Elementi di Modellistica computazionale

Docente: prof. Orlando Crescenzi

Obiettivi:

Obiettivo del corso è fornire le conoscenze di base necessarie per un utilizzo consapevole ed efficace dei principali strumenti teorici e computazionali in uso per la simulazione di sistemi chimici di interesse biologico.

Contenuti:

Il corso presenta una panoramica degli approcci modellistico-computazionali più diffusi nella simulazione di sistemi chimici di interesse biologico. I necessari concetti di base matematici, chimico-fisici ed informatici vengono introdotti ad un livello di approfondimento tale da consentire una valutazione ragionata degli ambiti di applicabilità e delle limitazioni dei vari approcci modellistici presentati. L'articolazione del corso prevede la discussione di: Concetti matematici e chimico-fisici di base; Campi di forza; Minimizzazioni energetiche; Introduzione generale alle tecniche di simulazione; Dinamiche molecolari; Metodo di Monte Carlo; Grid search; Introduzione al sistema operativo Unix.

Programma analitico:

(Il numero di asterischi indica l'importanza degli argomenti al fine del superamento della prova di valutazione delle conoscenze: due asterischi identificano gli argomenti senza la cui conoscenza non si può superare l'esame)

Concetti di base

- Sistemi di coordinate *
- Superfici di energia potenziale **
- Grafica molecolare
- Unità di misura

Concetti matematici

- Espansioni in serie *

Campi di forza

- Termini di un tipico campo di forza **
- Caratteristiche generali di un campo di forza
- Termini di stretching **
- Termini di bending **
- Termini 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

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

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

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

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

Introduzione al sistema operativo Unix

Concetti di base *
Struttura gerarchica
Permessi
Principali comandi Unix *

Testo consigliato:

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

Propedeuticità:

Si consiglia che il corso sia preceduto da tutti gli esami del biennio.

Prerequisiti:

Gli studenti devono possedere i concetti di base di matematica, fisica e chimica corrispondenti ai corsi impartiti nel biennio.

Modalità accertamento profitto:

Esame orale con voto.