

Отчет по проекту «Атомистическое моделирование: фундаментальные основы и практика на python»

Образовательный курс для студентов 3-го года обучения

Автор:

Антропов Александр Сергеевич

К.ф.-м.н.

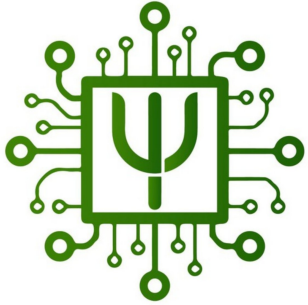
М.н.с., старший преподаватель МФТИ

Цель проекта

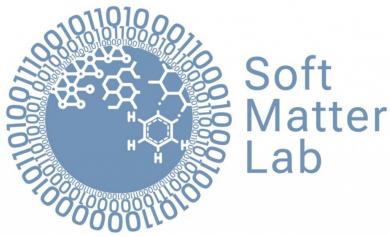
- Разработка и проведение образовательного курса по атомистическому моделированию,
- Фундаментальная теория + практика в интерактивной форме.
- Методическое пособие
- Python-ноутбуки, охватывающие современные подходы классического и квантового моделирования.
- Решить проблему отсутствия качественных методических материалов, сложности входа в профессиональные пакеты, а также недостатка связи с актуальными задачами науки и промышленности.

Актуальность темы курса

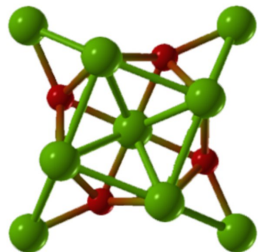
В МФТИ непосредственно темами, охватываемыми в курсе, занимаются:



Лаборатория суперкомпьютерных методов в физике конденсированного состояния



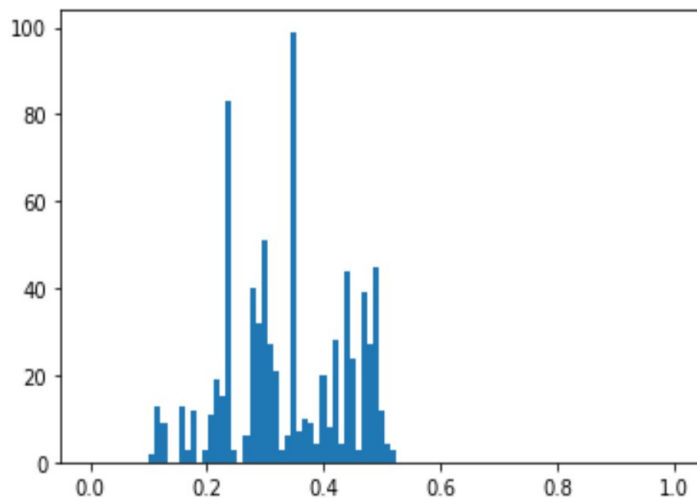
Лаборатория многомасштабного моделирования в физике мягкой материи



Лаборатория компьютерного дизайна материалов

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

Команда проекта

- **Антропов Александр Сергеевич.** Автор и преподаватель курса. Старший преподаватель кафедры физики высокотемпературных процессов ФЭФМ, выпускник ФМХФ МФТИ.
- Антропов А.С.: «Этот курс — то, чего мне не хватало самому в бакалавриате: простого, последовательного и современного введения в атомистическое моделирование, которое сейчас проникает в огромное количество физических исследований
- В курсе участвовали приглашенные лекторы — кандидаты наук и сотрудники других организаций: Кисленко Сергей Александрович, Николаев Владислав Сергеевич, Олейниченко Александр Витальевич, Стегайлов Владимир Владимирович, Фиданян Карен Саркисович, Янилкин Алексей Витальевич

Программа

Лекционная программа.

- Энергия как центральная величина статистической физики, статистические ансамбли NVE, NVT, NPT, гамильтониан системы ядер и электронов, приближение Борна-Опенгеймера, сложность решения многочастичного уравнения Шрёдингера, классические потенциалы как приближение квантового взаимодействия.
- Средние значения и эргодичность: термическое и временное усреднение, распределение Гиббса в классическом и квантовом случае, понятие эргодичности.
- Практика расчёта энергии: периодические граничные условия, обрезание и сглаживание потенциала, списки Верле, расчёт температуры и давления.
- Метод молекулярной динамики: уравнения движения, методы Эйлера и Верле, leapfrog-схема, симплектичность, устойчивость и сравнение алгоритмов.
- Статистические функции и RDF: расчёт и интерпретация радиальной функции распределения.
- Метод Монте-Карло: сэмплирование, алгоритм Метрополиса, детальный баланс, проблемы редких событий, примеры применения.
- Межатомные потенциалы: парные потенциалы Леннард-Джонса, силовые поля класса I (Amber, CHARMM, OPLS, GROMOS), потенциалы внедрённого атома (EAM), реакционные потенциалы (BOP, REBO, AIREBO, COMB, ReaxFF).
- Термостаты в МД: зачем нужны, виды (масштабирующие, стохастические, детерминированные), термостаты Берендсена, Андерсена, Ланжевена, Нозе-Гувера, гамильтониан расширенной системы.
- Метод Эвальда: разложение Кулоновских сумм, гауссово разбиение заряда, расчёт в фурье-пространстве и в реальном пространстве, формула полной энергии.
- Термодинамическое интегрирование: расчёт свободной энергии через параметр λ , усреднение производной энергии, численное интегрирование.
- Свойства твёрдых тел: идеальная решётка, точечные дефекты, границы зёрен, фононы, фазовая термодинамика, теплоёмкость, упругость, пластичность, разрушение, диффузия.
- Дефекты: вакансии, междоузлия, антисайты, замещения, энергия образования и миграции, колебательная энтропия, метод NEB, коэффициенты диффузии.

Практика.

- Модуль расчета потенциальной энергии системы с потенциалом Леннарда-Джонса
- Добавление периодических граничных условий
- Добавление обрезания потенциала
- Схема численного интегрирования (3 штуки)
- Сравнение ошибок схем интегрирования
- Расчет температуры
- Молекулярно-динамическая симуляция равновесной Л-Д жидкости. Расчет RDF.
- Алгоритм Метрополиса
- Моделирование равновесной RDF методом монте-Карло.
- Поиск равновесной постоянной решетки кристалла
- Схема интегрирования Ланжевена, Андерсена, Нозе-Гувера.
- Иллюстрация фазовых траекторий разных термостатов.
- Моделирование плавления кристалла. Расчет температуры плавления.

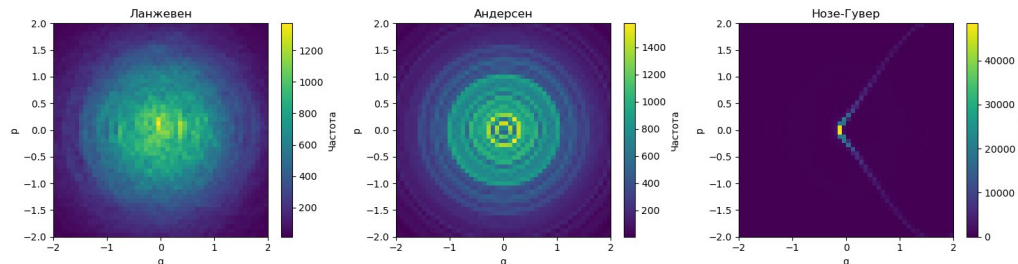
Основные результаты

- Разработаны методические материалы:
 - 1) Методическое пособие на 70 страниц
 - 2) Презентации по темам методического пособия
 - 3) Python ноутбуки с ячейками, соответствующими модулям практического задания.
- **23 студента**, среди которых 21 студент ФЭФМ и 2 студента ЛФИ прошли курс в полном объеме и сдали зачет. Справились с первым практическим заданием – 20 студентов, со вторым заданием – 6 студентов.

```
plt.imshow(h.T, origin='lower', aspect='auto',
           extent=[q_min, q_max, p_min, p_max], cmap='viridis')
plt.colorbar(label='Частота')
plt.title('Андерсен')
plt.xlabel('q'), plt.ylabel('p')

# Нозе-Гувер
plt.subplot(1, 3, 3)
h, xedges, yedges = np.histogram2d(traj_nh[:,0], traj_nh[:,1],
                                   bins=bins, range=[[q_min, q_max], [p_min, p_max]])
plt.imshow(h.T, origin='lower', aspect='auto',
           extent=[q_min, q_max, p_min, p_max], cmap='viridis')
plt.colorbar(label='Частота')
plt.title('Нозе-Гувер')
plt.xlabel('q'), plt.ylabel('p')

plt.tight_layout()
plt.show()
```



Федеральное государственное автономное образовательное
учреждение
высшего образования

«Московский физико-технический институт
(национальный исследовательский университет)»

Основы атомистического моделирования: теория и практика на python

Учебное пособие

Разработано при поддержке ФЦК МФТИ

Москва
МФТИ, Физтех
2025

Показатели проекта

- **Развитие.** Курс расширил образовательную базу ФЭФМ и ЛФИ в области материаловедения, квантовой химии и моделирования. Курс улучшил подготовку студентов к научной работе, обеспечив системный вводный курс, связанный с последующими научными проектами. Курс способствовал формированию ядра студентов, заинтересованных в темах атомистического моделирования.
- **Бюджет проекта:** 1 155 525 (один миллион сто пятьдесят пять тысяч пятьсот двадцать пять) рублей. Деньги в полном объеме получены от ФЦК МФТИ.
- **Упоминания ФЦК.** В раздаточных материалах и методичке было указано, что она разработана при поддержке ФЦК МФТИ. Кроме того, это было несколько раз сказано устно в качестве благодарности, в частности при разборе новых для образовательной программы ФЭФМ тем, таких как дальнодействующие потенциалы, термодинамическое интегрирование.



Вывод распределения Гиббса из уравнения детального баланса в алгоритме Метрополиса

Метод Метрополиса основан на выполнении уравнения **детального баланса**, которое обеспечивает соответствие между вероятностями переходов и стационарным распределением системы. Покажем, что в алгоритме Метрополиса результирующее распределение системы имеет вид распределения Гиббса.

Рассмотрим вероятности перехода системы из состояния x в состояние x' и обратного перехода:

$$P(x \rightarrow x') = T(x \rightarrow x')A(x \rightarrow x'),$$

$$P(x' \rightarrow x) = T(x' \rightarrow x)A(x' \rightarrow x).$$

