



## 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



## UNIVERSITÀ DI PISA

---

Metodi iterativi per i sistemi lineari e per i problemi agli autovalori-  
Metodi di ottimizzazione

### 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 progetto 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*