UNIVERSITÀ DI PISA

METODI NUMERICI DELLA CHIMICA FISICA

FILIPPO LIPPARINI

Anno accademico	2023/24
CdS	CHIMICA
Codice	384CC
CFU	3

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

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.

Programma (contenuti dell'insegnamento)

Elementi di programmazione nel linguaggio Fortran 90.
Cenni alla teoria della discretizzazione e al metodo di Galerkin
Algebra lineare numerica: librerie BLAS e LAPACK e loro utilizzo

Bibliografia e materiale didattico

Fletcher, Practical Methods of Optimization
Ulteriore materiale verrà fornito, ove necessario, durante le lezioni.

Modalità d'esame

L'esame consiste nello svolgimento di un progettto computazionale (costruzione di una libreria di routine per la soluzione di sistemi lineari e problemi ad autovalori) e in una prova orale

Ultimo aggiornamento 11/09/2023 14:46