FSI3450 Avancerad molekyldynamik 7,5 hp

Advanced Molecular Dynamics

Fastställande

Kursplan för FSI3450 gäller från och med HT11

Betygsskala

G

Utbildningsnivå

Forskarnivå

Särskild behörighet

• Grundläggande kunskaper i statistisk mekanik / termodynamik
(Kursen innehåller en kort introduktion till molekylär dynamik och kraftfält)

Undervisningsspråk

Undervisningsspråk anges i kurstillfällesinformationen i kurs- och programkatalogen.

Lärandemål

Efter avslutad kurs ska studenten kunna:

• skapa simuleringar av vätskor, polymerer och proteiner

- analysera strukturella och dynamiska egenskaper
- bedöma kvaliteten på “sampling” och vara medveten om metoder för att förbättra denna
- skapa beräkningar av fri energi
- applicera systematisk “coarse-graining”

Kursinnehåll

Kursen behandlar metodik i avancerad molekyldynamik (MD) för klassiska simuleringar av vätskor, polymerer och proteiner. MD-simuleringar ger atomistiskt detaljerad information om strukturella och dynamiska kvantiteter, men ofta till en hög beräkningskostnad. Eftersom simuleringarna kräver att vibrationer av atomer återskapas så är tidsstegen i simuleringarna av storleksordningen femtosekunder, medan tidsskalor av intresse ofta är av storleksordningen mikrosekunder.

Detta har tre viktiga konsekvenser. Effektiv mjukvara och hårdvara behövs, till exempel “stream computing” på GPU:er. Du måste alltid noga kontrollera konvergensen av egenskaper av intresse. Och om konvergens inte kan nås, kan du behöva använda metoder för att förbättra insamlandet av data (sampling), till exempel fri energi-beräkningar och “coarse-graining”.

Dessa ämnen kommer att behandlas i föreläsningar, litteraturstudier och datorlabbar.

Kurslitteratur

- D. Frenkel & B. Smit, Understanding Molecular Simulation
- H.J.C. Berendsen, Simulating the Physical World
- Utvalda artiklar

Examination

Examinator beslutar, baserat på rekommendation från KTH:s handläggare av stöd till studenter med funktionsnedsättning, om eventuell anpassad examination för studenter med dokumenterad, varaktig funktionsnedsättning.

Examinator får medge annan examinationsform vid omexamination av enstaka studenter.

När kurs inte längre ges har student möjlighet att examineras under ytterligare två läsår.

Övriga krav för slutbetyg

- Datorlabbar med Gromacs simuleringspaketet
- Presentation av projekt som kan anpassas till de särskilda intressen hos studenterna

Etiskt förhållningssätt

- Vid grupparbete har alla i gruppen ansvar för gruppens arbete.
- Vid examination ska varje student ärligt redovisa hjälp som erhållits och källor som använts.
- Vid muntlig examination ska varje student kunna redogöra för hela uppgiften och hela lösningen.