



## 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*