів обчислень і експерименту для обох сполук. Сформульовано висновки щодо доцільності проведення обчислень стабільності кластерів (ZnO)n в гріді: напівемпіричний метод буде раціонально використовувати для кластерів з n>60, ab initio методи - для n>2?5 залежно від використаного базису і рівня теорії.

Реферат англійською:

Grid technologies are widely used for modeling of natural and man-made nanosystems, in particular biological macromolecules and artificial nanostructures. The most widely used methods of molecular dynamics and quantum chemistry are allowed to model the structure and dynamics of complex supramolecular systems and obtain the trajectories of all atoms of the system over time. The size of a typical trajectory of molecular dynamics for the development of computational power is growing and now is the tens of gigabytes. The processing of such paths can take hours or even days. This makes the data analysis stage rather complicated technically and numerically intensive. Accordingly there is a need to analyze the trajectories of moving tasks in a grid environment. Integration analysis of molecular dynamics trajectories in the grid environment requires several purposes: 1) the creation of new software for the analysis of the trajectories, 2) optimization of its operation on the individual computer clusters, and 3) providing access to local and remote resources, which are physically stored trajectory, 4) to create an interface for user interaction analysis. At this stage of the project, we were continuing on the development of libraries for molecular modeling and analysis Pteros. Implementation of asynchronous reading of large MD trajectory with parallel dispatching of reading any number of frames between the analytical procedures that are performed by independent subsidiaries flows was developed. The buffer with reference counted which collected and kept read frames until they are processed at least one of analytic flows and remove them after use was Realized. Implemented single universal API to read any data formats MD, which allows for a very simple and transparent to add new file formats in the library. A wrapper for plugins IO program VMD molfile plugins compatible with universal API IO Pteros was implementated. Binding with programming language Python was greatly improved. We developed an additional system of interpretation of the startup analytical programs. Web-based library was implemented. The transfer of development on more advanced distributed version control system GIT was initiated. Implementation of the algorithm grid search was radically redesigned, also full support for the periodic boundary conditions was added. The documentation at http://pteros.sourceforge.net/. was updated. Clusters consisting of a small number of atoms - less than a few hundred, have a significantly different structure and properties than the bulk material. For example, well-known buckyballs are fundamentally different from the structure of graphite and diamond, as well as the newly discovered embedded-shell nanoparticles (CdSe)33, (CdSe)34 does not have the wurtzite structure of bulk CdSe .. We have previously published the results of-flight mass spectroscopy of clusters ZnO, obtained by laser ablation of powder zinc peroxide (ZnO2), and shows that from the proposed precursor can be formed much greater variety of clusters. Additional points were detected clusters of high stability - "magic clusters" - (ZnO)34, (ZnO)60 and (ZnO)78, and found a way to increase their relative amount by adding alkylamines. Our approach to solving the problem of establishing the structure of small atomic clusters is as follows. As a basis we take the experimental data, namely, the mass spectra of these

compounds. Next, choose the portion of the spectrum that contains information about the prevalence of (stability) of some characteristic (magic, if any) of the small size clusters. Then construct all possible isomers of the selected clusters and perform a preliminary selection of the "best" of isomers, i.e. those that have the lowest possible total energy. According to the results of quantum chemical calculations, performed the final selection of isomers for these clusters. Based on a comparison of the results of calculations (energy cluster communication) with experimental data (prevalence clusters) we draw conclusions about the realism of selected calculation method. If the results are satisfactory - is performed quantum-chemical calculations of large clusters selected method. We believe that the results thus obtained the calculation can be trusted. At this stage, a complex set of calculations, where n = 12, 13 was carried out by using specially designed software and standard software packages for the quantum-chemical calculations (Firefly) and the energetically most favorable structures of atomic clusters (ZnO)n and (ZnS)n were established. Based on the comparison of the calculation results with experimental data (mass spectra corresponding clusters by laser ablation of a solid target) the following conclusion on the rational choice of calculation method and basis functions for the investigated compounds were proposed: for ZnO a simple basis in calculations from first principles can be used, while such calculations for ZnS poorly agreed with the experimental data, and the semi-empirical AM1 method gives a satisfactory agreement between the calculation results and experiments for both compounds. Also the conclusions on the feasibility to carry out computation of the (ZnO)n clusters stability in the grid environment were formulated : semi-empirical method is efficient to use for clusters with n> 60, ab initio methods - for n> 2 ? 5 depending on the basis used and the level of theory.

Індекс УДК: 539.196.3, 539.196.3

Коди тематичних рубрик: 29.29.25

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Яценко Леонід Петрович

Науковий ступінь:

Вчене звання:

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

VIII. Наукова (науково-технічна) продукція (НТП)

Назва НТП українською: Комп'ютерна бібліотека для нестандартного молекулярного аналізу та моделювання, технологія квантово-хімічні розрахунків структури та властивостей кластерів бінарних напівпровідників.

Назва НТП англійською: Computer library for nonstandard analysis and molecular modeling, technology of quantum-chemical calculations of the structure and properties of binary semiconductor clusters.

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати:

Галузь застосування: К 72.21.0; К 73.10.1

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Бібліотека Pteros дозволяє здійснювати в гріді конструювання складних молекулярних систем та аналіз результатів моделювання, що значно прискорює процес обчислень в порівнянні з використанням локальних ресурсів. Її реалізовано на мові C++ з використанням високорівневих засобів, що робить її інтерфейс дуже простим та зрозумілим для непрофесійних програмістів. Проведено комплекс обчислень і встановлено найбільш енергетично вигідні структури атомарних кластерів (ZnO)n і (ZnS)n, де n=12, 13.

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 3 роки.

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: науково дослідні установи та університети.

Перспективні ринки: Україна, зарубіжні країни.

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.:

Права, що надаються інвестору після завершення роботи:

Наявність бізнес-плану:

Техніко-економічне обгрунтування:

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:

Очікуваний термін окупності (років):

Додаткова інформація:

IX. Бібліографічний опис

Semen O. Yesylevskyy, Pteros: Fast and easy to use open-source C++ library for molecular analysis, Journal of Computational Chemistry Volume 33, Issue 19, pages 1632-1636; Yesylevskyy SO, Demchenko AP. How cholesterol

is distributed between monolayers in asymmetric lipid membranes. Eur Biophys J. 2012 Oct 9. [Epub ahead of print]; A. Dmytruk, I. Dmitruk, R. Belosludov. On the structure of about one nanometer clusters of A2B6 semiconductors. // Abstracts of the 4-th German-Ukrainian symposium "Physics and Chemistry of Nanostructures and Nanobiotechnology 2012", 18-20 September 2012, Ilmenau University of Technology, p. 47-48.

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи Порошин Володимир Миколайович

Перелік осіб-виконавців

Єсилевський Семен Олександрович

Березецька Наталя Михайлівна

Блонський Іван Васильович

Дмитрук Ігор Миколайович

Дмитрук Андрій Миколайович

Рябцев Андрій Володимирович

Харкянен Валерій Миколайович

Шинкаренко Євген Вікторович

Яценко Леонід Петрович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Телефон

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності

