**Создание силовых полей для моделирования нанотрубок WS2**

***Станиславчук-Абовский Д.Б.1, Домнин А.В.1***

*Студент, 3 курс бакалавриата*

*1Санкт-Петербургский государственный университет,*

*химический факультет, Санкт-Петербург, Россия*

*E-mail:* [*st101520@student.spbu.ru*](mailto:st101520@student.spbu.ru)

Перспективность изучения дисульфида вольфрама основывается на его физических свойствах, которые определяются диаметром трубок, типом свертки и структурой получаемых трубок [1]. Выявить численные значения физических свойств от полученной в результате эксперимента структуры возможно с помощью моделирования методом атомных потенциалов. Однако удовлетворительных параметров потенциалов, которые могли бы воспроизводить нанотрубки WS2, в литературе не встречается, по этой причине возникает потребность в их подгонке.

В данной работе предлагается усовершенствованная методика подгонки парных потенциалов взаимодействия для одностенных трубок WS2. Методика заложена в программу, полученную модернизацией пакета EZFF [2]. Суть работы программы заключается в минимизации погрешностей, вычисленных путем сравнения экспериментальных данных с рассчитанными значениями из функциональной зависимости параметров подгоняемых полей. Сперва подгонялись параметры силовых полей для объемных фаз (1T, 3R, 2H) и монослоя (1H), а затем среди полученных полей выбирались такие, которые корректно воспроизводят значения одностенных нанотрубок. В методику заложено использование эволюционного алгоритма NSGA-III. Такой выбор обусловлен возможностью алгоритма работать с большим числом подгоняемых параметров. В качестве расчетного модуля используется программа GULP [3]. Для точной калибровки параметров силового поля использовался градиентный спуск. В данной работе была совершена попытка автоматизации градиентной оптимизации путем сокращения числа оптимизируемых признаков и размера популяции данных. Распределение параметров силового поля, полученных после генетической оптимизации, семплировалось при помощи алгоритма Монте-Карло по схеме Марковской цепи. После чего при помощи Байесовского вывода была оценена статистическая значимость каждого параметра распределения. Основываясь на полученных результатах, можно предположить какие параметры можно замораживать при градиентной оптимизации, уменьшая таким образом размерность оптимизируемой выборки. В качестве альтернативного подхода использовался кластерный анализ данных при помощи самоорганизующейся карты Кохонена. Данный подход позволяет отобрать наилучших представителей из популяции, что значительно упрощает процесс фитинга параметров силовых полей.

Реализованная методика позволяет автоматизировать процесс подгонки параметров силового поля. В дальнейшем полученные результаты могут использоваться для создания простого интерфейса, который облегчит работу с программой пользователям, не имеющим опыта в программировании.

*Выражаю благодарность всему коллективу кафедры «Квантовой химии», в частности моему научному руководителю Бандуре Андрею Виловичу.*

**Литература**

1. Zibouche N., Kuc A., Heine T. From layers to nanotubes: Transition metal disulfides TMS2 // Eur Phys J B. – 2012. – Vol. 85, № 1. – P. 491
2. Krishnamoorthy A. et al. EZFF: Python library for multi-objective parameterization and uncertainty quantification of interatomic force fields for molecular dynamics // SoftwareX. – 2021. – Vol. 13. – P. 100663.
3. Gale J.D., Rohl A.L. The General Utility Lattice Program (GULP) // Mol Simul. – 2003. – Vol. 29, № 5. – P. 291–341.