

UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES

Facultad de Ciencias Exactas y Naturales

Departamento: Química Inorgánica, Analítica y Química Física.

Asignatura: **COMPUTACION EN QUIMICA.**

Plan de estudios: 1987.

Carácter: Optativa.

Correlativas: Química General e Inorgánica IA, Álgebra y Cálculo Numérico.

Horas de clase: Teóricas 4 hs., Prácticas 6 hs., Total: 10 horas.

Duración: Cuatrimestral.

PROGRAMA DE LA MATERIA

I. Breve introducción a la computadora digital.

Lenguaje FORTRAN: Constantes enteras, reales, complejas y lógicas. Otros tipos de variables. Expresiones FORTRAN, reglas. Expresiones aritméticas y lógicas. Operaciones. Operadores lógicos y lógico-numéricos. Proposiciones aritméticas, lógicas y complejas. Proposiciones de control. Proposiciones: GO TO, IF aritmético y lógico, DO (nidificación). Proposiciones de entrada y salida: READ, WRITE, PRINT. Proposiciones de especificación: FORMAT (I, E, F, A). Doble precisión. Proposiciones END, CONTINUE, COMMENT, PAUSE, STOP. Arreglos. Variables dimensionadas, subíndices. Proposición DIMENSION. Entrada y salida de arreglos. Proposición EQUIVALENCE. Subprogramas y subrutinas. Proposiciones CALL, COMMON. Programas de biblioteca.

II. Aplicaciones:

Métodos de cuadrados mínimos, regresión múltiple lineal, regresión no lineal, estimación de errores, ajuste de curvas experimentales con polinomios, suavizado de curvas.

Matrices: producto, inversión, obtención de autovalores y autovectores. Solución de ecuaciones lineales simultáneas.

Otras aplicaciones.

III. Práctica de computación:

Desarrollo o modificación de un programa computacional directamente relacionado con temas de la Licenciatura en Ciencias Químicas.

IV. Visita a grupos de investigación y/o industrias donde se tome conocimiento del uso de la computadora acoplada a equipos de medición en problemáticas de interés químico.

La firma de Trabajos Prácticos requiere:

- la aprobación de todas las prácticas de programación.
- la aprobación de un examen parcial o su recuperación.
- la aprobación de la práctica de computación mencionada en III.

La materia se aprueba con examen final.

Dr. ENRIQUE A. SAN ROMAN

Director

Depto. QCA. INORG. ANAL. QCA. FIS.

APROBADO POR RESOLUCION e) 5 2 4 / 84

BIBLIOGRAFIA

- * Friedman F.L., Koffman E.B.; *FORTRAN, Introducción al Lenguaje y Resolución de Problemas con Programación Estructurada*, 1a. Ed., Fondo Educativo Interamericano, 1984.
- * Metcalf M.; *FORTRAN Optimization*, Academic Press, Florida, 1985.
- * Farina I.H.; *Introducción a la Programación en FORTRAN IV*, Endeaba, Buenos Aires, 1970.
- * La Fara R.; *Computer Methods for Science and Engineering*, 1a. Ed., Hayden Book Co., New Jersey, 1973.


Dr. ENRIQUE A. SAN ROMAN
Director
DEPT. OCA. INORG. ANAL. OCA. FIS.