

Clave UEA: 2141089

Programación Aplicada a la Química
Trimestre 24-I, Grupo CF01

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

Salón AT-105



Profesor: Marcos Rivera Almazo

Email: mrivera@izt.uam.mx

Sitio web: <https://molecular-mar.github.io/cursos/paq>

Aula virtual: <https://virtuami.izt.uam.mx/aulas/avmacca/course/view.php?id=1227>

Cubículo: AT-248

Horario de asesoría: Martes 10-12 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 químicos.

Modalidad de evaluación:

Portafolio	20%
Tareas	20%
Exámenes (Sesiones 9 y 18)	20%
Proyecto (Semana 10-11)	30%

[0, 6)	NA
[6.0, 7.5)	S
[7.5, 8.5)	B
[8.5, 10.0]	MB

Bibliografía:

- Charles J. Weiss, Scientific Computing for Chemists with Python, <https://weisscharlesj.github.io/SciCompforChemists/notebooks/introduction/intro.html>, consultado el 11 de Noviembre de 2023.
- Lynch, S., Python for Scientific Computing and Artificial Intelligence, Chapman and Hall/CRC, 2023. <https://doi.org/10.1201/9781003285816>
- Cedillo, A., Manual de prácticas para el curso Química Computacional, http://www.fqt.izt.uam.mx/Profes/ACO/qcomp_n.pdf, 2004.
- Kiusalaas, J., Numerical Methods in Engineering with Python 3, 3ª edición, Cambridge: Cambridge University Press, 2013