

Nicodemo Di Pasquale

Nome: Nicodemo Di Pasquale

Nazionalità: Italiana

e-mail: nicodemo.dipasquale@unibo.it

Indirizzo: Manchester, UK
M1 3DB

Telefono: +44 7452742124

Esperienza Professionale

Ottobre 2023 -, Università di Bologna, Dipartimento di Chimica Industriale "Toso Montanari", **Professore Associato di Teoria dello Sviluppo dei Processi Chimici**

Maggio 2022 - Ottobre 2023, Brunel University London, Department of Chemical Engineering, **Lecturer in Ingegneria Chimica**

Settembre 2020 - Maggio 2022 University of Manchester, Department of Chemical Engineering and Analytical Science, **Research Associate**

Marzo 2020 - Luglio 2020 University of Nottingham, School of Mathematical Sciences, **Research Fellow**

Gennaio 2020 - Marzo 2020 University of Nottingham, School of Mathematical Sciences, **Consulenza**

2017-2020 University of Leicester, School of Mathematics and Actuarial Science **PDRA**

2014-2016 University of Manchester, School of Chemistry **PDRA**

2013 Politecnico di Torino, Department of Applied Science and Technology **PDRA**

Esperienza di Ricerca

Settembre 2020 - Maggio 2022 *University of Manchester, Research Associate*

- Modelli di Machine Learning per grafene polarizzabile
- Sto usando Tensorflow e Keras per la generazione di reti neurali usate nella predizione della distribuzione di cariche su grafene in contatto con elettroliti
- Sto lavorando sull'accoppiamento di questi modelli di reti neurali con simulazioni di Dinamica Molecolare

Marzo 2020 - Luglio 2020 *University of Nottingham, Research Fellow*

- Progetto: "Subsurface Evaluation Of Carbon Capture And Storage And Unconventional Risk" (SECURE)
- Sviluppo di modelli di fluidodinamica numerica per Mezzi Porosi
- Studio teorico dei modelli e loro implementazione in OpenFoam®
- Attività di divulgazione scientifica pensata per ragazzi delle scuole medie

Jan 2020 - Mar 2020 *University of Nottingham, Consulenza*

- Ho progettato un'apparecchiatura per la lavorazione della carne per Cranswick plc
- Scrittura del report per il partner industriale, trasferimento tecnologico della ricerca all'azienda

2017- 2020 *University of Leicester, PDRA*

- Studio di Algoritmi per il calcolo di **Free Energy** e loro applicazioni a sistemi cristallini (metalli e cristalli di molecole organiche)
- Sviluppo e convalida del "Cleaving Method", per il calcolo delle proprietà interfacciali di materiali con simulazioni di Dinamica Molecolare.
- Implementazione di questi modelli nel pacchetto LAMMPS

2014-2016 *University of Manchester, PDRA*

- **Machine Learning (ML)**
- Sviluppo di un software per ML estremamente ottimizzato per applicazioni in High Performance Computing
- Implementazione di force-fields polarizzabili costruiti con ML in un software di dinamica molecolare
- Utilizzo di vari modelli di ottimizzazione e regressione, Particle Swarm Optimization, Differential Evolution e Kriging
- Dinamica Molecolare di ioni in soluzione
- Esperienza con calcoli quantomeccanici

2013 *Politecnico di Torino, PDRA*

- Sviluppo e convalida di una legge cinetica per la nucleazione di nanoparticelle polimeriche nel processo di precipitazione
- Sviluppo di modelli per simulazioni multi-scala Coarse-Grained/Atomistiche
- Simulazioni di dinamica molecolare di poli- ϵ -caprolactone in solvente

2010-2012 *Politecnico di Torino, PhD fellowship founded by Ministero dell'istruzione (Italy)*

- **Multiscale modelling**
- Descrizione teorica del processo di *spostamento di solvente* in a Confined Impinged Jets Mixer
- Accoppiamento di modelli di bilancio di Popolazione con simulazioni di fluidodinamica numerica
- Sviluppo e convalida di modelli per la formazione di nanoparticelle di poli- ϵ -caprolactone
- Studio e analisi del campo di moto all'interno di micro-reattori attraverso simulazioni di fluidodinamica numerica

2010-2012 *University of Manchester, Visiting Student*

- Sviluppo e convalida di modelli multiscala per simulazioni Coarse-Grained
- Implementazione di modelli multiscala all'interno del software per dinamica molecolare, IBIsCO

Other projects:

- Studio teorico di modelli Coarse-Grained utilizzando il proiettore di Mori-Zwanzig (in collaborazione con La Sapienza e University of Warwick, UK)
- Accoppiamento di modelli di Machine Learning per simulazioni di Fluidodinamica numerica in mezzi porosi (in collaborazione con il Politecnico di Torino, e University of Nottigham, UK)

Research Interests

- Machine Learning
 - Reti Neurali
 - Processi Gaussiani
- Molecular Dynamics
 - Modelli Atomistici
 - Coarse-graining
 - Thermodynamic Integration
- Soft Matter (polimeri e biomolecole)
- Condensed Matter
- Sistemi organici and inorganici
- Fenomeni interfacciali in cristalli
 - Modellazione per Interfacce
 - Calcolo Surface Free Energy, Surface stress
- Fluidodinamica Numerica
 - Processi di Precipitazione
 - Mezzi Porosi
- Equazione di Bilancio di Popolazione

Istruzione

2010-2012 Politecnico di Torino, **PhD in Ingegneria Chimica**

Ottenuta: February 2013

Tesi: "Multiscale simulation of polymer nanoparticles precipitation for pharmaceutical applications"

2008-2009 Politecnico di Torino **Laurea Specialistica in Ingegneria Chimica** (110/110)

2004-2007 Politecnico di Torino **Laurea Triennale in Ingegneria Chimica** (110/110)

Insegnamento

Teaching Experience:

- 2022-2023 Università di Bologna:
B1993 - SIMULAZIONE MULTISCALA DI APPARECCHIATURE PER L'INDUSTRIA CHIMICA
00501 - IMPIANTI CHIMICI
- 2022-2023 Brunel University London:
CL2606 - "Fluids Mechanics" 2nd year students in Chemical Engineering
CL5655 - "Process System Engineering" 4th year students in Chemical Engineering
- 2020-2021 University of Manchester: (co-)lecture nel corso di *Molecular Modelling and Simulation in Chemical Engineering* "Molecular Dynamics Simulations" section (equivalente a 5 crediti di 15 total)(CHEN 40232/60232)
- 2017-2019 University of Leicester: Assistant teacher nel corso di *Scientific Computing* per studenti di Laurea Specialistica in Matematica
- 2010-2011 Politecnico di Torino: Assistant teacher nel corso di *Reattori Chimici* per studenti di Laurea Specialistica in Ingegneria Chimica

Co-supervision di tesi di Laurea Specialistica in Ingegneria Chimica presso il Politecnico di Torino, e Fisica presso La Sapienza, Rome, Italy)

E-learning environment:

- Buona Conoscenza dell'ambiente Blackboard per Virtual Learning Environment
- Lezione on line su "Mori-Zwanzig formalism for Dimension Reduction" nel corso di "Multiscale modelling and coarse-graining for flow and transport PDEs" per studenti del dottorato in Ingegneria Chimica al Politecnico di Torino, Maggio 2020

Fellowships e Riconoscimenti

- Institute of Advanced Study Residential Fellowship, University of Warwick, January 2017
- "Honorary Visiting Fellow" nella School of Mathematics and Actuarial Science, University of Leicester, Dicembre 2019
- Dicembre 2021
- Copertina sul Journal of Computational Chemistry, vol. 35, issue 16, (2014)
(<https://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/jcc.23635>)

- Reviewer per: Chemical Engineering Science, The Canadian Journal of Chemical Engineering, Molecular Simulation, The Journal of Physical Chemistry, Chimica oggi-Chemistry today, Materials Letters, Entropy

Conferenze e Scuole

Conferences:

- “*Description of Surface Properties of Organic Crystals through Molecular Dynamics Simulations*”, oral contribution presented at Midlands Computational Chemistry meeting, 6th-7th January 2021
- “*Calculation of Surface Free Energy in Mannitol Crystals through cleaving*”, poster presented at Insights into Processes at Minerals and Materials Surfaces and Interfaces, 17th June 2019, University of Huddersfield, Huddersfield, UK
- “*Calculation of Surface Free Energy in Mannitol Crystals through cleaving*”, poster presented at Future Formulation III, 4th April 2019, University of Leicester, Leicester, UK
- “*Direct calculation of surface free energy of mannitol by molecular dynamics simulations*”, poster presented at New frontiers in particle-based multiscale and coarse-grained modelling, 17th September 2018, Max Planck Institute for Polymer Research, Mainz, Germany
- “*Kriging Models in Predicting Properties of Ions in Solution from First Principle Calculations*”, poster presented at Second CCPBioSim/CCP5 Multiscale Modelling, 13th April 2016, Manchester, UK
- “*Mixing Atoms and Coarse Grained Beads in Modelling Polymer Melts*”, oral contribution presented at Multiscale Modelling of Condensed Phase and Biological Systems, 7th January 2014, Manchester, UK
- “*New formulation of the Nucleation Law for polymer system and coupling with PBE*”, oral contribution presented at 5th International Conference on Population Balance Modelling, Bangalore, India, 11th September, 2013
- “*Simulation of mixing and precipitation of nanoparticles for pharmaceutical applications with CFD and MD*”, oral contribution presented at 14th European Conference on Mixing, Warsaw, Poland, 9th September, 2012
- “*Hybrid Model Atomistic-Coarse-Grained for soft material molecular dynamics simulations*”, poster presented at Coarse-Grained Methods and Self Assembly, 27th July 2011, CECAM-USI, Lugan, Switzerland
- “*Coupling Molecular Dynamics with Computational Fluid Dynamics Via Parameter Passing for the Simulation of Polymer Nanoparticle Precipitation*” oral contribution presented at AIChE 2011 Annual Meeting, Minneapolis, USA, October 16-21, 2011

Conferences Proceedings:

- A. D. Lavino, N. Di Pasquale, P. Carbone, D. Marchisio. “*Molecules as building blocks for a CFD-PBE model to describe the effect of fluid dynamics on nanoparticle formation*”. In: International Symposium on Industrial Crystallization, ISIC20, Dublin, Ireland, September 3-6, 2017
- A. D. Lavino, N. Di Pasquale, P. Carbone, D. L. Marchisio, “*Soft matter self-assembly in acetone-water mixtures: a multiscale modeling approach*” In: SARA 2016, Edinburgh, UK, December 9, 2016. 22
- D. L. Marchisio, A. D. Lavino, N. Di Pasquale, P. Carbone, “*Multiscale modelling of macromolecule self-assembly in solution: the case of poly- ϵ -caprolactone in Acetone-Water Mixtures.*” In: AIChE 2016 Annual Meeting, San Francisco, USA, November 16-18, 2016
- A. D. Lavino, N. Di Pasquale, P. Carbone, A. A. Barresi, D. L. Marchisio, “*Simulation of macromolecule self-assembly in solution: A multiscale approach.*” In: AIP Conference Proceedings, 1695:020036, 2015
- N. Di Pasquale, P. Carbone, D. Marchisio, “*Multiscale Modelling of Polycaprolactone Self-Assembly in Water-Acetone Mixtures.*” In: 2014 AIChE Annual Meeting, Atlanta, USA, November 16-21, 2014
- “*Simulation of mixing and precipitation of nanoparticles for pharmaceutical applications with CFD and MD.*” In: 14th European Conference on Mixing, Warsaw, Poland, 9th September, 2012
- “*Coupling Molecular Dynamics with Computational Fluid Dynamics Via Parameter Passing for the Simulation of Polymer Nanoparticle Precipitation.*” In: AIChE 2011 Annual Meeting, Minneapolis, USA, October 16-21, 2011

Schools:

- *Multiscale Modeling of Flowing Soft Matter and Polymer Systems*, CISM course, Udine (IT), July 2016
- *Hierarchical Methods for Dynamics in Complex Molecular Systems*, IAS Winter School, Forschungszentrum Jülich (DE), March 2012

- *Methods in Molecular Simulation Summer School 2011*, organized by CCP5 and sponsored by CECAM, Belfast (UK), July 2011
- *Advanced calculus Summer School*, organized by CASPUR, Rome (IT), August 2010