**Motivation**

При синтезе новых материалов (сплавов, наноструктур, белков, etc.) зачастую возникает необходимость в теоретическом определении их свойств, моделировании протекающих процессов, оптимизации параметров изготовления. Метод Молекулярной динамики и Монте-Карло моделирование позволяют определять свойства материалов, экспериментальное определение которых было бы очень трудозатратным или даже невозможным. Более того, они позволяют моделировать различные физические процессы, наблюдение которых было бы невозможно на эксперименте в силу малых временных и пространственных масштабов.

Synthesis of new materials (alloys, nanostructures, proteins, etc.) often requires theoretical determination of their properties, simulation of processes and optimization of manufacturing parameters. Molecular Dynamics and Monte Carlo modeling allow to determine the properties of materials whose experimental determination would be very laborious or even impossible. They also allow the modeling of various physical processes that would be inaccessible in an experiment due to small time and space scales.

**Expected course outcome**

Понимание основных методов моделирования атомных/молекулярных систем и задач, для решения которых эти методы могут быть применены. Границы применимости, достоинства и недостатки различных методов и того, как они соотносятся друг с другом. Понимание основной теории, лежащей в основе построения методов Молекулярной Динамики и Монте-Карло. Базовые навыки использования открытого кода для Молекулярно-динамических расчетов LAMMPS, умение составлять программы для простейшего моделирования методом Монте-Карло с критерием Метрополиса.

Understanding of the basic methods of modeling atomic/molecular systems and the problems to which these methods can be applied; limitations of applicability, advantages and disadvantages of different methods, and how they relate to each other. Knowledge of the basic theory behind the construction of Molecular dynamics and Monte Carlo methods. Basic skills in using the open source Molecular dynamics code LAMMPS, ability to write programs for simple Metropolis Monte Carlo simulations.

**Approximate course content:**

1. Введение. Основные положения статистической физики, эргодическая гипотеза, ансамбли (NVE, NVT, NPT, muVT). МД (Молекулярная Динамика) и МК (Монте-Карло) – как методы для семплирования ансамблей (вычисления средних величин).
2. МД. Интегрирование уравнений движения (в ансамбле NVE). Различные интеграторы. Особенность интегратора Верле. Симплектичность. Подход к построению симплектических интеграторов для сепарабельных гамильтонианов. Стабильность по Ляпунову. Выбор шага интегрирования
3. **Практика:** 1) сравнить результаты интегрирования уравнения движения маятника и системы из нескольких частиц различными интеграторами (прямой метод Эйлера, обратный, предиктор-корректор и Верле); 2) Моделирование NVE ансамбля для металла. Основные блоки моделирования: создание структуры, релаксация, инициализация начальных скоростей. Выбор шага интегрирования.
4. Моделирование NVT, NPT ансамблей: алгоритмы термостатирования, баростаты
5. **Практика:** Моделирование процесса осаждения атома на подложку. Создание полубесконечной структуры. Оценка времени релаксации импульса. Комбинирование NVE и NVT ансамблей.
6. Монте-Карло методы. Алгоритм Метрополиса, виды пробных шагов, сходимость алгоритма. Принцип детального баланса. Ускоренные методы сэмплирования координат. Гибридные МД/МК, VCSGC ансамбль.
7. **Практика:** реализация табличного МК алгоритма для моделирования распределения примеси в дефектах кристалла
8. Полуэмпирические потенциалы взаимодействий: Lenard-Jones, EAM. Технические детали: списки соседей, параллельные вычисления. ML потенциалы и атомные дескрипторы (SOAP)
9. Моделирование редких событий: hyperdynamics, parallel replica dynamics, temperature accelerated dynamics, и on-the-fly kinetic Monte Carlo
10. Комбинирование МД и первопринципных методов расчета (DFT): QM\MM алгоритмы
11. Вычисление свободной энергии: free energy perturbation method, термодинамическое интегрирование, зонтичная выборка, неравновесные методы.

1. Introduction. Basic of statistical physics, ergodic hypothesis, ensembles (NVE, NVT, NPT, muVT). MD (Molecular Dynamics) and MC (Monte Carlo) as methods for ensemble sampling (computing averages).

2. MD. Integration of equations of motion (in NVE ensemble). Various integrators. The specificity of the Verlet integrator. Symplecticity. Approach to the construction of symplectic integrators for separable Hamiltonians. Lyapunov stability. Choice of integration step

3. Practice: 1) compare the results of integration of the equation of motion of an oscillator and a system of several particles by different integrators (direct Euler method, inverse, predictor-corrector and Verlet); 2) Modeling of NVE ensemble for metal. Main blocks of the simulation: structure creation, relaxation, initial velocity initialization. Choice of integration step.

4. Modeling of NVT, NPT ensembles: thermostat algorithms, barostats

5. Practice: Modeling of atom deposition on a substrate. Simulation of a semi-infinite structure. Estimation of pulse relaxation time. Combining NVE and NVT ensembles.

6. Monte Carlo methods. Metropolis algorithm, types of trial steps, convergence of the algorithm. Principle of detailed balance. Accelerated coordinate sampling methods. Hybrid MD/MC, VCSGC ensemble

7. Practice: implementation of table MC algorithm for modeling solute distribution in crystal defects

8. Semi-empirical interaction potentials: Lenard-Jones, EAM. Technical details: neighbor lists, parallel computation. ML potentials and atomic descriptors (SOAP)

9. Modeling rare events: hyperdynamics, parallel replica dynamics, temperature accelerated dynamics, and on-the-fly kinetic Monte Carlo simulations

10. Combining MD and first-principles methods of computation (DFT): QM\MM algorithms

11. Free energy calculation: free energy perturbation method, thermodynamic integration, umbrella sampling, non-equilibrium methods.

**Practice and credit**

В курсе предполагается выполнение 2 заданий с использованием произвольного языка программирования (рекомендуется, но не обязательно - питон) и 2 заданий с использованием пакета для МД расчетов LAMMPS. Эти задания будут выполняться в юпитер блокнотах, где часть кода уже написана в виде примера. Код LAMMPS можно запускать через google colab, а можно и установить его локально на компьютере.

Для зачета необходимо выполнить все задания и сдать экзамен по теории.

Также, вместо экзамена и практических заданий можно выполнить курсовую работу, которая будет состоять из более трудоемкого МД моделирования. Выполненную работу нужно представить на семинаре.

The course assumes 2 assignments using an arbitrary programming language (Python is recommended, but not required) and 2 assignments using the LAMMPS package for MD calculations. These assignments will be done in jupiter notebooks, where part of the code is already written as an example. The LAMMPS code can be run through google colab, or you can install it locally on your computer.

All assignments must be completed and a theory exam must be passed for credit.

Also, instead of theory exams and practical assignments, you can do a coursework, which will consist of a more time-consuming MD simulation. The completed work should be presented at the seminar.

**Suggested reading**

General:

1. D. Frenkel, B. Smit, and M. A. Ratner, *Understanding Molecular Simulation: From Algorithms to Applications*, vol. 50. 1997. Accessed: Jul. 17, 2021. <http://physicstoday.scitation.org/doi/10.1063/1.881812>

2.Hinchliffe A. Molecular modelling for beginners. – John Wiley & Sons, 2003.

Hybrid MD&MC:

3. B. Sadigh, P. Erhart, A. Stukowski, A. Caro, E. Martinez, and L. Zepeda-Ruiz, “Scalable parallel Monte Carlo algorithm for atomistic simulations of precipitation in alloys,” *Phys. Rev. B*, vol. 85, no. 18, p. 184203, 2012, doi: [10.1103/PhysRevB.85.184203](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.85.184203).

Simulation of rare events:

4. D. Perez, B. P. Uberuaga, Y. Shim, J. G. Amar, and A. F. Voter, “Chapter 4 Accelerated Molecular Dynamics Methods: Introduction and Recent Developments,” in *Annual Reports in Computational Chemistry*, vol. 5, Elsevier, 2009, pp. 79–98. doi: [10.1016/S1574-1400(09)00504-0](https://doi.org/10.1016/S1574-1400%2809%2900504-0).