



UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

SEMINARIO DE COMPUTACION EN QUIMICA-FISICA - 1978

Temario a desarrollar:

- I) Lenguaje Fortran, subrutinas, programas de biblioteca.
- II) Aplicaciones: a) Resolución de problemas sencillos (método de cuadrados mínimos, estudio de errores, "fiteo" de curvas experimentales con polinomios, "smoothing" de curvas).
b) Integración y diferenciación numérica, resolución de ecuaciones diferenciales, resolución de ecuaciones integrales, simulación, y sus aplicaciones a problemas de Termodinámica, Electroquímica y Cinética. Interpolación en tablas de doble entrada; matrices, obtención de autovalores y autovectores, y su aplicación a Espectroscopía y Estado Sólido.
- III) Práctica de computación y su aplicación a problemas particulares.

Duración del seminario: se desarrollará en 16 semanas, con 5 horas semanales teórico-prácticas.

Bibliografía:

- D.D. McCracken, "Programación Fortran IV", Limusa-Wiley, 1970.
E.I. Organick, "A Fortran Primer", Addison-Wesley, 1963.
Ed. J.S. Mattson, H.B. Mark Jr., H.C. MacDonald Jr., "Computers in Chemistry and Instrumentation, Vol. 2 Electrochemistry", Marcel Dekker Inc., N.Y., 1972.
W.S. Dorn and D.D. McCracken, "Numerical Methods with Fortran IV Case Studies", J. Wiley & Co., 1972.
R.L. LaFara, "Computer Methods for Science and Engineering", Intertext Books, 1973.

Dra. J. F. FOS... ALBINATI
DIRECTORA DEL CATE...
QUIMICA INORGANICA Y ANALITICA

BIBLIOGRAFIA

Cramer, Harald: "Elementos de la teoría de probabilidades y algunas de sus aplicaciones".

Freund, John E. : "Mathematical Statistics".

Guenther, W. C. : "Analysis of variance".

Meyer, Paul L.: "Introductory probability and statistical applications".

Mosteller, Rourke and Thomas: "Probability and Statistics".

Ostle, B.: "Estadística aplicada".

Parzen, Emanuel: "Modern probability theory and its applications".

Siegel, S.: "Nonparametric Statistics".

Snedecor, G. W. : "Métodos estadísticos".

Sokal and Rohlf: "Biometry".

Steel and Terrie: "Principles and procedures of Statistics with special reference to Biological Sciences".

Dixen y Massey: "Introducción al análisis estadístico".