Laboratorios de computación salas A y B

Profesor:	M.I. Heriberto García Ledezma
Asignatura:	Fundamentos de programación
Grupo:	21
No. de práctica(s):	1
Integrante(s):	Yahir Barojas Morales
No. de lista o brigada:	10
Semestre:	2024-1
Fecha de entrega:	30/08/2023
Observaciones:	

CALIFICACIÓN:

OBJETIVOS

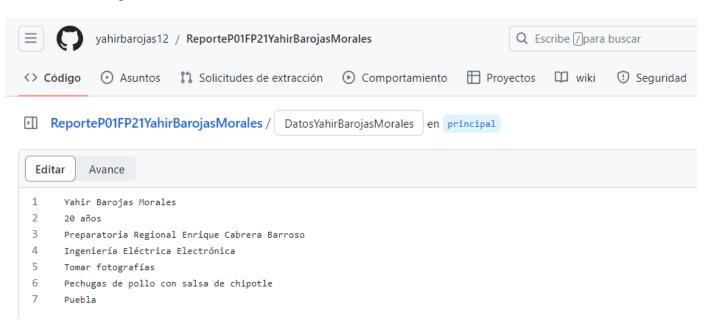
El alumno conocerá y utilizará herramientas de software que ofrecen las Tecnologías de la Información y Comunicación que le permitan realizar actividades y trabajos académicos de forma organizada y profesional a lo largo de la vida escolar, tales como manejo de repositorios de almacenamiento y buscadores con funciones avanzadas

DESARROLLO

Realice la "Actividad en casa", propuesta en la página 20 del manual de práctica de laboratorio de fundamentos de programación.

Creando nuestro primer repositorio

 Crear un archivo llamado "DatosYahirBarojasMorales" donde incluyas algunos datos del alumno

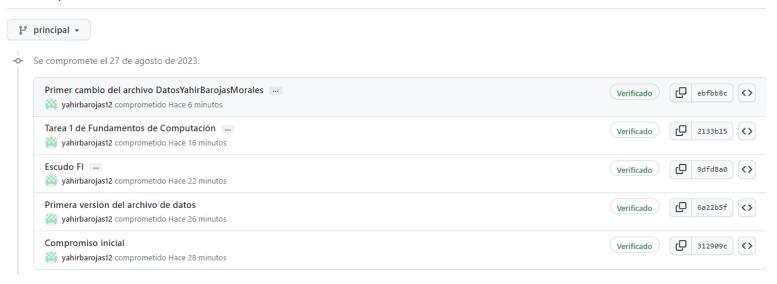


2. Captura de pantalla de la sección de administración del repositorio donde se observan los archivos que contiene.



3. Revisar el historial de nuestro repositorio donde se pueda observar el número de commits realizados

Se compromete



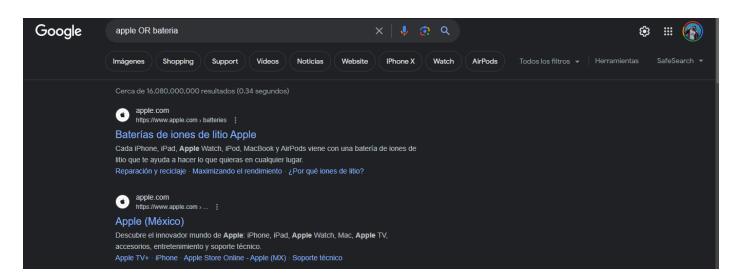
2. Con el buscador de google, **realizar una búsqueda de información en Internet** (diferente a las realizadas en la sesión de laboratorio) con los siguientes operadores: signo menos, OR, filetype, comillas dobles y operador define. Además, utilice las herramientas también señaladas en la práctica (calculadora, conversión de unidades, graficas de funciones, google scholar).

Signo menos



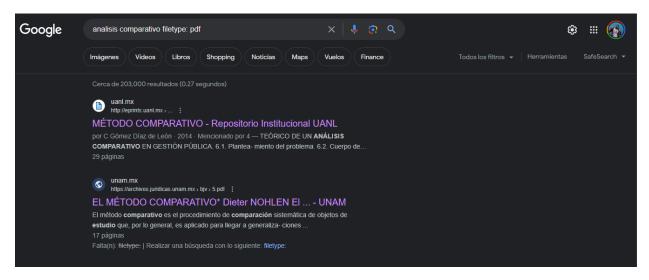
Se buscó la definición de algoritmo el cual es un conjunto de instrucciones sistemáticas y previamente definidas que se utilizan para realizar una determinada tarea. En este caso, el operador menos omitió los resultados de búsqueda relacionados a Wikipedia

OR



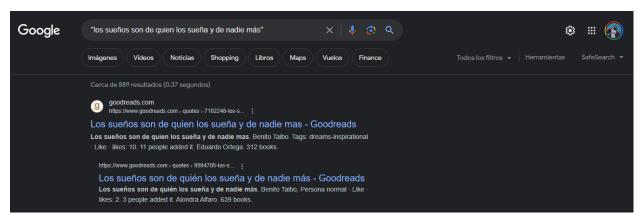
Está búsqueda pretende buscar información relacionada con Apple o sus baterías, ya sea como información individual o una mezcla de ambas como lo dice la primera página en la imagen "Baterías de iones de litio Apple". Al utilizar OR, ampliamos los resultados de búsqueda al incluir cualquiera de los términos o todos ellos a la vez.

Filetype



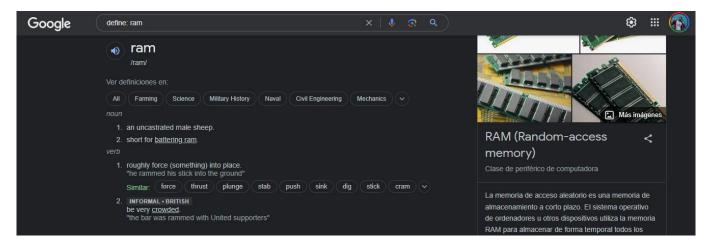
El método comparativo es un método para confrontar dos o varias propiedades enunciadas en dos o más objetos en un determinado tiempo. En este caso, filetype nos permite buscar páginas que tengan el mismo tipo de archivo, en este caso: pdf

Comillas dobles ""



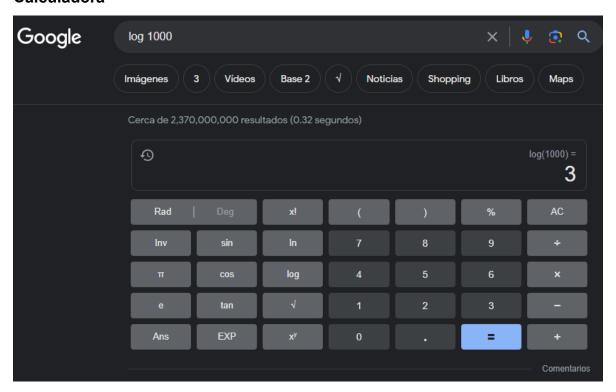
En este caso, buscamos una frase del libro: "Persona normal", al colocar las comillas, buscamos una palabra o frase en orden específico, es decir nos muestran las páginas donde hay coincidencias exactas

Operador define



La memoria RAM es la memoria principal de un dispositivo, su función es almacenar de forma temporal los datos de los programas que estás utilizando en este momento. En este caso, el operador define sirve para encontrar el significado de la palabra.

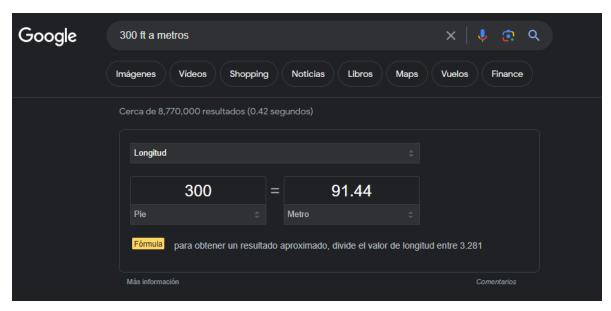
Calculadora



Google también nos brinda la posibilidad de hacer operaciones matemáticas, debido a que cuenta con una calculadora integrada, basta con escribir la operación y saldrá

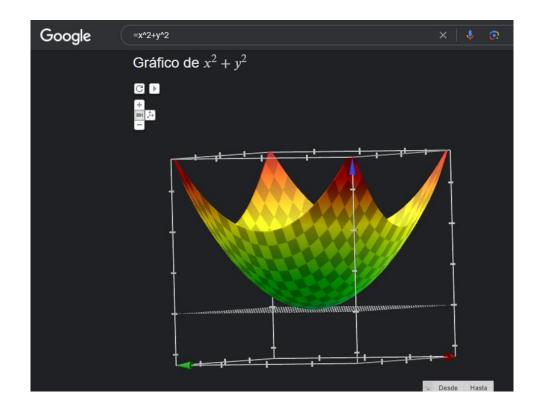
dicha herramienta. Efectivamente comprobamos que el logaritmo natural de 1000 es 3

Conversión de unidades



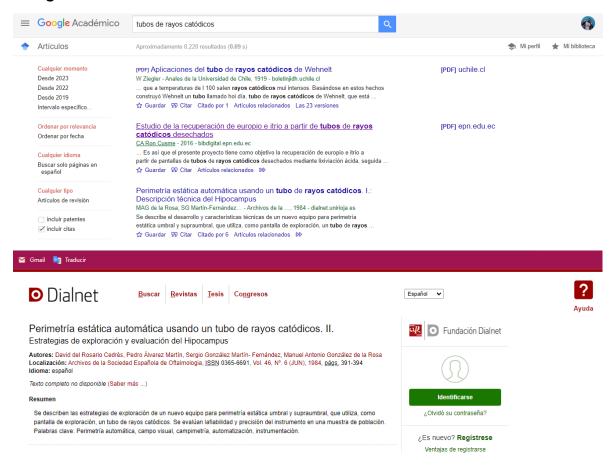
Otra de las funciones es convertir unidades, en este caso se solicitó calcular el valor de 300 ft a metros donde podemos observar nuestro resultado y comprobarlo, ya que, 1 ft = 0.3048m

Graficas de funciones



Considero que esta herramienta es muy útil para materias como Calculo Vectorial o incluso Cálculo Diferencial porque tenemos la posibilidad de modelar funciones y analizar su comportamiento. También es una manera fácil de comprobar nuestros resultados

Google Scholar



Google Académico es una excelente herramienta para acudir a fuentes confiables, ya que es un buscador que nos permite localizar documentos académicos como artículos, tesis, libros y resúmenes científicos





3. Cuando ya tengan su cuenta para acceder, desde la página inicial de http://dgb.unam.mx/, hacer una búsqueda desde el Descubridor de información, de algún tema que sepan que se trabaja actualmente en la ingeniería que están estudiando.

Una vez que se muestre la lista de resultados, hagan una depuración a través del panel izquierdo de la pantalla de resultados con los siguientes criterios: Disponible en la Colección de bibliotecas, Texto completo, antigüedad máxima de 4 años, sólo artículos de revistas. Si gustan, indiquen otros criterios de depuración.

Por último, seleccionar uno de los resultados de la lista y descargar el archivo. Abran ese archivo, hagan una captura de la primera página de ese archivo e inclúyanla en el reporte de la práctica.



Contents lists available at ScienceDirect

Computer Physics Communications

www.elsevier.com/locate/cpc



KSSOLV 2.0: An efficient MATLAB toolbox for solving the Kohn-Sham equations with plane-wave basis set (*), (*)



Shizhe Jiao ^a, Zhenlin Zhang ^a, Kai Wu ^a, Lingyun Wan ^a, Huanhuan Ma ^a, Jielan Li ^a, Sheng Chen ^a, Xinming Qin ^a, Jie Liu ^a, Zijing Ding ^a, Jinlong Yang ^a, Yingzhou Li ^{b,*}, Wei Hu ^{a,*}, Lin Lin ^{c,d,**}, Chao Yang ^{d,*}

- ^a School of Future Technology, Department of Chemical Physics, and Anhui Center for Applied Mathematics, University of Science and Technology of China, Jinzhai Road No.96, Hefei, 230026, PR China
- School of Mathematical Sciences, Fudan University, Handan Road No.220, Shanghai, 200433, PR China
- Department of Mathematics, University of California, Berkeley, CA 94720, USA
 Applied Mathematics and Computational Research Division, Lawrence Berkeley National Laboratory, Berkeley, CA 94720, USA

ARTICLE INFO

Article history: Received 5 March 2022 Received in revised form 10 May 2022 Accepted 17 May 2022 Available online 2 June 2022

Keywords: Kohn-Sham solver MATLAB Plane-wave basis set Density functional theory Numerical algorithms

ABSTRACT

KSSOLV (Kohn-Sham Solver) is a MATLAB toolbox for performing Kohn-Sham density functional theory (DFT) calculations with a plane-wave basis set. KSSOLV 2.0 preserves the design features of the original KSSOLV software to allow users and developers to easily set up a problem and perform ground-state calculations as well as to prototype and test new algorithms. Furthermore, it includes new functionalities such as new iterative diagonalization algorithms, k-point sampling for electron band structures, geometry optimization and advanced algorithms for performing DFT calculations with local, semi-local, and hybrid exchange-correlation functionals. It can be used to study the electronic structures of both molecules and solids. We describe these new capabilities in this work through a few use cases. We also demonstrate the numerical accuracy and computational efficiency of KSSOLV on a variety of examples.

Program summary

Program title: Kohn-Sham Solver 2.0 (KSSOLV 2.0) CPC Library link to program files: https://doi.org/10.17632/pp8vgvfcv4.1

 Incluyan en el reporte de la práctica la dirección de Internet (URL) del sitio web que crearon y una captura de pantalla de la hoja de cálculo donde se vean las respuestas.

Link del sitio web "Real Madrid-Página oficial de los fans"

https://sites.google.com/view/fp21-241-ybm

	A	В	С		D		Е		F		G	3		Н
1	Marca temporal	Dirección de correo	elect Puntuación		¿De qué país pro	viene e	Selecciona los	jugadores	Del 1 al 5, ¿(Cuál es tu n	¿Contra quie	én jugó la fin	Tu mayor í	dolo merengu
2	30/08/2023 0:46:	05		5/5	España		Rodrigo			2	Liverpool			
3	30/08/2023 0:47:	09		2/5	Marruecos		Modric			1	Barcelona			
4	30/08/2023 0:59:	03 josue.arreola@inge	nieria	3/5	España		Vinicius Jr			3	Manchester	City		
5	30/08/2023 1:05:	36 malopez.mal51@gn	nail.c	5/5	España		Modric, Alaba,	Militao, Vi		3	Liverpool		Cristiano R	onaldo
6	30/08/2023 1:06:	41 romangapone@gma	ail.co	4/5	España		Alaba, Joselu			5	Manchester	City	Qué es esc	jaja
7	30/08/2023 1:09:	06 yahir.barojas.morale	es@g	5/5	España		Militao			3	Liverpool			
8														
1	Cuál fue el marcadar de	J	K Salassiana la posición de	Calana	L lana la nacioón au	· Oulán f	M	· Sigues o	N I Bool Modrid		O ara ti qué on o	F L Dool Modrid		Q
2 Cuál fue el marcador de ¿El jugador de la imgael Selecciona la posicón qu Selecciona la posicón qu ¿Quién fue el dichaje má ¿Sigues al Real Madrid € Describe para ti qué es el Real Madrid														
_			Centrocampista	Porter			rcía Sí				El sueño que me motiva cada día pa			
_							rcía	Sí		El sueño qu	ue me motiva	cada dia para	a visitar el Sa	ntiago Bernabe
4			Centrocampista	Porter) N	Mendy						·		
7			Centrocampista Centrocampista	Portero Portero) N			Sí No			ue me motiva po de fútbol m	·		
	2-0 favor Real Madrid	oni Kroos	•) M	Mendy					po de fútbol m	·		
5	2-0 favor Real Madrid T 2-0 favor Real Madrid N	oni Kroos lacho Fernández	Centrocampista	Porter) N	Mendy Ceballos	rcía	No		Es un equipo	po de fútbol m	uy importante	e en la liga e	ıropea
5	2-0 favor Real Madrid T 2-0 favor Real Madrid N 3-2 favor Real Madrid C	oni Kroos lacho Fernández Odriozola	Centrocampista Centrocampista	Portero) N	Mendy Ceballos Fran Gai	rcía rcía	No No		Es un equip Un equipo El único eq	po de fútbol m de fútbol	uy importante	e en la liga e ue no es de l	ıropea

Conclusión

En conclusión, logramos cumplir cada uno de nuestros objetivos, ya que, utilizamos y creamos herramientas que nos beneficiarán en nuestra trayectoria académica, laboral y social, un ejemplo de ello son las páginas web, en las cuales tenemos la posibilidad de compartir información, administrar comunidades de seguidores o incluso generar canales de transmisión de información. En lo personal esto es muy útil, debido a que lo puedo aplicar al expandir nuestro negocio familiar o también para crear una página personal donde muestre mis pasatiempos favoritos.

Otro de los aspectos importantes fue los comandos de búsquedas avanzadas. Aquí hago especial énfasis en el ahorro de tiempo que generan. Es muy común que al hacer investigaciones nos encontremos con fuentes que no son confiables o que contienen mucha publicidad. Al aplicarlos podemos omitir páginas no deseadas, buscar información específica y confiable como es el caso de la Biblioteca digital UNAM.

Del mismo, considero que, en el transcurso del curso, mejoraremos nuestros conocimientos prácticos sobre los repositorios. Algo que me pareció interesante fue su propia definición: "directorio de trabajo utilizado para organizar un proyecto de tal manera que se guarden todas las versiones elaboradas" Esto tiene muchas aplicaciones al momento de trabajar con nuestras prácticas porque podemos recuperar trabajos o ideas que se quedaron en las primeras versiones de nuestros trabajos.