



Casa abierta al tiempo
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.



Casa abierta al tiempo

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA

APROBADO POR EL COLEGIO
ACADEMICO
EN SU SESION NUM. 343

EL SECRETARIO DEL COLEGIO

NOMBRE DEL PLAN LICENCIATURA EN QUIMICA		2/ 3
CLAVE 2141089	PROGRAMACION APLICADA A LA QUIMICA	

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



UNIVERSIDAD AUTONOMA METROPOLITANA

APROBADO POR EL COLEGIO
ACADEMICO
EN SU SESION NUM. 343

EL SECRETARIO DEL COLEGIO

[Handwritten signature]

NOMBRE DEL PLAN LICENCIATURA EN QUIMICA

3/ 3

CLAVE 2141089

PROGRAMACION APLICADA A LA QUIMICA

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, 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

Casa abierta al tiempo.

APROBADO POR EL COLEGIO
ACADEMICO
EN SU SESION NUM. 343

EL SECRETARIO DEL COLEGIO