

-MODELLAZIONE E SIMULAZIONE MULTISCALE DEI MATERIALI-

Docenti: Prof. Giovanni Ciccotti, Prof. Andrea Di Carlo

- [Scheda dell'insegnamento in formato elettronico](#)
- [Obiettivi formativi](#)
- [Sillabo del corso](#)
- [Materiale didattico complementare](#)

-OBIETTIVI FORMATIVI:

Questo corso intende stimolare l'interazione costruttiva tra fisica atomistica e fisica dei mezzi continui, che funzioni in entrambi i sensi: mentre le teorie fini possono trasferire alle teorie sommarie informazioni costitutive ben fondate, quelle sommarie forniscono alle prime un traguardo ben strutturato, il che è di grande aiuto per estrarre il comportamento emergente di interesse dall'enorme massa di informazioni microscopiche non

strutturate.

[TORNA ALL'INDICE](#)

-SILLABO DEL CORSO:

Parte 0 - Il formalismo generale della meccanica (Prof. A. Di Carlo; 6 lezioni di due ore)

0.1-La struttura formale dell'elettromagnetismo maxwelliano:un utile termine di paragone.

0.2-La struttura formale generale della meccanica dei sistemi discreti e dei mezzi continui.

Parte 1: I materiali come aggregati molecolari (Prof. G. Ciccotti; 12 lezioni di due ore)

1.1 Giustificazione dell'uso della meccanica classica. Richiami di meccanica analitica e di meccanica statistica classica. Equivalenza delle medie temporali e di ensemble. Osservabili di interesse: proprietà statiche e proprietà dinamiche. Metodi di simulazione: DM vs MC. Setup di una simulazione: condizioni iniziali, condizioni al bordo. Calcolo dell'energia e delle forze, tavole dei vicini, eccetera. Dinamica molecolare: algoritmo di Verlet.

1.2 Metodo Monte Carlo: generalità. Catene di Markov e algoritmo di Metropolis. Leggi di conservazione per i campi macroscopici. Idrodinamica linearizzata. Limite idrodinamico per la $S(k,w)$.

1.3 Eventi attivati. Energia libera come logaritmo della probabilita' marginale. Dinamica accelerata per eventi attivati e metodo Single Sweep.

1.4 Sistemi quantistici a temperatura finita: matrice densita' e Path Integrals. Metodi di campionamento per Path Integrals. Statistiche quantistiche.

1.5 Introduzione a probabilita' e processi stocastici (stazionari e non). Processo di Wiener e moto browniano. Equazione di Langevin. Contrazione di variabili con la tecnica delle proiezioni di Zwanzing ed equazione di Langevin generalizzata.

Parte 2: I materiali come mezzi continui (Prof. A. Di Carlo:6 lezioni di due ore)

2.1 Modelli e problemi esemplari in fluidodinamica e in meccanica dei solidi

2.2 Meccanica dei continui e dinamica molecolare: il metodo Andersen-Parrinello-Rahman rivisitato in un'ottica multiscala.

[TORNA ALL'INDICE](#)

-MATERIALE DIDATTICO COMPLEMENTARE:

-
- [Computer Simulation Dream](#)
 - [Challenges in Molecular Dynamics Simulation](#)

- [MD of Complex Systems](#)
- [Blue Moon Sampling](#)
- [Minimum Free Energy Paths](#)
- [Techniques for Rare Events](#)
- [Vacancy Diffusion](#)
- [Beyond Hydrodynamics](#)
- [Benard Convection](#)
- [Time Dependend Non Equilibrium MD](#)
- [Hydrodynamics from Dynamic NEMD](#)
- [Hydrodynamics Limit](#)
- [Quantum Classical Statistical Mechanics](#)

[TORNA ALL'INDICE](#)