

МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ  
имени М. В. Ломоносова

---

ФАКУЛЬТЕТ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ МАТЕМАТИКИ И КИБЕРНЕТИКИ

На правах рукописи  
УДК 519.6:621.384.83

Позднеев Александр Валерьевич

**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ  
ДВИЖЕНИЯ ИОНОВ В МАСС-СПЕКТРОМЕТРАХ**

Специальность 05.13.18 — математическое моделирование,  
численные методы и комплексы программ

АВТОРЕФЕРАТ  
диссертации на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

Москва — 2009

Работа выполнена на кафедре автоматизации научных исследований факультета вычислительной математики и кибернетики Московского государственного университета имени М. В. Ломоносова.

Научный руководитель: доктор физико-математических наук,  
профессор Попов Александр Михайлович

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук,  
профессор (физический факультет  
МГУ имени М. В. Ломоносова)  
Боголюбов Александр Николаевич

кандидат физико-математических наук,  
кандидат технических наук,  
заведующий лабораторией (Институт энергетических проблем химической физики РАН)  
Горшков Михаил Владимирович

Ведущая организация: Вычислительный центр  
им. А. А. Дородницына РАН

Защита состоится 23 сентября 2009 г. в 15 час. 30 мин. на заседании диссертационного совета Д 501.001.43 при Московском государственном университете имени М. В. Ломоносова по адресу: 119991, ГСП-1, Москва, Ленинские горы, МГУ, 2-й учебный корпус, факультет вычислительной математики и кибернетики, ауд. 685.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке факультета ВМК МГУ имени М. В. Ломоносова. С текстом автореферата можно ознакомиться на официальном сайте факультета ВМК МГУ <http://cs.msu.su> в разделе «Наука» — «Работа диссертационных советов» — «Д 501.001.43».

Автореферат разослан « » августа 2009 г.

Ученый секретарь  
диссертационного совета Д 501.001.43  
доктор физико-математических наук,  
профессор

Захаров Е. В.

## ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

**Актуальность темы.** Масс-спектрометрия — это метод определения элементарного состава и химической структуры молекул и смесей. За последние годы первостепенную роль методы масс-спектрометрии стали играть в биомедицине и протеомике при изучении структуры и функционирования биомолекул. Распознавание протеинов является ключевым шагом в протеомике для понимания биологических систем. Правильность работы алгоритмов, направленных на идентификацию протеинов, решающим образом зависит от точности измерения масс белков и составляющих их аминокислотных последовательностей.

В настоящее время одним из наиболее предпочтительных инструментов для указанных исследований являются масс-спектрометры ионно-циклотронного резонанса с фурье-преобразованием сигнала, так как на текущий момент эти приборы обеспечивают беспрецедентно высокую точность определения масс по сравнению с другими масс-спектрометрическими устройствами.

Точность измерения масс определяется многими факторами, среди которых выделяют влияние на движение ионов постоянного удерживающего электрического поля ионных ловушек, кулоновское взаимодействие ионов, силу со стороны индуцированных на стенках ионной ловушки зарядов. Поведение ионов в масс-спектрометрах сложным и еще не достаточно хорошо изученным образом зависит от величины магнитного поля, переменных внешних электрических полей, начальной формы и плотности ионных облаков, разности в количестве и массах ионов разного типа. Таким образом, в отличие от остальных инструментальных методов масс-спектрометрии, масс-спектрометрия ионно-циклотронного резонанса все еще имеет потенциал в повышении точности измерения масс.

На данный момент создан ряд моделей, основанных на уравнениях полей в масс-спектрометрах с идеализированными геометриями ионных ловушек, а существующие популярные программные коды позволяют отслеживать поведение ионов в ловушках сложной формы, но не учитывают кулоновские эффекты.

Создание новых поколений многопроцессорных вычислительных систем и эффективных библиотек подпрограмм позволяет ставить задачу по прямому моделированию поведения ионов в ловушках масс-спектрометров с учетом эффектов, которые невозможно принять во внимание в теоретических исследованиях.

Все это приводит к необходимости разработки новых математических моделей, численных методов, алгоритмов и параллельных программ для исследования влияния на масс-спектр параметров, которые не учитывает теория, с помощью вычислительного эксперимента на современных высокопроизводительных компьютерных системах.

**Цель работы.** Целью диссертации является разработка математических моделей и алгоритмов для исследования поведения ионов в масс-спектрометре ионно-циклотронного резонанса с фурье-преобразованием сигнала, создание комплекса параллельных программ, предназначенного для реалистического моделирования экспериментов по измерению масс в масс-спектрометрах, проведение вычислительных экспериментов для анализа динамики ионных облаков и ее влияния на масс-спектр.

**Научная новизна, теоретическая и практическая значимость.**

1. Предложены численные алгоритмы для моделирования поведения ионов в ловушках масс-спектрометров на основе метода частиц в ячейке. В выбранной модели учитывается поле ловушки реальной геометрии и кулоновское поле ионов и зарядов, индуцированных на стенках ловушки, что позволяет использовать ее для реалистического моделирования экспериментов по измерению масс в масс-спектрометрах.
2. Разработан параллельный код частиц в ячейке для моделирования масс-спектрометра на многопроцессорных вычислительных системах, позволяющий осуществлять прямое сравнение результатов моделирования с экспериментом. Созданные программы могут быть использованы для изучения различных режимов функционирования масс-спектрометров.
3. Проведена практическая демонстрация эффективности разработанных программных средств при исследовании влияния числа частиц в ионных облаках, близости измеряемых масс, силы магнитного поля на факторы, определяющие точность измерения масс.
4. Проанализирован характер динамики частиц в процессе их переноса транспортным квадрупольем из накопительной линейной ионной ловушки при различных схемах подачи напряжения на ее электроды.

**Апробация работы.** Основные результаты диссертационной работы докладывались и обсуждались на следующих конференциях и семинарах:

1. 5-й североамериканской конференции по масс-спектрометрии ионно-циклотронного резонанса с фурье-преобразованием сигнала (США, Ки-Уэст, шт. Флорида, апрель 2005);
2. 53-й международной конференции американского общества по масс-спектрометрии ASMS'2005 (США, Сан-Антонио, шт. Техас, июнь 2005);
3. 54-й международной конференции американского общества по масс-спектрометрии ASMS'2006 (США, Сиэтл, шт. Вашингтон, май–июнь 2006);
4. международной конференции «Тихонов и современная математика» (Москва, июнь 2006);
5. 55-й международной конференции американского общества по масс-спектрометрии ASMS'2007 (США, Индианаполис, шт. Индиана, июнь 2007).

- 2007);
6. российско-ирландской летней школе по научным вычислениям (Москва–Уотерфорд, август 2007);
  7. 8-й европейской конференции по масс-спектрометрии ионно-циклотронного резонанса с фурье-преобразованием сигнала (Москва, август–сентябрь 2007);
  8. 2-й общероссийской конференции «Масс-спектрометрия и ее прикладные проблемы» (Москва, сентябрь 2007);
  9. 50-й научной конференции Московского физико-технического института «Современные проблемы фундаментальных и прикладных наук» (Москва–Долгопрудный, ноябрь 2007);
  10. научном семинаре для аспирантов факультета ВМК МГУ (Москва–Лесной городок, март 2008);
  11. 56-й международной конференции американского общества по масс-спектрометрии ASMS'2008 (США, Денвер, шт. Колорадо, июнь 2008);
  12. 9-м международном семинаре по заряженной плазме (США, Нью-Йорк, шт. Нью-Йорк, июнь 2008);
  13. всероссийской научной конференции «Научный сервис в сети Интернет: решение больших задач» (Новороссийск, сентябрь 2008);
  14. научных семинарах кафедры автоматизации научных исследований под руководством зав. кафедрой чл.-корр. РАН Костомарова Д. П. (факультет ВМК МГУ).

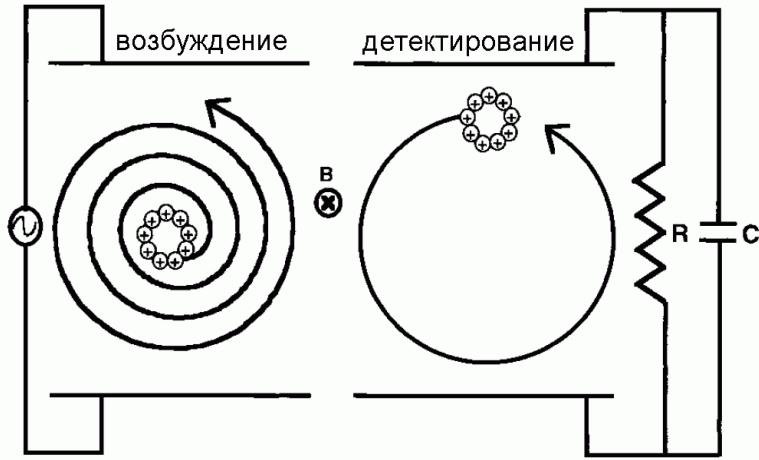
**Публикации.** Основные результаты диссертации опубликованы в пятнадцати работах: четыре статьи в изданиях, рекомендованных ВАК [1–4], одна статья в тематическом сборнике [5], десять тезисов докладов [6–15].

**Структура и объем диссертации.** Диссертация состоит из введения, трех глав, заключения и списка литературы. Текст изложен на 147 страницах, диссертация содержит 43 рисунка и 11 таблиц. Список литературы включает 133 наименования.

## СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во **введении** раскрывается актуальность темы работы, приводится краткое описание проблем и результатов, относящихся к теме диссертации. Приведен обзор существующих моделей и программ решения задачи отслеживания траекторий ионов в ловушках масс-спектрометров. Кратко излагается структура и содержание работы по главам и основные полученные результаты.

В **первой главе** описывается математическая модель поведения ионов в ловушке масс-спектрометра ионно-циклотронного резонанса с фурье-преобразованием сигнала, учитывающая кулоновские силы и влияние поля реальной геометрии ионной ловушки, предлагаются алгоритмы и численные методы для решения поставленной задачи



**Рис. 1.** Схема работы масс-спектрометра ионно-циклотронного резонанса с фурье-преобразованием сигнала.

и нахождения сигнала ионно-циклотронного резонанса.

Базовые сведения об устройстве и функционировании масс-спектрометра ионно-циклотронного резонанса с фурье-преобразованием сигнала<sup>1</sup> приведены в § 1.1. Принцип его работы состоит в измерении циклотронной частоты вращения частицы

$$\omega_c = \frac{qB}{m} \quad (1)$$

в постоянном однородном магнитном поле  $\mathbf{B}$ . Для удержания частиц в ионной ловушке масс-спектрометра этого типа вдоль магнитного поля создается потенциальная яма. Под действием перпендикулярного магнитному внешнего переменного электрического поля  $\mathbf{E}^{\text{exct}}(t) = E_0^{\text{exct}} \cos \gamma t$  происходит возбуждение ионов, циклотронная частота  $\omega_c$  которых совпадает с частотой  $\gamma = \gamma(t)$  изменения внешнего поля. Далее следует процесс детектирования, в котором измеряется заряд, индуцированный на электродах-детекторах (рис. 1). К полученному сигналу применяют преобразование Фурье и от частотного спектра, зная напряженность магнитного поля, переходят к масс-спектру, из которого определяют величину  $m/q$  отношения массы  $m$  иона к его заряду  $q$ .

В § 1.2 описана модель движения ионов в ловушке масс-спектрометра и приводится постановка задачи. Она сводится к интегрированию уравнений движения ионов в магнитном поле под действием электрического поля ловушки и кулоновского поля других ионов и поверхностных зарядов, индуцированных на стенках ловушки, и вычислению индуцированного заряда.

Движение  $p$ -го иона ( $p = 1, 2, \dots, N$ ;  $N$  — полное число частиц) с массой  $m_p$ , несущего заряд  $q_p$ , в магнитном поле  $\mathbf{B}$  определяется действием силы

<sup>1</sup> Marshall A.G., Hendrickson C.L., Jackson G.S. Fourier transform ion cyclotron resonance mass spectrometry: a primer // Mass Spectrom. Rev. — 1998. — Vol. 17. — Pp. 1–35.

Лоренца:

$$\begin{cases} m_p \dot{\mathbf{v}}_p = q_p \mathbf{E}(\mathbf{r}_p, t) + q_p [\mathbf{v}_p \times \mathbf{B}] + \mathbf{R}(\mathbf{v}_p), \\ \dot{\mathbf{r}}_p = \mathbf{v}_p, \end{cases} \quad (2)$$

где  $\mathbf{r}_p = \{x_p, y_p, z_p\}$  — радиус-вектор иона,  $\mathbf{v}_p$  — его скорость. Случайная сила  $\mathbf{R}(\mathbf{v})$  отвечает воздействию нейтрального газа. Электрическое поле  $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$  определяется потенциалом  $\Phi^{\text{trap}}(\mathbf{r})$  внешнего удерживающего поля ловушки, потенциалом  $\Phi^{\text{exct}}(\mathbf{r}, t)$  радиочастотного возбуждающего поля и потенциалом  $\Phi^{\text{coul}}(\mathbf{r}, t)$  кулоновского поля:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -\nabla \Phi(\mathbf{r}, t) = -\nabla (\Phi^{\text{trap}}(\mathbf{r}) + \Phi^{\text{exct}}(\mathbf{r}, t) + \Phi^{\text{coul}}(\mathbf{r}, t)). \quad (3)$$

В диссертации рассматривается ловушка с квадратным сечением, торцевые электроды которой находятся на расстоянии  $a$  друг от друга, а расстояние между парами продольных возбуждающих и детектирующих электродов —  $d$ . Удерживающее поле возникает за счет приложения постоянного потенциала  $V^{\text{trap}}$  к торцевым электродам, возбуждающее поле определяется потенциалами  $\pm V^{\text{exct}} \cos \gamma t$ , приложенными к двум противоположным продольным пластинам. Кулоновское поле  $\Phi^{\text{coul}}(\mathbf{r}, t)$  является суммой поля, созданного ионами анализируемого вещества, и поля  $\Phi^{\text{wall}}(\mathbf{r}, t)$  зарядов, которые они индуцируют на стенках ловушки:

$$\Phi^{\text{coul}}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{p=1}^N \frac{q_p}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_p(t)|} + \Phi^{\text{wall}}(\mathbf{r}, t). \quad (4)$$

Если ввести пространственную плотность  $\rho(\mathbf{r}, t)$  заряда и учесть, что потенциалы  $\Phi^{\text{trap}}(\mathbf{r})$  и  $\Phi^{\text{exct}}(\mathbf{r}, t)$  удовлетворяют уравнению Лапласа, то потенциал  $\Phi(\mathbf{r}, t)$  поля внутри ловушки можно искать как решение первой краевой задачи для уравнения Пуассона с неоднородными граничными условиями:

$$\begin{cases} \Delta \Phi = -\rho/\epsilon_0 & \text{внутри ловушки,} \\ \Phi|_{x=\pm d/2} = \pm V^{\text{exct}} \cos \gamma t, \\ \Phi|_{y=\pm d/2} = 0, \\ \Phi|_{z=\pm a/2} = V^{\text{trap}}. \end{cases} \quad (5)$$

Здесь  $\epsilon_0 = 8,85 \cdot 10^{-12} \text{ Ф/м}$  — электрическая постоянная.

Сигнал ионно-циклотронного резонанса регистрируется как разность зарядов, индуцированных на детектирующих электродах. Из электростатической теоремы Гаусса следует, что нормальная составляющая электрического поля на пластинах есть  $E_n = \sigma/\epsilon_0$ . Полный индуцированный на пластине заряд  $Q^{\text{induced}}$  можно найти интегрированием поверхностной плотности рас-

пределения заряда  $\sigma$  по всей пластине  $\Gamma^{\text{plate}}$ :

$$Q^{\text{induced}} = \int_{\Gamma^{\text{plate}}} \sigma dS = \varepsilon_0 \int_{\Gamma^{\text{plate}}} E_n dS, \quad (6)$$

где  $E_n$  вычисляется из производной потенциала поля по нормали  $\mathbf{n}$ :

$$E_n = -\frac{\partial \Phi}{\partial n} = -\nabla \Phi \cdot \mathbf{n}. \quad (7)$$

Описанию алгоритма моделирования и использованным численным методам посвящен § 1.3. Численное решение поставленной задачи основано на использовании метода частиц в ячейке. В п. 1.3.1 данного параграфа приводится общая схема алгоритма. Он состоит в том, что уравнения движения решаются в области, а парные взаимодействия частиц заменяются расчетом поля на сетке. Алгоритм включает следующие этапы, которые повторяются на каждом шаге по времени: интерполяция заряда на сетку, нахождение потенциала электрического поля и вычисление его напряженности в узлах сетки, интерполяция поля на частицы, интегрирование уравнений движения. В данной работе используется равномерная прямоугольная сетка: область, в которой решается задача, разбивается на  $N_x$ ,  $N_y$  и  $N_z$  интервалов длины  $h_x$ ,  $h_y$  и  $h_z$  по направлениям  $x$ ,  $y$  и  $z$  соответственно.

В п. 1.3.2 выписана схема интегрирования уравнений движения. Для этого используется центрированная по времени разностная схема, которую предложил О. Бунеман:

$$\begin{cases} m \frac{\mathbf{v}^{n+1/2} - \mathbf{v}^{n-1/2}}{\tau} = q \mathbf{E}^n + q \left[ \frac{\mathbf{v}^{n+1/2} + \mathbf{v}^{n-1/2}}{2} \times \mathbf{B}^n \right], \\ \frac{\mathbf{r}^{n+1} - \mathbf{r}^n}{\tau} = \mathbf{v}^{n+1/2}. \end{cases} \quad (8)$$

Уравнения являются неявными по скорости. Для разделения в первом уравнении (8) членов, связанных с движением в магнитном поле  $\mathbf{B}^n = \{0, 0, B\}$ , и членов, описывающих ускорение в электрическом, был использован метод, предложенный Дж. Борисом. В соответствии с этим методом сначала производится изменение скорости на половину электрического импульса, затем осуществляется вращение в магнитном поле и добавляется вторая половина электрического импульса. Введение поправочного множителя

$$\alpha = \left( \operatorname{tg} \frac{\omega_c \tau}{2} \right) / \frac{\omega_c \tau}{2} \quad (9)$$

в знаменатель левой части первого уравнения схемы (8) позволяет точно воспроизводить при интегрировании циклотронную частоту. В уравнениях (8) верхний индекс  $n$  указывает на номер временного слоя,  $\tau$  — шаг по времени.

В *n. 1.3.3* приводятся формулы, по которым осуществляется интерполяция заряда и поля:

$$\rho_{i_x i_y i_z} = \frac{1}{h_x h_y h_z} \sum_{p=1}^N q_p W_{i_x i_y i_z}(x_p, y_p, z_p), \quad (10)$$

$$\mathbf{E}(x_p, y_p, z_p) = \sum_{i_x=0}^{N_x} \sum_{i_y=0}^{N_y} \sum_{i_z=0}^{N_z} W_{i_x i_y i_z}(x_p, y_p, z_p) \mathbf{E}_{i_x i_y i_z}. \quad (11)$$

Здесь  $\rho_{i_x i_y i_z}$  и  $\mathbf{E}_{i_x i_y i_z}$  — это сеточная плотность и напряженность поля в узле  $(i_x, i_y, i_z)$ . В данной работе в качестве весов  $W_{i_x i_y i_z}(x, y, z)$  применяются функции

$$W_{i_x i_y i_z}(x, y, z) = W_{i_x}(x) W_{i_y}(y) W_{i_z}(z), \quad (12)$$

где

$$W_{i_\alpha}(\alpha) = \begin{cases} 1 - |\alpha - \alpha_{i_\alpha}| / h_\alpha, & |\alpha - \alpha_{i_\alpha}| < h_\alpha, \\ 0, & |\alpha - \alpha_{i_\alpha}| \geq h_\alpha, \end{cases} \quad \alpha \in \{x, y, z\}, \quad (13)$$

и  $\alpha_{i_\alpha}$  — координата сеточного узла с номером  $i_\alpha$  ( $i_\alpha = 0, 1, \dots, N_\alpha$ ;  $\alpha \in \{x, y, z\}$ ).

Численному решению трехмерного уравнения Пуассона посвящен *n. 1.3.4*. Используется прямой метод, основанный на комбинации серии независимых двумерных быстрых преобразований Фурье и метода прогонки.

В *n. 1.3.5* выписаны формулы для расчета поверхностной плотности заряда, необходимые для вычисления сигнала ионно-циклотронного резонанса.

Алгоритм учета влияния нейтрального газа обсуждается в *n. 1.3.6*. Вероятность того, что за шаг  $\tau$  произойдет упругое столкновение иона с нейтральной частицей, составляет  $P_c = 1 - e^{-n_g \sigma v_r \tau}$ , где  $n_g$  — концентрация нейтрального газа,  $\sigma$  — сечение столкновения,  $v_r$  — относительная скорость сталкивающихся частиц. На каждом шаге генерируется случайное число  $r \in (0, 1)$ . Если  $P_c > r$ , то считается, что столкновение произошло, и в системе отсчета, связанной с центром инерции частиц, осуществляется поворот скоростей, которые остаются неизменными по величине, а направление движения после столкновения выбирается случайным образом.

Выводы по первой главе сформулированы в § 1.4.

**Вторая глава** диссертации посвящена программной реализации предложенной в первой главе математической модели на современных высокопроизводительных вычислительных системах и созданию на ее основе комплекса программ для моделирования экспериментов по измерению масс, проводимых с помощью масс-спектрометра. Рассматриваются алгоритмы распараллеливания и исследуется их масштабируемость на системах Regatta и Blue Gene/P.

Описанию архитектуры системы моделирования масс-спектрометра,

функциональности входящих в нее программ, порядку их запуска и необходимым для них данным посвящен § 2.1.

В основу системы моделирования положен разработанный в рамках диссертации параллельный код частиц в ячейке PARADISE (PARallel ADvanced Ion Simulation Engine — инструмент для параллельного моделирования движения ионов, обладающий расширенными возможностями). Система моделирования может работать как на основе данных из реального эксперимента, так и без привязки к нему. Она включает четыре разработанные в рамках диссертации программы и подготовленный автором набор программ для визуализации данных в среде MATLAB. Также в систему моделирования включены четыре программы сторонних разработчиков. Вычислительный эксперимент включает генерирование программой EMASS<sup>2</sup> теоретического распределения масс с учетом изотопного состава ионов. При этом могут использоваться данные из экспериментального спектра об интенсивности различных зарядовых состояний. Для резонансного возбуждения используется либо гармонический сигнал, либо синусоидальный сигнал с линейно меняющейся частотой, либо волновая форма, сгенерированная по желаемой спектральной характеристике возбуждающего сигнала с помощью обратного преобразования Фурье (SWIFT, stored waveform inverse Fourier transform).

Фурье-анализ сигнала ионно-циклотронного резонанса, полученного в результате численного моделирования кодом PARADISE, проводится программой POWER. Она предназначена для работы в пакетном режиме и предоставляет расширенный набор возможностей для нахождения частотных спектров: умножение сигнала на одну из предопределенных весовых функций, дополнение его нулями, нормирование частотного спектра. Результаты могут быть выведены в бинарном или текстовом формате.

Кроме того, для получения масс-спектров может быть применен профессиональный масс-спектрометрический пакет AWE<sup>3</sup>. Он же используется в описываемой системе моделирования для генерирования волновых форм возбуждающего сигнала типа SWIFT. Для преобразования данных из оптимизированного для высокопроизводительных вычислений формата кода PARADISE в формат пакета AWE служит программа SIM2SIM.

Параллельным аспектам кода и вопросам его программной реализации на высокопроизводительных компьютерных системах посвящен § 2.2. В начале параграфа обосновывается выбор языка программирования, архитектур вычислительных систем и технологий параллельного программирования.

В п. 2.2.1 описана параллельная реализация алгоритма моделирования движения ионов в масс-спектрометре. В основу алгоритма положен тот факт,

<sup>2</sup> Rockwood A.L., Haimi P. Efficient calculation of accurate masses of isotopic peaks // J. Am. Soc. Mass Spectrom. — 2006. — Vol. 17. — Pp. 415–419. — doi:10.1016/j.jasms.2005.12.001.

<sup>3</sup> Mize T.H. et al. A modular data and control system to improve sensitivity, selectivity, speed of analysis, ease of use, and transient duration in an external source FTICR-MS // Int. J. Mass Spectrom. — 2004. — Vol. 235. — Pp. 243–253. — doi:10.1016/j.ijms.2004.05.003.

что частицы двигаются в ловушке независимо друг от друга под действием поля, которое пересчитывается на каждом шаге метода. Декомпозиция по частицам и декомпозиция области при расчете поля осуществляются независимо.

Для представления данных в памяти предложено использовать смешанный подход: часть данных хранится в виде массивов, другая — в виде массивов структур, что позволяет локализовать обращение к элементам массивов и оптимизировать использование шины памяти.

Использование вычислительной системы с общей памятью позволяет осуществлять декомпозицию по частицам без привязки к их пространственному положению. В процессе моделирования некоторые ионы могут покинуть пределы ловушки или потерять заряд, столкнувшись с электродами, и дальнейшие вычисления для них выполнять не нужно. Для того, чтобы сбалансировать нагрузку между процессорами, предложено все множество ионов разделить на группы равного размера, число которых значительно больше числа доступных процессоров. Расчеты для каждой группы ионов могут занимать различное время. Завершив вычисления для ионов своей группы, каждый процессор выбирает очередную группу, для которой расчеты еще не выполнены, и процесс повторяется до исчерпания множества групп. Распараллеливание осуществлено с применением технологии OpenMP. Реализация указанного алгоритма основана на использовании директивы `omp do` с динамической диспетчеризацией `omp schedule(dynamic)`. Рассмотренный алгоритм применяется в следующих процедурах кода: вычисление весов интерполяции, интерполяция заряда, интерполяция поля, интегрирование уравнений движения.

Параллельная реализация алгоритма расчета кулоновского поля рассмотрена в *п. 2.2.2*. Она основана на том, что преобразования Фурье являются независимыми друг от друга и системы линейных уравнений с трехдиагональными матрицами также могут решаться независимо. Пусть уравнение Пуассона решается на сетке  $N_1 \times N_2 \times N_3$ , и доступно  $N_{\text{проц.}}$  процессоров. На первом шаге решения между ними распределяются  $N_3$  независимых двумерных преобразований Фурье размера  $N_1 \times N_2$ . При этом каждый процессор должен будет выполнить  $N_3/N_{\text{проц.}}$  преобразований. При использовании системы с общей памятью и технологии OpenMP после этого этапа выполняется барьерная синхронизация, а на вычислительной системе с распределенной памятью запускается механизм межпроцессных коммуникаций MPI для перераспределения данных между процессорными узлами. На втором шаге необходимо решить  $(N_1 \cdot N_2)$  линейных систем уравнений с трехдиагональными матрицами. Для этого каждый процессор  $(N_1 N_2 / N_{\text{проц.}})$  раз обратится к методу прогонки. Третий шаг решения полностью аналогичен первому. Перед ним снова выполняется либо барьерная синхронизация, либо межпроцессные коммуникации. Преобразования Фурье осуществляются средствами библио-

теки подпрограмм FFTW<sup>4</sup>.

В § 2.3 исследуется масштабируемость параллельного кода частиц в ячейке на 16-процессорной вычислительной системе с общей памятью IBM eServer pSeries 690 Regatta. Описывается архитектура компьютерной системы, настройки библиотек и компилятора, методика тестирования.

В п. 2.3.1 рассмотрено ускорение кода с изменением числа процессоров для характерных задач фиксированного размера (сетка:  $N_g \times N_g \times N_g$  точек, где  $N_g = 32, 64, 128$  и  $192$ ; число частиц:  $16\,000\,000$ ). Характеристикой эффективности распараллеливания кода при решении задачи фиксированного размера является *ускорение*. Оно отражает масштабируемость в так называемом сильном смысле и определяется следующим образом<sup>5</sup>:

$$S = \frac{T(1, M)}{T(N_{\text{проц.}}, M)}. \quad (14)$$

Здесь  $T(1, M)$  — время решения задачи фиксированного размера с вычислительными затратами  $M$  на одном процессоре и  $T(N_{\text{проц.}}, M)$  — время решения той же задачи на  $N_{\text{проц.}}$  процессорах.

При расчетах было получено ускорение от 7,1 до 10,7 раз. Исследуется, какое ускорение имеют отдельные шаги алгоритма и какой вклад они вносят в ускорение кода в целом, выполняется анализ того, как это связано с иерархией памяти, архитектурой процессоров и их межсоединений в рамках вычислительной системы.

Исследование эффективности кода при увеличении размера задачи и числа процессоров проводится в п. 2.3.2. Оценки такого рода характеризуют так называемую слабую масштабируемость кода. Эта эффективность определяется следующим образом:

$$\eta_{\text{слаб.}} = \frac{T(1, M^{\text{баз.}})}{T(N_{\text{проц.}}, N_{\text{проц.}} M^{\text{баз.}})}. \quad (15)$$

Здесь  $T(1, M^{\text{баз.}})$  — время решения базовой задачи с вычислительными затратами  $M^{\text{баз.}}$  на одном процессоре и  $T(N_{\text{проц.}}, N_{\text{проц.}} M^{\text{баз.}})$  — время решения задачи в  $N_{\text{проц.}}$  раз большей на  $N_{\text{проц.}}$  процессорах.

Исследование слабой масштабируемости проводилось в двух режимах: в первом варьировалось и число частиц, и число точек сетки, во втором — только число частиц.

В первом случае за базовую принималась задача расчета на одном процессоре динамики 1 000 000 частиц в кубической области размера  $2,0 \times 2,0 \times 2,0$

---

<sup>4</sup>Frigo M., Johnson S.J. The design and implementation of FFTW3 // Proc. IEEE. — 2005. — Vol. 93, no. 2. — Pp. 216–231. — doi:10.1109/JPROC.2004.840301.

<sup>5</sup>Sbalzarini I.F. et al. PPM — a highly efficient parallel particle-mesh library for the simulation of continuum systems // J. Comput. Phys. — 2006. — Vol. 215, no. 2. — Pp. 566–588. — doi:10.1016/j.jcp.2005.11.017.

(в безразмерных величинах), на которой введена сетка  $32 \times 32 \times 32$  и  $64 \times 64 \times 64$ . При использовании  $N_{\text{проц.}}$  процессоров число частиц увеличивалось до  $1\,000\,000 \cdot N_{\text{проц.}}$ , размер области — до  $2,0 \times 2,0 \times (2,0 \cdot N_{\text{проц.}})$ , сетки — до  $32 \times 32 \times (32 \cdot N_{\text{проц.}})$  и  $64 \times 64 \times (64 \cdot N_{\text{проц.}})$ ; длина облака при начальном распределении частиц также была увеличена в  $N_{\text{проц.}}$  раз. В целом при максимальном увеличении задачи удалось достичь эффективности в 47 % при базовом размере сетки  $32 \times 32 \times 32$  и 38 % при базовом размере сетки  $64 \times 64 \times 64$ .

Во втором случае размер сетки фиксировался. Расчеты проводились в области размера  $2,0 \times 2,0 \times 2,0$  на сетках  $32 \times 32 \times 32$  и  $64 \times 64 \times 64$ . При использовании  $N_{\text{проц.}}$  процессоров число частиц увеличивалось до  $1\,000\,000 \cdot N_{\text{проц.}}$ , а размер области, сетки и длина облака при начальном распределении частиц не менялись. В целом при максимальном увеличении задачи удалось достичь эффективности в 57 % при размере сетки  $32 \times 32 \times 32$  и 60 % при размере сетки  $64 \times 64 \times 64$ .

В § 2.4 исследуется масштабируемость процедуры расчета кулоновского поля на массивно-параллельной системе IBM Blue Gene/P, состоящей из 2048 четырехядерных вычислительных узлов. Параграф начинается с описания архитектуры суперкомпьютера и режимов исполнения процессов.

В п. 2.4.1 проводится исследование масштабируемости в сильном смысле при увеличении числа используемых процессорных узлов от 128 до 2048. Аналогично формуле (14) эффективность в смысле сильной масштабируемости характеризуется ускорением

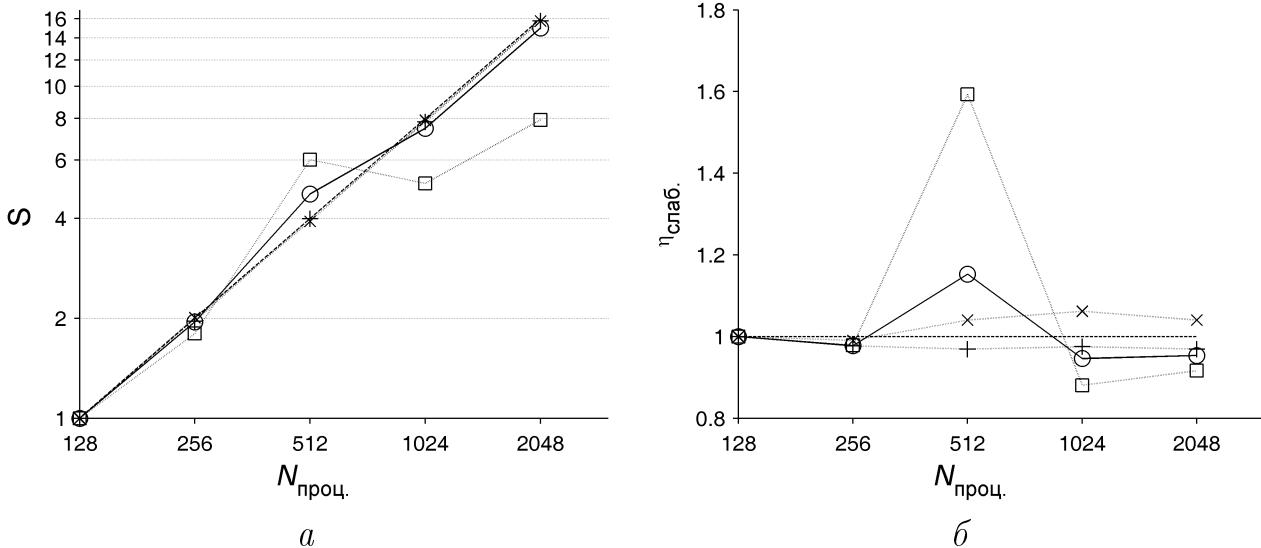
$$S = \frac{T(N_{\text{проц.}}^{\text{баз.}}, M)}{T(N_{\text{проц.}}, M)}. \quad (16)$$

Но теперь оно измеряется относительно времени  $T(N_{\text{проц.}}^{\text{баз.}}, M)$  решения задачи фиксированного размера с вычислительными затратами  $M$  на числе процессоров  $N_{\text{проц.}}^{\text{баз.}} = 128$ , которое принято за базовое. Здесь  $T(N_{\text{проц.}}, M)$  — время решения той же задачи на  $N_{\text{проц.}}$  процессоров.

Исследование проводилось на сетках  $512 \times 512 \times 8192$  ( $\approx 2,1 \cdot 10^9$  точек) и  $640 \times 640 \times 8192$  ( $\approx 3,4 \cdot 10^9$  точек). Это задачи предельного размера, помещающиеся в оперативную память минимально доступного блока из 128 процессорных узлов, а выбор числа точек по третьему направлению позволяет обеспечить равномерную загрузку всей системы. Эффективность процедуры близка к теоретической: на сетке  $640 \times 640 \times 8192$  с использованием 2048 процессорных узлов достигнуто 15-кратное ускорение (рис. 2, a). Задача решается за 0,56 с. Это сопоставимо с временем решения задачи на сетке  $64 \times 64 \times 64$ , использовавшейся в предыдущей работе, посвященной моделированию масс-спектрометра методом частиц в ячейке<sup>6</sup>, которое соста-

---

<sup>6</sup> Mitchell D.W. Realistic simulation of the ion cyclotron resonance mass spectrometer using a distributed



**Рис. 2.** Масштабируемость на системе Blue Gene/P параллельной процедуры решения уравнения Пуассона (○) и отдельных ее шагов — процедур БПФ (+), решения систем линейных уравнений с трехдиагональными матрицами (×), межпроцессных обменов (□) — при фиксированном размере задачи  $640 \times 640 \times 8192$  точек (а) и при фиксированной нагрузке на вычислительный узел с исходным размером сетки для раздела из 128 процессорных узлов в  $1408 \times 1408 \times 1408$  точек (б). Пунктирные линии  $S = N_{\text{проц.}}/128$  (а) и  $\eta_{\text{слаб.}} = 1$  (б) отвечают теоретической масштабируемости.

вило 0,64 с. Необходимо отметить, что число точек в этих сетках отличается в 12 800 раз.

В этом же *n. 2.4.1* вскрывается роль в появлении суперлинейного ускорения, которую играет трехмерная топология коммуникационной сети типа «точка-точка» системы Blue Gene/P. Показано, что если топологию трехмерной решетки не замыкать в трехмерный тор, то значение величины  $S$  на 512 процессорных узлах в зависимости от размера сетки и режима исполнения снижается до 3,72–3,99.

В *n. 2.4.2* исследуется масштабируемость на системе Blue Gene/P в слабом смысле. Снова, аналогично формуле (15) эта эффективность характеризуется величиной

$$\eta_{\text{слаб.}} = \frac{T(N_{\text{проц.}}^{\text{баз.}}, M^{\text{баз.}})}{T(N_{\text{проц.}}, \frac{N_{\text{проц.}}}{N_{\text{баз.}}^{\text{баз.}}} M^{\text{баз.}})}. \quad (17)$$

Здесь за  $T(N_{\text{проц.}}^{\text{баз.}}, M^{\text{баз.}})$  обозначено время решения базовой задачи с вычислительными затратами  $M^{\text{баз.}}$  на базовом числе процессоров  $N_{\text{проц.}}^{\text{баз.}} = 128$ ,  $T(N_{\text{проц.}}, \frac{N_{\text{проц.}}}{N_{\text{баз.}}^{\text{баз.}}} M^{\text{баз.}})$  — время решения задачи в  $\frac{N_{\text{проц.}}}{N_{\text{баз.}}^{\text{баз.}}}$  раз большей на  $N_{\text{проц.}}$  процессорах.

Максимальный размер сетки, на которой удалось решить уравнение Пуассона на принятых за базисные 128 процессорных узлах в каждом из режимов

исполнения, составил  $1408 \times 1408 \times 1408$ . Также рассматривалась сетка  $1280 \times 1280 \times 1280$ . В каждом из режимов выполнения были проведены расчеты на 128, 256, 512, 1024 и 2048 процессорных узлах. При этом число точек по третьему направлению составляло соответственно 1280, 2560, 5120, 10240, 20480 для базисной задачи на сетке  $1280 \times 1280 \times 1280$  и 1408, 2816, 5632, 11264 и 22528 для базисной задачи на сетке  $1408 \times 1408 \times 1408$ . Как и в случае сильной масштабируемости, эффективность оказалась близка к теоретической. Для сетки с исходным размером  $1280 \times 1280 \times 1280$  она достигла 0,98, а для сетки  $1408 \times 1408 \times 1408$  — 0,95 (рис. 2, б). Показано, что возрастание эффективности при переходе от 256 к 512 процессорным узлам связано с тем, что, начиная именно с этого размера, сеть межпроцессных коммуникаций замыкается в топологию трехмерного тора.

Здесь же в п. 2.4.2 определен и максимальный размер задач, которые можно решать на доступных вычислительных мощностях. На 2048 процессорных узлах задача на сетке  $1408 \times 1408 \times 22528$  ( $\approx 4,5 \cdot 10^{10}$  точек) решается за 8,64 с, на сетке  $2560 \times 2560 \times 8192$  ( $\approx 5,4 \cdot 10^{10}$  точек) — за 8,49 с. Кроме того, в режиме исполнения, использующем лишь половину доступных процессорных ядер, удалось за 15,6 с решить задачу на сетке  $1536 \times 1536 \times 24576$  ( $\approx 5,8 \cdot 10^{10}$  точек).

Выводы по второй главе приведены в § 2.5.

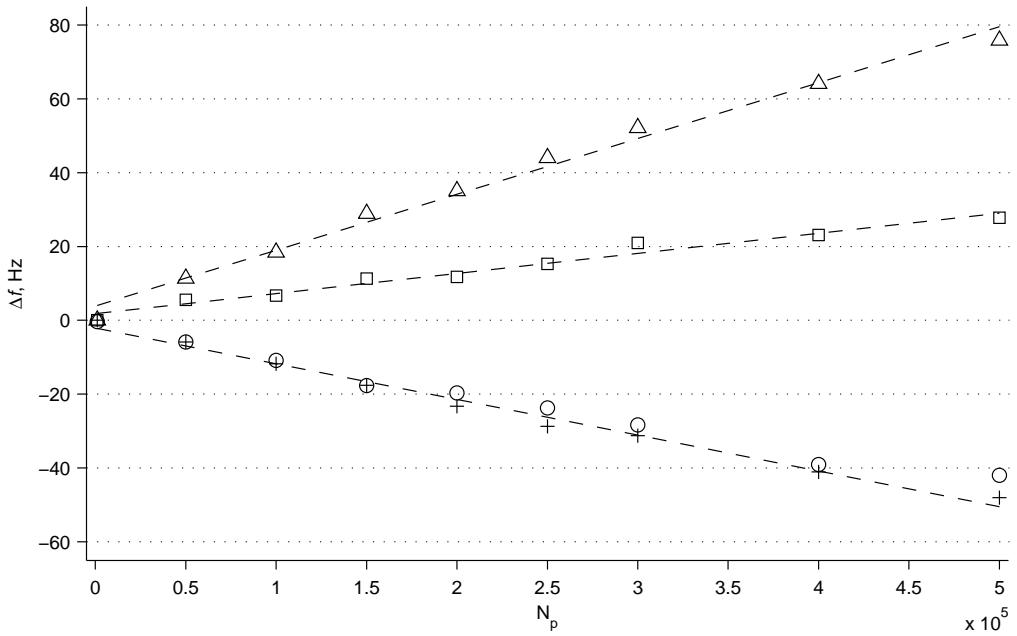
**В третьей главе** диссертации рассматриваются результаты численного моделирования поведения ионов в ловушках масс-спектрометров. Исследуется зависимость смещения и слияния спектральных пиков от числа частиц и близости измеряемых масс. Анализируется влияние напряженности магнитного поля на эволюцию ионных облаков. Проводится сравнение результатов моделирования с экспериментом. Моделируется поведение ионных облаков с учетом воздействия нейтрального газа.

Анализу влияния кулоновских сил на масс-спектр посвящен § 3.1. В п. 3.1.1 проводится исследование смещения спектральных пиков для ионов одной массы с единичным положительным зарядом ( $m/q = 100,0$ ) при изменении числа частиц от 1000 до 500 000. Чтобы исключить расфазировку облака за счет воздействия неоднородного поля ловушки, в качестве удерживающего был выбран идеальный квадрупольный потенциал. Начальные размер и форма облака во всех расчетах были одинаковыми. Потеря ионов на стенках ловушки имела место только в расчетах для 400 000 (0,1 %) и 500 000 (2,2 %) частиц. Плотность облака в возбужденном состоянии не превышала 0,7 предельной бриллюэновской.

Расчеты показывают (рис. 3), что сдвиг модифицированной циклотронной частоты  $f_+$  является отрицательным, а сдвиг магнетронной частоты  $f_-$  положительным, что качественно совпадает с экспериментальными наблюдениями<sup>7</sup>. Для невысоких плотностей сдвиг модифицированной циклотронной

---

<sup>7</sup>Dunbar R.C., Chen J.H., Hays J.D. Magnetron motion of ions in the cubical ICR cell // Int. J. Mass



**Рис. 3.** Наблюдаемое смещение модифицированной циклотронной  $f_+$  (+) и магнетронной  $f_-$  ( $\Delta$ ) частот и сумма этих сдвигов  $f_+ + f_-$  ( $\square$ ) как функция числа частиц. Оценка сдвига модифицированной циклотронной частоты ( $\circ$ ) выполнена по формуле из работы М. Горшкова.

частоты количественно согласуется с теоретическими оценками, выполненными М. Горшковым<sup>8</sup>. В отличие от теории<sup>9</sup>, предсказывающей нулевой сдвиг для суммы модифицированной циклотронной и магнетронной частот  $f_+ + f_-$ , показано, что он отличен от нуля и является положительным.

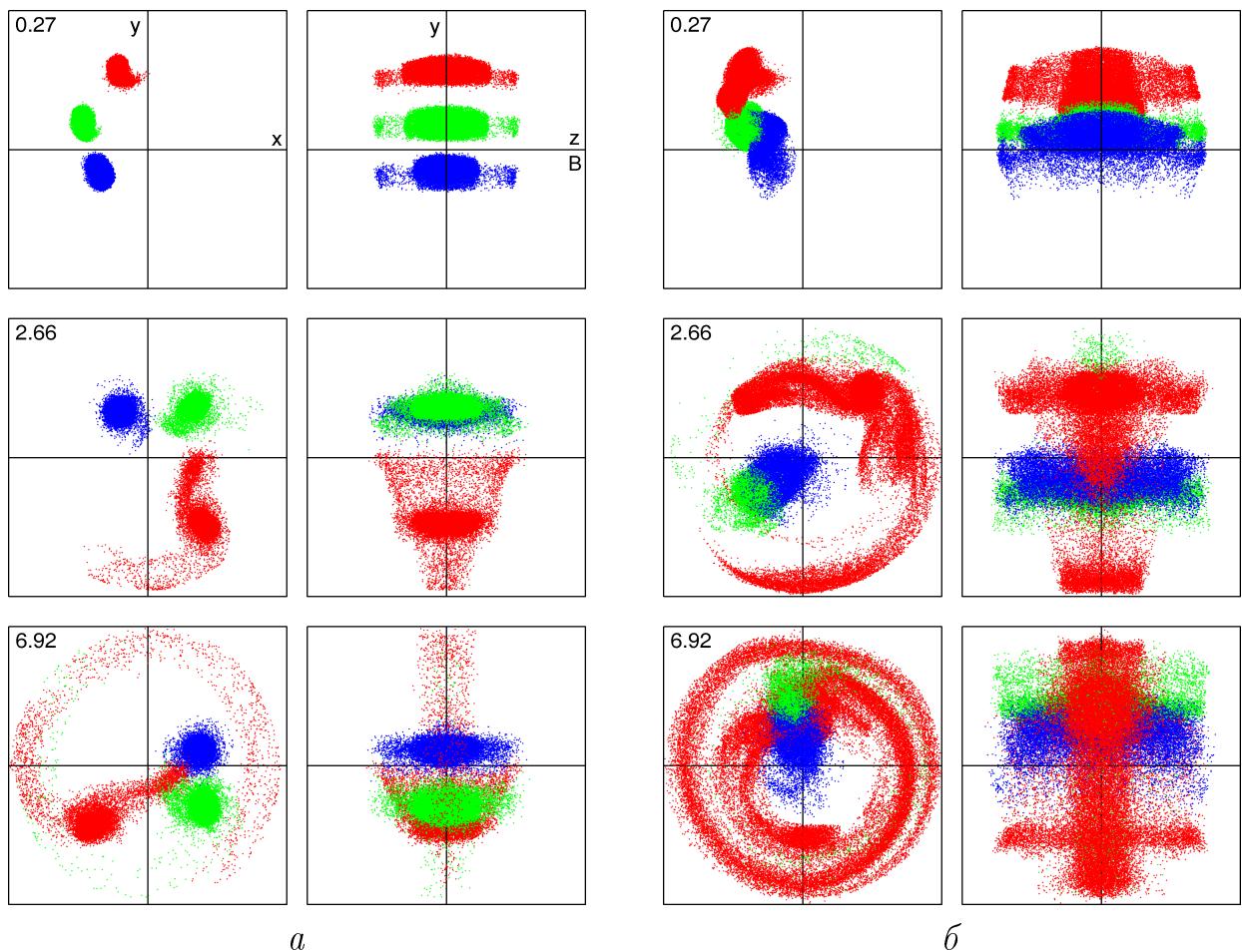
В расчетах, описанных в п. 3.1.2, получено явление разрыва коалесценции. Оно состоит в том, что ионные облака, состоящие из частиц с близкими массами и вращающиеся вследствие высокой плотности в одной фазе, в некоторый момент времени в процессе детектирования начинают вращаться независимо. Моделирование показывает, что это явление связано с постепенной потерей облаками ионов, находящихся вне зоны их соприкосновения. Построен график, выражающий зависимость момента времени, в который наступает разрыв коалесценции, от разности в массах и числа ионов.

Выполненный в п. 3.1.3 анализ динамики ионных облаков с тремя близкими массами показал, что при большом числе частиц возникает коалесценция

Spectrom. Ion Processes. — 1984. — Vol. 57, no. 1. — Pp. 39–56. — doi:10.1016/0168-1176(84)85064-8; Wong R.L., Amster I.J. Experimental evidence for space-charge effects between ions of the same mass-to-charge in Fourier-transform ion cyclotron resonance mass spectrometry // Int. J. Mass Spectrom. — 2007. — Vol. 265. — Pp. 99–105. — doi:10.1016/j.ijms.2007.01.014.

<sup>8</sup> Gorshkov M.V., A.G.Marshall, E.N.Nikolaev. Analysis and elimination of systematic errors originating from Coulomb mutual interaction and image charge in Fourier transform ion cyclotron resonance precise mass difference measurements // J. Am. Soc. Mass Spectrom. — 1993. — Vol. 4, no. 11. — Pp. 855–868. — doi:10.1016/1044-0305(93)87003-U.

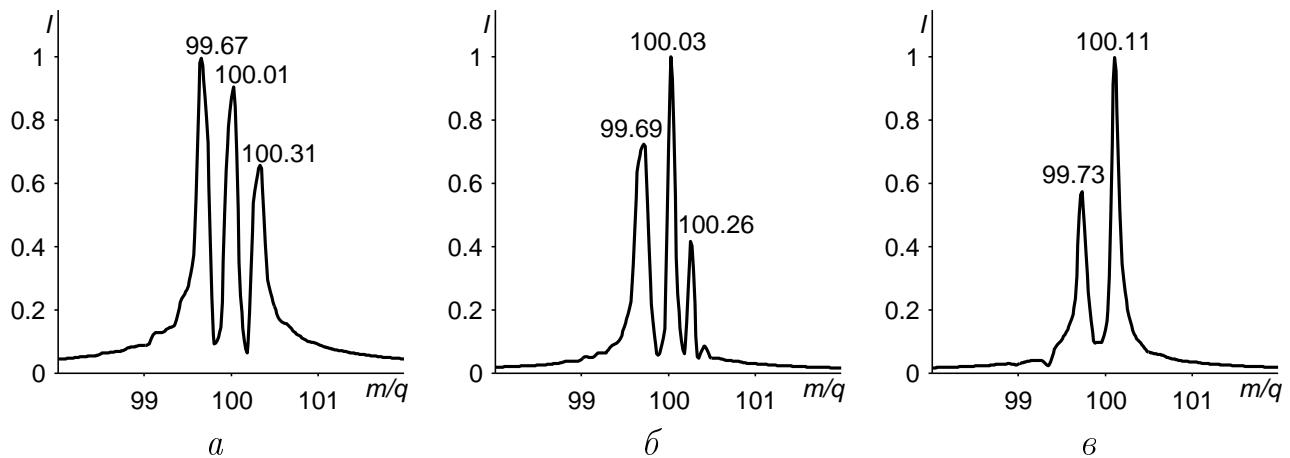
<sup>9</sup> F.G. Major, V.N. Gheorghe, G. Werth. Charged Particle Traps: Physics and Techniques of Charged Particle Field Confinement. — Springer, 2005. — Vol. 37 of Springer Series on Atomic, Optical, and Plasma Physics.



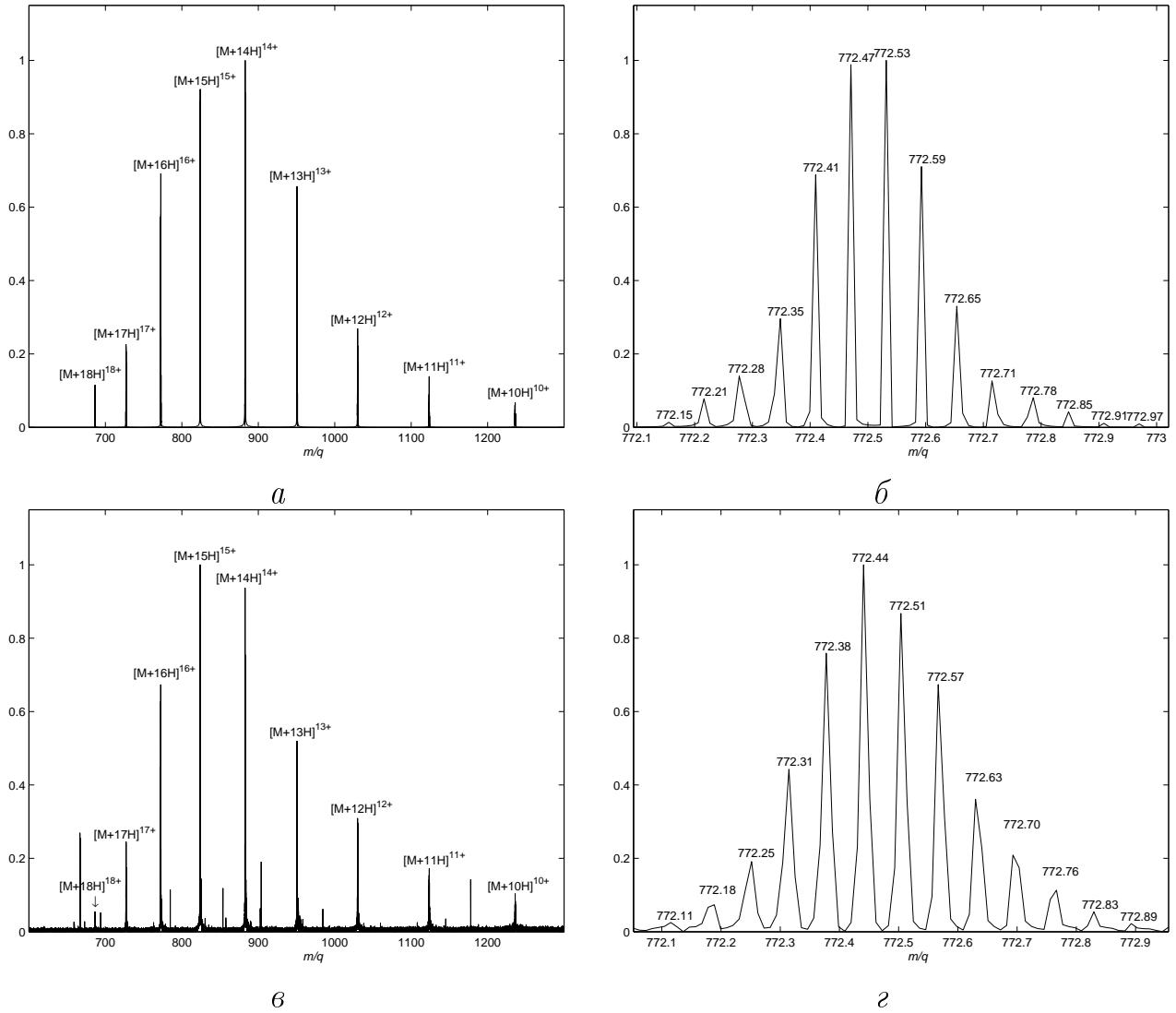
*a*

*b*

**Рис. 4.** Проекции позиций ионов на плоскости  $xy$  и  $zy$  в выбранные моменты времени в процессе детектирования для расчетов расчетов динамики облаков с близкими массами  $m/q = 99,7$  (красный),  $100,0$  (зеленый) и  $100,3$  (синий) при различном числе частиц:  $3 \times 25\,000$  ионов (*a*) и  $3 \times 75\,000$  (*b*). Время указано в миллисекундах.



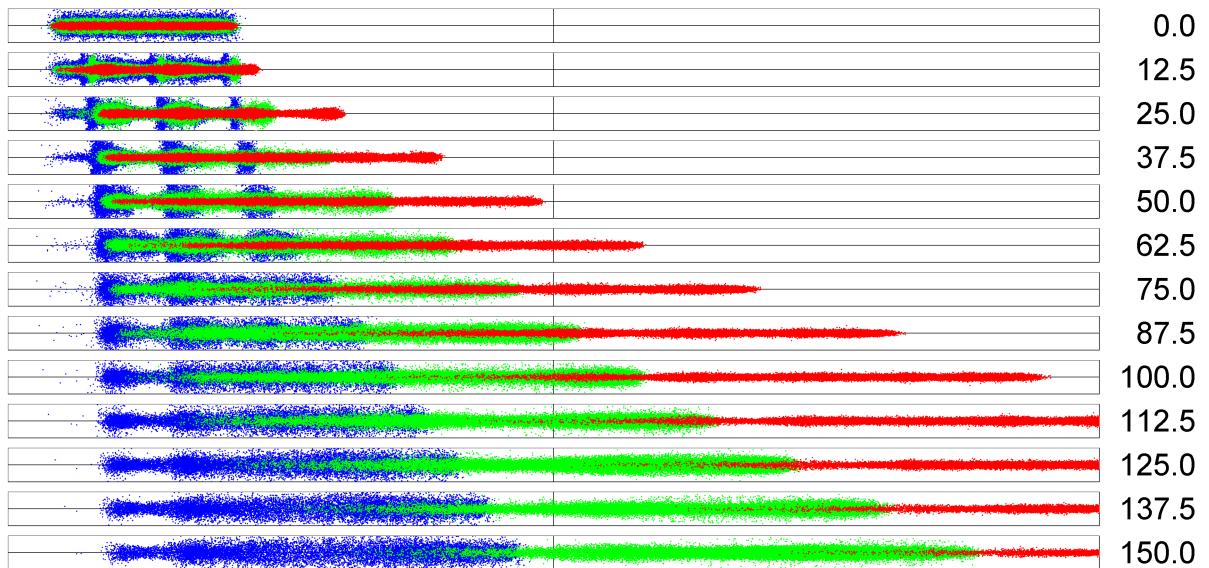
**Рис. 5.** Масс-спектры для расчетов динамики облаков с ионами близких масс  $m/q = 99,7$ ,  $100,0$  и  $100,3$  при различном числе частиц:  $3 \times 25\,000$  ионов (*a*),  $3 \times 50\,000$  (*b*) и  $3 \times 75\,000$  (*c*).



**Рис. 6.** Масс-спектры белка цитохром *c*, полученные в компьютерном моделировании (*a*, *б*) и реальном эксперименте (*в*, *г*); изотопный пакет, отвечающий зарядовому состоянию +16 (*б*, *г*).

между облаками с более тяжелыми ионами, и это приводит к слиянию соответствующих спектральных пиков. При этом облако с более легкими ионами постепенно претерпевает расфазировку, и интенсивность его спектрального пика снижается. При небольшом числе частиц коалесценции не происходит, и регистрируются все три спектральных пика (рис. 4 и 5).

В § 3.2 исследуется влияние напряженности магнитного поля на эволюцию ионного облака в ловушке масс-спектрометра реальной геометрии. Были проведены расчеты для трех характерных значений напряженности магнитного поля: 1 Тл, 5 Тл и 10 Тл. Во всех численных экспериментах использовалось одно и то же число частиц и одинаковое начальное распределение. Длительность возбуждения и амплитуда возбуждающего поля были подобраны таким образом, чтобы в каждом из трех расчетов ионы возбуждались на одинаковый радиус. Моделирование показывает, что время достижения



**Рис. 7.** Перенос ионов с массой  $m/q = 200,0$  (красный),  $500,0$  (зеленый) и  $1000,0$  (синий) с помощью транспортного квадруполя из накопительного квадруполя с сегментированными электродами. Время указано в микросекундах.

ионным облаком характерных стадий своего развития пропорционально величине магнитного поля. С возрастанием напряженности поля ионное облако не меняет свою структуру, но лишь замедляется его эволюция. Предлагается объяснение этого явления, основанное на том факте, что частота вращения ионов, совершающих аксиальные колебания с достаточно большой амплитудой, уменьшается на величину, обратно пропорциональную напряженности магнитного поля.

Сравнение результатов численного моделирования с реальным экспериментом проведено в § 3.3 на примере белка цитохром *c*. Этот протеин достаточно хорошо изучен, его формула и масса известны, и он используется в работах по исследованию характеристик приборов. Существует несколько видов белка цитохром *c*, но в данной работе расчеты проводились для протеина с молекулярной формулой  $C_{560}H_{874}N_{148}O_{156}S_4Fe$ . Интенсивности пиков, отвечающие различным зарядовым состояниям, были взяты из реального спектра, а теоретическое распределение масс (изотопный состав) для каждого зарядового состояния было сгенерировано по алгоритму, описанному в § 2.1. Ионно-циклotronный резонанс в численном эксперименте позволил воспроизвести все зарядовые состояния (рис. 6, *a*), имевшиеся в реальном масс-спектре (рис. 6, *в*). В обоих случаях разрешены изотопные пакеты (рис. 6, *б*, *г*). Данные расчеты показывают, что код позволяет проводить моделирование для сложных многомассовых составов с различными зарядовыми состояниями.

Моделированию движения ионов в линейных радиочастотных ловушках с учетом влияния нейтрального газа посвящен § 3.4. Параграф начинается с описания схемы и принципа работы квадрупольных ионных ловушек.

В устройствах этого типа для удержания ионов служит не магнитное поле, а переменное электрическое.

На первом этапе вычислительного эксперимента отслеживалась динамика ионов с тремя различными массами в накопительном квадруполе. К моменту достижения облаком равновесного состояния произошло пространственное разделение ионов по массам: ионы с меньшей массой оказались сосредоточены ближе к центру ловушки, более тяжелые ионы образовывали облака большего радиуса.

Далее было проведено моделирование переноса ионов с помощью транспортного квадруполя при трех различных схемах подачи напряжения на электроды накопительной ловушки. Показано, что использование накопительной ловушки с сегментированными электродами позволяет эффективно разделять ионы по массам в процессе транспортировки (рис. 7).

Таким образом, в данном параграфе было выполнено моделирование процессов накопления и переноса ионов в линейных квадруполях — стадий, непосредственно предшествующих измерению масс в ловушке масс-спектрометра FTICR. Это позволяет говорить о том, что представленный в диссертации код может быть использован для непосредственного моделирования полного цикла эксперимента в масс-спектрометрии в ионных ловушках разного типа и их комбинациях.

Выходы по третьей главе сделаны в § 3.5.

В **заключении** приведены основные результаты диссертации.

## Основные результаты работы

1. Предложены математические модели и численные алгоритмы для исследования поведения ионов в масс-спектрометрах, учитывающие силу со стороны кулоновского поля и влияние реальной геометрии ионных ловушек.
2. Создан комплекс параллельных программ для моделирования масс-спектрометров, позволяющий осуществлять сравнение результатов вычислительного и реального экспериментов. Показана масштабируемость кода и его отдельных процедур по числу частиц и точек сетки.
3. Проведено исследование влияния числа частиц, величины магнитного поля, состава ионных облаков на их динамику и спектры. Получено хорошее соответствие результатов компьютерного моделирования с данными эксперимента.
4. Выполнено моделирование пространственного разделения ионов по массам в реальной геометрии накопительной и транспортной линейных квадрупольных ловушек с учетом влияния нейтрального газа.

## ПУБЛИКАЦИИ АВТОРА ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

- [1] *Nikolaev E.N., Heeren R.M.A., Popov A.M., Pozdneev A.V., Chingin K.S.* Realistic modeling of ion cloud motion in a Fourier transform ion cyclotron resonance cell by use of a particle-in-cell approach // Rapid Commun. Mass Spectrom. — 2007. — Vol. 21, no. 22. — Pp. 3527–3546. — doi:10.1002/rcm.3234.
- [2] *Позднеев А.В.* Численное моделирование эволюции ионных облаков в масс-спектрометре методом частиц в ячейке // Вестн. Моск. Ун-та. Сер. 15. Вычисл. матем. и киберн. — 2008. — № 3. — С. 11–19.
- [3] *Позднеев А.В.* Моделирование движения частиц в масс-спектрометре с помощью параллельного кода частиц в ячейке // Матем. моделирование. — 2009. — Т. 21, № 6. — С. 103–109.
- [4] *Позднеев А.В.* Система моделирования масс-спектрометра на основе параллельного кода частиц в ячейке // Прогр. продукты и системы. — 2009. — № 2. — С. 173–175.
- [5] *Позднеев А.В.* Параллельный код частиц в ячейке для моделирования процессов в масс-спектрометре // Программные системы и инструменты: Тематический сборник факультета ВМиК МГУ им. М.В. Ломоносова / Под общ. ред. Л.Н. Королева. — 2007. — № 8. — С. 173–177.
- [6] *Nikolaev E.N., Popov A.M., Heeren R.M.A., Taban I.M., Sharova M.S., Chingin K.S., Pozdneev A.V.* Realistic modeling of ion motion in FT ICR cell // *Proceedings of the 5<sup>th</sup> North American FT-ICR MS Conference*. — Key West, Florida: April 17–20, 2005. — P. 27.
- [7] *Nikolaev E.N., Heeren R.M.A., Popov A.M., Pozdneev A.V., Chingin K.S.* Current progress in supercomputer modeling of ion clouds behavior in FT ICR cells // *54<sup>th</sup> ASMS Conference on Mass Spectrometry and Allied Topics*. — Seattle, Washington: May 28 – June 1, 2006. — MOF pm 04:20. <http://www.asms.org/asms06pdf/A060997.pdf>.
- [8] *Chingin K.S., Pozdneev A.V., Popov A.M., Heeren R.M.A., Nikolaev E.N.* Realistic supercomputer modeling of ion cloud dynamics in RF accumulation quadrupoles // *54<sup>th</sup> ASMS Conference on Mass Spectrometry and Allied Topics*. — Seattle, Washington: May 28 – June 1, 2006. — WP 305. <http://www.asms.org/asms06pdf/A062906.pdf>.

- [9] Popov A.M., Sharova M.S., Pozdneev A.V. 3D simulation of ion motion in FT ICR mass spectrometer // *Book of Abstracts of International Conference «Tikhonov and Contemporary Mathematics»*. — Moscow, Russia: M.: Изд-во ф-та ВМК МГУ; МАКС Пресс, June 19–25, 2006. — Pp. 98–99.
- [10] Nikolaev E., Heeren R., Popov A., Pozdneev A., Vladimirov G. The new possibilities in ion clouds dynamic simulation using supercomputers. Application to FTICR, Kingdon trap and accumulation quadrupole devices // *55<sup>th</sup> ASMS Conference on Mass Spectrometry and Allied Topics*. — Indianapolis, Indiana: June 3–7, 2007. — MP 069. <http://asms.org/aspfolder/ASMSAbstracts.html>.
- [11] Nikolaev E., Heeren R., Ryumin P., Avtomonov D., Boldin I., Pozdneev A. Particle in cell and capacitance methods for ion clouds dynamic simulation in FTICR and Kingdon trap // *Book of abstracts of the 8<sup>th</sup> European FTMS conference*. — Moscow, Russia: August 27 – September 1, 2007. — P. 53.
- [12] Автономов Д.М., Рюмин П.А., Болдин И.А., Позднеев А.В., Николаев Е.Н. Метод емкостей в моделировании движения ионных ансамблей в ионных ловушках и системах транспорта ионов с электродами произвольной формы // *Труды 2-й общероссийской конференции «Масс-спектрометрия и ее прикладные проблемы»*. — Москва, Россия: 3–8 сентября 2007. — ПС-15.
- [13] Pozdneev A.V., Popov A.M., Misharin A.S. Supercomputer simulations of interacting ion cloud dynamics in FT-ICR cells using novel parallel three-dimensional domain decomposition finite element particle-in-cell code // *56<sup>th</sup> ASMS Conference on Mass Spectrometry and Allied Topics*. — Denver, Colorado: June 1–5, 2008. — MP 147. <http://www.asms.org/asms08pdf/A080287.3250VER.1.pdf>.
- [14] Nikolaev E., Boldin I., Heeren R.M.A., Pozdneev A., Popov A., Ryumin P., Vladimirov G., Avtomonov D. Supercomputer modeling of ion cloud motion in mass spectrometers // *9<sup>th</sup> International Workshop on Non-Neutral Plasmas*. — New York City, New York: June 16–20, 2008. — P. 57. [http://www.apam.columbia.edu/NNP08/NNP08\\_Abstracts.pdf](http://www.apam.columbia.edu/NNP08/NNP08_Abstracts.pdf).
- [15] Позднеев А.В. Суперкомпьютерное моделирование масс-спектрометра на основе метода разделения области // *Труды Всероссийской научной конференции «Научный сервис в сети Интернет: решение больших задач»*. — Новороссийск, Россия: М.: Изд-во Московского университета, 22–27 сентября 2008. — С. 91–93. <http://agora.guru.ru/abrau2008/pdf/053.pdf>.