

LOGO DELLA STRUTTURA PRIMARIA

ANNO ACCADEMICO: 2016/17															
Matematica per la Chimica															
TIPOLOGIA DI ATTIVITÀ FORMATIVA: Insegnamento di base															
DOCENTE: Occorsio Donatella															
e-mail: donatella.occorsio@unibas.it	sito web:														
Telefono: 0971 205848	cell. di servizio (facoltativo):														
Lingua di insegnamento: Italiano															
n. CFU: 4 cfu teoria ed esercizi, 2 cfu di esercitazione in laboratorio numerico	<table border="1"> <tr> <td>n. ore: 60</td> <td>Sede:</td> </tr> <tr> <td>36 ore di</td> <td>Potenza</td> </tr> <tr> <td>teoria ed</td> <td>Dipartim</td> </tr> <tr> <td>esercizi, 24</td> <td>ento</td> </tr> <tr> <td>ore di</td> <td>CdS:</td> </tr> <tr> <td>esercitazione</td> <td>Chmica LT</td> </tr> <tr> <td>in laboratorio</td> <td></td> </tr> </table>	n. ore: 60	Sede:	36 ore di	Potenza	teoria ed	Dipartim	esercizi, 24	ento	ore di	CdS:	esercitazione	Chmica LT	in laboratorio	
n. ore: 60	Sede:														
36 ore di	Potenza														
teoria ed	Dipartim														
esercizi, 24	ento														
ore di	CdS:														
esercitazione	Chmica LT														
in laboratorio															
<p><b>OBIETTIVI FORMATIVI E RISULTATI DI APPRENDIMENTO</b>                  Il corso è il primo insegnamento in cui sono introdotti gli elementi di base della programmazione e del Calcolo Scientifico .</p> <p><b>Le principali conoscenze</b> fornite saranno:                  Elementi essenziali della programmazione in Matlab. Utilizzo dei metodi numerici per la risoluzione di sistemi lineari, approssimazione degli zeri di funzioni , approssimazione degli autovalori e degli autovettori di una matrice. Utilizzo degli strumenti per l'approssimazione di dati nel senso dei minimi quadrati. Utilizzo degli strumenti per l'approssimazione di dati e funzioni mediante splines lineari e cubiche.</p> <p><b>Abilità acquisite</b></p> <p>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.</p>															
<p><b>PREREQUISITI</b>                  L'esame di Matematica I è propedeutico all'esame di Matematica per la Chimica.</p>															
<p><b>CONTENUTI DEL CORSO</b>  <b>(10 ore) Programmazione in Matlab</b></p> <p>Algoritmi e programmazione. Costanti, variabili locali e globali, operatori aritmetici e logici, espressioni. Tecniche algoritmiche di base. Implementazione degli algoritmi in linguaggio Matlab.</p> <p>(5 ore) <b>Rappresentazione dei numeri in un calcolatore.</b> 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.</p> <p><b>(8ore) Elementi di base di algebra delle matrici.</b></p> <p>Spazi vettoriali. Matrici. Sistemi di equazioni lineari. Alcune nozioni di algebra lineare. Rango e Determinante di una matrice.</p> <p><b>(10 ore )Metodi numerici per la risoluzione di sistemi lineari</b></p>															

## LOGO DELLA STRUTTURA PRIMARIA

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.

### **(10 ore )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.

### **(7 ore )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.

### **(10 ore )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

Il corso prevede 60 ore di didattica tra lezioni ed esercitazioni. Il corso si tiene interamente in laboratorio, in modo da consentire una immediata illustrazione degli argomenti introdotti mediante semplici esercizi.

In particolare sono previste 24 ore di esercitazioni (12 esercitazioni della durata di due ore), e 36 ore di lezione con esercizi teorici. Gli studenti hanno libero accesso al laboratorio didattico del DiMIE per ulteriori esercitazioni individuali, naturalmente in accordo al regolamento del laboratorio

## MODALITÀ DI VERIFICA DELL'APPRENDIMENTO

Gli esami si compongono di due prove: una prova pratica a calcolatore ed una prova orale. Il voto della prova pratica-scritta si ottiene come somma dei voti attribuiti ai singoli esercizi qualora questi siano svolti congruamente. Il punteggio attribuito a ciascun quesito viene comunicato prima di iniziare la prova. La somma dei punteggi è pari a 30. Gli esercizi sono articolati in domande sia sulla modalità di svolgimento che sui risultati numerici ottenuti. La prova scritta dura mediamente 2 ore e solo chi raggiunge la sufficienza nello scritto viene ammesso alla prova orale. La prova orale prevede una discussione sulla prova scritta e domande volte ad accertare la conoscenza degli argomenti, il livello di consapevolezza e la capacità di orientamento nella scelta dei diversi metodi proposti durante il corso. Il voto finale risulterà la media dei voti ottenuti nella prova scritta e nella prova orale.

In alternativa, coloro che frequentano assiduamente il corso, possono partecipare alle due prove pratiche a calcolatore (una a metà del corso, l'altra a fine corso) che sono organizzate secondo le modalità descritte sopra. Coloro che abbiano ottenuto in media almeno 18/30 sono ammessi a sostenere la prova orale, che diventa facoltativa, qualora essi abbiano seguito con profitto il 90% delle esercitazioni in laboratorio (con presenza appurata mediante firma).  
Le modali

## TESTI DI RIFERIMENTO E DI APPROFONDIMENTO, MATERIALE DIDATTICO ON-LINE

Appunti del docente disponibili sul sito del corso

Testo/i di riferimento: *G. Monegato, Fondamenti di Calcolo Numerico, Edizioni C.L.U.T. Torino*

## METODI E MODALITÀ DI GESTIONE DEI RAPPORTI CON GLI STUDENTI

All'inizio del corso, dopo aver descritto obiettivi, programma e metodi di verifica, il docente mette a disposizione degli studenti il materiale didattico (cartelle condivise, sito web, etc). Contestualmente, si raccoglie l'elenco degli studenti che intendono iscriversi al corso, corredato di nome, cognome, matricola ed email.

## LOGO DELLA STRUTTURA PRIMARIA

Orario di ricevimento: lunedì 12.30 - 13.30  
martedì 15 - 17  
presso lo studio 217 edificio 3d,  
Oltre all'orario di ricevimento settimanale, il docente può essere contattato dagli studenti via email utilizzando l'indirizzo email istituzionale.

### DATE DI ESAME PREVISTE<sup>1</sup>

15/02/2017, 15/03/2017, 21/06/2017, 19/07/2017, 22/09/2017, 21/12/2017

SEMINARI DI ESPERTI ESTERNI    SI     NO

### ALTRE INFORMAZIONI

---

<sup>1</sup>Potrebbero subire variazioni: consultare la pagina web del docente o del Dipartimento/Scuola per eventuali aggiornamenti