

Literatura.

Dla zainteresowanych pomocna w poszerzaniu wiadomości może być następująca literatura.

Po pierwsze przyda się podręcznik matematyki dla chemików, np.

D. A. McQuarrie, *Matematyka dla przyrodników i inżynierów*, t. 1-3, PWN, 2006.

Nie od rzeczy jest także mieć pod ręką podręcznik chemii kwantowej, np.

L. Piel, *Idee chemii kwantowej*, PWN, 2003.

Metody numeryczne i analiza numeryczna omawiana jest w szeregu podręczników:

Å. Björck, G. Dahlquist, *Metody numeryczne*, PWN, 1983.

J. Stoer, R. Bulirsch, *Wstęp do analizy numerycznej*, PWN, 1987.

J. i M. Jankowscy, *Przegląd metod i algorytmów numerycznych*, WNT, 1988.

A. Kielbasiński, H. Schwetlick, *Numeryczna algebra liniowa*, WNT, 1992.

D. Kincaid, W. Cheney, *Analiza numeryczna*, WNT, 2006.

Z. Fortuna, B. Macukow, J. Wąsowski, *Metody numeryczne*, WNT, 2005.

Opis wielu metod oraz kody programów można znaleźć w:

W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, B. P. Flannery, *Numerical Recipes*, 3rd Ed. Cambridge University Press, 2007. (wydanie 3-cie omawia programy w C++, starsze – w Fortranie)

Zastosowanie różnych metod w modelowaniu molekularnym:

A. R. Leach, *Molecular modelling. Principles and applications*. Prentice Hall, 2001.

Biblioteki oprogramowania.

Jednym z podstawowych źródeł bibliotek jest:

<http://www.netlib.org/>

między innymi znaleźć w nim można biblioteki BLAS i LAPACK.

Inne źródła to

Guide to Available Mathematical Software

<http://gams.nist.gov/>

CERNLib

<http://cernlib.web.cern.ch/cernlib/>

ARPACK

<http://www.caam.rice.edu/software/ARPACK/>