

| Principali informazioni sull'insegnamento |                              |
|---|------------------------------|
| Denominazione insegnamento                | Metodi di calcolo in chimica |
| Corso di studio                           | Chimica                      |
| Classe di laurea                          | L-27                         |
| Crediti formativi (CFU)                   | 3                            |
| Obbligo di frequenza                      | Si                           |
| Lingua di erogazione                      | italiano                     |
| Anno Accademico                           | 2018/2019                    |

| Docente responsabile |                         |
|----------------------|-------------------------|
| Nome e Cognome       | Fulvio Ciriaco          |
| indirizzo mail       | fulvio.ciriaco@uniba.it |
| telefono             | 080-5442041             |

| Dettaglio insegnamento | Ambito disciplinare | SSD | tipologia attività |
|------------------------|---------------------|-----|--------------------|
|                        |                     |     | INF01              |

| Erogazione insegnamento | Anno di corso | Semestre |
|-------------------------|---------------|----------|
|                         | 2             | 2        |

| Modalità erogazione | CFU lez | Ore lez | CFU lab | Ore lab | CFU eserc | Ore eserc | CFU eserc campo | Ore eserc campo |
|---------------------|---------|---------|---------|---------|-----------|-----------|-----------------|-----------------|
|                     |         | 1       | 8       | 0       | 0         | 2         | 30              | 0               |

| Organizzazione della didattica | ore totali | ore insegnamento | ore studio individuale |
|--------------------------------|------------|------------------|------------------------|
|                                | 68         | 38               | 30                     |

| Calendario | Inizio attività didattiche | Fine attività didattiche |
|------------|----------------------------|--------------------------|
|            |                            |                          |

## PARTE A CURA DEL DOCENTE

| Syllabus  |  |
|---|--|
| Prerequisiti  | Corso di Analisi I   |
| <b>Risultati di apprendimento attesi</b> (declinare rispetto ai Descrittori di Dublino) (si raccomanda che siano coerenti con i risultati di apprendimento del CdS, riportati nei quadri A4a, A4b e A4c della SUA, compreso i risultati di apprendimento trasversali) |  |
| Conoscenza e capacità di comprensione   | Funzionamento generale del computer<br>Elementi di programmazione: istruzioni di assegnazione, cicli, moduli, funzioni, file<br>Statistica e sua applicazione all'interpretazione e alla progettazione di esperimenti<br>Forme di visualizzazione dei dati sia rapida, per l'interpretazione immediata che sofisticata per la pubblicazione. |
| Capacità di applicare conoscenza e comprensione   | Calcolo di regressione multivariata lineare e non lineare.<br>Calcolo della soluzione di equazioni differenziali.<br>Manipolazione di spettri ed altri dati provenienti da strumentazione scientifica.<br>Costruzione di grafici scientifici.  |
| Autonomia di giudizio   | -  |
| Abilità comunicative  | -  |
| Capacità di apprendimento   | Lettura ed interpretazione di piccoli programmi per uso scientifico.   |

| <b>Programma</b>   |   |
|--|---|
| <b>Contenuti dell'insegnamento</b>   | <p>Introduzione al linguaggio di programmazione Python e ai paradigmi generali della programmazione.<br/>           Metodi di visualizzazione di dati mono e multivariati.<br/>           La trasformata di fourier e le sue proprietà.<br/>           Applicazione della trasformata di fourier.<br/>           Librerie per la soluzione di equazioni differenziali ordinarie ed esempi di applicazione: cinetica chimica, eq. di schrödinger monodimensionale.<br/>           Elementi di statistica e applicazione della statistica bayesiana all'interpretazione di esperimenti con inferenza matematica complessa; applicazione esemplificativa alla matrice di contatori geiger.<br/>           Librerie per la riduzione del numero di variabili e la classificazione.<br/>           Applicazioni di natura chemiometrica.</p> |
| <b>Testi di riferimento</b>  | Dispense ed appunti di lezione.   |
| <b>Note ai testi di riferimento</b>  | -   |
| <b>Metodi didattici</b>  | <p>Lezioni frontali ed esercitazioni alla lavagna<br/>           Impiego del notebook di Python per l'applicazione annotata del ciclo REPL ed il salvataggio delle sessioni di lavoro<br/>           Le lezioni si tengono in isola multimediale e le spiegazioni vengono seguite da applicazione immediata degli studenti sulle postazioni di calcolo individuali.</p>   |
| <b>Metodi di valutazione</b><br><i>(indicare almeno la tipologia scritto, orale, altro)</i>  | Il lavoro degli studenti al computer viene salvato, se giudicato sufficiente quantitativamente e qualitativamente viene assegnata direttamente l'idoenità, altrimenti a seguito di colloquio.   |
| <b>Criteri di valutazione</b><br><i>(per ogni risultato di apprendimento atteso su indicato, descrivere cosa ci si aspetta lo studente conosca o sia in grado di fare e a quale livello al fine di dimostrare che un risultato di apprendimento è stato raggiunto e a quale livello)</i> | Lo studente deve esibire capacità di sviluppare in autonomia una serie di passaggi che porta alla soluzione di problemi, per lo più attinenti alla manipolazione di dati scientifici, e tradurli in termini di chiamate di libreria e semplici funzioni da lui scritte o fornite dal docente e deve sapere presentare i risultati in forma grafica.   |
| <b>Altro</b>   |   |