



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA

PROGRAMA DE ESTUDIOS

UNIDAD	IZTAPALAPA	DIVISION	CIENCIAS BASICAS E INGENIERIA	1 / 3
NOMBRE DEL PLAN	LICENCIATURA EN QUIMICA			
CLAVE	UNIDAD DE ENSEÑANZA-APRENDIZAJE		CRED.	6
2141089	PROGRAMACION APLICADA A LA QUIMICA		TIPO	OBL.
H.TEOR. 1.0	SERIACION		TRIM.	V-VII
H.PRAC. 4.0	2131091			

#### OBJETIVO(S):

Objetivos Generales:

Que al final de la UEA 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:

Que al final de la UEA 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 SINTETICO:

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



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA

APROBADO POR EL COLEGIO  
ACADEMICO  
EN SU SESION NUM. 343

EL SECRETARIO DEL COLEGIO

*[Handwritten signature]*

## 1.3. Compilación

## 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 CONDUCCION DEL PROCESO DE ENSEÑANZA-APRENDIZAJE:**

1. El curso consiste en una sesión de teoría (1 h) y 2 sesiones prácticas (2 h cada una) por semana.
2. 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.
3. Se desarrollará un proyecto: Resolución computacional de uno o varios problemas sencillos de la química.
4. 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 EVALUACION:**

## 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



Casa abierta al tiempo

UNIVERSIDAD AUTONOMA METROPOLITANA

APROBADO POR EL COLEGIO  
ACADEMICO  
EN SU SESION NUM. 343

EL SECRETARIO DEL COLEGIO

situaciones especiales), etc.

Evaluación de Recuperación:

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

**BIBLIOGRAFIA 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, 3rd edition, Cambridge, 2007.



UNIVERSIDAD AUTONOMA METROPOLITANA

APROBADO POR EL COLEGIO  
ACADEMICO  
EN SU SESION NUM. 343

EL SECRETARIO DEL COLEGIO