Università degli Studi di Roma "Tor Vergata"

Scheda Insegnamento

Mod. Scheda Insegnamento v. 1.1 -

Docente responsabile dell'insegnamento/attività formativa

Nome	VELIA
Cognome	MINICOZZI

Denominazione insegnamento/attività formativa

Italiano	TEORIA E TECNICHE COMPUTAZIONALI PER LA FISICA BIOLOGICA
Inglese	THEORY AND COMPUTATIONAL METHODS FOR BIOLOGICAL PHYSICS

Informazioni insegnamento/attività formativa

A.A.	2025/2026
CdS	FISICA (LM-17)
Codice	8067480
Canale	UNICO
CFU	6
Lingua	ITA

○ L ◉ LM ○ LM CU

Docente del modulo didattico (compilare solo per attività formative articolate in moduli)

Nome	
Cognome	

Denominazione modulo didattico (compilare solo per attività formative articolate in moduli)

Italiano	
Inglese	

Obiettivi formativi e risultati di apprendimento attesi

Italiano	OBIETTIVI FORMATIVI: Il corso si propone di fornire una preparazione avanzata nelle tecniche computazionali utilizzate per lo studio di Biomolecole. CONOSCENZA E CAPACITÀ DI COMPRENSIONE: Lo studente deve conoscere le principali tecniche computazionali ed essere in grado di scegliere quale utilizzare per ogni specifico sistema oggetto di indagine. CAPACITÀ DI APPLICARE CONOSCENZA E COMPRENSIONE: Lo studente deve essere in grado di identificare le variabili importanti e di elaborare un modello del problema biofisico oggetto dello studio. AUTONOMIA DI GIUDIZIO: Lo studente deve essere in grado di effettuare autonomamente simulazioni numeriche e analisi dati di simulazioni numeriche con le differenti tecniche apprese nel corso e di comprendere quale sia la migliore tecnica da utilizzare per il problema che deve affrontare. ABILITÀ COMUNICATIVE:
Inglese	LEARNING OUTCOMES: The course aims at providing advanced preparation in the computational techniques used for the study of Biomolecules. KNOWLEDGE AND UNDERSTANDING: The student should know the main computational techniques and be able to choose which one to use for each specific system being investigated. APPLYING KNOWLEDGE AND UNDERSTANDING: The student should be able to identify the important variables and develop a model of the biophysical problem under study. MAKING JUDGEMENTS: The student should be able to carry out numerical simulations and data analysis of numerical simulations with the different techniques learned in the course and to understand which is the best technique to use for the problem he/she has to face. COMMUNICATION SKILLS:

Prerequisiti

Italiano	Fisica classica, nozioni basilari di meccanica quantistica ed analisi matematica.
Inglese	Classical physics, basic notions of quantum mechanics and mathematical analysis.

Programma

Italiano	1) La nozione di ensemble: ensemble micro-canonico canonico e gran-canonico. Teorema di Liouville. Equivalenza tra ensembles. Il teorema di equipartizione dell'energia. Potenziali termodinamici. 2) Introduzione al modelling di biomolecole. Force-fields empirici. Sviluppo in multipoli. Polarizzazione. Forze di van der Waals. Modelli di acqua. Somme di Ewald. Reaction Field. 3) Algoritmi di minimizzazione 4) Dinamica molecolare classica. Equazioni di Hamilton e loro discretizzazione. Algoritmi di integrazione (Leap Frog, Velocity Verlet e Multiple Time Step).
Inglese	1) Ensembles: micro-canonical, canonical e grand-canonical. Liouville theorem. Ensembles equivalence. Equipartition theorem. Thermodynamical potentials. 2) Biomolecules modeling. Empirical force-fields empirici. Multipole expansion. Polarization. van der Waals forces. Water models. Ewald sums. Reaction Field. 3) Minimization algorithms. 4) Classical Molecular Dynamics. Hamilton equations and their discretisation. Integration algorithms: Leap Frog, Velocity Verlet. Multiple Time Step. 5) Constraints. Thermostats and barostats.

Modalità di valutazione

- [ ] Prova scritta
- [x] Prova orale
- [ ] Valutazione in itinere
- [ ] Valutazione di progetto
- [ ] Valutazione di tirocinio
- [ ] Prova pratica
- [ ] Prova di laboratorio

Descrizione delle modalità e dei criteri di verifica dell'apprendimento

Italiano	La prova di esame sarà valutata secondo i seguenti criteri: Non idoneo: importanti carenze e/o inaccuratezza nella conoscenza e comprensione degli argomenti; limitate capacità di analisi e sintesi, frequenti generalizzazioni. 18-20: conoscenza e comprensione degli argomenti appena sufficiente con possibili imperfezioni; capacità di analisi, sintesi e autonomia di giudizio sufficienti. 21-23: Conoscenza e comprensione degli argomenti routinaria; Capacità di analisi e sintesi corrette con argomentazione logica coerente. 24-26: Discreta conoscenza e comprensione degli argomenti; buone capacità di analisi e sintesi con argomentazioni espresse in modo rigoroso. 27-29: Conoscenza e comprensione degli argomenti completa; notevoli capacità di analisi, sintesi. Buona autonomia di giudizio. 30-30L: Ottimo livello di conoscenza e comprensione degli argomenti. Notevoli capacità di
Inglese	The examination will be evaluated according to the following criteria: Ineligible: imajor deficencies and/or inaccuracy in knowledge and understanding of topics; limited analytical and synthesis skills, frequent generalizations. 18-20: knowledge and understanding of topics only sufficient with possible imperfections; analytical skills, synthesis and judgment autonomy just sufficient. 21-23: knowledge and understanding of topics at a basic level; Correct analysis and synthesis skills with consistent logical reasoning. 24-26: Fair knowledge and understanding of the topics; good analytical and synthesis skills with rigorous arguments. 27-29: Ccomplete knowledge and understanding of the topics; remarkable ability of analysis, synthesis. Good autonomy of judgment. 30-30L: Excellent level of knowledge and understanding of topics. Remarkable ability of

Testi adottati

Italiano	K. Huang, Statistical mechanics. John Wiley & Sons. 1987. A.R. Leach, Molecular Modelling. Principles and Applications. 2nd Edition. Pearson Prentice Hall D. Frenkel & B. Smit, Understanding Molecular Simulations. Academic Press. 2002. M.P. Allen & D. J. Tildesley, Computer Simulations of Liquids, Oxford University Press. 2017.
Inglese	K. Huang, Statistical mechanics. John Wiley & Sons. 1987. A.R. Leach, Molecular Modelling. Principles and Applications. 2nd Edition. Pearson Prentice Hall D. Frenkel & B. Smit, Understanding Molecular Simulations. Academic Press. 2002. M.P. Allen & D. J. Tildesley, Computer Simulations of Liquids, Oxford University Press. 2017.

Bibliografia di riferimento

Italiano	K. Huang, Statistical mechanics. John Wiley & Sons. 1987. A.R. Leach, Molecular Modelling. Principles and Applications. 2nd Edition. Pearson Prentice Hall D. Frenkel & B. Smit, Understanding Molecular Simulations. Academic Press. 2002. M.P. Allen & D. J. Tildesley, Computer Simulations of Liquids, Oxford University Press. 2017.
Inglese	K. Huang, Statistical mechanics. John Wiley & Sons. 1987. A.R. Leach, Molecular Modelling. Principles and Applications. 2nd Edition. Pearson Prentice Hall D. Frenkel & B. Smit, Understanding Molecular Simulations. Academic Press. 2002. M.P. Allen & D. J. Tildesley, Computer Simulations of Liquids, Oxford University Press. 2017.

Modalità di svolgimento

- [x] Modalità in presenza
- [ ] Modalità a distanza

Descrizione della modalità di svolgimento e metodi didattici adottati

Italiano	Lezioni frontali ed esercizi
Inglese	Lectures and exercises

Modalità di frequenza

- (●) Frequenza facoltativa
- ( ) Frequenza obbligatoria

Descrizione della modalità di frequenza

Italiano	E' caldamente consigliata la frequenza del corso e lo svolgimento di eventuali esercizi assegnati
Inglese	Attendance at the course and any assigned exercises are strongly recommended.