

SCHEDA DELL' INSEGNAMENTO DI "ELEMENTI DI MODELLISTICA COMPUTAZIONALE" INTRODUCTORY COMPUTATIONAL MODELING

Corso di Studio L-
BIOLOGIA

Insegnamento

Laurea

A.A. 2020/2021

Docente: Prof. Orlando CRESCENZI ☎ +39 081 674206

email: orlando.crescenzi@unina.it

SSD

CFU

Anno di corso

Semestre

Insegnamenti propedeutici previsti: Chimica Generale ed Inorganica

RISULTATI DI APPRENDIMENTO ATTESI

Conoscenza e capacità di comprensione (max 4 righe, Arial 9)
Lo studente deve dimostrare di aver compreso nelle linee generali le potenzialità e gli ambiti di applicazione dei più comuni approcci modellistici per la simulazione di sistemi biomacromolecolari (proteine, acidi nucleici), e di aver acquisito le conoscenze di base necessarie per un uso consapevole degli strumenti di modellizzazione. <i>Knowledge of the scope and limitations of the most common approaches used for the simulation of biomacromolecular systems (proteins, nucleic acids); capabilities required for an effective use of the main theoretical-computational modeling tools.</i>
Conoscenza e capacità di comprensione applicate (max 4 righe, Arial 9)
Lo studente dovrà essere in grado di discriminare fra i diversi ambiti di applicazione dei più diffusi approcci per la modellizzazione computazionale di sistemi chimici di interesse biologico; dovrà inoltre avere acquisito le abilità fondamentali nell'uso del sistema operativo Unix, e possedere le capacità di base per l'impostazione di simulazioni di meccanica e di dinamica molecolare. <i>Some familiarity with the most commonly used theoretical-computational approaches for the simulation of biomacromolecular systems. Basic Unix skills. Capability to setup simple molecular mechanics and molecular dynamics simulations.</i>
Eventuali ulteriori risultati di apprendimento attesi, relativamente a:
<ul style="list-style-type: none">• Autonomia di giudizio: Lo studente dovrà essere in grado di approfondire in maniera autonoma i concetti appresi, ad esempio con la lettura di altre fonti bibliografiche secondarie; dovrà inoltre essere capace di confrontare criticamente l'applicabilità e le limitazioni di diversi approcci teorico-computazionali a problemi biochimici realistici.• <i>Students must be able to deepen their knowledge on the topics of the course, e.g. by reading from other university-level books. Furthermore, they must be able to compare and contrast different theoretical-computational approaches as to their suitability to describe realistic systems / phenomena of biochemical relevance.</i>• Abilità comunicative: Lo studente dovrà essere in grado di esporre le nozioni apprese durante il corso, eventualmente anche a persone non esperte della materia, utilizzando un linguaggio scientifico corretto e appropriato.• <i>Students must be able to illustrate the concepts learned during the course, possibly even to a non-expert listener, using an appropriate scientific language.</i>• Capacità di apprendimento: Lo studente dovrà essere in grado di aggiornarsi e ampliare progressivamente le proprie conoscenze attingendo in maniera autonoma da testi in lingua inglese.• <i>Students must be able to widen their knowledge using scientific texts written in English.</i>

PROGRAMMA

Concetti di base: sistemi di coordinate; superfici di energia potenziale; grafica molecolare; unità di misura; concetti matematici: espansioni in serie (0.5 CFU). Campi di forza: termini di un tipico campo di forza; caratteristiche generali di un campo di forza; termini di stretching, di bending, torsionali; torsioni improprie; termini di interazione; interazioni non-bonded; interazioni elettrostatiche; modelli elettrostatici di cariche puntiformi; calcolo delle cariche parziali atomiche; cariche parziali per sistemi macromolecolari; interazioni di Van der Waals; potenziale di Lennard-Jones (1 CFU). Minimizzazioni energetiche: definizioni generali; derivate dell'energia; metodo sequenziale univariato; metodi del primo ordine; metodo degli steepest descents; metodo dei gradienti coniugati; metodi del secondo ordine; metodo di Newton-Raphson; scelta del metodo di minimizzazione; minimi, massimi, punti di sella; criteri di convergenza (1 CFU). Tecniche di simulazione: dinamica molecolare; metodo di Monte Carlo; paragone tra i due approcci; condizioni periodiche al contorno; cutoff delle interazioni non-bonded; liste dei vicini; cutoff basati su gruppi (0.5 CFU). Dinamiche molecolari: concetto di integrazione numerica delle equazioni differenziali; esempi di integrazione numerica: oscillatore armonico, moto planetario; metodi alle differenze finite; algoritmo di Verlet; algoritmo leap-frog; scelta del time step; frequenze tipiche dei moti molecolari: spettro IR; cenni sull'uso di constraints: SHAKE; controllo della temperatura e della pressione (1 CFU). Metodo di Monte Carlo: numeri pseudocasuali; calcolo di un integrale col metodo di Monte Carlo; cenni sul metodo di Metropolis. Esplorazione sistematica dello spazio conformazionale: grid search (0.5 CFU). Introduzione al sistema operativo Unix: concetti di base; struttura gerarchica; permessi; principali comandi Unix (0.5 CFU). Esercitazioni al computer (1 CFU).

CONTENTS

Introductory concepts: coordinate systems; potential energy surfaces; molecular graphics; units of length and energy; mathematical concepts: series expansions (0.5 CFU). Empirical force field models: molecular mechanics: general features of molecular mechanics force fields; bond stretching; angle bending; torsional terms; improper torsions and out-of-plane bending motions; non-bonded interactions; electrostatic interactions; van der Waals interactions; the Lennard-Jones potential (1 CFU).

SCHEMA DELL' INSEGNAMENTO DI "ELEMENTI DI MODELLISTICA COMPUTAZIONALE" INTRODUCTORY COMPUTATIONAL MODELING

Corso di Studio L-
BIOLOGIA

Insegnamento

Laurea

A.A. 2020/2021

Energy minimization and related methods for exploring the energy surface: introduction to derivative minimization methods; first-order minimization methods; second derivative methods; the Newton-Raphson method; choosing a method; applications of energy minimization; determination of transition structures and reaction pathways (**1 CFU**).

Computer simulation methods: molecular dynamics; Monte Carlo methods; practical aspects of computer simulation; boundaries; truncating the potential and the minimum image convention; long-range forces (**0.5 CFU**).

Molecular dynamics simulation methods: numerical integration of differential equations – basic concepts; some examples; finite-difference methods; the Verlet algorithm; the leapfrog algorithm; choosing the time-step; characteristic frequencies of molecular motions: the IR spectrum; constraint dynamics: SHAKE; molecular dynamics at constant temperature and pressure (**1 CFU**).

Monte Carlo simulation methods: calculating properties by integration; some theoretical background to the Metropolis method. Systematic exploration of the conformational space: grid searches (**0.5 CFU**).

An introduction to the Unix operating system: fundamental concepts; hierarchical structure; permissions; basic Unix commands (**0.5 CFU**).

Computer exercises (**1 CFU**).

MATERIALE DIDATTICO

A.R. Leach, *Molecular modelling, principles and applications*, seconda edizione, Prentice Hall, 2001.

FINALITA' E MODALITA' PER LA VERIFICA DI APPRENDIMENTO

- A)** L'esame di fine corso mira a verificare e valutare il raggiungimento degli obiettivi didattici elencati in grassetto nella sezione contenuti del programma.
- B)** Lo studente verrà interrogato sugli argomenti del corso per valutare il grado di completezza della sua risposta, il livello di integrazione tra i vari contenuti del corso, il raggiungimento da parte dello studente di una visione organica dei temi affrontati, la padronanza espressive e la proprietà nel linguaggio scientifico.
La frequenza assidua e la partecipazione attiva durante le lezioni e le esercitazioni al computer saranno elementi di valutazione positiva.

PURPOSES AND MODALITIES OF LEARNING VERIFICATION

- A)** *The final examination aimed at verifying and evaluating the achievement of the educational learning targets listed in bold in the program contents section.*
- B)** *The student will be asked to answer to questions on the course topics in order to evaluate the degree of completeness of the answers, the level of integration between the different topics of the course and the appropriateness of the scientific language used. Regular attendance to the lessons and active participation in the computer exercises will be positively considered.*

b) Modalità di esame:

L'esame si articola in prova	Scritta e orale		Solo scritta		Solo orale	X
Discussione di elaborato progettuale						
Altro, specificare						

In caso di prova scritta i quesiti sono (*)	A risposta multipla		A risposta libera		Esercizi numerici	
---	---------------------	--	-------------------	--	-------------------	--