

Атомистическое моделирование: фундаментальные основы и практика на python

Образовательный курс для студентов 3-го года обучения ФЭФМ

Автор:

Антропов Александр Сергеевич

К.ф.-м.н.

М.н.с., старший преподаватель МФТИ

Актуальность темы курса

Атомистическое моделирование используется во многих областях науки:

- Материаловедение
 - Поиск новых перспективных материалов
 - Предсказание свойств материалов из первых принципов
- Биология и фармацевтика
 - Поиск лекарственных препаратов
 - Изучение кинетики биологических процессов в организме
- Энергетика
 - Эволюция материалов в ядерных реакторах
 - Предсказание свойств углеводородов

... и множество других приложений

Актуальность темы курса

В МФТИ непосредственно темами, охватываемыми в курсе, занимаются:



Лаборатория суперкомпьютерных методов
в физике конденсированного состояния



Лаборатория многомасштабного
моделирования в физике мягкой
материи



Лаборатория компьютерного
дизайна материалов

Текущее состояние преподавания темы:

Релевантные образовательные программы:

- ЛФИ - Вычислительная физика конденсированного состояния и живых систем
- ФЭФМ – Молекулярная физика

Наиболее близкие по смыслу курсы:

- Суперкомпьютерное атомистическое моделирование (3 курс ФЭФМ).
- Введение в вычислительную физику конденсированного состояния (2 курс ЛФИ)
- Молекулярная динамика: практикум (2 курс ЛФИ)

Некоторые недостатки существующих курсов:

– Методичка есть?

– Есть.

– Тогда сейчас докурю, и пойду сдавать.

(с) Баян про студентов МФТИ

1) Отсутствие методичек

- Самая цитируемая учебная литература – книга Френкеля-Смита на 600 страниц 1996 года без русского перевода в открытом доступе [*]
- По некоторым темам учебной литературы вообще нет
- Многие современные методы и темы опубликованы только в научных журналах и не адаптированы для более широкой аудитории на русском языке



[*] из РУПов соответствующих курсов

Некоторые недостатки существующих курсов:

2) Не очень эффективная практика

«Разбираться в пакетах»

- По каждому разделу нужно настраивать отдельную профессиональную программу
- По каждой теме нужно разбираться в синтаксисе и сложных настройках

```
Administrator: Anaconda Prompt
(base) c:\WINDOWS\system32>pip install xgboost
Collecting xgboost
  Using cached https://files.pythonhosted.org/packages/5e/49/b95c037b717b4ceadc76b6e25c27052d1611d5a2e832757945/xgboost-0.90-py2.py3-none-win_amd64.whl
Requirement already satisfied: scipy in d:\users\hp\anaconda3\lib\site-packages (from xgboost (1.1.0))
Requirement already satisfied: numpy in d:\users\hp\anaconda3\lib\site-packages (from xgboost (1.1.0))
distributed 1.21.8 requires msgpack, which is not installed.
Installing collected packages: xgboost
Successfully installed xgboost-0.90
You are using pip version 10.0.1, however version 19.2.3 is available.
You should consider upgrading via the 'python -m pip install --upgrade pip' command.
(base) c:\WINDOWS\system32>
```

«Писать код с нуля»

- Невозможно уйти дальше простейших задач
- Много программирования, мало физики

```
#include <iostream>

int main(){
    std::cout << "Hello, World!" << std::endl;
    return 0;
}
```

- Нет «задавальника», соответствующего программе
 - Нет простых наглядных примеров

Некоторые недостатки существующих курсов:

3) Устаревшая или несбалансированная программа

- Для удачного выбора научной траектории и успешного решения реальных научных задач важно быть знакомым с большинством современных направлений.
- Нужно давать все темы, а не только область научных интересов преподавателя.
- Материаловедение является одной из главных областей науки, в которой используется атомистическое моделирование. Было бы полезно включить в курс методы моделирования кристаллических материалов.
- Необходимо дать обзор методов машинного-обучения в материаловедении
- В связи с систематическим недопониманием этой темы, нужно отдельно уделить внимание расчету свободной энергии и свойств при конечной температуре

Цель и задачи проекта:

Целью проекта является увеличения количества знаний и практических навыков, которые получают студенты, выбирающие направление атомистического моделирования.

Задачи проекта.

- 1) Написание методического пособия по курсу
- 2) Создание связанных с ним интерактивных материалов в виде python-ноутбуков с наглядной визуализацией описываемых методов.

Методическое пособие:

2.0.3 Френкелевские пары

Пара Френкеля — точечный дефект кристалла, представляющий собой пару, состоящую из вакансии и междоузельного атома (иона).

Кинетика образования Френкелевских пар: появятся они могут в любом узле и для этого нужна энергия E_{fp} , а для аннигиляции они просто должны оказаться в одном узле и это произойдет точно. Барьеры, как вы помните, все равно сократятся. Тогда:

$$N c_{vac} c_{sia} \nu_0 = N \nu_0 \exp\left(\frac{-\Delta G_{f.p.}}{RT}\right)$$

ΔG_i — молярная энергия Гиббса образования собственных междоузлий. Поскольку число междоузлий и вакансий в одноатомном кристалле одинаково, $c_{sia} = c_{vac} = c_{f.p.}$:

$$c_{f.p.} = \exp\left(\frac{-\Delta G_i}{2RT}\right)$$

Здесь опущены геометрические множители, которые выражают количество возможных взаимных расположений вакансии и междоузлия перед аннигиляцией, об этом стоит помнить в реальных задачах.

2.0.4 Поверхность + Френкелевские пары

Уже для случая вакансий и междоузлий в открытой системе с поверхностью нельзя говорить об одной и той же равновесной концентрации во всем объеме! Кинетические уравнения должны включать рождение каждого типа дефектов на поверхности, рождение пар в объеме, аннигиляцию в объеме и аннигиляцию с поверхностью, а также диффузию.

Однако, если один дефект имеет энергию образования намного ниже другого, то можно пренебречь вторым, а также их парами.

2.0.5 Расчет энергии образования дефектов, статика

Расчет потенциальных энергий можно проводить из статики:

$$E_{sia/vac} = E_{bulk_{with_{def}}} - (E_{bulk_{ideal}} \pm E_{coh})$$

Как видите, надо всегда не забывать про хим-потенциал удаленных, добавленных атомов.

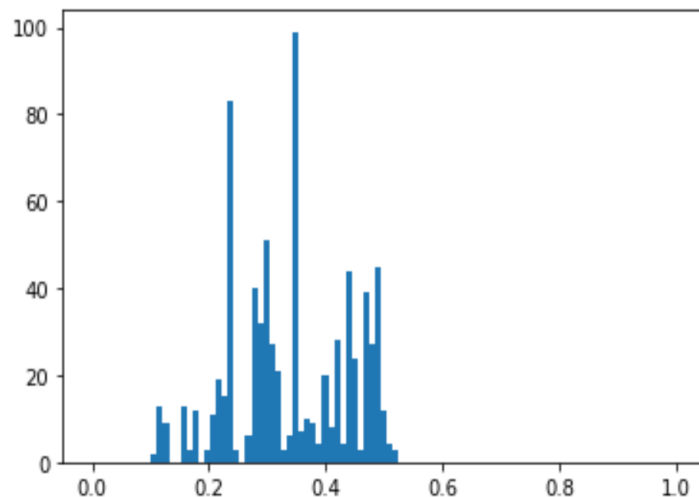
2.0.6 Расчет энергии образования дефектов, динамика

Мы помним, что энергия Гиббса зависит от температуры из-за энтропийного фактора. Однако сама

- Определения, формулы, пояснения, картинки
- Просто для восприятия
- Студенты могут повторить материал, подготовиться к экзамену.

Практические задания и материалы:

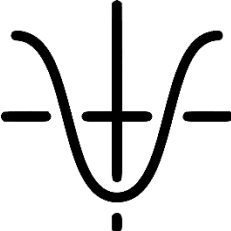
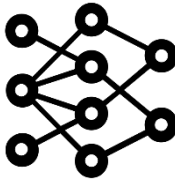
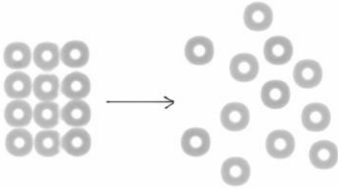
```
def show_PhDOS(freq):  
    import matplotlib.pyplot as plt  
    bins = np.linspace(0.0001, 1, 100)  
    plt.hist(freq.real, bins = bins)  
    plt.hist(freq.imag, bins = bins)  
    plt.show()  
  
def PhDOS(dyn_matrix):  
    """  
    Реализуйте расчет фонованого спектра системы по ее динамической матрице,  
    используя формулу (4) из методического пособия.  
    Вход - матрица 3N*3N. Выход - список частот.  
    Постройте фонованый спектр, используя готовую функцию show_PhDOS  
    """  
    ...  
    ...  
    ...
```



- Python ноутбуки – универсальная, простая, гибкая и наглядная среда для решения учебных задач
- Все учебные задачи в одном виде и в одной среде
- Большая часть пакетов для атомистического моделирования имеют python библиотеки
- Студентам не нужно разбираться во всех тонкостях, чтобы программа заработала
- Преподаватель сам выбирает, что дать в готовом виде, а что студент должен реализовать сам
- Визуализация на лету позволяет ускорить процесс и облегчить понимание
- Мало программирования, много физики
- Пошаговое изучение темы

Современные темы

В том числе:

<p>Методы поиска энергетического минимума. Релаксация. Алгоритмы минимизации. Поиск глобального минимума. Эволюционные алгоритмы. Поиск новых материалов.</p>	
<p>Методы создания потенциалов межатомного взаимодействия. Force-matching. Машинно-обученные потенциалы. Дескрипторы.</p>	
<p>Свободная энергия и энтропия в МД расчете. Метод термодинамического интегрирования по температуре, объему и параметру потенциала. Расчет фазовой диаграммы методом термодинамического интегрирования.</p>	
<p>Гармоническое приближение в кристаллах и молекулах. Система гармонических осцилляторов. Динамическая матрица. Спектр колебательных частот. Расчет свободной энергии по колебательному спектру. Квазигармоническое приближение.</p>	