

INSEGNAMENTO: MATEMATICA PER LA CHIMICA			
ANNO ACCADEMICO: 2018-2019			
TIPOLOGIA DI ATTIVITÀ FORMATIVA: Base			
DOCENTE: Prof.ssa Incoronata NOTARANGELO			
e-mail: incoronata.notarangelo@unibas.it		sito web: https://sites.google.com/site/inconota	
Telefono: +39 0971 205836		cell.:	
Lingua di insegnamento: Italiano			
n. CFU: 6 (3 di lezione e 3 di esercitazioni/laboratorio)	n. ore: 60 (24 di lezione e 36 di esercitazione/laboratorio)	Sede: Potenza Dipartimento/Scuola: Dipartimento di Scienze CdS Cimica	Semestre: I (date previste di inizio e fine corso: dal 01/10/2018 al 20/12/2018-20/01/2019)
OBIETTIVI FORMATIVI E RISULTATI DI APPRENDIMENTO			
<ul style="list-style-type: none"> ○ Conoscenza e capacità di comprensione. <i>Conoscenza degli elementi di base del Calcolo Scientifico di frequente utilizzo in Chimica: programmazione in Matlab, elementi di algebra lineare, metodi numerici per la risoluzione di sistemi lineari, approssimazione di zeri di funzione, approssimazione di autovalori e autovettori di una matrice, approssimazione di dati nel senso dei minimi quadrati, approssimazione di funzioni mediante spline lineari e cubiche.</i> ○ Capacità di applicare conoscenza e comprensione. <i>Capacità di utilizzare tali strumenti matematici e applicarli alla risoluzione di problemi, studiando risolubilità e condizionamento, e stimando "a priori" gli errori teorici.</i> ○ Autonomia di giudizio. <i>Capacità di scegliere il metodo numerico più efficace e più efficiente per la risoluzione di un dato problema.</i> ○ Abilità comunicative. <i>Capacità di esprimere le conoscenze apprese, sia in forma orale che scritta, utilizzando un linguaggio matematico appropriato. Capacità di motivare la scelta del metodo risolutivo utilizzato sia in problemi di carattere teorico che nelle applicazioni.</i> ○ Capacità di apprendimento. <i>Capacità di apprendere i contenuti del corso, anche mettendoli in relazione con quelli di altri insegnamenti del corso di studi. Capacità di utilizzare anche in autonomia i testi consigliati per esercitazioni, approfondimenti e confronti.</i> 			
PREREQUISITI			
<i>L'esame di Matematica I è propedeutico all'esame di Matematica per la Chimica.</i>			
CONTENUTI DEL CORSO			
<ul style="list-style-type: none"> • Programmazione in Matlab (10 h) <i>Algoritmi e programmazione. Costanti, variabili locali e globali, operatori aritmetici e logici, espressioni. tecniche algoritmiche di base. Implementazione degli algoritmi in linguaggio Matlab.</i> • Rappresentazione dei numeri in un calcolatore (4 h) <i>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.</i> • Elementi di base di algebra delle matrici. (12 h) <i>Spazi vettoriali. Matrici. Sistemi di equazioni lineari. Alcune nozioni di algebra lineare. Rango e determinante di una matrice.</i> 			

- **Metodi numerici per la risoluzione di sistemi lineari (10 h)**

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.

- **Metodi numerici per l'approssimazione degli zeri di funzioni (8 h)**

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 (8 h)**

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 (8 h)**

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 (24 ore) ed esercitazioni (36 ore). Nelle esercitazioni saranno affrontati sia esercizi teorici che esercizi pratici al calcolatore.

Il corso si tiene essenzialmente in laboratorio, in modo da consentire una immediata illustrazione degli argomenti introdotti mediante semplici esercizi. Gli studenti hanno libero accesso al laboratorio didattico del DiMIE per ulteriori esercitazioni individuali, sempre in accordo al regolamento del laboratorio stesso.

MODALITÀ DI VERIFICA DELL'APPRENDIMENTO**Prova pratica-scritta e verifica orale.**

L'obiettivo della prova d'esame consiste nel verificare il livello di raggiungimento degli obiettivi formativi precedentemente indicati.

L'esame è diviso in 2 parti:

- una prova pratica-scritta al calcolatore con quesiti di carattere sia teorico che applicativo su tutti gli argomenti trattati nel corso; la prova ha lo scopo di valutare le conoscenze ed abilità acquisite ed ha carattere di selezione (lo studente che non mostri una sufficiente conoscenza degli argomenti non è ammesso alla prova orale). Per superare la prova è necessario acquisire almeno 16 punti su 30. Il tempo previsto per la prova è di 2 ore. Durante la prova è vietato utilizzare cellulari e consultare testi o appunti.
- una prova orale (da sostenersi nello stesso l'appello della prova scritta) nella quale sarà valutata la capacità di collegare e confrontare aspetti diversi trattati durante il corso e consiste nella discussione dell'elaborato scritto, in alcune domande di teoria e nell'eventuale svolgimento di esercizi. Al termine della prova orale verrà attribuito un voto finale che tiene conto di entrambe le prove: l'esame sarà superato se tale voto è pari almeno a 18 su 30. In caso contrario è necessario ripetere entrambe le prove.

Gli studenti che seguono il corso possono sostenere delle prove scritte parziali (facoltative) contenenti quesiti di carattere sia teorico che applicativo su diverse parti di programma.

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

- Materiale didattico fornito dalla docente, disponibile on-line su <https://sites.google.com/site/inconota/teaching/>

Testo di riferimento: G. Monegato, *Fondamenti di Calcolo Numerico*, Edizioni C.L.U.T., Torino, 1998.

METODI E MODALITÀ DI GESTIONE DEI RAPPORTI CON GLI STUDENTI

All'inizio del corso verranno descritti obiettivi, programma e metodo di valutazione.

Al termine della trattazione di ciascun argomento la docente mette a disposizione degli studenti il materiale didattico nella pagina web del corso.

Orario di ricevimento: il Giovedì dalle 14.30 alle 16.30 presso lo studio n. 63/3D214 del DiMIE - Dipartimento di Matematica, Informatica ed Economia (Edificio 3D, secondo piano).

Oltre all'orario di ricevimento settimanale, la docente è disponibile ogni giorno ad essere contattata via e-mail.

DATE DI ESAME PREVISTE¹

15/02/2019, 01/03/2019, 27/06/2019, 09/07/2019, 03/09/2019, 01/10/2019, 20/12/2019

SEMINARI DI ESPERTI ESTERNI SI NO

ALTRE INFORMAZIONI

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