

Nazwa przedmiotu			Kod ECTS
Programowanie II			13.3.0493
Nazwa jednostki prowadzącej przedmiot			
Katedra Chemii Teoretycznej			
Studia			
wydział	kierunek	poziom	drugiego stopnia
Wydział Chemii	Chemia	forma	stacjonarne
		moduł	chemia obliczeniowa
		specjalnościowy	
		specjalizacja	wszystkie
Nazwisko osoby prowadzącej (osób prowadzących)			
prof. UG, dr hab. Cezary Czaplewski; prof. dr hab. Józef Liwo; dr Artur Giełdź			
Formy zajęć, sposób ich realizacji i przypisana im liczba godzin			Liczba punktów ECTS
Formy zajęć			4 zajęcia 45 godz. konsultacje 10 godz. praca własna studenta 45 godz. RAZEM: 100 godz. - 4 ECTS
Sposób realizacji zajęć			
zajęcia w sali dydaktycznej			
Liczba godzin			
Wykład: 15 godz., Ćw. laboratoryjne: 30 godz.			
Cykl dydaktyczny			
2016/2017 letni			
Status przedmiotu	Język wykładowy		
obowiązkowy	polski		
Metody dydaktyczne	Forma i sposób zaliczenia oraz podstawowe kryteria oceny lub wymagania egzaminacyjne		
ćwiczenia w pracowni komputerowej	Sposób zaliczenia		
	- Egzamin		
	- Zaliczenie na ocenę		
	Formy zaliczenia		
	- ustalenie oceny zaliczeniowej na podstawie ocen cząstkowych otrzymywanych w trakcie trwania semestru		
	- wykonanie pracy zaliczeniowej - projekt lub prezentacja		
	Podstawowe kryteria oceny		
	Ćwiczenia laboratoryjne: średnia arytmetyczna ocen cząstkowych otrzymywanych w trakcie trwania semestru za pisemne sprawozdania z wykonanych ćwiczeń laboratoryjnych, głównym kryterium oceny jest poprawność merytoryczna sprawozdań. Wykłady: wykonanie projektu polegającego na zaprojektowaniu z zastosowaniem języka FORTRAN wybranego i uzgodnionego z prowadzącym lub wskazanego przez prowadzącego algorytmu związanego z chemią. Głównym kryterium oceny jest poprawność algorytmu, dodatkowym oryginalność zaproponowanych rozwiązań.		
Sposób weryfikacji założonych efektów kształcenia			

Sposób weryfikacji przyswojonej wiedzy:

Przyswojona przez studenta wiedza w zakresie prostych algorytmów matematycznych (K_W06) oraz zastosowań programowania w chemii, która wykracza poza kanoniczny kurs chemii (K_W05) jest weryfikowana poprzez ocenę rozwiązań zadawanych w czasie zajęć problemów.

Sposób weryfikacji nabycia umiejętności:

Umiejętności studenta w zakresie programowania w języku FORTRAN 77 są weryfikowane przez napisanie programu z zastosowaniem języka FORTRAN 77 dla wybranego i uzgodnionego z prowadzącym lub wskazanego przez prowadzącego algorytmu związanego z chemią (K_U02). Głównym kryterium oceny jest poprawność algorytmu, dodatkowym oryginalność zaproponowanych rozwiązań.

Sposób weryfikacji nabrania kompetencji społecznych:

W toku rozwiązywania zadań weryfikowane są zdolności studenta do krytycznego myślenia oraz umiejętności wyszukiwania koniecznych materiałów. Poprzez realizowanie projektów zespołowych weryfikowana jest umiejętność współpracy i komunikatywność. (K_K01)

Określenie przedmiotów wprowadzających wraz z wymogami wstępnymi

A. Wymagania formalne

Technologia informacyjna

B. Wymagania wstępne

umiejętność pracy w systemie Unix

Cele kształcenia

Umiejętność poprawnego projektowania podstawowych algorytmów z wykorzystaniem dostępnych procedur bibliotecznych i procedur napisanych przez innych programistów, podstawy programowania w języku Fortran.

Treści programowe

Hierarchiczne i modułowe języki programowania. Historia języka FORTRAN od FORTRANu I do FORTRANu 2000. FORTRAN 77. Struktura programu w języku FORTRAN 77. Kompilacja programu. Moduły źródłowe, półskompilowane oraz moduł wykonywalny. Struktura źródła programu w FORTRANie: format ustalony i format swobodny. Instrukcje i dyrektywy. Podstawowe typy danych w FORTRANie. Stałe i zmienne. Deklaracje typów (rozszerzenie FORTRANu 77). Nadawanie wartości początkowych zmiennych na etapie ich deklaracji. Podstawowe instrukcje wejścia/wyjścia. Dyrektywa FORMAT. Wyrażenia w FORTRANie. Instrukcja przypisania. Instrukcje warunkowe (prosta, arytmetyczna, złożona). Instrukcje skoku (prosta, obliczona i wyznaczona). Instrukcje pętli. Rozszerzenia FORTRANu 77: instrukcja CASE, instrukcja FORALL i instrukcja WHERE. Zaawansowane operacje wejścia/wyjścia oraz operacje na plikach. Dyrektywy preprocesora. Użycie programu make do składania programu wykonywalnego z modułów. Posługiwanie się debuggerem przy uruchamianiu programu. Pogromy w językach mieszanych; dołączanie procedur napisanych w języku C do programu w FORTRANie i odwrotnie.

Wykaz literatury

Fortran 77. Podręczna pamięć programisty, Ryszard Kott, WNT 1989
Programowanie w języku FORTRAN 77, Ryszard Kott, Krzysztof Walczak, WNT 1991

Efekty kształcenia

(obszarowe i kierunkowe)

K_W05: operuje poszerzoną wiedzą w zakresie studiowanej specjalności;
K_W06: stosuje matematykę w zakresie niezbędnym do zrozumienia, opisu i modelowania procesów chemicznych o średnim poziomie złożoności;
K_U02: krytycznie ocenia wyniki przeprowadzanych eksperymentów, dokonywanych obserwacji i obliczeń teoretycznych, a także dyskutuje błędy;
K_K01: zna ograniczenia własnej wiedzy, rozumie konieczność dalszego kształcenia się i potrafi inspirować do tego inne osoby;

Wiedza

Student nazywa i opisuje typy danych w oparciu o język programowania FORTRAN 77. Rozróżnia instrukcje sterujące języka FORTRAN 77 oraz jego rozszerzeń. Wymienia dostępne procedury biblioteczne.

Umiejętności

Student projektuje proste algorytmy, zapisuje je z zastosowaniem języka FORTRAN 77, a następnie kompiluje i testuje uzyskane programy. Wykorzystuje dostępne procedury biblioteczne i procedury napisane przez innych programistów w swoich programach.

Kompetencje społeczne (postawy)

Student wyrabia w sobie umiejętność precyzyjnego i logicznego wnioskowania. Poznaje zasady bezpiecznej, odpowiedzialnej i efektywnej pracy na komputerach podłączonych do sieci. Wykazuje odpowiedzialność za konto osobiste w wielodostępnym systemie komputerowym oraz za bezpieczeństwo jego zasobów. Wyrabia w sobie umiejętność pracy w zespole.

Kontakt

cezary.czaplewski@ug.edu.pl