

Principali informazioni sull'insegnamento	
Denominazione dell'insegnamento	<b><i>Molecular Dynamics</i></b>
Corso di studio	<b><i>Physics (LM)</i></b>
Anno di corso	<b><i>2021/2022</i></b>
Crediti formativi universitari (CFU) / European Credit Transfer and Accumulation System (ECTS):	: 3
SSD	<b><i>Fis/07</i></b>
Lingua di erogazione	<b><i>Inglese</i></b>
Periodo di erogazione	<b><i>2° semestre</i></b>
Obbligo di frequenza	<b><i>Fortemente consigliata</i></b>

Docente	
Nome e cognome	Antonio Suma
Indirizzo mail	antonio.suma@uniba.it
Telefono	
Sede	<b><i>Dipartimento di Fisica</i></b>
Sede virtuale	
Ricevimento (giorni, orari e modalità)	Mercoledì, dalle 16:00 alle 18:00 previo appuntamento via e-mail

Syllabus	
<b>Obiettivi formativi</b>	Conoscenza approfondita delle principali tecniche di simulazione di dinamica molecolare e della possibilità di implementare direttamente queste tecniche numericamente.
<b>Prerequisiti</b>	<b><i>Dinamica Newtoniana, meccanica statistica</i></b>
<b>Contenuti di insegnamento (Programma)</b>	<p><b><i>Introduzione alle simulazioni di dinamica molecolare. Basi di dinamica Newtoniana e oscillatore armonico.</i></b></p> <p><b><i>Campionare l'ensemble microcanonico: Verlet, Leap-Frog, Velocity Verlet, equazione di Liouville e Trotter splitting.</i></b></p> <p><b><i>Campionare l'ensemble canonico: Monte Carlo, principio del bilancio e del bilancio dettagliato, regola di Metropolis, velocity rescaling, termostato di Berendsen, termostato di Andersen, termostato di Langevin, termostato di Nosé-Hoover, stochastic velocity rescaling.</i></b></p> <p><b><i>Limiti sulla scelta del timestep, timestep di integrazione multipli (RESPA), bond rigidi, shake.</i></b></p> <p><b><i>Campionare l'ensemble isobarico: barostati di Andersen e Monte Carlo, stimatore pressione.</i></b></p> <p><b><i>Condizioni al contorno periodiche, origine dei termini di forza, lista di primi vicini (metodi Verlet e linked cell list), unità ridotte.</i></b></p> <p><b><i>Esercitazioni sull'uso di BASH, AWK, Gnuplot e LAMMPS, per la scrittura di semplici codici di dinamica molecolare e Monte Carlo, di codici per effettuare analisi e per la visualizzazione di dati.</i></b></p>
<b>Testi di riferimento</b>	<p><b><i>D. Frenkel, B. Smit, Understanding Molecular Simulation, Academic Press, 2001.</i></b></p> <p><b><i>M. P. Allen, D. J. Tildesley, Computer Simulation of Liquids, OUP Oxford, 2017.</i></b></p> <p><b><i>M. E. Tuckermann, Statistical mechanics: theory and molecular simulation, Oxford Graduate Texts, 2010.</i></b></p>

<b>Note ai testi di riferimento</b>	
-------------------------------------	--

<b>Organizzazione della didattica</b>			
<b>Ore</b>			
Totali	Didattica frontale	Pratica (laboratorio, campo, esercitazione, altro)	Studio individuale
75	16	15	44
<b>CFU/ETCS</b>			
3	2	1	

<b>Metodi didattici</b>	<i>Didattica frontale, esercitazioni al computer</i>

<b>Risultati di apprendimento previsti</b>	
<b>Conoscenza e capacità di comprensione</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>○ Tecniche principali per simulare al computer sistemi fisici di varia natura che seguono le equazioni di Newton</li> <li>○ Saper distinguere quale tipo di tecnica va usata per campionare ciascun ensemble (microcanonico, canonico, isobarico)</li> </ul>
<b>Conoscenza e capacità di comprensione applicate</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>○ Sapere impostare in ambiente Linux programmi per simulare, analizzare e visualizzare semplici sistemi molecolari</li> </ul>
<b>Competenze trasversali</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• <i>Autonomia di giudizio</i> <ul style="list-style-type: none"> <li>○ Capire quali sono i tipici problemi dovuti alla modellizzazione e implementazione nei codici di sistemi di dinamica molecolare, incluso problemi nel campionamento e nella scelta della tecnica di campionamento</li> </ul> </li> <li>• <i>Abilità comunicative</i> <ul style="list-style-type: none"> <li>○ Competenze informatiche legate al processare dati e analizzarli</li> <li>○ Capacità di presentare usando un linguaggio scientifico appropriato gli argomenti considerati</li> </ul> </li> <li>• <i>Capacità di apprendere in modo autonomo</i> <ul style="list-style-type: none"> <li>○ Costruzione di programmi più complessi nell'ambito dell'ambiente Linux</li> <li>○ Capacità di approfondire autonomamente tecniche di simulazione più avanzate</li> </ul> </li> </ul>

<b>Valutazione</b>	
Modalità di verifica dell'apprendimento	<i>Presentazione orale che approfondisce un tema del corso. Il tema può essere una tecnica diversa da quelle presentate a lezione, un tipo di sistema molecolare, o i risultati trovati simulando questo sistema. Gli argomenti scelti possono essere tratti dai testi di riferimento o da articoli scientifici, e devono essere concordati con il docente.</i>
Criteri di valutazione	<ul style="list-style-type: none"> <li>• <i>Conoscenza e capacità di comprensione:</i> <ul style="list-style-type: none"> <li>○ Capacità di descrivere l'argomento affrontato</li> <li>○ Saper rispondere a domande di comprensione sulle tecniche/risultati presentati</li> </ul> </li> <li>• <i>Conoscenza e capacità di comprensione applicate:</i> <ul style="list-style-type: none"> <li>○ Capire come sono state implementate numericamente le tecniche utilizzate</li> </ul> </li> <li>• <i>Autonomia di giudizio:</i> <ul style="list-style-type: none"> <li>○ Avere un giudizio critico sugli argomenti presentati</li> </ul> </li> <li>• <i>Abilità comunicative:</i></li> </ul>

	<ul style="list-style-type: none"><li>○ Qualità dell'esposizione</li><li>○ Competenza nel lessico utilizzato</li><li>• Capacità di apprendere:<ul style="list-style-type: none"><li>○ Capire il contesto generale in cui è collato l'argomento</li></ul></li></ul>
Criteria di misurazione dell'apprendimento e di attribuzione del voto finale	<i>Il voto finale è attribuito in trentesimi</i>
<b>Altro</b>	