

UNIDAD: <b>IZTAPALAPA</b>		DIVISIÓN <b>CIENCIAS BÁSICAS E INGENIERÍA</b>	
NIVEL: <b>LICENCIATURA</b>		EN <b>QUÍMICA</b>	
CLAVE: <b>2141089</b>	UNIDAD DE ENSEÑANZA - APRENDIZAJE: <b>PROGRAMACIÓN APLICADA A LA QUÍMICA</b>		TRIM: <b>V-VII</b>
HORAS TEORÍA: 1	SERIACIÓN <b>213191</b>		CRÉDITOS: <b>6</b>
HORAS PRÁCTICA: 4			OPT/OBL: <b>OBL.</b>

**OBJETIVO(S):**

**GENERALES**

Que al final del curso el alumno sea capaz de:

- Comprender los elementos básicos de un lenguaje de programación de alto nivel y de los métodos numéricos y aplicarlos a la solución de algunos problemas sencillos de la química.
- Utilizar algoritmos numéricos y codificar programas que permitan modelar fenómenos químicos simples.

**ESPECÍFICOS**

Que al final del curso el alumno sea capaz de:

- Reconocer los fundamentos del cómputo científico.
- Utilizar los comandos básicos del sistema operativo tipo UNIX.
- Comprender las estructuras básicas de un lenguaje de programación de alto nivel (FORTRAN o C).
- Usar las estructuras básicas de un lenguaje de alto nivel para programar métodos numéricos sencillos.
- Aplicar los elementos de programación y métodos numéricos aprendidos en la resolución de algunos problemas de la química.

**CONTENIDO SINTÉTICO:**

1. Introducción al cómputo científico.
  - 1.1. Sistema operativo UNIX.
  - 1.2. Lenguajes de programación.
  - 1.3. Compilación

<b>NOMBRE DEL PLAN</b> <b>LICENCIATURA EN QUÍMICA</b>		<b>2/3</b>
<b>CLAVE</b> <b>2141089</b>	<b>UNIDAD DE DE ENSEÑANZA-APRENDIZAJE</b> <b>PROGRAMACIÓN APLICADA A LA QUÍMICA</b>	

2. Principios de programación.
  - 2.1. Operaciones aritméticas.
  - 2.2. Condicionales.
  - 2.3. Ciclos.
  - 2.4. Subprogramas.
  - 2.5. Arreglos.
3. Métodos numéricos elementales.
  - 3.1. Resolución de ecuaciones no lineales.
  - 3.2. Sistemas de ecuaciones: eliminación de Gauss; diagonalización.
  - 3.3. Solución numérica de ecuaciones diferenciales.
4. Solución computacional de un problema de interés químico.

**MODALIDADES DE CONDUCCIÓN DEL PROCESO DE ENSEÑANZA-APRENDIZAJE:**

- El curso consiste en una sesión de teoría (1 h) y 2 sesiones prácticas (2 h cada una) por semana.
- Las sesiones prácticas se desarrollarán en un laboratorio de cómputo, en donde el alumno podrá compilar y ejecutar sus programas, de acuerdo con las especificaciones que indique el profesor en la sesión teórica.
- Se desarrollará un proyecto: Resolución computacional de uno o varios problemas sencillos de la química.
- Es recomendable que el alumno aproveche sus programas elaborados a lo largo del curso y que los reutilice en la generación de códigos más complejos y en el proyecto.

**MODALIDADES DE EVALUACIÓN:**

Evaluación Global:

- Evaluaciones periódicas, tomando en cuenta principalmente el trabajo desarrollado en las sesiones prácticas.
- Se recomienda que el alumno realice todo el trabajo en las sesiones prácticas y que se evalúe su desempeño en cada sesión, tomando en cuenta: los objetivos de la actividad, las características y la ejecución del código generado, los resultados que proporciona el programa compilado (tanto en los casos de prueba como en los problemas a resolver y en situaciones especiales), etc.

Evaluación de Recuperación:

- El curso no podrá acreditarse mediante una evaluación de recuperación.

NOMBRE DEL PLAN LICENCIATURA EN QUÍMICA		3/3
CLAVE 2141089	UNIDAD DE DE ENSEÑANZA-APRENDIZAJE PROGRAMACIÓN APLICADA A LA QUÍMICA	

**BIBLIOGRAFÍA NECESARIA O RECOMENDABLE:**

1. Brainerd. W.S., *Programmer's guide to FORTRAN 90*, Springer, 1996.
2. Burden, R.L., y Faires, J.D., *Análisis numérico*, 2a edición, Iberoamericana, 1996.
3. Cedillo, A., *Manual de prácticas para el curso Química Computacional*, [www.izt.fqt.uam.mx/cedillo](http://www.izt.fqt.uam.mx/cedillo), 2004.
4. Chapman, S., *FORTRAN 95/2003 for scientists and engineers*, McGraw, 2008.
5. Gerald, C.F., *Applied Numerical Analysis*, 7th edition, Addison, 2003.
6. Joyanes, L., *Fundamentos de programación*, 2a edición, McGraw, 1996.
7. Kernighan, B.W. y Pike, R., *El entorno de programación UNIX*, Prentice, 1987.
8. Kernighan, B.W. y Ritchie, D.M., *El lenguaje de programación C*, 2a edición, Prentice, 1991.
9. Levine, G., *Introducción a la computación y a la programación estructurada*, 2a edición, McGraw, 1989.
10. Qualline, S., *Practical C programming*, O'Reilly, 1991.
11. Roberts, E.S., *The art and science of C*, Addison, 1995.
12. Rogers, D.W., *Computational chemistry using the PC*, 3rd edition, Wiley, 2003.
13. Sobell, M.G., *UNIX System V: A practical guide*, 3rd edition, Addison, 1995.
14. Stevens, A., *Al Stevens teaches C*, M&T, 1994.
15. WH Press et al, *Numerical recipes*, 3<sup>rd</sup> edition, Cambridge, 2007.