

DENOMINAZIONE INSEGNAMENTO / ATTIVITÀ FORMATIVA

Laboratorio di Programmazione e Calcolo Numerico

INFORMAZIONI INSEGNAMENTO / ATTIVITÀ FORMATIVA

A.A.	2026-2027	CdS	FISICA (LM)
Codice	8067480-8068932	Canale	Unico
CFU	6	Lingua	Italiano

DOCENTE RESPONSABILE DELL'INSEGNAMENTO / ATTIVITÀ FORMATIVA

Velia Minicozzi

CODOCENTE

Modulo:

OBIETTIVI FORMATIVI E RISULTATI DI APPRENDIMENTO ATTESI

Italiano	OBIETTIVI FORMATIVI: Preparazione avanzata nelle tecniche computazionali utilizzate per lo studio delle biomolecole. CONOSCENZA E CAPACITÀ DI COMPrensIONE: Conoscenza delle principali tecniche computazionali per lo studio dei sistemi biomolecolari. Comprensione dei criteri di scelta della metodologia più appropriata per differenti sistemi oggetto di indagine. CAPACITÀ DI APPLICARE CONOSCENZA E COMPrensIONE: Capacità di identificare le variabili rilevanti e di elaborare modelli teorici e computazionali di problemi biofisici. AUTONOMIA DI GIUDIZIO: Capacità di effettuare autonomamente simulazioni numeriche e analisi dei dati derivanti dalle simulazioni. Capacità di valutare criticamente la metodologia più adatta al problema affrontato. ABILITÀ COMUNICATIVE: Capacità di collaborare alla risoluzione di problemi biofisici e di presentare in modo chiaro i risultati ottenuti. CAPACITÀ DI APPRENDIMENTO: Capacità di applicare le conoscenze acquisite allo studio di argomenti correlati e di approfondire autonomamente nuove metodologie nell'ambito della biofisica computazionale.
<i>English</i>	LEARNING OUTCOMES: Advanced preparation in the computational techniques used for the study of biomolecules. KNOWLEDGE AND UNDERSTANDING: Knowledge of the main computational techniques for the study of biomolecular systems. Understanding of the criteria for selecting the most appropriate methodology for different systems under investigation. APPLYING KNOWLEDGE AND UNDERSTANDING: Ability to identify the relevant variables and to develop theoretical and computational models of biophysical problems. MAKING JUDGEMENTS: Ability to autonomously perform numerical simulations and

	analyze simulation data. Ability to critically evaluate the most suitable methodology for a specific problem. COMMUNICATION SKILLS: Ability to collaborate in the solution of biophysical problems and to clearly present and discuss the obtained results. LEARNING SKILLS: Ability to apply the acquired knowledge to related topics and to independently deepen new methodologies in the field of computational biophysics.
--	---

PREREQUISITI

Italiano	Fisica classica, nozioni basilari di meccanica quantistica, meccanica statistica ed analisi matematica.
English	<i>Classical physics, basic notions of quantum mechanics, statistical mechanics and mathematical analysis.</i>

PROGRAMMA E CRONOPROGRAMMA

Italiano	Introduzione alla modellizzazione computazionale di biomolecole: Scale caratteristiche dei sistemi biologici. Ruolo delle simulazioni nella biofisica moderna. Relazione tra modelli computazionali ed esperimenti. Modelli, approssimazioni e fonti di errore. Dinamica molecolare e meccanica statistica: Meccanica statistica ed ensemble (NVE, NVT, NPT). Equazioni del moto e algoritmi di integrazione. Vincoli, algoritmi a tempi multipli, termostati e barostati. Interazioni molecolari e force fields: Force fields empirici e parametrizzazione. Interazioni bonded e non-bonded. Potenziale di Lennard-Jones ed elettrostatica. Condizioni periodiche al contorno e somme di Ewald. Limiti dei modelli classici. Sampling e proprietà osservabili: Tempi caratteristici e metastabilità. Funzioni di correlazione, coefficienti di diffusione e distribuzioni radiali. Introduzione al calcolo delle energie libere. Metodi Monte Carlo: Metodo Monte Carlo e detailed balance. Simulazioni Monte Carlo negli ensemble canonico e isobarico. Relazione tra Monte Carlo e dinamica molecolare. Tecniche avanzate di campionamento: Umbrella sampling. Teorema di Jarzynski. Replica Exchange Molecular Dynamics e Monte Carlo. Ensemble generalizzati. Metodi quantomeccanici e multiscala: Limiti dei modelli classici. Introduzione ai metodi QM/MM. Dinamica molecolare ab initio. Applicazioni a sistemi biomolecolari. Esercitazioni Le esercitazioni saranno dedicate alla preparazione, esecuzione e analisi di simulazioni di sistemi biomolecolari modello mediante dinamica molecolare e metodi Monte Carlo.
----------	--

	Verranno affrontati problemi relativi alla stabilità numerica delle simulazioni, al calcolo di proprietà strutturali e dinamiche, al campionamento conformazionale e al calcolo dell'energia libera.
English	Introduction to computational modelling of biomolecules: Characteristic time, energy and length scales in biological systems. Role of simulations in modern biophysics. Relationship between computational models and experiments. Models, approximations and sources of error. Molecular dynamics and statistical mechanics: Statistical mechanics and ensembles (NVE, NVT, NPT). Equations of motion and integration algorithms. Constraints, multiple time-step algorithms, thermostats and barostats. Molecular interactions and force fields: Empirical force fields and parametrization. Bonded and non-bonded interactions. Lennard-Jones potentials and electrostatics. Periodic boundary conditions and Ewald summation methods. Limitations of classical models. Sampling and observable properties: Characteristic times and metastability. Correlation functions, diffusion coefficients and radial distribution functions. Introduction to free-energy calculations. Monte Carlo methods: Monte Carlo methods and detailed balance. Monte Carlo simulations in the canonical and isobaric ensembles. Relationship between Monte Carlo and molecular dynamics. Advanced sampling techniques: Umbrella sampling. Jarzynski theorem. Replica Exchange Molecular Dynamics and Monte Carlo. Generalized ensembles. Quantum-mechanical and multiscale methods: Limitations of classical models. Introduction to QM/MM methods. Ab initio molecular dynamics. Applications to biomolecular systems. Practical sessions The practical sessions will focus on the setup, execution and analysis of simulations of model biomolecular systems using molecular dynamics and Monte Carlo methods. Topics will include numerical stability, calculation of structural and dynamical properties, conformational sampling and free-energy calculations.

TESTI ADOTTATI E 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.
English	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.
--	---

DESCRIZIONE DELLE MODALITÀ DI SVOLGIMENTO E METODI DIDATTICI ADOTTATI

☒ In presenza ☐ A distanza

Italiano	Lezioni in aula e lezioni ed esercitazioni al computer.
English	Lectures and computer-based practical sessions.

MODALITÀ DI FREQUENZA

☐ frequenza obbligatoria ☒ frequenza facoltativa

DESCRIZIONE DELLE MODALITÀ DI FREQUENZA

Italiano	Frequenza facoltativa ma fortemente consigliata.
English	Attending is optional but strongly recommended.

MODALITÀ DI VALUTAZIONE

☐ Prova scritta ☒ Prova orale ☐ Prova di laboratorio ☐ Prova pratica
☐ Valutazione in itinere ☐ Valutazione di progetto ☐ Valutazione di tirocinio

COMPOSIZIONE DELLA COMMISSIONE VALUTATRICE

Velia Minicozzi, Francesco Stellato

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 analisi e di sintesi e di autonomia di giudizio. Argomentazioni espresse in modo originale.
----------	--

<i>English</i>	The examination will be evaluated according to the following criteria: Ineligible: imajor deficiencies 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 analysis and synthesis and autonomy of judgment. Arguments expressed in an original way
-----------------------	---