

CORSO DI STUDIO *Chimica*

ANNO ACCADEMICO *2023-2024*

DENOMINAZIONE DELL'INSEGNAMENTO *Metodi di Calcolo in Chimica*

Principali informazioni sull'insegnamento	
Anno di corso	<i>II</i>
Periodo di erogazione	<i>2° semestre</i>
Crediti formativi universitari (CFU/ETCS):	<i>3</i>
SSD	<i>INF02</i>
Lingua di erogazione	<i>Italiano</i>
Modalità di frequenza	<i>Facoltativa</i>

Docente	
Nome e cognome	<i>Fulvio Ciriaco</i>
Indirizzo mail	<i>fulvio.ciriaco@uniba.it</i>
Telefono	<i>3286119458</i>
Sede	<i>dip. di chimica, primo piano</i>
Sede virtuale	<i>Indicare il luogo virtuale (es. codice teams per attività di tutoraggio) https://teams.microsoft.com/l/team/19%3a8f84cf9cb1254ffb8e06893f32d2fe1d%40thread.tacv2/conversations?groupId=eb6c062a-d8f4-4fec-93ff-8c7f9454b672&tenantId=c6328dc3-afdf-40ce-846d-326eed86d49</i>
Ricevimento	<i>mar, 9:00-11:00, gio. 21:00-22:00</i>

Organizzazione della didattica			
Ore			
Totali	Didattica frontale	Pratica (laboratorio, campo, esercitazione, altro)	Studio individuale
<i>36</i>	<i>8</i>	<i>28</i>	<i>21</i>
CFU/ETCS			
<i>Es. 6</i>	<i>4</i>	<i>2</i>	

Obiettivi formativi	<i>Riportare gli obiettivi formativi così come indicati nella SUA-CdS e nel regolamento didattico</i>
Prerequisiti	<i>Elementi di analisi e algebra lineare. Elementi di chimica.</i>

<p>Metodi didattici</p>	<p><i>L'insegnamento consiste di una parte frontale e di una parte pratica svolta parzialmente in gruppo alla presenza del docente e parzialmente individualmente. L'insegnamento si avvale dello strumento del Jupyter Notebook, un supporto che unisce calcolo, programmazione, testo e strumenti di interazione. Gli studenti applicano molte delle competenze acquisite a problemi di altri corsi di chimica, in particolare del lab. di chim. fis. II.</i></p>
<p>Risultati di apprendimento previsti</p> <p><i>Da indicare per ciascun Descrittore di Dublino (DD=</i></p> <p>DD1 Conoscenza e capacità di comprensione</p> <p>DD2 Conoscenza e capacità di comprensione applicate</p> <p>DD3-5 Competenze trasversali</p>	<p><i>I risultati di apprendimento attesi definiscono "l'insieme delle conoscenze, delle abilità e delle competenze (culturali, disciplinari e metodologiche) definite in sede di progettazione del CdS, che lo/la studente/studentessa deve possedere al termine del percorso formativo.</i></p> <p><i>Oltre alle due categorie "conoscenza e comprensione" e "capacità di applicare conoscenza e comprensione" previste dalla SUA-CdS, includono abilità trasversali individuate come "capacità di giudizio", "abilità comunicative", "capacità di apprendimento".</i></p> <p><i>In sintesi, i risultati di apprendimento attesi devono descrivere quanto uno/una studente/studentessa deve conoscere, comprendere ed essere in grado di fare/produrre al termine del processo di apprendimento, in coerenza con quanto previsto dai Descrittori di Dublino pertinenti e definiti dal CdS nella SUA (quadri A4.b.1, A4.b.2 e A4.c).</i></p> <p><i>In funzione del piano didattico del CdS è possibile che i risultati di apprendimento del singolo insegnamento non siano declinabili per tutti e cinque i Descrittori di Dublino dei quali i primi due riguardano obiettivi specifici della disciplina e gli altri tre si riferiscono alle cosiddette "competenze trasversali" (soft skills) che devono essere potenziate mediante attività di raccordo tra le diverse aree culturali o scientifiche che compongono il CdS.</i></p> <p><i>- Descrittore di Dublino 1: conoscenza e capacità di comprensione (che cosa lo/la studente/studentessa conosce al termine dell'insegnamento);</i></p> <ul style="list-style-type: none"> <i>o il linguaggio python a livello intermedio</i> <i>o librerie di calcolo e grafica</i> <i>o programmi di rappresentazione molecolare</i> <i>o alcuni metodi di classificazione e chemometria</i> <p><i>- Descrittore di Dublino 2: capacità di applicare conoscenza e comprensione (che cosa lo/la studente/studentessa sa fare al completamento dell'insegnamento ovvero quali sono le competenze che ha acquisito);</i></p> <ul style="list-style-type: none"> <i>o utilizzare un jupyter notebook</i> <i>o xxxxxxxx applicare le note librerie a problemi di calcolo</i> <i>o xxxxxxxx risolvere problemi di elaborazione di dati strumentali e darne la rappresentazione grafica più adeguata.</i> <p><i>- Descrittore di Dublino 3: capacità critiche e di giudizio (occorre indicare le attività che concorrono allo sviluppo di tali abilità. Per es.: prove di laboratorio, redazione di relazioni scritte, e così via); Gli/Le studenti/studentesse devono avere la capacità di raccogliere ed interpretare i dati (normalmente nel proprio campo</i></p>

	<p><i>di studio) ritenuti utili a determinare giudizi autonomi, inclusa la riflessione su temi sociali, scientifici o etici ad essi connessi.</i></p> <ul style="list-style-type: none"> • Autonomia di giudizio <p><i>Al termine dell'insegnamento lo/la studente/studentessa dovrà essere in grado di</i></p> <ul style="list-style-type: none"> ○ xxxxxxxx scegliere la libreria più adeguata al problema da risolvere ○ xxxxxxxx pianificare la soluzione del problema ○ xxxxxxxxxxxx preparare degli interattori per una maggiore interattività con la soluzione ○ xxxxxxxx scegliere un modello adatto al problema sperimentale presentato. <p><i>- Descrittore di Dublino 4: capacità di comunicare quanto si è appreso (anche in questo caso si devono predisporre attività mirate allo sviluppo, nello/a studente/studentessa, della capacità di comunicare/trasmettere quanto appreso); gli studenti devono saper comunicare informazioni, idee, problemi e soluzioni a interlocutori specialisti e non specialisti.</i></p> <ul style="list-style-type: none"> • Abilità comunicative <p><i>Al termine dell'insegnamento lo/la studente/studentessa dovrà essere in grado di</i></p> <ul style="list-style-type: none"> ○ xxxxxxxxxxxxxxxx, ○ xxxxxxxxxxxxxxxx <p><i>- Descrittore di Dublino 5: capacità di proseguire lo studio in modo autonomo nel corso della vita (occorre indicare quali siano gli strumenti forniti affinché lo studente sappia, al termine dell'insegnamento, proseguire autonomamente nello studio). Gli/Le studenti/studentesse devono aver sviluppato quelle capacità di apprendimento che sono loro necessarie per intraprendere studi successivi con un alto grado di autonomia.</i></p> <ul style="list-style-type: none"> ● Capacità di apprendere in modo autonomo <p><i>Al termine dell'insegnamento lo/la studente/studentessa dovrà essere in grado di</i></p> <ul style="list-style-type: none"> ● xxxxxxxx.cercare e installare da solo librerie aggiuntive, implementare le soluzioni richieste o accedere ai canali di aiuto e alla documentazione.
<p>Contenuti di insegnamento (Programma)</p>	<p><i>Elencare in maniera schematica e completa i principali argomenti che saranno trattati e la progressione in cui saranno affrontati.</i></p> <p><i>Alla lettura deve risultare:</i></p> <ul style="list-style-type: none"> - adeguato a descrivere in maniera esaustiva i contenuti dell'insegnamento e la loro progressione nel percorso di apprendimento; - coerente con il numero di CFU/ETCS complessivi attribuiti all'insegnamento e alla loro eventuale ripartizione in attività frontale/pratica; - idoneo a far comprendere agli/alle studenti/studentesse in quale modo si sviluppi l'insegnamento stesso. - la trasformata di fourier e le sue proprietà - il linguaggio python: sintassi, moduli, definizioni, contenitori - equazioni differenziali ordinarie: metodi di soluzione numerica, soluzione di esempi tipici e utili come cinetica chimica e eq. di schroedinger. - adattamento lineare e polinomiale mono e multivariato - SVM - riduzione del numero di caratteristiche in problemi di classificazione ed adattamento. - statistica: distribuzioni, problemi caratteristici, modellizzazione ed ottimizzazione di esperimenti di laboratorio. - trattamento di segnali: picchi di uno spettro IR - deconvoluzione gaussiana: trattamento di uno spettro UV-VIS - spettro IR: modi normali, calcolo e visualizzazione - metodi di visualizzazione
<p>Testi di riferimento</p>	<p><i>Indicare i testi di riferimento adottati</i></p> <p><i>The quick python book, ed. MEAP</i></p>
<p>Note ai testi di riferimento</p>	<p><i>Indicare il materiale didattico aggiuntivo che può essere utilizzato per specifici approfondimenti</i></p>

	<i>uno o più notebook per ogni lezione</i>
Materiali didattici	<i>Indicare dove è reperibile il materiale didattico (es. classe Teams o altro, si ricorda che in accordo ad AVA3 è auspicabile rendere disponibile il materiale didattico per almeno un triennio dopo l'erogazione dell'insegnamento) tutto il materiale è disponibile su Teams all'indirizzo indicato per il supporto, inoltre tutto il materiale è disponibile agli studenti tramite accesso privato alla piattaforma di calcolo all'indirizzo: https://chimicaweb.chimica.uniba.it/jhub/</i>
Valutazione	
Modalità di verifica dell'apprendimento	<i>Deve consentire allo/alla studente/studentessa di comprendere su quali risultati di apprendimento sarà valutato, cosa ci si attenda che lui conosca o sappia fare, quali sono i criteri di formulazione del voto complessivo, in particolare per il raggiungimento della sufficienza e con quali modalità è accertato il conseguimento dei risultati di apprendimento attesi (si ricorda di considerare quanto al proposito è indicato nel regolamento Didattico del CdS). Le modalità di verifica dettagliate devono essere adeguate ad accertare il raggiungimento dei risultati di apprendimento attesi. Il superamento dell'esame conferisce un'idoneità. Gli studenti possono dimostrare di aver appreso i concetti fondamentali completando l'80% degli esercizi sui notebook o superando un esame orale.</i>

	<p><i>Ad esempio, risultati di apprendimento attesi: la capacità di risolvere un problema tecnico-scientifico o di sviluppare un'analisi di contesto), tra le modalità di valutazione occorrerà prevedere prove adatte a verificare tale competenza.</i></p> <p><i>È importante specificare:</i></p> <ul style="list-style-type: none"> - <i>la modalità di svolgimento se orale, scritta, in laboratorio...etc) e la tipologia (colloquio, prova scritta a risposte chiuse, prova scritta a risposte aperte, prova scritta semi-strutturata, esercitazione pratica in laboratorio, discussione critica di un project work, etc);</i> - <i>la durata minima assegnata alla prova scritta, se prevista, o alla presentazione in aula di progetti, lavori di gruppo etc.</i> - <i>se sono previste prove intermedie o pre-appelli, nel caso specificare in quale momento si svolgeranno (a metà insegnamento, a due terzi...) e il peso rispetto alla valutazione finale (esplicitare se la valutazione finale sarà composta dalla somma delle valutazioni delle prove intermedie, oppure dalla media o dalla media ponderata dei voti);</i> - <i>numero e tipologie delle prove che concorrono alla valutazione finale;</i> - <i>eventuali materiali utili per sostenere la prova e consentiti durante la stessa: dizionari, glossari, manuali, tavole degli elementi, calcolatori;</i> - <i>modalità di comunicazione dei risultati della prova, in caso di prove scritte,</i> <p><i>Nel caso di esami scritti e test è buona prassi mettere a disposizione preferibilmente online i modelli di esame o i test erogati in appelli precedenti.</i></p> <p><i>Non possono essere previste modalità di verifica differenziate per studenti frequentanti e non frequentanti.</i></p>
<p>Criteri di valutazione</p>	<p><i>Per ogni risultato di apprendimento atteso su indicato, descrivere cosa ci si aspetta lo/la studente/studentessa 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 (a titolo di esempio: capacità di organizzare discorsivamente la conoscenza; capacità di ragionamento critico sullo studio realizzato; qualità dell'esposizione, competenza nell'impiego del lessico specialistico, efficacia, linearità etc.).</i></p> <ul style="list-style-type: none"> • <i>Conoscenza e capacità di comprensione:</i> <ul style="list-style-type: none"> ○ • <i>Conoscenza e capacità di comprensione applicate:</i> <ul style="list-style-type: none"> ○ • <i>Autonomia di giudizio:</i> <ul style="list-style-type: none"> ○ • <i>Abilità comunicative:</i> <ul style="list-style-type: none"> ○ ○ • <i>Capacità di apprendere:</i> <ul style="list-style-type: none"> ○
<p>Criteri di misurazione dell'apprendimento e di attribuzione del voto finale</p>	<p><i>Indicare il tipo di valutazione utilizzata (a titolo di esempio: "Il voto finale è attribuito in trentesimi. L'esame si intende superato quando il voto è maggiore o uguale a 18") e le regole con cui viene formulata la valutazione finale.</i></p> <p><i>Quindi, se presente, indicare come sarà valutata la prova scritta (ad esempio punteggi dati ai singoli o gruppi di quesiti), se è prevista una votazione minima per accedere ad un eventuale orale e come il voto conseguito nella prova scritta contribuirà alla valutazione finale. Per la prova orale è possibile indicare se domande/argomenti del programma contribuiscono in modo diverso alla formulazione del voto finale. È anche possibile indicare come e quanto le competenze trasversali previste nei risultati di apprendimento incidano nella valutazione finale, ad esempio specificando che per conseguire una valutazione</i></p>

	<i>elevata lo/la studente/studentessa deve avere sviluppato autonomia di giudizio e adeguata capacità di argomentazione ed esposizione. Infine, è possibile indicare i criteri per l'assegnazione della Lode. Il superamento dell'esame conferisce un'idoneità.</i>
Altro	
	.

FAC.SIMILE SCHEDA DI INSEGNAMENTO IN LINGUA INGLESE
COURSE OF STUDY
ACADEMIC YEAR
ACADEMIC SUBJECT

General information	
Year of the course	2023-2024
Academic calendar (starting and ending date)	
Credits (CFU/ETCS):	3
SSD	CHIMICA
Language	Italian
Mode of attendance	Presence

Professor/ Lecturer	
Name and Surname	Fulvio Ciriaco
E-mail	fulvio.ciriaco@uniba.it
Telephone	3286119458
Department and address	dip. di chimica, university Aldo Moro di Bari
Virtual room	https://teams.microsoft.com/l/channel/19%3a8f84cf9cb1254ffb8e06893f32d2fe1d%40thread.tacv2/General?groupId=eb6c062a-d8f4-4fec-93ff-8c7f9454b672&tenantId=c6328dc3-afdf-40ce-846d-326eead86d49
Office Hours (and modalities: e.g., by appointment, on line, etc.)	tue. 9-11, thu. 21-22

Work schedule			
Hours			
Total	Lectures	Hands-on (laboratory, workshops, working groups, seminars, field trips)	Out-of-class study hours/ Self-study hours
36	8	28	21
CFU/ETCS			
3	2	1	

Learning Objectives	
Course prerequisites	Analysis and linear algebra elements.

Teaching strategie	<i>The course is imparted partly frontally and partly in a series of practical lessons, some of which individual and others in the presence of the teacher. The lessons use the Jupyter Notebook, an instrument that takes together programming and calculus cells and text cells. Students apply the acquired competences to actual chemistry problems they met or are about to meet in other courses, especially the lab. di chim. fis II course.</i>
Expected learning outcomes in terms of	
Knowledge and understanding on:	- python language: intermediate level - calculus and plotting libraries - utilities for molecular representation - a small number of classification methods in chemometry

	<ul style="list-style-type: none">○
Applying knowledge and understanding on:	applying a jupyter notebook applying libraries to calculus problems solving problems dealing with elaboration of experimental data and representing the solutions. <ul style="list-style-type: none">○
Soft skills	searching for the most appropriate libraries for the problem at hand and installing them, implementing correct solutions and finding help in help groups and documentation. <ul style="list-style-type: none">●

	<ul style="list-style-type: none"> ○ XXXXXXXXX ○ XXXXXXXXXXXXX ○ XXXXXXXXX ● <i>Communicating knowledge and understanding</i> ○ XXXXXXXXXXXXXXXX, ○ XXXXXXXXXXXXXXXX ● <i>Capacities to continue learning</i> ○ XXXXXXXXX.
Syllabus	
Content knowledge	<ul style="list-style-type: none"> - <i>the fourier transform: properties, uses, libraries.</i> - <i>the python language in six easy? lessons.</i> - <i>ordinary differential equations: numerical solution with typical examples as chemical kinetics and solution of the schroedinger one-dimensional equation.</i> - <i>linear and polynomial fitting in single and multiple dependent variables</i> - <i>SVM</i> - <i>feature reduction</i> - <i>statistics: distributions, typical problems, modeling and optimization of laboratory procedures.</i> - <i>signal treatment: peak detection</i> - <i>IR spectrum: normal modes solution and dynamical representation</i> - <i>visualization methods</i>
Texts and readings	the quick python book, ed. MEAP
Notes, additional materials	one or moer notebooks for each leasson
Repository	Teams as indicated above and access to https://chimicaweb.chimica.uniba.it/jhub/ where each student has a private account and jupyter hub service.

Assessment	
Assessment methods	completing 80% of the notebook exercises or passing an oral exam.
Assessment criteria	<ul style="list-style-type: none"> ● <i>Knowledge and understanding</i> ○ xxxx ● <i>Applying knowledge and understanding</i> ○ xxxxx ● <i>Autonomy of judgment</i> ○ xxxx ● <i>Communicating knowledge and understanding</i> ○ xxxxxxxxxxxxxxxx ● <i>Communication skills</i> ○ xxxxxxxxxxxxxxxx ● <i>Capacities to continue learning</i> ○
Final exam and grading criteria	
Further information	
	.