

Clave UEA: 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: [mrivera@izt.uam.mx](mailto: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, 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 químicos.

### 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

### 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.
- Cedillo, A., Manual de prácticas para el curso Química Computacional, [http://www.fqt.izt.uam.mx/Profes/ACO/qcomp\\_n.pdf](http://www.fqt.izt.uam.mx/Profes/ACO/qcomp_n.pdf), 2004.
- Kiusalaas, J., Numerical Methods in Engineering with Python 3, 3<sup>a</sup> edición, Cambridge: Cambridge University Press, 2013