

Principali informazioni sull'insegnamento	
Denominazione dell'insegnamento	Molecular Dynamics
Corso di studio	Physics (LM)
Anno di corso	2022/2023
Crediti formativi universitari (CFU)	3
SSD	Fis/07
Lingua di erogazione	Inglese
Periodo di erogazione	1° semestre secondo anno (Dato da decidere previo accordo via email con gli interessati)
Obbligo di frequenza	Fortemente consigliata

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

Syllabus	
Obiettivi formativi	Conoscenza approfondita delle principali tecniche di simulazione di dinamica molecolare e della possibilità di implementare direttamente queste tecniche numericamente.
Prerequisiti	Dinamica Newtoniana, meccanica statistica
Contenuti di insegnamento (Programma)	<p>Introduzione alle simulazioni di dinamica molecolare. Basi di dinamica Newtoniana e oscillatore armonico.</p> <p>Campionare l'ensemble microcanonico: Verlet, Leap-Frog, Velocity Verlet, equazione di Liouville e Trotter splitting.</p> <p>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.</p> <p>Limiti sulla scelta del timestep, timestep di integrazione multipli (RESPA), bond rigidi, shake.</p> <p>Campionare l'ensemble isobarico: barostati di Andersen e Monte Carlo, stimatore pressione.</p> <p>Condizioni al contorno periodiche, origine dei termini di forza, lista di primi vicini (metodi Verlet e linked cell list), unità ridotte.</p> <p>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.</p>
Testi di riferimento	<p>D. Frenkel, B. Smit, Understanding Molecular Simulation, Academic Press, 2001.</p> <p>M. P. Allen, D. J. Tildesley, Computer Simulation of Liquids, OUP Oxford, 2017.</p> <p>M. E. Tuckermann, Statistical mechanics: theory and molecular simulation, Oxford Graduate Texts, 2010.</p>
Note ai testi di riferimento	

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

Metodi didattici	Didattica frontale, esercitazioni al computer

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

Valutazione	
Modalità di verifica dell'apprendimento	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.
Criteri di valutazione	<ul style="list-style-type: none"> • Conoscenza e capacità di comprensione <ul style="list-style-type: none"> ○ Capacità di descrivere l'argomento affrontato ○ Saper rispondere a domande di comprensione sulle tecniche/risultati presentati • Conoscenza e capacità di comprensione applicate <ul style="list-style-type: none"> ○ Capire come sono state implementate numericamente le tecniche utilizzate • Autonomia di giudizio <ul style="list-style-type: none"> ○ Avere un giudizio critico sugli argomenti presentati • Abilità comunicative <ul style="list-style-type: none"> ○ Qualità dell'esposizione ○ Competenza nel lessico utilizzato • Capacità di apprendere <ul style="list-style-type: none"> ○ Capire il contesto generale in cui è collato l'argomento
Criteri di misurazione dell'apprendimento e di attribuzione del voto finale	Il voto finale è attribuito in trentesimi
Altro	