



PLANO DE DESENVOLVIMENTO DE DISCIPLINA

2º Semestre - 2019

| Disciplina | |
|-------------------|--|
| Código | Nome |
| QF935 | Fundamentos Computacionais de Simulação em Química |

| Turmas | Horário | Local |
|---------------|------------------------------|--------------|
| A | Quartas Feiras - 21:00-23:00 | IQ04 |

| Docentes |
|---|
| Leandro Martínez - leandro@iqm.unicamp.br - Sala H312 |

| Critérios de Avaliação e Aprovação |
|--|
| A disciplina consiste na realização de um estudo dirigido que envolve a programação de problemas de sucessiva complexidade. O aluno deverá realizar e entregar todos os exercícios ao final do curso. Alguns dos exercícios serão realizados em sala de aula para serem entregues no mesmo dia, para a avaliação do aprendizado. A lista de exercícios receberá uma nota de 0 a 10. Alunos com nota maior ou igual a 5 serão aprovados. Alunos com nota menor que 5 deverão fazer EXAME, que consistirá na resolução de exercícios de programação, de forma presencial, na data especificada. O Exame receberá uma nota de 0 a 10. Alunos com nota de Exame maior ou igual a 5 serão aprovados. Alunos com nota de Exame menor que 5 serão reprovados. A nota final é a nota da lista, se esta for maior ou igual a 5, ou a nota do Exame. |

| Calendário |
|---|
| 7 de Agosto: Não haverá aula (semana da Química) |
| 14 de Agosto: Primeira aula. |
| 20 de Novembro: Feriado (Dia da Consciência Negra). |
| 27 de Novembro: Última aula. Entrega das listas de exercícios resolvidos. |
| 11 de Dezembro: Exame. |

| Outras informações relevantes |
|---|
| Caso um estudante falte em algum dos exercícios de avaliação, serão consideradas as notas dos outros exercícios. Caso falte em mais de uma avaliação, uma avaliação substitutiva será feita individualmente em dia adequado para todos. |

SEGUEM A EMENTA, PROGRAMA E BIBLIOGRAFIA



UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
INSTITUTO DE QUÍMICA

PROGRAMAS E BIBLIOGRAFIAS



2º semestre de 2019

| Disciplina Eletiva | |
|--------------------|---|
| Código | Nome |
| QF935 | Fundamentos computacionais de simulações em Química |

| Vetor |
|--|
| F:S-6 T:002 P:000 L:000 O:000 D:000 HS:002 SL:002 C:002 AV:N EX:S FM:75% |

| Pré-Req |
|---------|
| |

| Docente |
|------------------------|
| Prof. Leandro Martínez |

| Ementa |
|--|
| <p>O curso pretende introduzir o aluno à programação numérica, uma ferramenta poderosa para a análise de dados e realização de simulações em qualquer ciência física.</p> <p>A linguagem de escolha será “Julia”, por ser uma linguagem de código livre, além de muito eficiente e intuitiva. Este será um curso de natureza fundamentalmente prática, abordando: Elementos básicos de programação numérica. Integração numérica de equações diferenciais. Condições de contorno. Análise de modos normais e componentes principais. Elementos básicos de otimização sem e com derivadas. Cinética de reações complexas. Integração de equações de movimento. Estabilidade. Simulações de Monte-Carlo. Propriedades estruturais. Cálculos de propriedades médias. Propriedades termodinâmicas.</p> <p>O curso é recomendado para qualquer aluno que tenha interesse em aprender programação, independentemente de sua área de atuação.</p> |

| Programa |
|---|
| <p>1 Elementos básicos de programação 1.1 Estrutura básica do programa</p> <p>2 Primeiras simulações: cinética química</p> <p>3 Otimização com derivadas 3.1 Minimizando com derivadas 3.2 Funções de múltiplas variáveis</p> <p>4 Funções</p> <p>5 Minimização sem derivadas 5.1 Gerador de números aleatórios 5.2 Minimizando $x^2 + y^2$</p> <p>5.3 O método Simplex</p> <p>6 Aplicando a otimização a um problema “real” 6.1 Resultado experimental 6.2 Comparação com a simulação 6.3 Descobrimo as constantes de velocidade</p> |

6.4 Refinamentos do programa

6.5 Usando funções prontas

7. Análise de dados

8. Aplicações

Bibliografia

- J. Bezanson, A. Edelman, S. Karpinski, V. B. Shah, Julia: A fresh approach to numerical computing. <https://arxiv.org/abs/1411.1607>

- Julia: The Julia Programming Language; <http://julialang.org>

- D. Frenkel, B. Smit, Understanding Molecular Simulations. Academic Press, 2002.

Crítérios de Avaliação

Crítérios de avaliação definidos pelo Professor, com base no disposto na Seção I – Normas Gerais, Capítulo V – Da Avaliação do Aluno na Disciplina, do Regimento Geral de Graduação. Frequência: 75 % (* O abono de faltas será considerado dentro do previsto no capítulo VI, seção X, artigo 72 do Regimento Geral de Graduação)