

基于Bohrium科学计算云平台的计算材料学和计算化学课程实验设计

许真铭¹, 王一博², 刘振辉¹, 陈铎¹, 郑明波¹, 申来法^{1,*}

¹ 南京航空航天大学材料科学与技术学院, 南京 210016

² 北京深势科技有限公司, 北京 100089

摘要: Bohrium科学计算云平台具有易配置计算环境、易部署安装软件、易成员协作和计算资源充沛等优势, 可解决传统计算模拟课程教学中的软件安装、理论和实践割裂等问题, 为材料和化学计算模拟课程教学提供极大便利, 可显著提高课程教学效率。本文重点介绍Bohrium平台的特色以及教学优势, 并展示基于Bohrium平台的分子建模、分子动力学模拟等实验案例设计。

关键词: Bohrium计算平台; 计算模拟设计; 结构建模; 分子动力学模拟

中图分类号: G64; O6

Experimental Design of Computational Materials Science and Computational Chemistry Courses Based on the Bohrium Scientific Computing Cloud Platform

Zhenming Xu¹, Yibo Wang², Zhenhui Liu¹, Duo Chen¹, Mingbo Zheng¹, Laifa Shen^{1,*}

¹ College of Materials Science and Technology, Nanjing University of Aeronautics and Astronautics, Nanjing 210016, China.

² Beijing Shenshi Technology Co., Ltd., Beijing 100089, China.

Abstract: The Bohrium scientific computing cloud platform offers several advantages, including easily configurable computing environments, straightforward software installation, seamless member collaboration, and abundant computing resources. These features address common issues in traditional computational simulation courses, such as software installation difficulties and the disconnect between theory learning and practical application. The platform provides significant convenience for teaching computational simulations in materials science and chemistry, thereby greatly improving teaching efficiency. This paper highlights the features and educational advantages of the Bohrium platform, and demonstrates the design of experimental cases, including molecular modeling and molecular dynamics simulation based on the Bohrium platform.

Key Words: Bohrium computing platform; Computational simulation design; Structural modeling; Molecular dynamics simulation

1 引言

近年来, 计算模拟在材料、化学等领域的科学研究中发挥着越来越重要的作用, 在*Nature*和

收稿: 2024-03-27; 录用: 2024-05-28; 网络发表: 2024-09-14

*通讯作者, Email: lfshen@nuaa.edu.cn

基金资助: 教育部产学研合作协同育人项目(230807576291840); 江苏省学位与研究生教育教学改革课题(JGKT24_C006); 南京航空航天大学研究生教育教学改革研究项目(2024YJXGG25); 南京航空航天大学研究生教育教学改革专项(优质教学资源建设)项目(2024YJXGG-C08, 2024YJXGG-B11)

*Science*等世界顶级期刊杂志上发表的论文工作中皆有计算模拟的身影^[1,2]。因此,有必要将计算模拟作为一项技能对材料、化学等学科的本科生和研究生开展相关培训。计算模拟实验是计算材料学和计算化学等课程教学内容的非常重要实践环节,旨在通过实践操作来灵活运用理论知识,培养学生计算设计思维,为学生的后期可持续、高质量发展打下坚实的基础^[3,4]。目前,国内诸多高校已在所开设的计算材料学和计算化学等课程中讲授Gaussian和Materials Studio等商业化材料化学计算模拟软件的操作使用^[5,6],学生需要学习如何基于上述计算模拟软件在服务器上开展计算任务。上述软件的正确编译安装和调试,对于初学者来说是个极大的挑战。因此,这部分繁重工作往往落在课程教师身上,教师需要花费大量时间重复指导学生如何在服务器上部署相关计算环境和安装软件,同时还需要处理因为不同原因所导致的千奇百怪的软件安装使用问题。另一方面,传统计算模拟课程主要从计算方法理论知识和实验实践操作两大部分进行先后教学,往往需要待计算方法理论知识全部讲授完后,再进行计算模拟实践案例操作,此时学生已基本遗忘前期所学的理论知识^[7,8]。如何在计算模拟实验教学中强化理论方法知识与计算模拟操作实践的联系,进一步提升学生的计算模拟理论水平和软件操作技能,提高课程教学质量效果,是教学中面临的新挑战和必须解决的问题。最近,我们在本单位的计算材料学和计算化学等课程教学中引入Bohrium微尺度科学计算云平台,彻底解决传统计算模拟课程教学中的软件安装、理论和实践割裂等问题。Bohrium平台为计算模拟课程教学提供极大便利,显著提高课程教学效率。本文将重点介绍Bohrium平台的教学优势,以及如何基于Bohrium平台进行锂离子电池有机电解液分子动力学模拟实验设计。通过该实验案例的教学实践,学生不仅进一步掌握分子动力学模拟的基本流程和后处理分析方法,且巩固对分子动力学模拟基本方法原理以及关键模拟参数的理解。

2 Bohrium科学计算云平台

Bohrium是深势科技公司开发的协作式科学计算云平台,非常适合教学场景,其优势主要有以下三点:(1) 开箱即用计算环境和软件。Bohrium采用容器镜像技术,预装基础编译环境与公共库,课程老师只需将教学所需的计算环境和软件配置安装好并一键制作、分享镜像文件,学生就可以直接使用,避免繁琐的计算环境配置工作,投入更多时间在知识的学习中。Bohrium平台预装了LAMMPS、GROMACS等主流开源分子动力学模拟软件,CP2K、Quantum Espresso、ABACUS等常用开源第一性原理计算软件,及DecPMD-kit、DP-GEN等机器学习原子间势模型开发软件,并对软件的功能与易用性进行了深度优化。此外,学生可在不同设备上使用Bohrium平台,打开网页即可开始进行结构建模、参数设置、提交计算任务和后处理分析,无需担心操作系统类型和版本、软件依赖版本冲突等问题;(2) 充沛计算资源。Bohrium提供弹性计算资源,按实际使用量付费。同时,Bohrium提供若干两核心免费计算资源,供开发、调试和运行小规模计算任务使用。在进行非大规模计算时,完全没有任何开销。而在处理大规模计算任务时,Bohrium又可以按照任务需求保质保量的提供大量计算资源,非常适合计算模拟课程实验教学中服务器使用时间分布不均匀的场景;(3) 成员协作便利。Bohrium提供在同一账户、多名用户、多个项目的协作模式,可针对不同计算项目进行人员安排与费用管理。计算环境镜像与数据文件可轻松地在项目成员间自由共享,非常适合分布式课堂教学场景。此外,教师可直接登录学生节点帮助其进行操作和查错,学生可在Bohrium上直接提交作业等。

Bohrium提供图形化操作界面(图1),用户可以进行文件管理、结构建模、参数设置、运行代码开发、计算执行以及计算过程监控等操作,同时提供命令行工具,以供用户进行个性化配置计算环境和安装软件。此外,Bohrium上的Notebook (Bohrium Notebook)提供一站式编写和运行代码的交互式环境(图2),可以在同一个文档中编写可执行代码以及展示LaTeX公式、文本、图片、HTML、结构模型等内容,可以非常便捷地分享给他人进行协作。Bohrium Notebook的内核是Jupyter,其非常重要的概念是单元格(cell)模式,其markdown单元格用于记录叙述性文档用以展示相关理论知识点和计算公式等(图2),而其code单元格用于计算代码的开发和运行并同步显示计算结果,以实现科学计算及可

可视化模拟等功能。Bohrium Notebook中每个单元格可独立运行，使得代码调试变得容易。如某个单元格出错，只需重新运行该单元格代码，不需要重新自上而下地运行所有单元格代码，大幅提高代码开发效率。计算材料学和计算化学课程教学内容包含了大量理论知识介绍、数学公式推导、分子/晶体结构展示、函数图像以及计算代码等，Bohrium Notebook能轻松地将这些内容整合到同一文件中(ipynb格式)，比传统的PPT教学形式更加灵活和便捷。学生可以一键运行计算案例进行复现，浏览所有输入输出结果，把握计算整体计算过程。也可以逐行运行cell单元格，了解每一处操作细节，并通过调试参数，加深对代码的理解。目前，国外一些教师已经在材料计算模拟、量子化学计算等课程教学活动之中引入ipynb文档^[9,10]。



图1 基于Bohrium Notebook的一站式编写和运行代码的交互式环境

3.2.2 扩散系数

根据爱因斯坦关系 (Einstein Relation) 和非菲克定律 (Fick's Law), 我们可以得到扩散系数 D 和均方位移之间的关系:

$$D = \frac{1}{6} \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{d(MSD)}{dt}$$

公式

通过计算体系粒子在不同温度下的扩散系数, 线性拟合阿伦尼乌斯方程 $D = D_0 \cdot e^{-\frac{E_a}{RT}}$, 获得粒子扩散激活能。 D 为锂离子扩散系数, D_0 为绝对零度下的扩散系数, E_a 为激活能, R 是气体常数, T 为绝对温度 (单位为 K)。

需要注意的是, 这种方法基于扩散过程中粒子的运动是随机的、无记忆的假设。在某些情况下, 这种假设可能不成立, 比如有长程相互作用或有有序晶格中的粒子运动。在这种情况下, 我们需要采用其他方法来计算扩散系数。然而, 在许多实际应用中, 尤其是液体和气体中的粒子扩散, 使用 MSD 计算扩散系数是一种非常有效的方法。

计算代码

```
! echo 2 2 | gmx msd -f electrolyte_traj.tng -s electrolyte.tpr -type no -ngroup 1 -rmcomm 1
```

code

```
(-) GROMACS - gmx msd, 2021.7 (-):
```

GROMACS is written by:

Andrey Alekseenko	Emile Apol	Rossen Apostolov
Paul Bauer	Herman J.C. Berendsen	Par Bjelkmar
Christian Blau	Viacheslav Bolnykh	Kevin Boyd
Aldert van Buuren	Rudi van Drunen	Anton Feenstra
Gilles Gouaillardet	Alan Gray	Gerrit Groenhof
Anca Hamuraru	Vincent Hindriksen	M. Eric Irrgang
Aleksei Iupinov	Christoph Junghans	Joe Jordan
Dimitrios Karkoulis	Peter Kasson	Jiri Kraus
Carsten Kutzner	Per Larsson	Justin A. Lemkul
Viveca Lindahl	Magnus Lundborg	Erik Marklund
Pascal Merz	Pieter Meulenhoff	Teemu Murtola
Szilard Pall	Sander Pronk	Roland Schulz
Michael Shirts	Alexey Shvetsov	Alfons Sijbers

计算输出

图2 Bohrium Notebook中的可执行代码、LaTeX公式、文本、计算结果输出

3 分子结构建模

在Bohrium Notebook中进行分子结构建模时，需要使用两个python程序包，包括veloxchem量子化学计算软件包和py3Dmol分子结构显示软件包。使用import命令即可在Bohrium Notebook中导入veloxchem和py3Dmol包，具体操作如图3所示。我们以乙醇分子为例，详细地说明其建模过程步骤及其python程序代码。首先，基于Molecule类的read_smiles函数读取乙醇分子的SMILES语言字符串(“CO”)，并赋值给变量molecule。基于SMILES语言分子建模过程非常简洁，只需要提供对应分子的SMILES语言即可，不需要使用Gaussian View和Materials Studio等图形化软件进行一系列的分子建模操作。实际上，此步骤已经完成了乙醇分子结构建模，这也就是基于SMILES语言的分子结构建模的简洁之处，但是该模型仅在计算机内存中，并未直观地图形化展示出来。为方便后续继续调用和查看分子结构，我们使用write_xyz函数将其保存为xyz格式的结构文件(CH3OH.xyz)，同时使用get_xyz_string函数输出乙醇分子6个原子坐标及其对应的元素(图3)。此外，使用py3Dmol软件包可视化乙醇分子结构，在执行定义分子结构显示窗口、加载分子结构和定义球棍模型等操作后，即可输出乙醇分子结构球棍模型图(图3)。值得注意的是，该乙醇分子结构并非严格意义上的稳定构象，需要通过分子(动)力学或量子化学计算进一步优化其原子坐标位置。

```
[9]: import py3Dmol as p3d
import veloxchem as vlx
```

导入 python 软件包

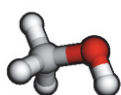
```
[15]: # smiles字符串转换成分子结构
molecule = vlx.Molecule.read_smiles('CO')
molecule.write_xyz('CH3OH.xyz')
xyz = molecule.get_xyz_string()
print(xyz)
# 定义分子结构显示窗口大小
viewer = p3d.view(viewergrid=(1,1), width=500, height=200, linked=False)
# 在模型窗口中加载分子结构
viewer.addModel(xyz, 'xyz', viewer=(0, 0))
# 定义球棍模型的棍粗细
viewer.setViewStyle({"style": "outline", "width": 0.05})
# 定义球棍模型的球半径
viewer.setStyle({"stick": {}, "sphere": {"scale": 0.25}})
viewer.show()

6
```

乙醇分子结构建模代码

C	0.930250000000	0.046050000000	-0.038370000000
O	2.345910000000	0.059730000000	-0.033620000000
H	0.570100000000	-0.731830000000	0.639370000000
H	0.570100000000	-0.143880000000	-1.052440000000
H	0.564460000000	1.018480000000	0.299580000000
H	2.641300000000	-0.815350000000	-0.337730000000

分子结构坐标输出



分子结构模型图像输出

图3 基于Bohrium Notebook的乙醇分子结构建模代码及其原子坐标和球棍模型输出

4 分子动力学模拟实验设计

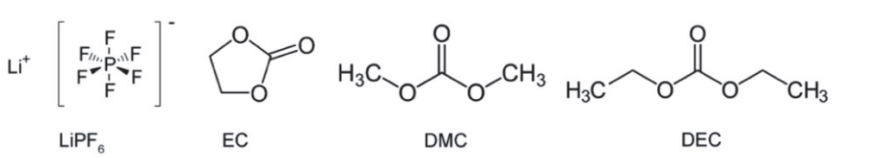
以锂离子电池有机电解液体系为例，我们基于Bohrium平台以Notebook形式设计一个分子动力学模拟计算实验。通过文献调研发现绝对大多数的锂离子电池有机电解液分子动力学模拟工作都是基于OPLS-AA力场开展的，其可以相对较好地描述电解液中的溶质和溶剂分子间和分子内的相互作用。目前，GROMACS分子动力学模拟软件已集成了OPLS-AA力场及其参数，可以直接调用，且Bohrium平台现已预安装了GROMACS软件，为我们使用其进行锂离子电池电解液分子动力学计算提供了极大方便。我们可以在同一个Bohrium Notebook中调用不同的结构建模软件(veloxchem、

packmol等)和分子动力学模拟软件(GROMACS), 实现溶液结构建模、结构优化和NPT+NVT系综分子动力学模拟等串行操作, 提升实验操作效率。

下面将详细地说明锂离子电池电解液分子动力学模拟的主要操作步骤(图4):

锂离子电池有机电解液体系分子动力学模拟

①离子/分子结构建模



使用packmol工具将溶质和溶剂分子按照比例pack到一个立方盒子, 即生成electrolyte.pdb文件

```
! packmol < mixture.inp
```

使用Gromacs中的editconf命令将electrolyte.pdb结构文件转换成electrolyte.gro格式文件

```
! gmx editconf -f electrolyte.pdb -box 5 5 5 -o electrolyte.gro
```

②分子(动)力学模拟计算

结构优化计算

```
! gmx grompp -f em.mdp -c electrolyte.gro -p run.top -o electrolyte -maxwarn 2
! gmx mdrun -s electrolyte.tpr -o electrolyte_traj.tng
```

npt系综MD模拟计算

```
! gmx grompp -f npt.mdp -c ../em/confout.gro -p run.top -o electrolyte -maxwarn 2
! gmx mdrun -s electrolyte.tpr -o electrolyte_traj.tng
```

nvt系综MD模拟计算

```
! gmx grompp -f nvt.mdp -c ../npt/confout.gro -p run.top -o electrolyte -maxwarn 2
! gmx mdrun -s electrolyte.tpr -o electrolyte_traj.tng
```

③结构和扩散性质计算

RDF of Li-(EC+DEC+DMC) pair

```
! gmx rdf -f electrolyte_traj.tng -s electrolyte.tpr -ref 2 -sel 4 5 6 -o rdf_Li_solvent.xvg
! dit xvg_compare -f rdf_Li_solvent.xvg -c 1,2,3 -csv rdf_Li_solvent.csv
```

RDF of Li-EC pair

```
! gmx rdf -f electrolyte_traj.tng -s electrolyte.tpr -ref 2 -sel 4 -o rdf_Li_EC.xvg
! dit xvg_compare -f rdf_Li_EC.xvg -c 1 -csv rdf_Li_EC.csv
```

Li离子周围(EC+DEC+DMC)分子数目(配位数)

```
! gmx rdf -f electrolyte_traj.tng -s electrolyte.tpr -ref 2 -sel 4 5 6 -cn CN_Li_solvent.xvg
! (dit xvg_compare -f CN_Li_solvent.xvg rdf_Li_solvent.xvg -c 1,2,3 1,2,3 -ymin 0 -ymax 12
-o CN_Li_solvent.png -csv CN_Li_solvent.csv)
```

Li离子MSD

```
! echo 2 2 | gmx msd -f electrolyte_traj.tng -s electrolyte.tpr -o Li_msd.xvg -ngroup 1 -rmcomm 1
! dit xvg_compare -f Li_msd.xvg -c 1 -o Li_MSD.png -csv Li_MSD.csv
```

图4 基于Bohrium Notebook的锂离子电池有机电解液结构建模、分子动力学模拟及其结构和扩散动力学性质分析计算代码

(1) 首先, 按照上一节方法分别对六氟磷酸锂(LiPF₆)溶质和碳酸乙烯酯(EC)、碳酸二甲酯(DMC)、碳酸二乙酯(DEC)等溶剂分子进行结构建模, 并保存对应的分子结构文件(xyz或pdb格式);

(2) 有机电解液离子/分子结构建模。mixture.inp为溶质和溶剂分子设置文件, 其定义电解液中Li离子、PF₆离子、EC、DMC和DEC分子的数目; 然后, 使用packmol软件读取mixture.inp文件进行电解液结构建模, 将溶质和溶剂分子按照预设数目组装到一个具有周期性边界条件的立方盒子里, 即生成电解液结构模型*.pdb文件; 然后, 使用GROMACS软件内置的gmx editconf命令对电解液结构模型进行扩胞和格式转换处理, 获得*.gro文件;

(3) 上一步所获得的电解液结构可能存在一些不合理的原子间距, 在进行分子动力学模拟计算之前需要进行基于分子力学的结构优化处理。*em.mdp*为结构优化参数设置文件, 其定义结构优化算法、收敛标准、边界条件和原子间相互作用处理方法等; 通过*gmx grompp*命令, 对带有原子坐标信息的*.gro文件、含力场信息的*run.top*文件和结构优化参数*em.mdp*文件进行处理, 得到用于后续结构优化计算的输入文件*.tpr; 通过*gmx mdrun*命令执行结构优化计算, 优化过程中的原子轨迹存储到*.tng文件, 优化后的电解液结构存储到*confout.gro*文件;

(4) 待上一步结构优化计算完成后, 通过*gmx grompp*命令读取优化后的电解液结构*confout.gro*文件、含有力场信息的*run.top*文件和基于NPT系综的分子动力学模拟设置参数*npt.mdp*文件, 生成*.tpr文件, 再通过*gmx mdrun*命令执行室温分子动力学模拟, 这里先使用NPT系综是为了确定常温常压条件下电解液的密度; 同理, 再接着进行基于NVT系综的分子动力学模拟。

(5) 最后, 基于室温分子动力学模拟(NVT系综)所获得的轨迹文件(*.tng), 进行结构分析和锂离子扩散性质分析计算; 通过*gmx rdf*命令计算锂离子和溶剂分子之间的径向分布函数、计算锂离子周围溶剂分子的平均配位数; 通过*gmx msd*命令计算锂离子均方位移, 从而获得锂离子扩散系数。

此外, 我们以文本、公式和图片等形式将分子动力学模拟基本原理、势函数、系综等理论知识集成到该Bohrium Notebook中, 让学生在计算操作之前高效地复习巩固所学的分子动力学理论核心知识点, 强化理论知识与计算模拟操作实践的联系, 双重提升学生的计算模拟理论水平和实践操作技能。

5 结语

本文重点介绍Bohrium科学计算云平台的特色以及其在材料化学计算模拟课程教学中的优势, 展示如何在计算材料学和计算化学等课程教学中运用Bohrium平台, 如何基于Bohrium科学计算云平台设计分子建模、分子动力学模拟等实验案例, 解决传统计算模拟课程教学中的软件安装、理论和实验实践割裂等问题, 提高课程教学效率。基于此Bohrium平台, 我们已经在本单位计算材料学、计算化学等课程中完成8课时的分子动力学模拟实验教学, 覆盖58名学生, 教学反馈优秀, 学生计算技能获得感高。除了本文所介绍的分子结构建模、分子动力学模拟实例之外, Bohrium平台亦可在蒙特卡洛模拟、量子化学计算(分子轨道、原子电荷、静电势和分子振动性质等)和第一性原理计算(能带结构、弹性常数、相变热力学和固体中粒子扩散动力学性质等)等诸多方面大显身手, 用以助力材料化学计算模拟课程的教学。笔者将持之不断地探索Bohrium平台在未来的材料化学计算模拟课程教学中的融合应用。

参 考 文 献

- [1] Merchant, A.; Batzner, S.; Schoenholz, S.S.; Aykol, M.; Cheon, G.; Cubuk, E. D. *Nature*. **2023**, *624*, 80.
- [2] Huang, B.; von Rudorff, G. F.; von Lilienfeld, O. A. *Science*. **2023**, *381*, 170.
- [3] 江建军, 缪灵, 张宝. 计算材料学——设计实践方法. 北京: 高等教育出版社, 2022.
- [4] 陈敏伯. 计算化学——从理论化学到分子模拟. 北京: 科学出版社, 2018.
- [5] 刘宇昂, 刘晓红, 李姝, 叶世海, 李国然, 言天英. 大学化学, **2023**, *38* (9), 227.
- [6] 许真铭, 刘庆生, 陈江安. 大学化学, **2024**, *39* (1), 332.
- [7] 苑世领, 张恒, 张冬菊. 分子模拟. 北京: 化学工业出版社, 2022.
- [8] 王溢磊, 李隽. 大学化学, **2018**, *33* (10), 25.
- [9] Lafuente, D.; Cohen, B.; Fiorini, G.; García, A. A.; Bringas, M.; Morzan, E.; Onna, D. *J. Chem. Educ.* **2021**, *98* (9), 2892.
- [10] Fransson, T.; Delcey, M. G.; Brumboiu, I. E.; Hodecker, M.; Li, X.; Rinkevicius, Z.; Dreuw, A.; Rhee, Y. H.; Norman, P. *J. Chem. Educ.* **2023**, *100* (4), 1664.