

Молекулярная динамика и метод Монте-Карло

Лекторы:

Иван Тертеров



Язык:

Русский

Трудоемкость:

4 з.е.

Форма контроля:

Экзамен

Образовательная программа:

Теоретическая и экспериментальная физика

8 семестр

Пререквизиты:

Статистическая физика

Теоретическая механика

Лекции (ак.час)*	Практические занятия (ак.час)	Лабораторные занятия (ак.час)
24		9
*1 академический час = 45 минутам		

Данный курс дает общее представление о физических основах и вычислительных методах молекулярного моделирования. В основном курс коснется методов классической Молекулярной Динамики и Монте-Карло, с примерами их применения для изучения материалов и биомолекулярных систем. Будут рассмотрены принципы построения полуэмпирических потенциалов и основные алгоритмы, используемые в повседневной практике исследований. Кроме того, в курсе обсуждаются и специальные подходы, позволяющие ускорять вычисления.

Содержание курса

8 семестр

Молекулярная динамика и метод Монте-Карло

Структура курса

Разделы	Лекции (ак. ч.)	Лаб.(ак.ч.)
1. Введение	2	
Введение, предмет и план курса. Место методов классической молекулярной динамики (МД) и метода Монте-Карло (МК) в иерархии пространственных и временных масштабов моделирования физических процессов. История развития молекулярного моделирования, первые применения к вопросам статистической механики (Метрополис, Алдер), первые результаты моделирования биологических молекул, развитие программных кодов и пакетов, Нобелевская премия по химии 2013 года за развитие методов моделирования.		
2. Основы классической молекулярной динамики.	2	
Принципы молекулярной динамики (МД). Виды интеграторов, интегратор Верле и связь с Гамильтоновой механикой, сохранение фазового объема и обратимости во времени. Параметры сходимости алгоритмов, нестабильность Ляпунова.		
3. Молекулярная динамика в разных ансамблях	3	3
Потребность в МД в различных ансамблях. Виды термостатов, распределение Больцмана и термостатирование в МД. Моделирование при постоянном давлении. Моделирование систем со связями. Анализ траекторий МД. Динамические, равновесные и неравновесные характеристики, получаемые из траектории. Примеры.		
4. Метод Монте-Карло	4	
Физические основы метода Монте-Карло (МК), соотношение детального баланса, структура алгоритма. Алгоритм Метрополиса, виды пробных шагов, сходимость алгоритма.		
5. МК в различных ансамблях	5	
Алгоритм МК в различных термодинамических ансамблях. Наблюдаемые, получаемые из моделирования, анализ получаемых результатов. Примеры.		
6. Методы вычисления сил и энергии	6	
Методы вычисления сил и энергии системы в МД и МК. Эмпирические потенциалы. Граничные условия, эффекты малого размера системы. Эффективные алгоритмы для вычисления потенциалов/сил, обрезка потенциалов, суммирование по Эвальду, списки ближайших соседей.		
7. Полуэмпирические классические потенциалы	7	
Виды полуэмпирических классических потенциалов (силовых полей) используемых для моделирования систем в жидкой фазе, биологических молекул, твердых тел. Методы учета поляризуемости в классических потенциалах. Методы получения параметров полуэмпирических потенциалов, связанные с этим сложности. Точность (адекватность) параметров, примеры реальных систем.		
8. Методы вычисления свободной энергии	8	
Примеры задач для которых необходимо вычислять свободную энергию. Free energy perturbation method, термодинамическое интегрирование, зонтичная выборка, неравновесные методы. Вычисления в большом каноническом ансамбле		
9. Стохастическая динамика	9	3
Стохастическая динамика, уравнение Ланжевена, диссипативная динамика частиц, броуновская динамика. Интеграторы для численного решения уравнений стохастической динамики, сходимость алгоритмов. Примеры применения.		
10. Методы ускорения сэмпинга	10	
Методы ускорения сэмпинга. Методы с множеством реплик. Гибридный метод Монте-Карло, Обобщенный Гибридный Монте-Карло, использование «Теневых» гамильтонианов.		
11. Архитектура кода пакетов моделирования	11	3

Архитектура кода пакетов для моделирования МД. Примеры пакетов (GROMACS, LAMMPS). Алгоритмы, используемые для ускорения расчетов МД в популярных кодах, использование графических процессоров, скейлинг производительности относительно размеров системы и времени моделирования. Методы анализа и визуализации результатов. Примеры актуальных задач и опубликованных результатов (разбор пары статей).		
--	--	--

Перечень лабораторных работ:

1. Радиус гирации полипептидов в водном растворе.
2. Размеры и форма агрегатов в коллоидной системе.
3. Получение константы связывания из свободной МД.

Рекомендуемые ресурсы

1. D. Frenkel, B. Smit, Understanding Molecular Simulation, 2nd Edition, Academic Press, New York, 2001.
2. Tuckerman, Mark. Statistical mechanics: theory and molecular simulation. Oxford university press, 2010.
3. Leimkuhler, Benedict, and Sebastian Reich. Simulating hamiltonian dynamics. No. 14. Cambridge university press, 2004.
4. M. Allen, D. Tildesley, Computer Simulation of Liquids, Clarendon Press, Oxford, 1987.
5. В. Замалин, Г. Норман, В. Филинов, Метод Монте-Карло в статистической термодинамике, Москва, Наука, 1977.
6. T. Schlick, Molecular Modeling and Simulation: An Interdisciplinary Guide, Springer 2nd ed. 2010
7. Berendsen, Herman. Simulating the physical world. Cambridge: Cambridge University Press, 2007.

Тип самостоятельных заданий

Примерный перечень вопросов/заданий к экзамену:

1. Алгоритм Верле и его варианты. Основные свойства алгоритма, краткосрочная и долгосрочная точность.
2. Метод построения численных схем при помощи оператора Лиувилля, модифицированный Гамильтониан, сохраняемый численной схемой.
3. Различные алгоритмы поддержания постоянной температуры при молекулярной динамике, сравнение, основные плюсы и минусы.
4. Методы поддержания постоянного давления в молекулярной динамике, основные подходы, изотермальный и изотермо-изобарический ансамбль.
5. Методы моделирования молекул с жесткими химическими связями: молекулярная динамика с голономными связями и схемы с различным масштабом шагов.
6. Методы расчета потенциалов и сил при молекулярном моделировании. Периодические граничные условия, короткодействующие и дальнедействующие силы.
7. Основы метода Монте-Карло, Марковские цепи, алгоритм Метрополиса.
8. Методы интегрирования движения стохастической динамики.
9. Методы вычисления свободной энергии. Потенциал средней силы, термодинамическое интегрирование.
10. Методы ускорения сэмплинга, множественные реплики, гибридные методы.