

# Programma per il corso di Metodi di Calcolo per la Chimica.

Fulvio Ciriaco

## Lezioni frontali

- Introduzione al software per le esercitazioni (octave, gamess-us, gabedit, gnuplot) ed alle alternative.
- Brevi cenni della sintassi e funzionalità di Matlab/Octave e dell'ambito di utilizzo.
- La trasformata di Fourier: proprietà matematiche. Principio di indeterminazione.
- La trasformata di Fourier discreta e la FFT. Condizioni al contorno ed implicazioni. Apodizzazione.
- Soluzione di problemi agli autovalori tramite espansione su un set di base.
- Soluzione di equazioni differenziali ordinarie.
- Concetti base di statistica.
- Formule di Bayes.
- Metodi di interpolazione e di fit dei dati.

## Esercitazioni

- Trasformata di Fourier discreta di diverse funzioni. Applicazione di filtri di apodizzazione su spettri IR simulati e reali. Visualizzazione delle proprietà fondamentali della trasformata e della sua norma.
- L'oscillatore armonico. Visualizzazione delle soluzioni. Espansione delle soluzioni dell'oscillatore anarmonico sulla base di soluzioni dell'oscillatore armonico. Calcolo di valori di aspettazione e di transizione, in particolare del momento di dipolo e giustificazione delle regole di selezione per gli oscillatori.

- Metodi ODE. Soluzione delle equazioni di una cinetica Michaelis-Menten. Soluzione dell'equazione di Schrödinger monodimensionale e applicazione delle condizioni al contorno. Applicazione al problema della particella in un potenziale squadrato, effetto tunnel contro un muro rettangolare e problema dell'oscillatore anarmonico.
- Applicazione delle formule di Bayes ad un problema modello: picco gaussiano in presenza di background e rumore di fondo. Ottenimento dei valori dei parametri al massimo della PDF, curve di livello della PDF. Evidenziazione della correlazione tra i parametri tramite l'orientazione delle curve di livello e regioni di confidenza.
- Metodi di interpolazione e di fit, specificità ed interpretazione.