

2141089

Programación aplicada a la Química
Trimestre 23-O, Grupo CF01

Lunes (11:00 am-1:00 pm)
Jueves (11:00 am-2:00pm)

Salón AT-106



Profesor: Marcos Rivera Almazo
Email: mralm@xanum.uam.mx
Sitio web: <https://molecular-mar.github.io/cursos/paq>
Cubículo: AT-248
Horario de asesoría: Martes, 11-12 am

Objetivos 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.

Objetivos específicos:

- Reconocer los fundamentos del cómputo científico.
- Utilizar los comandos básicos del sistema operativo tipo UNIX.
- Comprender las estructuras básicas de un lenguaje de alto nivel.
- Aplicar los elementos de programación y métodos numéricos aprendidos para la resolución de un problema de la química.

Temario:

- Introducción al cómputo científico.
 - Sistema operativo UNIX.
 - Lenguajes de programación.
 - *Compilación/Ejecución.*
- Principios de programación
 - Operaciones aritméticas.
 - Condicionales.
 - Ciclos.
 - *Subprogramas/Funciones.*
 - Arreglos.
- Métodos numéricos elementales

- Resolución de ecuaciones no lineales.
- Sistemas de ecuaciones: eliminación de Gauss; diagonalización.
- Solución numérica de ecuaciones diferenciales.
- Solución computacional de un problema de interés químico

Modalidad de conducción:

- 5 horas de clase por semana:
 - 1 hora de teoría
 - 4 horas actividades prácticas en equipo de cómputo
- Las actividades prácticas van encaminadas a que el alumno ejecute y verifique programas, haciendo uso de los conceptos señalados durante las explicaciones teóricas.
- Entrega de productos finales:
 - Portafolio consistente en las prácticas realizadas a lo largo del curso **debidamente documentadas**.
 - Proyecto consistente en la resolución computacional de uno o varios problemas sencillos de la química.

Modalidad de evaluación:

| | |
|--------------------------|-----|
| Portafolio | 40% |
| Exámenes (Semana 5 y 10) | 30% |
| Proyecto (Semana 10-11) | 30% |
| | |
| [0, 6) | NA |
| [6,0, 7,5) | S |
| [7,5, 8,4) | B |
| [8,4, 10,0] | MB |