



## UNIVERSITÀ DI PISA

---

### METODI DI SIMULAZIONE

#### ALESSANDRO TANI

Anno accademico	2018/19
CdS	CHIMICA
Codice	200CC
CFU	3

Moduli	Settore/i	Tipo	Ore	Docente/i
METODI DI SIMULAZIONE	CHIM/02	LEZIONI	24	ALESSANDRO TANI

#### Obiettivi di apprendimento

##### *Conoscenze*

Lo studente che completa il corso (e partecipa alle esercitazioni del laboratorio computazionale) ottiene una conoscenza dei metodi di simulazione adeguata per fare un uso consapevole dei programmi di simulazione disponibili. Sarà anche capace di scrivere, compilare e controllare programmi originali di analisi dei dati forniti dalla simulazione.

##### *Modalità di verifica delle conoscenze*

L'esame orale mira a verificare la comprensione da parte dello studente degli argomenti esposti durante il corso. La parte 'sperimentale', cioè l'attività del laboratorio computazionale (messa a punto di programmi originali) costituisce oltre metà del lavoro e della verifica. o  
Quindi le modalità di verifica sono :

- Esame finale orale
- Relazione di 'laboratorio'

##### *Indicazioni metodologiche*

Lezioni frontali sui fondamentali dei metodi, introduzione al linguaggio FORTRAN.  
Le attività comprendono:

- partecipazione alle lezioni
- studio individuale
- laboratorio computazionale

E' consigliabile seguire regolarmente le lezioni

##### *Programma (contenuti dell'insegnamento)*

Il corso è concepito come un'introduzione ai principali metodi di simulazione impiegati in meccanica statistica, il metodo Monte Carlo e la dinamica molecolare, con particolare attenzione alle applicazioni su fasi condensate. Nella prima parte del corso sono presentati i fondamenti teorici dei metodi, successivamente si analizzano analogie e differenze di implementazione e si evidenziano le possibilità e i limiti dei metodi. La seconda parte del corso è dedicata a esempi di applicazioni, con sessioni di 'laboratorio' dove gli studenti mettono a punto e utilizzano programmi di calcolo di loro realizzazione.

##### *Bibliografia e materiale didattico*

- 1) M.P. Allen and D.J. Tildesley 'Computer simulation of liquids', Clarendon Press, Oxford, 1987.
- 2) D. Frenkel and B. Smit 'Understanding Computer Simulation : From Algorithms to Applications', Academic Press, San Diego, 1996.
- 3) M. E. Tuckerman, 'Statistical Mechanics: theory and Molecular Simulation', Oxford University Press, Oxford, 2010

Naturalmente la bibliografia è molto ampia e in continua espansione. I testi indicati sono solo la fonte della maggior parte del materiale presentato nelle lezioni.