Tecniche di programmazione in chimica computazionale

Introduction

Emanuele Coccia

Dipartimento di Scienze Chimiche e Farmaceutiche

Contatti

- ecoccia@units.it
- edificio C11, quarto piano, stanza 453/454
- appuntamento: mercoledì 15h-17h

Contatti

- ecoccia@units.it
- edificio C11, quarto piano, stanza 453/454
- appuntamento: mercoledì 15h-17h
- Registratevi su Moodle

Struttura del corso

- Introduzione pratica al sistema operativo Linux

Struttura del corso

- Introduzione pratica al sistema operativo Linux
- Elementi di programmazione in Fortran90

Struttura del corso

- Introduzione pratica al sistema operativo Linux
- Elementi di programmazione in Fortran90
  - Direttive per il compilatore

Struttura del corso

- Introduzione pratica al sistema operativo Linux
- Elementi di programmazione in Fortran90
  - Direttive per il compilatore
  - Tipi di variabili

Struttura del corso

- Introduzione pratica al sistema operativo Linux
- Elementi di programmazione in Fortran90
  - Direttive per il compilatore
  - Tipi di variabili
  - Operatori ed espressioni

Struttura del corso

- Introduzione pratica al sistema operativo Linux
- Elementi di programmazione in Fortran90
  - Direttive per il compilatore
  - Tipi di variabili
  - Operatori ed espressioni
  - Cicli, scelte e decisioni

Struttura del corso

- Introduzione pratica al sistema operativo Linux
- Elementi di programmazione in Fortran90
  - Direttive per il compilatore
  - Tipi di variabili
  - Operatori ed espressioni
  - Cicli, scelte e decisioni
  - Subroutines e funzioni

Struttura del corso

- Introduzione pratica al sistema operativo Linux
- Elementi di programmazione in Fortran90
  - Direttive per il compilatore
  - Tipi di variabili
  - Operatori ed espressioni
  - Cicli, scelte e decisioni
  - Subroutines e funzioni
  - Variabili globali e l'utility make

Struttura del corso

- Introduzione pratica al sistema operativo Linux
- Elementi di programmazione in Fortran90
  - Direttive per il compilatore
  - Tipi di variabili
  - Operatori ed espressioni
  - Cicli, scelte e decisioni
  - Subroutines e funzioni
  - Variabili globali e l'utility make
  - Tipi derivati

Struttura del corso

- Introduzione pratica al sistema operativo Linux
- Elementi di programmazione in Fortran90
  - Direttive per il compilatore
  - Tipi di variabili
  - Operatori ed espressioni
  - Cicli, scelte e decisioni
  - Subroutines e funzioni
  - Variabili globali e l'utility make
  - Tipi derivati
  - Formato I/O e files

Struttura del corso

- Introduzione pratica al sistema operativo Linux
- Elementi di programmazione in Fortran90
  - Direttive per il compilatore
  - Tipi di variabili
  - Operatori ed espressioni
  - Cicli, scelte e decisioni
  - Subroutines e funzioni
  - Variabili globali e l'utility make
  - Tipi derivati
  - Formato I/O e files
  - Ottimizzazione di codici (cenni)

Struttura del corso

- Introduzione pratica al sistema operativo Linux
- Elementi di programmazione in Fortran90
  - Direttive per il compilatore
  - Tipi di variabili
  - Operatori ed espressioni
  - Cicli, scelte e decisioni
  - Subroutines e funzioni
  - Variabili globali e l'utility make
  - Tipi derivati
  - Formato I/O e files
  - Ottimizzazione di codici (cenni)
- Esempi legati alla chimica computazionale (quantistica)

Come e dove studiare

- Appunti delle lezioni

Come e dove studiare

- Appunti delle lezioni
- Open books e tutorial in rete

Come e dove studiare

- Appunti delle lezioni
- Open books e tutorial in rete
- Libri:
  - Fortran 90/95 for Scientists and Engineers, S. J. Chapman, McGraw-Hill College
  - Introduction to Programming with Fortran, I. Chivers & J. Sleightholme, Springer-Nature New York Inc

Modalità d'esame

- Prova scritta: scrivere un codice Fortran, compilarlo e produrre i risultati richiesti
- Prova orale: discussione del compito scritto e delle tematiche affrontate durante il corso