

SCUOLA	SCIENZE di BASE E APPLICATE
ANNO ACCADEMICO	2014/2015
CORSO DI LAUREA	Corso di Laurea in Chimica
INSEGNAMENTO	Metodi Computazionali di Base per la Chimica
TIPO DI ATTIVITÀ	Affine o integrativa
AMBITO DISCIPLINARE	CHIM/02
CODICE INSEGNAMENTO	16160
ARTICOLAZIONE IN MODULI	NO
NUMERO MODULI	1
SETTORI SCIENTIFICO DISCIPLINARI	CHIM/02
DOCENTE RESPONSABILE (MODULO 1)	Lo Celso Fabrizio Ricercatore Università degli Studi di Palermo
CFU	4+2
NUMERO DI ORE RISERVATE ALLO STUDIO PERSONALE	94
NUMERO DI ORE RISERVATE ALLE ATTIVITÀ DIDATTICHE ASSISTITE	56
PROPEDEUTICITÀ	Nessuna
ANNO DI CORSO	Primo
SEDE DI SVOLGIMENTO DELLE LEZIONI	Aula C ed.17
ORGANIZZAZIONE DELLA DIDATTICA	Lezioni frontali, Esercitazioni in aula,
MODALITÀ DI FREQUENZA	Obbligatoria
METODI DI VALUTAZIONE	Prova Scritta
TIPO DI VALUTAZIONE	Voto in trentesimi
PERIODO DELLE LEZIONI	Secondo semestre
CALENDARIO DELLE ATTIVITÀ DIDATTICHE	Secondo calendario delle lezioni pubblicato
ORARIO DI RICEVIMENTO DEGLI STUDENTI	Mar Mer 9-11 Giov 12-14

RISULTATI DI APPRENDIMENTO ATTESI

Conoscenza e capacità di comprensione

Conoscenza dei metodi di base matematici per l'analisi degli errori e per adattamento di dati sperimentali a modelli.

Capacità di applicare conoscenza e comprensione

Capacità di applicare i metodi di base matematici per l'analisi degli errori e per adattamento di dati sperimentali a modelli sulla base di esercitazioni numeriche e programmazione al computer.

Autonomia di giudizio

Valutare autonomamente la scelta del metodo e dell'ambito applicativo della teoria degli errori per problemi relativi all'ambito chimico fisico

Abilità comunicative

Capacità di saper comunicare in modo chiaro e univoco la scelta del metodo per il trattamento dei dati sperimentali e i relativi passaggi matematici per giustificare le conclusioni .

Capacità d'apprendimento

Avere sviluppato le capacità di apprendimento che consentono di affrontare autonomamente, di comprendere e trattare problemi non esplicitamente trattati durante il corso con particolare riferimento all'uso di software numerico di uso comune.

--

OBIETTIVI FORMATIVI DEL MODULO
 L'obiettivo del corso è quello di fornire gli elementi necessari per la comprensione della teoria dell'analisi degli errori, di metodi matematici di base per il trattamento di dati sperimentali, per l'utilizzo di software di uso comune in ambito matematico.

MODULO	Metodi di Base Computazionali per la Chimica
ORE FRONTALI	LEZIONI FRONTALI
4	Misura di una grandezza fisica. Incertezza. Cifre significative. Arrotondamento. Operazioni tra numeri approssimati. Discrepanza. Incertezza relativa. Notazioni per esprimere l'incertezza. Propagazione delle incertezze: errore max per somma e differenza; errore max per moltiplicazione; errore max per quoziente.
4	Analisi statistica delle incertezze. Errori casuali e sistematici. Definizione di media e deviazione standard. La misura come evento casuale. Istogramma; distribuzione limite. Distribuzione gaussiana. Parametri della distribuzione gaussiana. Giustificazione di media e deviazione standard come determinazioni più probabili dei parametri della distribuzione normale. Distribuzioni derivate: $x+A$, Bx , $x+y$, $f(x,y)$. Calcolo della probabilità di un risultato in un intervallo di valori. Funzione $\text{erf}(t)$.
4	Fitting lineare. Determinazione dei parametri fitting lineare tramite minimizzazione del χ^2 . Calcolo dell'errore sui parametri. Probabilità di un valore di indice di correlazione lineare.
4	Distribuzione binomiale. Media e deviazione standard per la distribuzione binomiale. Distribuzione di Poisson. Media e deviazione standard per la distribuzione di Poisson.
4	Test Chi quadro
4	Gnuplot: software open source per il trattamento dei dati sperimentali
2	Elementi di informatica di base
6	Elementi di programmazione Fortran 77
	ESERCITAZIONI
24	Esercitazioni numeriche sugli argomenti affrontati nelle lezioni frontali
TESTI CONSIGLIATI	J. R. Taylor. Introduzione all'analisi degli errori. Zanichelli, Bologna, 2006.