



UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI PALERMO

DIPARTIMENTO	Scienze e Tecnologie Biologiche, Chimiche e Farmaceutiche		
ANNO ACCADEMICO OFFERTA	2023/2024		
ANNO ACCADEMICO EROGAZIONE	2023/2024		
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 $\text{erf}(t)$.
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