



# UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI PALERMO

<b>DIPARTIMENTO</b>	Fisica e Chimica - Emilio Segrè		
<b>ANNO ACCADEMICO OFFERTA</b>	2023/2024		
<b>ANNO ACCADEMICO EROGAZIONE</b>	2023/2024		
<b>CORSO DILAUREA MAGISTRALE</b>	FISICA		
<b>INSEGNAMENTO</b>	COMPUTATIONAL PHYSICS WITH LABORATORY		
<b>TIPO DI ATTIVITA'</b>	B		
<b>AMBITO</b>	50337-Sperimentale applicativo		
<b>CODICE INSEGNAMENTO</b>	22018		
<b>SETTORI SCIENTIFICO-DISCIPLINARI</b>	FIS/07		
<b>DOCENTE RESPONSABILE</b>	COTTONE GRAZIA	Professore Associato	Univ. di PALERMO
<b>ALTRI DOCENTI</b>			
<b>CFU</b>	6		
<b>NUMERO DI ORE RISERVATE ALLO STUDIO PERSONALE</b>	86		
<b>NUMERO DI ORE RISERVATE ALLA DIDATTICA ASSISTITA</b>	64		
<b>PROPEDEUTICITA'</b>			
<b>MUTUAZIONI</b>			
<b>ANNO DI CORSO</b>	1		
<b>PERIODO DELLE LEZIONI</b>	1° semestre		
<b>MODALITA' DI FREQUENZA</b>	Obbligatoria		
<b>TIPO DI VALUTAZIONE</b>	Voto in trentesimi		
<b>ORARIO DI RICEVIMENTO DEGLI STUDENTI</b>	<b>COTTONE GRAZIA</b> Lunedì 15:00 17:00 Studio 102 Dip. DIFC, viale delle Scienze, Ed. 18, primo piano Mercoledì 15:00 17:00 Studio 102 Dip. DIFC, viale delle Scienze, Ed. 18, primo piano		

DOCENTE: Prof.ssa GRAZIA COTTONE

<b>PREREQUISITI</b>	Elementi di informatica e programmazione. Metodi numerici per la risoluzione di equazioni algebriche lineari, metodi di integrazione numerica di funzioni, metodi di risoluzione numerica di equazioni differenziali ordinarie, generazione di numeri random.
<b>RISULTATI DI APPRENDIMENTO ATTESI</b>	Conoscenza e capacita' di comprensione: acquisizione di conoscenze approfondite di fisica computazionale ed in particolare delle principali tecniche di analisi numerica avanzata e di modeling teorico per l'indagine di processi fisici. Capacita' di intuire le analogie tra situazioni diverse cosi da poter adattare al problema di interesse soluzioni sviluppate in contesti fenomenologici diversi. Capacita' di applicare conoscenza e comprensione: applicazione del metodo computazionale ad un ampio spettro di problemi di fisica. Sviluppo della propensione al "problem solving" attraverso una continua esposizione a quesiti, discussioni, problemi. Capacita' di riflessione critica sui metodi proposti in aula per lo studio di casi di ricerca e di applicazione. Capacita' applicative in senso pratico, attraverso attivita' di laboratorio didattico di informatica. Autonomia di giudizio: sviluppo della capacita' di autonomia attraverso l'abitudine ad applicare i concetti e le tecniche della fisica computazionale a problemi di ricerca in fisica. Abilita' comunicative: sviluppo della capacita' di comunicare in forma orale e scritta informazioni, idee, problemi e soluzioni. Capacita' di esporre i risultati di studi computazionali anche ad un pubblico non esperto. Essere in grado di sostenere l'importanza ed evidenziare le ricadute degli studi scientifici analizzati. Capacita' d'apprendimento: capacita' di approfondire i concetti esposti durante il corso tramite studio su testi diversi. Capacita' di aggiornamento con la consultazione delle pubblicazioni scientifiche proprie del settore della materia. Capacita' di intraprendere, utilizzando le conoscenze acquisite nel corso, studi futuri con un sufficiente grado di autonomia.
<b>VALUTAZIONE DELL'APPRENDIMENTO</b>	L'esame finale consiste in un esame orale su argomenti del corso e nella presentazione di un assignment individuale. Tale prova consente di valutare, oltre alle conoscenze del candidato e alla sua capacita' di applicarle, anche le proprieta' di linguaggio scientifico e di capacita' di esposizione chiara e diretta. La valutazione finale sarà espressa in trentesimi e sarà formulata sulla base delle seguenti condizioni: a) lo studente ha una minima conoscenza di base degli argomenti principali dell'insegnamento, sufficiente capacita' di applicare autonomamente le conoscenze acquisite (voto 18-21 trentesimi); b) lo studente non ha piena padronanza degli argomenti studiati ma ne possiede le conoscenze, soddisfacente proprieta' di linguaggio, sufficiente capacita' di applicare autonomamente le conoscenze acquisite (voto 21-23 trentesimi). b)lo studente ha conoscenza di base degli argomenti studiati, discreta proprieta' di linguaggio, con piu' che sufficiente capacita' di applicare autonomamente le conoscenze alla soluzione dei problemi proposti (voto 23-25 trentesimi); c)lo studente ha buona padronanza degli argomenti, buona capacita' di analisi dei casi presentati, piena proprieta' di linguaggio (voto 26-29 trentesimi); d)lo studente ha una conoscenza approfondita e diffusa degli argomenti studiati, ottima capacita' di analisi dei casi presentati, ottima proprieta' di linguaggio (voto 30-30L trentesimi).
<b>OBIETTIVI FORMATIVI</b>	Lo scopo del corso e' quello di introdurre lo studente allo studio ed implementazione di tecniche avanzate di risoluzione numerica per la descrizione di processi fisici modello e allo studio delle tecniche standard di simulazione atomistica classica. Obiettivi formativi sono: -l'acquisizione di conoscenze di tecniche numeriche per la risoluzione di equazioni differenziali alle derivate parziali del secondo ordine, per la simulazione atomistica di dinamica molecolare di equilibrio con metodi standard di campionamento; -l'applicazione di metodi di interesse in fisica computazionale, col fine di mostrare come le metodologie numeriche possano fornire strumenti fondamentali nella comprensione dei fenomeni fisici, permettendo quindi di averne una visione più completa.
<b>ORGANIZZAZIONE DELLA DIDATTICA</b>	L'insegnamento e' semestrale e si svolge al primo anno del CdL Magistrale in Fisica. L'attivita' didattica si sviluppa attraverso lezioni frontali in aula su

	algoritmi e tecniche numeriche per lo studio di processi fisici ed esercitazioni in aula informatica.
<b>TESTI CONSIGLIATI</b>	R.H. Landau, M.J. Paez, C.C. Bordeianu, Computational Physics: Problem Solving With Python III Edition ISBN 978-3527413157 Basic textbook D. Frenkel & B. Smit, Understanding Molecular Simulation, II Edition, ISBN 978-0-12-267351 Supplementary textbook  Research papers

### PROGRAMMA

ORE	Lezioni
1	Introduzione al corso. Significato di "Fisica Computazionale". Esposizione del programma, dei libri di testo e consultazione, dei tutorial per le esercitazioni pratiche.
2	Introduzione alla simulazione atomistica. Scale spaziali e temporali. Equilibrio e non equilibrio. Ipotesi ergodica. Dinamica Molecolare e Monte Carlo come metodi di indagine di sistemi a molti corpi.
2	Dinamica molecolare standard. Algoritmi di integrazione delle equazioni del moto. Metodo di Eulero, metodo di Verlet e Velocity Verlet. Proprietà degli integratori numerici. Reversibilità temporale e conservazione del volume nello spazio delle fasi.
2	Potenziali di interazione, approssimazione Born-Oppenheimer, potenziali ab initio, semiempirici. Potenziali additivi a coppie.
2	Il potenziale di Lennard-Jones per sistemi atomici. Unità ridotte. Diagrama fasi dell'argon. Potenziali a corto e lungo range. Le condizioni periodiche al bordo. Il criterio di minima immagine.
2	Stima di proprietà strutturali e dinamiche di sistemi atomici. La funzione di correlazione a coppie. La diffusione.
3	Equazioni differenziali alle derivate parziali del II ordine: generalità, schemi numerici alle differenze finite per la risoluzione, discretizzazione del dominio spazio-temporale. Consistenza, convergenza e stabilità. Schemi espliciti vs schemi impliciti.
3	Equazioni differenziali alle derivate parziali del II ordine: l'equazione parabolica. Metodo di Eulero e metodo di Dufort-Frenkel. Analisi di stabilità di Von Neumann. Stima dell'errore di troncamento.
2	Equazioni differenziali alle derivate parziali del II ordine: l'equazione ellittica (Laplace/Poisson). Metodo di Jacobi e metodo di Gauss-Seidel.
3	Equazioni differenziali alle derivate parziali del II ordine: l'equazione iperbolica (onde, avvezione). Confronto fra differenti schemi di integrazione numerica. Analisi di stabilità di Von Neumann.
3	Equazioni differenziali alle derivate parziali del II ordine: l'equazione iperbolica (onde, avvezione). Stima degli effetti di "diffusione" e "dispersione" numerica per diversi schemi di integrazione.
3	Metodi di ottimizzazione di funzioni: funzioni obiettivo (loss function), metodi di gradiente coniugato, metodo steepest descent e stochastic steepest descent.
4	Il metodo Monte Carlo. Annealing simulato.

ORE	Laboratori
3	Esercitazioni al computer in aula informatica su argomenti del corso: Dinamica Molecolare classica di particelle Lennard-Jones. Struttura di un codice (C/Python) per la simulazione di atomi di argon nel microcanonico.
3	Esercitazioni al computer in aula informatica su argomenti del corso: Calcolo dell'energia totale, potenziale, cinetica e della temperatura del sistema di atomi. Stabilità dell'algoritmo di integrazione e conservazione dell'energia totale al variare del time step.
3	Esercitazioni al computer in aula informatica su argomenti del corso: Simulazioni nell'insieme canonico, implementazione del termostato di Andersen.
3	Esercitazioni al computer in aula informatica su argomenti del corso: Calcolo della funzione di correlazione a coppie a differenti densità e temperature; calcolo del coefficiente di diffusione.
6	Introduzione al linguaggio di programmazione Python
3	Esercitazioni al computer in aula informatica su argomenti del corso: l'equazione parabolica del calore. Risoluzione numerica al variare delle condizioni al bordo e iniziali.
3	Esercitazioni al computer in aula informatica su argomenti del corso: l'equazione ellittica di Laplace-Poisson. Risoluzione numerica al variare delle condizioni al bordo e differenti sorgenti di carica.
3	Esercitazioni al computer in aula informatica su argomenti del corso: l'equazione iperbolica di avvezione. Risoluzione numerica al variare delle condizioni iniziali. Risoluzione con quattro schemi alle differenze finite.
2	Esercitazioni al computer in aula informatica su argomenti del corso: l'equazione di Burgers non viscosa e viscosa; risoluzione numerica con schema Upwind conservativo e non conservativo. Schema numerico di McCormack.
3	Esercitazioni al computer in aula informatica su argomenti del corso: Annealing simulato.