



Metodi di Calcolo per la Chimica



Metodi di Calcolo per la Chimica

Contatti

Mirco Zerbetto: mirco.zerbetto@unipd.it

Agostino Migliore: agostino.migliore@unipd.it

Materiale Didattico

Appunti di lezione (<https://stem.elearning.unipd.it/course/view.php?id=7799>,
passwd: **calcolo**)

"Pensare in Python: come pensare da informatico" (<https://www.python.it/doc/libri/>)

Metodi di Calcolo per la Chimica

Orario

Martedì: 13:30 – 14:15, aula M

Mercoledì: 16:30 – 18:15, aula M

Venerdì: 13:30 – 14:15, aula M

Tipologia lezioni (6 CFU: 3 lezione, 3 esercitazione)

Frontali

Esercitazioni al calcolatore

Problem solving di gruppo

Esami (sessione estiva)

18 giugno 2024, ore 8:30, aula N

2 luglio 2024, ore 8:30, aula M

Modalità d'esame

Orale con discussione a partire da un progettino sviluppato autonomamente sui temi del corso.

Metodi di Calcolo per la Chimica

Programma

1. Codice binario, rappresentazione dei numeri in un computer, errori di arrotondamento (2 ore)
2. Introduzione al *coding* (18 ore):
 - a. basi della programmazione: variabili, funzioni, array, condizioni, loop, diagrammi di flusso in pseudocodice (2 ore)
 - b. linguaggio Python e live scripts con Jupyter (12 ore)
 - c. live scripts in Matlab (4 ore)
3. Soluzione di problemi specifici
 - a. Integrazione, derivazione e ricerca di minimi (6 ore)
 - b. Trasformate di Fourier 1D e 2D (4 ore)
 - c. Soluzioni di equazioni lineari e non-lineari (10 ore)
 - d. Soluzione di equazioni differenziali (6 ore)
 - e. Interpolazione e *modeling* statistico (PCA + ML) (8 ore)

Metodi di Calcolo per la Chimica

Istruzioni per l'installazione dei programmi necessari alle esercitazioni Python

1 Installazione di Anaconda (comprende python):

a. scaricare il file di installazione da:

<https://www.anaconda.com/products/individual#Downloads>



Anaconda Installers

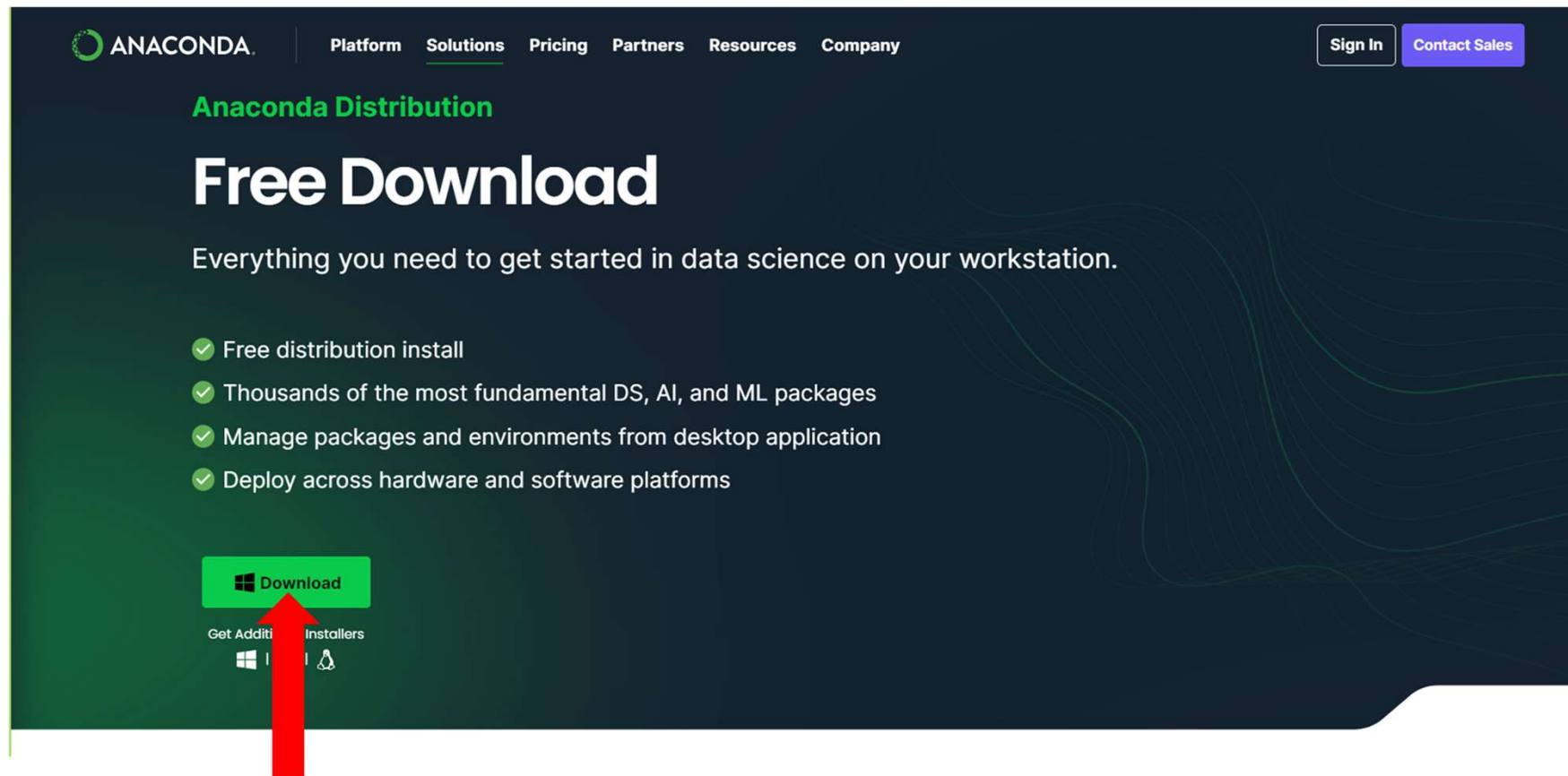
| Windows | Mac | Linux |
|--|--|--|
|  |  |  |
| Python 3.11 | Python 3.11 | Python 3.11 |
| ↓ 64-Bit Graphical Installer (898.6 MB) | ↓ 64-Bit Graphical Installer (610.5 MB) | ↓ 64-Bit (x86) Installer (1015.6 MB) |
| | ↓ 64-Bit Command Line Installer (612.1 MB) | ↓ 64-Bit (Power8 and Power9) Installer (473.8 MB) |
| | ↓ 64-Bit (M1) Graphical Installer (643.9 MB) | ↓ 64-Bit (AWS Graviton2 / ARM64) Installer (727.4 MB) |
| | ↓ 64-Bit (M1) Command Line Installer (645.6 MB) | ↓ 64-bit (Linux on IBM Z & LinuxONE) Installer (340.8 MB) |



Metodi di Calcolo per la Chimica

Selezionare 64-Bit Graphical Installer

Alternativamente, cliccando su Download nella parte iniziale della pagina web:



si effettua direttamente il download per Windows

2. Eseguire il programma di installazione, lasciando le opzioni di default (in particolare, “ Install for: Just Me “) quando richiesto

Metodi di Calcolo per la Chimica

2. Installazione di Visual Studio Code

a. Scaricare il file di installazione da: <https://code.visualstudio.com/download>

Visual Studio Code Docs Updates Blog API Extensions FAQ Learn Search Docs Download

Version 1.86 is now available! Read about the new features and fixes from January.

Download Visual Studio Code

Free and built on open source. Integrated Git, debugging and extensions.

Windows (Windows 10, 11)

- User Installer: x64, Arm64
- System Installer: x64, Arm64
- .zip: x64, Arm64
- CLI: x64, Arm64

Linux

- .deb** (Debian, Ubuntu): x64, Arm32, Arm64
- .rpm** (Red Hat, Fedora, SUSE): x64, Arm32, Arm64
- .tar.gz: x64, Arm32, Arm64
- Snap: Snap Store
- CLI: x64, Arm32, Arm64

Mac (macOS 10.15+)

- .zip: Intel chip, Apple silicon, Universal
- CLI: Intel chip, Apple silicon

Selezionare “User Installer” 64 bit per Windows or Mac (a seconda del sistema operativo usato)

b. Eseguire il programma di installazione, lasciando le opzioni di default