



UNIVERSITÀ DI PISA

METODI NUMERICI DELLA CHIMICA FISICA

GIOVANNI GRANUCCI

Anno accademico 2022/23
CdS CHIMICA
Codice 384CC
CFU 3

Moduli	Settore/i	Tipo	Ore	Docente/i
METODI NUMERICI DELLA CHIMICA FISICA	CHIM/02	LEZIONI	24	GIOVANNI GRANUCCI

Obiettivi di apprendimento

Conoscenze

Al termine del corso lo studente avrà acquisito conoscenze su metodi di calcolo numerico e su linguaggi di programmazione.

Modalità di verifica delle conoscenze

L'accertamento delle conoscenze acquisite avverrà tramite l'esame finale.

Capacità

Al termine del corso lo studente sarà in grado di

- approfondire autonomamente gli argomenti del corso;
- utilizzare metodi di calcolo numerico in applicazioni a problemi chimico-fisici e in particolare in chimica quantistica;
- programmare semplici algoritmi di calcolo.

Modalità di verifica delle capacità

L'accertamento delle capacità acquisite avverrà tramite l'esame finale.

Comportamenti

Lo studente potrà sfruttare correttamente il calcolo numerico, con la consapevolezza dei suoi limiti e possibili insuccessi.

Modalità di verifica dei comportamenti

Le esercitazioni al calcolatore sono un momento utile per verificare l'atteggiamento dello studente verso i metodi di calcolo e la programmazione, con lo scopo di indirizzarlo verso i comportamenti più corretti ed efficaci.

Prerequisiti (conoscenze iniziali)

Conoscenze di base di matematica (analisi, algebra lineare) e meccanica quantistica.

Indicazioni metodologiche

L'insegnamento consiste di lezioni alla lavagna e in esercitazioni di programmazione al calcolatore. Sono fornite note delle lezioni che coprono solo alcuni argomenti specifici.

Programma (contenuti dell'insegnamento)

Norme matriciali. Numero di condizionamento di una matrice quadrata. Errori di troncamento e di arrotondamento. Condizionamento di un problema e stabilità di un algoritmo.



UNIVERSITÀ DI PISA

Derivazione numerica. Quadratura numerica: formule composte dei trapezi e di Simpson.

Sistemi lineari: fattorizzazione QR. Diagonalizzazione di matrici: teoremi di Gershgorin e di Bauer-Fike. Metodo delle potenze, di Jacobi e di Householder. Metodo di Davidson.

Integrazione numerica di equazioni differenziali ordinarie: metodi a uno e a più passi.

Singular value decomposition di una matrice e applicazioni.

Linguaggio di programmazione Fortran: rudimenti.

Bibliografia e materiale didattico

V. Comincioli, *Analisi Numerica*.

~~Note delle lezioni dei docenti su alcuni argomenti specifici (in italiano).~~

Modalità d'esame

L'esame consiste in una prova orale. Tende ad accertare le capacità di applicare concetti e metodi piuttosto che la pura conoscenza di dimostrazioni o procedure.

Ultimo aggiornamento 29/07/2022 18:41