

<b>Principali informazioni sull'insegnamento</b>	
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

<b>Docente</b>	
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

<b>Syllabus</b>	
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	

<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>	Didattica frontale, esercitazioni al computer

<b>Risultati di apprendimento previsti</b>	
Conoscenza e capacità di comprensione	<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>
Conoscenza e capacità di comprensione applicate	<ul style="list-style-type: none"><li>○ Sapere impostare in ambiente Linux programmi per simulare, analizzare e visualizzare semplici sistemi molecolari</li></ul>
Competenze trasversali	<ul style="list-style-type: none"><li>● <b>Autonomia di giudizio</b><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>● <b>Abilità comunicative</b><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>● <b>Capacità di apprendere in modo autonomo</b><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	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"><li>● <b>Conoscenza e capacità di comprensione</b><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>● <b>Conoscenza e capacità di comprensione applicate</b><ul style="list-style-type: none"><li>○ Capire come sono state implementate numericamente le tecniche utilizzate</li></ul></li><li>● <b>Autonomia di giudizio</b><ul style="list-style-type: none"><li>○ Avere un giudizio critico sugli argomenti presentati</li></ul></li><li>● <b>Abilità comunicative</b><ul style="list-style-type: none"><li>○ Qualità dell'esposizione</li><li>○ Competenza nel lessico utilizzato</li></ul></li><li>● <b>Capacità di apprendere</b><ul style="list-style-type: none"><li>○ Capire il contesto generale in cui è collato l'argomento</li></ul></li></ul>
Criteri di misurazione dell'apprendimento e di attribuzione del voto finale	Il voto finale è attribuito in trentesimi
<b>Altro</b>	