

CORSO DI STUDIO *Physics (LM-17)*

ANNO ACCADEMICO 2023-2024

DENOMINAZIONE DELL'INSEGNAMENTO *Molecular Dynamics*

Principali informazioni sull'insegnamento	
Anno di corso	1°
Periodo di erogazione	2° semestre: Marzo - Maggio 2024
Crediti formativi universitari (CFU/ECTS):	3
SSD	FIS/07
Lingua di erogazione	Inglese
Modalità di frequenza	Raccomandata, non obbligatoria

Docente	
Nome e cognome	Antonio Suma
Indirizzo mail	antonio.suma@uniba.it
Telefono	0805443214
Sede	Dipartimento di Fisica, stanza n. 10 al piano terra
Sede virtuale	
Ricevimento	Di persona o online, da concordare via e-mail

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

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

Metodi didattici	Didattica frontale, esercitazioni al computer
-------------------------	---

Risultati di apprendimento previsti	
DD1 Conoscenza e capacità di comprensione	- Descrittore di Dublino 1: conoscenza e capacità di comprensione <ul style="list-style-type: none"> o Tecniche principali per simulare al computer sistemi fisici di varia natura che seguono le equazioni di Newton o Saper distinguere quale tipo di tecnica va usata per campionare ciascun ensemble (microcanonico, canonico, isobarico)
DD2 Conoscenza e capacità di comprensione applicate	- Descrittore di Dublino 2: capacità di applicare conoscenza e comprensione; <ul style="list-style-type: none"> o Sapere impostare in ambiente Linux programmi per simulare, analizzare e visualizzare semplici sistemi molecolari
DD3-5 Competenze trasversali	- Descrittore di Dublino 3: capacità critiche e di giudizio. <ul style="list-style-type: none"> • Autonomia di giudizio <ul style="list-style-type: none"> o 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

	<p>- Descrittore di Dublino 4: capacità di comunicare quanto si è appreso.</p> <ul style="list-style-type: none"> ● <i>Abilità comunicative</i> <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 <p>- Descrittore di Dublino 5: capacità di proseguire lo studio in modo autonomo nel corso della vita.</p> <ul style="list-style-type: none"> ● <i>Capacità di apprendere in modo autonomo</i> <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
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>Eventi rari e metodi di campionamento potenziato. Stima energia libera ed errori. Umbrella Sampling. Weighted histogram analysis method. Metadinamica.</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	
Materiali didattici	

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"> ● <i>Conoscenza e capacità di comprensione</i> <ul style="list-style-type: none"> ○ Capacità di descrivere l'argomento affrontato ○ Saper rispondere a domande di comprensione sulle tecniche/risultati presentati ● <i>Conoscenza e capacità di comprensione applicate</i> <ul style="list-style-type: none"> ○ Capire come sono state implementate numericamente le tecniche utilizzate ● <i>Autonomia di giudizio</i> <ul style="list-style-type: none"> ○ Avere un giudizio critico sugli argomenti presentati

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