

Факультативный курс «Компьютерное моделирование физических процессов в программе LAMMPS» для студентов профиля «Физика и Информатика»

А. И. Чередниченко¹, А. М. Ерёмин², П. В. Захаров³

¹Алтайский государственный гуманитарно-педагогический университет
им. В.М. Шукшина, Бийск, Россия

²Бийский технологический институт (филиал) Алтайского государственного
технического университета им. И.И. Ползунова, Бийск, Россия

³Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
Санкт-Петербург, Россия

Аннотация. В статье представлено содержание и методические особенности факультативного курса «Компьютерное моделирование физических процессов в программе LAMMPS» для студентов профиля «Физика и Информатика» педагогических вузов. К задачам курса можно отнести формирование интереса к научному знанию у студентов, ознакомление с этапами научно-исследовательской деятельности. Показана возможность внедрения в учебный процесс профессионального программного обеспечения. Полученные знания могут применяться студентами как в рамках научной деятельности, так и при подготовке уроков и лабораторных работ по физике.

Ключевые слова: факультативный курс, компьютерное моделирование, молекулярная динамика, Lammmps, Ovito.

Компьютерное моделирование является на данном этапе развития науки широко применяемым способом познания сути различных процессов. Нельзя отрицать того, что без его помощи невозможно проводить исследования на атомном уровне.

Изучение компьютерного математического моделирования открывает широкие возможности для осознания связи информатики с математикой, физикой и другими науками – естественными и социальными [1, 2].

Факультативный курс (факультатив) – необязательный учебный курс или предмет, изучаемый студентами вузов и учащимися средних учебных

заведений по их желанию для углубления и расширения научно-теоретических знаний. По нашему мнению, именно такой формат следует применять для углубленного изучения компьютерного моделирования процессов молекулярной динамики.

Актуальность факультативного курса «Компьютерное моделирование физических процессов в программе LAMMPS» заключается в том, что позволяет студентам ознакомиться с приемами компьютерного моделирования физических процессов на молекулярном уровне. Полученные знания могут быть полезны в научных изысканиях студентов и при подготовке ими (в качестве учителей) наглядных материалов для уроков.

Нами разработаны учебно-методические материалы к факультативному курсу (программа курса, планы-конспекты занятий, модели физических процессов).

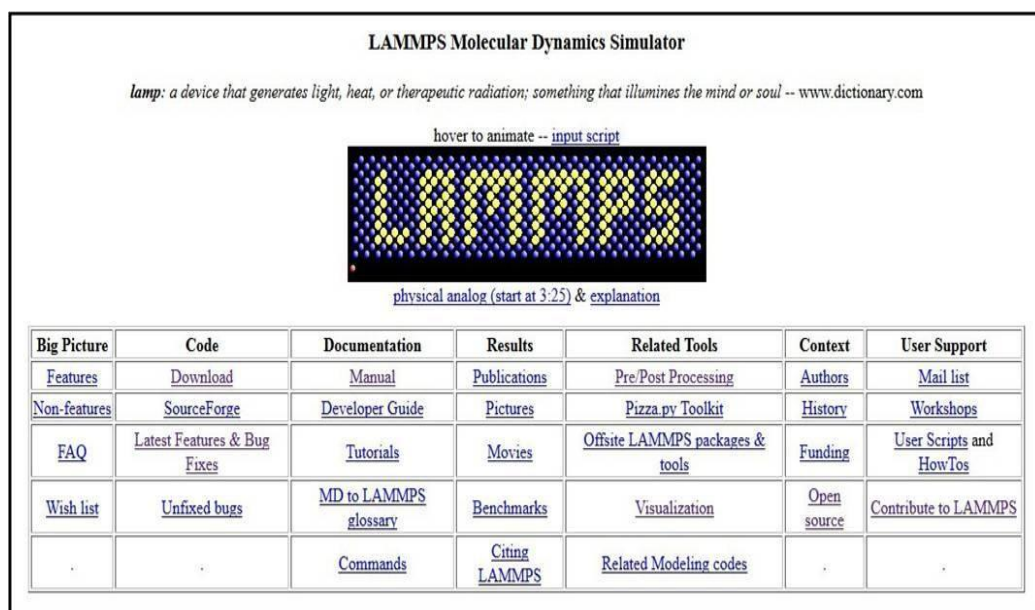
Факультативный курс содержит задачи из области молекулярной физики. Межпредметное взаимодействие показано в курсе через связь физики и информатики посредством компьютерного моделирования. Факультативный курс предлагается проводить на 1-4 курсе бакалавриата профиля «Физика и Информатика».

Программный пакет молекулярной динамики LAMMPS является бесплатным профессиональным программным обеспечением [3]. Разрабатывалось данное ПО для решения задач молекулярной динамики в моделях с большим количеством атомов. Для таких расчетов используются супер-ЭВМ с возможностью распараллеливания вычислений. Но для небольших моделей в несколько тысяч атомов LAMMPS можно устанавливать на персональные компьютеры (рис. 1).

Язык команд пакета LAMMPS можно отнести к декларативному программированию, так как в скрипте описывается физическая модель: система единиц измерения, начальное состояние модели и влияющие на неё условия (внутренние и внешние). Модель вещества может быть создана средствами LAMMPS, а также считана программой из внешнего файла. Также в скрипт

можно добавлять переменные, встроенные математические функции; имеется возможность встраивания кода, написанного на языке Python.

Рисунок 1. Официальный сайт LAMMPS



По нашему мнению, для визуализации вычислений, проводимых LAMMPS, наиболее удобной в использовании является программа OVITO [4]. Эта программа имеет большое количество модификаторов, с помощью которых можно получать данные с отдельных атомов, выделять плоскости содержащие дефекты; сохранять изображения и видео.

С помощью пакета LAMMPS нами создавались и исследовались модели кристаллических структур различных гранецентрированных кристаллов и их сплавов. Выполнялись расчеты по минимизации энергии, нахождению фононных спектров и других характеристик кристаллов. Были смоделированы и исследованы динамические дефекты кристаллической решетки – дискретные бримеры [5].

Учебно-тематический план проведения занятий приведен в таблице 1. К приведенному ниже плану разработаны планы-конспекты занятий.

Факультативный курс логически поделен на три части:

- изучение программирования в программе LAMMPS;
- моделирование вещества в газообразном состоянии;
- моделирование твердых тел.

Таблица 1. Учебно-тематический план

№ п/п	Название темы	Количество часов	Вид занятия
1	Компьютерное моделирование	2	Лекция, тестирование
2-3	LAMMPS: структура кода и основные команды	4	Лекция, практ. работа
4	Моделирование газов	2	Лекция, практ. работа
5	Броуновское движение в газах	2	Лекция, практ. работа
6-7	Распределение Максвелла	4	Лекция, практ. работа
8-9	Создание кристаллических структур	4	Лекция, практ. работа
10	Ионная кристаллическая решетка	2	Лекция, практ. работа
11-14	Дефекты кристаллической решетки	8	Лекция, практ. работа
15	Диффузия	2	Лекция, практ. работа
16	Расчет энергии связи	2	Лекция, практ. работа
17	Итоговое занятие	2	Тестирование, демонстрация проектов

Для курса были разработаны модели, описывающие физические процессы на молекулярном уровне: плавление, диффузия, движение частиц газа и др.

Стоит отметить, что кроме заданий по работе с LAMMPS, студентам предложены задания по написанию программ (на языках программирования, изучаемых в ВУЗе) для создания файлов с начальными данными кристаллических структур.

Занятия факультативного курса прошли апробацию в рамках дисциплины «Практикум по решению задач на ЭВМ». Данная дисциплина посвящена решению физических задач с помощью программирования. В ходе занятий в программе LAMMPS студенты описывали и запускали скрипты для

моделирования физических процессов на молекулярном уровне. Для занятий были выбраны модели: броуновское движение частиц и плавление ионной кристаллической решетки NaCl. Наглядное представление о процессах, происходящих при моделировании, было получено в программе OVITO. После моделирования проводилась обработка полученных данных в таблицах Excel: построен график хаотичного движения частицы для первой модели и график зависимостей потенциальной и кинетической энергий системы от её температуры.

Студенты прошли входное и выходное тестирование, содержащее вопросы по физике и компьютерному моделированию. Достоверность результатов апробации проверялась статистически – был использован непараметрический Т-критерий Уилкоксона. Критерий показал повышение уровня знаний студентов в области компьютерного моделирования после обучения с применением материалов факультативного курса. Можно говорить о том, что разработанные методические и дидактические материалы факультативного курса могут использоваться при обучении студентов ВУЗов.

Литература

1. Могилев А.В., Пак Н.И., Хеннер Е.К. Информатика: учебное пособие для пед. вузов. М.: Академия, 2012. 848 с.
2. Тупицына А.И. Методы компьютерного моделирования физических процессов и сложных систем: учебное пособие. СПб.: Университет ИТМО, 2014. 48 с.
3. LAMMPS Molecular Dynamics Simulator : официальный сайт. – URL: <http://lammps.sandia.gov/> (дата обращения: 10.05.2023).
4. OVITO Open Visualization Tool: официальный сайт. URL: <https://www.ovito.org/> (дата обращения: 10.05.2023).
5. Захаров П.В., Старостенков М.Д., Ерёмин А.М., Чередниченко А.И. Дискретные бризеры в кристалле CuAu // Письма о материалах. 2016. Т. 6. № 4 (24). С. 294-299.

Сведения об авторах:

Чередниченко Антон Иванович – преподаватель кафедры математики, физики, информатики Алтайского государственного гуманитарно-педагогического университета им. В.М. Шукшина, e-mail: anton.chered@mail.ru

Ерёмин Александр Михайлович – доцент кафедры естественно-научных дисциплин Бийского технологического института (филиал) Алтайского государственного технического университета им. И.И. Ползунова, кандидат физико-математических наук, доцент, e-mail: eam77@yandex.ru

Захаров Павел Васильевич – профессор кафедры физики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, доктор физико-математических наук, доцент, e-mail: zakharovpvl@rambler.ru