

Química Computacional (214141)

Andrés Cedillo (AT-250)

Objetivos

Que el alumno:

Aprenda los elementos básicos de un lenguaje de programación de alto nivel y los aplique en la solución de problemas numéricos

Sea capaz de diseñar algoritmos y codificar programas para resolver algunos problemas sencillos de la Química

Temario

1. Introducción al sistema operativo UNIX
2. Introducción al lenguaje C
3. Condicionales y ciclos
4. Funciones
5. Integración numérica
6. Resolución de ecuaciones no lineales
7. Arreglos
8. Matrices y Vectores; Sistemas de ecuaciones lineales
9. Apuntadores
10. Ajuste de curvas
11. Solución numérica de ecuaciones diferenciales

Bibliografía

- 1) *Notas del curso, Tutorial de UNIX y de Programación en C* (disponibles en www.fqt.izt.uam.mx/Profes/ACO/Andres.html)
- 2) MG Sobell, *UNIX System V: A practical guide*, 3rd ed, Addison (1995)
- 3) BW Kernighan y R Pike, *El entorno de programación UNIX*, Prentice (1987)
- 4) ES Roberts, *The art and science of C*, Addison (1995)
- 5) BW Kernighan y DM Ritchie, *El lenguaje de programación C*, 2a ed, Prentice (1991)
- 6) A Stevens, *Al Stevens teaches C*, M&T (1994)
- 7) S Qualline, *Practical C programming*, O'Reilly (1991)
- 8) CF Gerald, *Applied Numerical Analysis*, 6th ed, Addison (1999)
- 9) RL Burden y JD Faires, *Análisis numérico*, 2a ed, Iberoamericana (1996)
- 10) WH Press et al, *Numerical recipes in C*, Cambridge (1992)

Evaluación

prácticas (75%) proyectos (25%)

Cada actividad se evaluará al final de la sesión correspondiente.

Escala de calificaciones

MB: 87-100 B: 74-86 S: 60-73 NA: 0-59

Trimestre 02-I, grupo CI59

Horario: Lu, Mi 11:00-14:00 AT-220

Ma, Ju 11:00-12:15 AT-220
Asesoría: Lu, Mi 10:30-11:30

Semana 1

Introducción al cómputo científico
Introducción al sistema operativo UNIX
Utilerías para archivos de texto, edición de textos y redirección

Semana 2

Error por redondeo y cifras significativas. Introducción al C
Sistemas numéricos. Tipos de variables en C

Semana 3

Ecuación cuadrática. Proyecto #1: Titulación ácido-base
Condicionales: if, case

Semana 4

Ciclos: for, while, do...while
Funciones. Integración numérica

Semana 5

Resolución de ecuaciones no lineales
Método de Newton

Semana 6

Proyecto #2: Equilibrio químico
Arreglos. Operaciones con vectores

Semana 7

Arreglos multidimensionales. Operaciones con matrices
Sistemas de ecuaciones lineales

Semana 8

Eliminación con pivote parcial. Inverso de una matriz
Proyecto #3: Balanceo de reacciones

Semana 9

Apuntadores y funciones
Ajuste de curvas

Semana 10

Solución numérica de ecuaciones diferenciales
Proyecto #4: Partícula encerrada en un campo de fuerza

Semana 11

Otros métodos numéricos
Proyecto opcional