

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
имени М. В. Ломоносова

XXX Международная конференция
студентов, аспирантов и молодых ученых
по фундаментальным наукам



Международный
молодежный научный форум

“ЛОМОНОСОВ–2023”

Секция **“ФИЗИКА”**

Подсекция
“МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ”

Сборник тезисов докладов

МОСКВА
Физический факультет МГУ
2023

XXX Международная конференция студентов, аспирантов и молодых ученых по фундаментальным наукам «Ломоносов—2023». Секция «Физика». Сборник тезисов. — М. Физический факультет МГУ, 2023, 1052 с.

ISBN 978-5-8279-0255-3

Секция «Физика» включает следующие подсекции

1. Акустика
2. Астрофизика
3. Атомная и ядерная физика
4. Биофизика
5. Геофизика
6. Математика и Информатика
7. Математическое моделирование
8. Медицинская физика
9. Молекулярная физика
10. Нелинейная оптика
11. Оптика
12. Радиофизика
13. Сверхпроводящие и электронные свойства твердых тел
14. Твердотельная наноэлектроника
15. Теоретическая физика
16. Физика космоса
17. Физика магнитных явлений
18. Физика твердого тела
19. Школа МГУ «Фотонные и квантовые технологии. Цифровая медицина»:
 - Квантовые технологии
 - Фотонные технологии
 - Цифровая медицина

ISBN 978-5-8279-0255-3

© Физический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова, 2023 г.

МЕТОДЫ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ ДЛЯ ПОСТРОЕНИЯ ПОТЕНЦИАЛОВ
МЕЖАТОМНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

Хабибуллин Р.А., Мокшин А.В.

*Казанский (Приволжский) ФУ, Институт физики, Казань, Россия**E-mail: px@kpfu.ru*

С развитием методов машинного обучения за последние два десятка лет было сформулировано и решено множество совершенно новых задач в различных областях физики, химии и биологии. Кроме того, данные методы позволили по-новому взглянуть на такие естественнонаучные задачи, которые до этого долгое время считались нерешаемыми. Одной из таких задач является разработка новых потенциалов межатоминого/межмолекулярного взаимодействия $u(\mathbf{r})$. Как известно, межчастичные потенциалы являются одной из важнейших величин в статистической физике. Зная энергию взаимодействия частиц, мы можем записать гамильтониан, найти уравнение состояния для исследуемой системы или воспользоваться методами численного моделирования. Далее, на основе результатов моделирования возможно получить исчерпывающую информацию о структуре вещества, рассчитать его транспортные свойства (коэффициент самодиффузии, вязкость и т. д.), выполнить исследование микроскопической коллективной динамики частиц.

К настоящему времени предложен целый ряд подходов для решения задачи построения потенциалов. Все эти методы можно разделить на две группы. Так, методы первой группы предполагают восстановление потенциала из наблюдаемых на эксперименте характеристик вещества [1]. В качестве таких характеристик как правило используют структурные данные: статический структурный фактор $S(\mathbf{k})$, непосредственно измеряемый на экспериментах по неупругому рассеянию нейтронов или рентгеновских лучей, и функцию радиального распределения частиц $g(\mathbf{r})$. Основопологающая идея второй группы методов — конструирование потенциалов на основе результатов квантово-механических расчетов [2].

Таким образом, задача разработки потенциала межчастичного взаимодействия представляет большой интерес для исследователей. Она также непосредственно связана с другой актуальной задачей поиска перспективных материалов. Нами предложены три оригинальных подхода для восстановления потенциалов межчастичного взаимодействия из экспериментальных структурных данных: два из них основаны на эволюционных алгоритмах [3], а третий предполагает использование нейронных сетей. Эффективность методов продемонстрирована на примере следующих систем: леннард-джонсовский флюид, вода в жидкой фазе вблизи кривой плавления, жидкие щелочные металлы.

Работа выполнена при поддержке РФФ (проект № 19–12–00022). Теоретическая часть работы поддержана Фондом развития теоретической физики и математики «Базис».

Литература

1. Mokshin A.V., Khabibullin R.A. Is there a one-to-one correspondence between interparticle interactions and physical properties of liquid? // *Physica A*. 2022. Vol. 608. P. 128297.
2. Mueller T., Hernandez A., Wang C. Machine learning for interatomic potential models // *J. Chem. Phys.* 2020. Vol. 152. P. 050902.
3. Storn R., Price K. Differential Evolution – A Simple and Efficient Heuristic for global Optimization over Continuous Spaces // *J. Glob. Optim.* 1997. Vol. 11. P. 341–359.