



FSK3523 Avancerad molekylodynamik 5,0 hp

Advanced Molecular Dynamics

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

Fastställande

Kursplan för FSK3523 gäller från och med HT18

Betygsskala

P, F

Utbildningsnivå

Forskarnivå

Undervisningsspråk

Undervisningsspråk anges i kurstillfällesinformationen i kurs- och programkatalogen.

Lärandemål

Efter avslutad kurs ska studenten kunna:

- sätta upp simuleringar av vätskor, polymerer och proteiner
- analysera strukturella och dynamiska egenskaper
- bedöma kvaliteten på provtagningen och vara medveten om metoder för att förbättra provtagningen
- ställa upp frienergiberäkningar

- tillämpa systematisk "coarse-graining"

Kursinnehåll

Kursen behandlar metoder inom avancerad molekylär dynamik (MD) för klassiska simuleringar av vätskor, polymerer och proteiner. MD-simuleringar ger atomistisk information om strukturella och dynamiska storheter, men ofta till en hög beräkningskostnad. Eftersom atomvibrationer måste tas med är tidsstegen ofta i femtosekundområdet, medan den intressanta tidsskalan för många molekylodynamiska processer ofta ligger i mikrosekund eller sekundområdet. Detta har tre huvudsakliga konsekvenser. Effektiv mjukvara och hårdvara krävs, med användning av exempelvis "stream computing" (på exempelvis GPU). Man måste alltid kontrollera att beräkningarna konvergerar. Och om konvergens inte kan nås, kan man behöva använda metoder för att förbättra provtagningen, såsom frienergiberäkningar och "coarse-graining". Dessa ämnen kommer att behandlas i föreläsningar, litteraturläsning och datorlaboratorier.

Kursupplägg

Förstudie om molekylär dynamik, om så krävs.

En vecka föreläsningar och datorövningar.

Individuellt projekt, om möjligt baserat på ditt eget ämne.

Särskild behörighet

Antagen som doktorand

Kurslitteratur

D. Frenkel & B. Smit, Understanding Molecular Simulation

H.J.C. Berendsen, Simulating the Physical World

Selected articles

Utrustning

Tillgång till en bärbar dator

Examination

- PRO1 - Projektuppgift, 5,0 hp, betygsskala: P, F

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

Examinator får medge annan examinationsform vid omexamination av enstaka studenter.

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.