



**UNIVERSITA' DEGLI STUDI DELLA BASILICATA**  
**DIPARTIMENTO DI SCIENZE**

**Insegnamento** \_\_\_\_\_ **Matematica per la Chimica** \_\_\_\_\_

**Corso di studio:** \_\_\_ Corso di Laurea in Chimica \_\_\_\_\_

**Anno di Corso:** \_\_\_ 2014/15 \_\_\_\_\_

**Periodo** \_\_\_ I Semestre \_\_\_\_\_

**didattico:**

**Tipologia:** \_\_\_ Affini integrative \_\_\_\_\_

**Totale Crediti:** \_\_\_ 6 \_\_\_\_\_

**Tipo Esame:** \_\_\_ scritto e orale \_\_\_\_\_

**Valutazione:** \_\_\_ voto \_\_\_\_\_

**Lingua di Italiano,** \_\_\_\_\_

**insegnamento:**

- inizio corso \_\_\_ 03/10/2014 \_\_\_\_\_ fine corso \_\_\_ 30/01/2015 \_\_\_\_\_

**APPELLI DI ESAME**

Mese	Anno	Appello previsto
Febbraio	2015	3
Marzo	2015	3
Aprile	2015	28
Maggio	2015	26
Giugno	2015	25
Luglio	2015	24
Settembre	2015	
Ottobre	2015	24
Novembre	2015	22
Dicembre	2015	19
Gennaio	2016	17

NOTA: Nello schema precedente sono indicati i mesi in cui è previsto almeno un appello d'esame.

Le date precise di appello definite tramite la procedura online possono essere rinvenute al link

[http://oldwww.unibas.it/selfservice/query\\_appelli.asp](http://oldwww.unibas.it/selfservice/query_appelli.asp)





**UNIVERSITA' DEGLI STUDI DELLA BASILICATA**  
**DIPARTIMENTO DI SCIENZE**

**COMMISSIONE ESAME:**

Presidente: \_\_\_\_De Bonis Maria Carmela\_\_\_\_

Componente: \_\_\_\_Occorsio Donatella\_\_\_\_

Componente: \_\_\_\_Russo Maria Grazia\_\_\_\_

Componente: \_\_\_\_Laurita Concetta\_\_\_\_

*ORARIO RICEVIMENTO STUDENTI*

	dalle ore	alle ore	presso
LUNEDI'	10:30	12:30	Studio docente
MARTEDI'			
MERCOLEDI'	10:30	12:30	Studio docente
GIOVEDI'			
VENERDI'			

**Eventuali prerequisiti**

E' richiesta la conoscenza degli argomenti svolti nel corso di Matematica I

**Obiettivi Formativi**

Conoscenze di base della programmazione con il software Matlab. Conoscenza e utilizzo dei metodi numerici per la risoluzione di sistemi lineari, per l'approssimazione degli zeri di funzioni e per l'approssimazione degli autovalori e degli autovettori di una matrice. Conoscenza e utilizzo degli strumenti per l'approssimazione di dati nel senso dei minimi quadrati. Conoscenza e utilizzo degli strumenti per l'approssimazione di dati e funzioni mediante splines lineari e cubiche.

Al termine del corso, per ogni assegnato problema lo studente sarà in grado di stabilirne la risolubilità e il buon condizionamento, di scegliere il metodo numerico più efficace e più efficiente che lo risolve numericamente, di stimare "a priori" gli errori teorici.





**UNIVERSITA' DEGLI STUDI DELLA BASILICATA**  
**DIPARTIMENTO DI SCIENZE**

---

## **Programma del Corso**

### **Programmazione in Matlab**

Algoritmi e programmazione. Costanti, variabili locali e globali, operatori aritmetici e logici, espressioni.

Descrizione degli algoritmi mediante il flow-chart. Tecniche algoritmiche di base.

Implementazione degli algoritmi in linguaggio Matlab.

Rappresentazione dei numeri in un calcolatore. Singola e Doppia Precisione.

Errore assoluto ed errore relativo e connessioni con il numero di cifre decimali e significative corrette di un numero approssimato. Epsilon macchina. Analisi del condizionamento di un problema e della stabilità degli algoritmi.

Cancellazione numerica.

### **Elementi di base di algebra delle matrici.**

Spazi vettoriali. Matrici. Sistemi di equazioni lineari. Alcune nozioni di algebra lineare. Rango e Determinante di una matrice.

### **Metodi numerici per la risoluzione di sistemi lineari**

Studio del condizionamento nella risoluzione dei sistemi lineari.

Metodi di sostituzione in avanti e all'indietro per matrici triangolari;

Metodo di eliminazione di Gauss e variante del pivoting parziale. Pivoting e stabilità.

Fattorizzazione LU e calcolo del determinante e dell'inversa di una matrice,

### **Metodo numerici per l'approssimazione degli zeri di funzioni**

Metodi di bisezione e di Newton. Ordine di convergenza dei metodi di bisezione e Newton.

Ordine di convergenza del metodo di Newton in presenza di zeri multipli. Teorema di Cauchy. Regola di Cartesio.

### **Metodi numerici per l'approssimazione degli autovalori e degli autovettori di una matrice**

Teoremi di localizzazione degli autovalori. Condizionamento del Problema. Condizionamento di un autovalore di molteplicità algebrica 1. Metodo delle Potenze e metodo delle potenze inverse.

Il metodo QR. Costo computazionale dei metodi numerici.

### **Approssimazione di dati e funzioni**

Approssimazione di dati e funzioni mediante spline lineari e cubiche.

Approssimazione di dati nel senso dei minimi quadrati. Stime teoriche degli errori.

---

## **Metodi didattici**

Lezioni in aula e lezioni in laboratorio con i calcolatori.

---

## **Modalità di verifica dell'apprendimento**

Prova pratica al calcolatore ed esame orale

---



***UNIVERSITA' DEGLI STUDI DELLA BASILICATA***  
***DIPARTIMENTO DI SCIENZE***

**Testi di Riferimento**

- G. Monegato, Fondamenti di Calcolo Numerico, Edizioni C.L.U.T. Torino
- D. Bini, M. Capovani, O. Menchi, Metodi Numerici per l'algebra lineare, Zanichelli.
- Appunti del corso

Altre informazioni:



**UNIVERSITA' DEGLI STUDI DELLA BASILICATA**  
**DIPARTIMENTO DI SCIENZE**

**Legenda:**

**Anno di Corso:**

**Tipologia:** A (base), B (caratterizzante), C (affine), D (scelta libera).

La tipologia del corso è indicata nel Manifesto degli Studi, al

link: <http://scienze.unibas.it/site/home/info/manifesto-degli-studi-a.a.-20142015.html>

**Tipo di esame:** (scritto/orale – scritto e orale)

**Valutazione:** (voto/idoneità)

**Periodo didattico:** (I/II sem. – annuale)

**Lingua:** (aggiungere eventuale altra lingua straniera in cui possono essere tenute le lezioni)

**Inizio e fine corso:** indicare l'intervallo previsto dal Manifesto degli Studi, rintracciabile al link:

<http://scienze.unibas.it/site/home/info/orario-a.a.-201415.html>

**Appelli d'esame:** indicare con una X la casella corrispondente al mese in cui è previsto un appello d'esame

**Prerequisiti:** indicare requisiti richiesti per la frequenza del corso e specificare se suggeriti o obbligatori

**Obiettivi formativi (Learning Outcomes):** indicare in max 1000 caratteri (spazi inclusi)

**Programma del corso (Syllabus):** indicare in max 1500 caratteri (spazi inclusi)

**Metodi didattici:** (lezione frontale/esercitazioni/tutorato/laboratorio/e-learning, altro)

**Modalità di verifica dell'apprendimento:** solo esame finale, esoneri e/o verifiche parziali durante il corso, test a risposte multiple, relazioni su argomenti specifici, relazioni su attività pratiche e/o di laboratorio, ecc.



**UNIVERSITA' DEGLI STUDI DELLA BASILICATA**  
**DIPARTIMENTO DI SCIENZE**

**COURSE** \_\_\_\_\_ **Mathematics for Chemistry** \_\_\_\_\_

**Course of** \_\_\_\_\_  
**studies:**

**Academic Year:** \_\_2014/15\_\_\_\_\_

**ECTS:** \_\_6\_\_\_\_\_

**Teaching Methods:** Lectures – Lab activities –

**Evaluation Methods:** \_\_\_\_\_

**Evaluation:** \_\_\_\_\_ (score on 30 points / qualification)

**Semester:** \_\_I\_\_\_\_\_ (I-II-Annual)

**Language:** ITALIAN (and ...)

- Course beginning on \_\_03/10/2014\_\_\_\_\_ ending on \_\_30/01/2015\_\_\_\_\_

**Calls for examination**

Month	Year	Expected call
February	2015	3
March	2015	3
April	2015	28
May	2015	26
June	2015	25
July	2015	24
September	2015	
October	2015	24
November	2015	22
December	2015	19
January	2016	17

NOTE: In the previous table you can see in which months an examination call is expected.

The exact dates for the exams can be found at the following link (sorry, at the present time, only in italian):

[http://oldwww.unibas.it/selfservice/query\\_appelli.asp](http://oldwww.unibas.it/selfservice/query_appelli.asp)





**UNIVERSITA' DEGLI STUDI DELLA BASILICATA**  
**DIPARTIMENTO DI SCIENZE**

**Examination Panel:**

President: \_\_\_\_ De Bonis Maria Carmela De Bonis \_\_\_\_\_

Member: \_\_\_\_ Occorsio Donatella \_\_\_\_\_

Member: \_\_\_\_ Russo Maria Grazia \_\_\_\_\_

Member: \_\_\_\_ Laurita Concetta \_\_\_\_\_

**Previous requirements:**

In order to attend the course the knowledge of the arguments from the courses of Matematica I.

**Learning Outcomes:**

The aim of the course is the knowledge of the basic notions of programming in Matlab language.

The knowledge and the use of the numerical methods for solving linear systems, for approximating the zeros of functions and for approximating the eigenvalues and the eigenvectors of a matrix.

The knowledge and the use of the tools for the best fitting in the least-squares sense and for the spline approximation of data and functions.

At the end of the course, the student will be able to establish the solvability and the well-conditioning of the given problem, to find the method that numerically solve it with the smallest computational cost and the greatest number of exact significant digits, to give "a priori" estimates of the theoretical errors.

**Syllabus:**

**Programming in Matlab**

Algorithm and programming. Constants, local and global variables, arithmetic and logical operators, expressions.

Description of the algorithms by means of flow-charts. Basic algorithm techniques.

Algorithm implementations in Matlab. Computer representation of numbers and computer arithmetic.

Absolute and relative errors, decimal and significant digits of a number. Machine Epsilon. Well-conditioned and ill-conditioned problems. Stability of an algorithm. Numerical cancellation.

**Basic notions of linear algebra**

Vector spaces. Matrices. Systems of linear equations. Some basic notions of linear algebra. Rank and determinant of a matrix.

**Numerical methods for solving linear systems**

Conditioning of the problem of solving linear systems.

Back and forward substitution methods for triangular matrices.

Gauss method and pivoting, pivoting and stability.

LU factorization and computation of the determinant and the inverse of a matrix,

**Numerical methods for approximating the zeros of functions**

Bisection and Newton methods: convergence order.

Convergence order of the Newton method in approximating multiple zeros. Cauchy theorem and Descartes' rule of signs .

**Numerical methods for approximating the eigenvalues and the eigenvectors of a matrix**





***UNIVERSITA' DEGLI STUDI DELLA BASILICATA***  
***DIPARTIMENTO DI SCIENZE***

Eigenvalues and eigenvectors of a matrix: localization theorems and conditioning.  
Conditioning of an eigenvalue of algebraic multiplicity 1. The power and the inverse power iteration method.  
The QR method. Computational cost of the methods.

**Approximation of data and functions**

Spline approximation of data and functions.  
Best fitting in the least-squares sense. Theoretical error estimates.

**Suggested textbooks**

- G. Monegato, Fondamenti di Calcolo Numerico, Edizioni C.L.U.T. Torino
- D. Bini, M. Capovani, O. Menchi, Metodi Numerici per l'algebra lineare, Zanichelli.
- Notes of the course.

**Further information:**