



UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI PALERMO

DIPARTIMENTO	Scienze e Tecnologie Biologiche, Chimiche e Farmaceutiche
ANNO ACCADEMICO OFFERTA	2022/2023
ANNO ACCADEMICO EROGAZIONE	2022/2023
CORSO DILAUREA	CHIMICA
INSEGNAMENTO	METODI COMPUTAZIONALI DI BASE PER LA CHIMICA
TIPO DI ATTIVITA'	C
AMBITO	10693-Attività formative affini o integrative
CODICE INSEGNAMENTO	16160
SETTORI SCIENTIFICO-DISCIPLINARI	CHIM/02
DOCENTE RESPONSABILE	LO CELSO FABRIZIO Professore Associato Univ. di PALERMO
ALTRI DOCENTI	
CFU	6
NUMERO DI ORE RISERVATE ALLO STUDIO PERSONALE	94
NUMERO DI ORE RISERVATE ALLA DIDATTICA ASSISTITA	56
PROPEDEUTICITA'	
MUTUAZIONI	
ANNO DI CORSO	1
PERIODO DELLE LEZIONI	2° semestre
MODALITA' DI FREQUENZA	Obbligatoria
TIPO DI VALUTAZIONE	Voto in trentesimi
ORARIO DI RICEVIMENTO DEGLI STUDENTI	LO CELSO FABRIZIO Mercoledì 14:30 17:00 Studio 1/B12 edificio 17 Giovedì 14:30 17:00 Studio 1/B12 edificio 17

DOCENTE: Prof. FABRIZIO LO CELSO

PREREQUISITI	Conoscenza della matematica di base: algebra, trigonometria, calcolo differenziale e integrale, funzioni semplici.
RISULTATI DI APPRENDIMENTO ATTESI	-Conoscenza e capacita di comprensione Conoscenza dei metodi di base matematici per l'analisi degli errori e per adattamento di dati sperimentali a modelli. -Capacita di applicare conoscenza e comprensione Capacita 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 -Abilita comunicative Capacita 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 . -Capacita d'apprendimento Avere sviluppato le capacita 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.
VALUTAZIONE DELL'APPRENDIMENTO	Due prove in itinere (meta' e fine del corso rispettivamente). Prova scritta finale. La prova e' essenzialmente intesa a valutare la conoscenza della teoria degli errori e la capacita' di applicarla in casi pratici, con possibili riferimenti a problemi di fisica e chimica. Valutazione percentuale in base alla difficolta' dei singoli quesiti: tra 10 e 15 quesiti con un punteggio medio che va da 3 a 2 punti. Voto in trentesimi per fasce percentuali (50%-55% 18-20, 56%-70% 21-23, 71%-80% 24-26, 81%-90% 27-29, >91% 30).
OBIETTIVI FORMATIVI	L'obiettivo del corso e 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.
ORGANIZZAZIONE DELLA DIDATTICA	Lezioni frontali ed esercitazioni numeriche in aula.
TESTI CONSIGLIATI	J. R. Taylor. Introduzione all'analisi degli errori. Zanichelli, Bologna, 2006. Marco Beri, Python 3. Guida tascabile al linguaggio di Google, Star Wars e la NASA, Apogeo

PROGRAMMA

ORE	Lezioni
6	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.
6	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 piu probabili dei parametri della distribuzione normale. Distribuzioni derivate: $x+A$, Bx , $x+y$, $f(x,y)$. Calcolo della probabilita di un risultato in un intervallo di valori. Funzione erf(t).
4	Fitting lineare. Determinazione dei parametri fitting lineare tramite minimizzazione del chi-quadrato Calcolo dell'errore sui parametri. Probabilita 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.
2	Test Chi quadro
10	Plotly graph objects: libreria open source per la visualizzazione e il trattamento dei dati sperimentali in Python Elementi di programmazione Python
ORE	Esercitazioni
24	Esercitazioni numeriche su tutti argomenti affrontati nelle lezioni frontali