Corso di Laurea Specialistica in Chimica delle Molecole di Interesse Biologico

Struttura e Dinamica di Biomolecole - 2008/2009

Laboratorio 1 - (24 marzo 2009)

---

1 Preliminari

1.1 assegnazione account

- Assegnazione nome utente e password
- (uso della posta elettronica su `studenti.fisica.unifi.it`)

1.2 ripasso UNIX[1] e configurazione utente

1. Aprire una sessione facendo login con il nome del vostro utente e password.
2. Aprire un terminale usando il menù principale del Desktop.
3. Ripassare la "sintassi generale di un comando" [tab. 4.1]
4. Ripassare il "percorso assoluto e relativo" per indicare file e directory [fig. 4.1]
5. Ripassare i comandi per la "gestione essenziale di file e directory" [tab. 4.2]
6. Copiare il file `~signorini/etc/bashrc.global` su `~/.bashrc`
7. Copiare il file `~signorini/etc/init.el` su `~/.emacs`
8. uscire dal terminale e rientrare

1.3 Editor di testo: emacs[2]

1. differenza tra editor di testo e word processor [3]
2. Lanciare emacs, col comando
   `emacs`
3. provare a uscire
4. rientrare lanciando il comando in background
   `emacs &`
5. osservare le varie aree dello schermo
   (a) barra menu
   (b) area di lavoro: il buffer
   (c) riga di stato (Mode Line)
   (d) minibuffer
6. menu, scorciatoie e comandi "complessi"
7. help: Apropos, Key, Whereis (locate); Tutorial
8. differenza tra buffer e file
9. editare il file `~/.plan`
   (a) inserire n.o matricola e codice corso di laurea
10. "editare" una directory: dired

---

[1] fare riferimento alle dispense sul "sistema operativo" in `http://www.chim.unifi.it/u/signo/did/unix`
[2] sez. 5.1
[3] sez. 4.5.1

1.4 Diagrammare dati e funzioni: `gnuplot`

Ripassare[4] come fare a

1. diagrammare file di dati
2. diagrammare funzioni
3. fit di una funzione su dati
4. stampare una figura e salvarla su un file (jpeg)

[4] sez. 6.1; cfr. anche `http://www.gnuplot.info`

Corso di Laurea Specialistica in Chimica delle Molecole di Interesse Biologico

Struttura e Dinamica di Biomolecole - 2008/2009

Laboratorio 1 - (24 marzo 2009)

---

2 Esercizio: verifica della validità della distribuzione canonica delle energie nel solido di Einstein e in problemi simili

2.1 il problema

Fare riferimento all'esempio riportato nel capitolo "Insieme canonico" (4.3) delle lezioni. Il modello è un contenitore isolato con N particelle che si scambiano energia in quantità unitarie, mantenendo costante l'energia totale E: la distribuzione delle energie delle particelle segue una distribuzione canonica nel limite $N \to \infty, E \to \infty, E \gg N$.

Il modello è applicabile a campi diversi: ad esempio, alla distribuzione di E gettoni su una scacchiera con N caselle (con rimescolamento casuale dei gettoni tra le caselle).

2.2 creazione dei dati

Si usa il programma `canon`

1. creare la directory `canonic` sotto la propria home
2. copiare il file di dati `~signorini/canonic/data/c.in` su `~/canonic/`
3. copiare il programma `~signorini/canonic/canon` su `~/canonic/`
4. editare il file di dati:
   (a) modificare il numero di caselle e il numero di gettoni in modo da ottenere un diverso rapporto
   (b) eventualmente, modificare il numero di mosse e la frequenza di campionamento
5. lanciare il programma con

   ```
   canon c
   ```
6. esaminare i file di output `c.out` e `c.tbl` con emacs

2.3 visualizzazione risultati e fit

Usare gnuplot per visualizzare i risultati e ottenere un fit sulla funzione

$$P(x) = \frac{1}{Q} e^{-\beta x}$$

```
gnuplot> p(x)=1./q*exp(-beta*x)
gnuplot> fit p(x) 'c.out' u 0:1 via q,beta
gnuplot> plot 'c.out' u 0:1, p(x)
```

Stampare il grafico con

```
gnuplot> set term jpeg
gnuplot> set out 'figura.jpeg'
gnuplot> !a2ps figura.jpeg
```