



PLANO DE DESENVOLVIMENTO DE DISCIPLINA

2º Semestre - 2020

| Disciplina | |
|------------|--|
| Código | Nome |
| QF939 | Simulações de sistemas dinâmicos: da pandemia ao movimento molecular |

| Turmas | Horário | Local |
|--------|----------|-----------------|
| A | Sex 8-10 | Condução Remota |
| | | |

Docentes

Leandro Martínez - lmartine@unicamp.br - Sala H312

Disciplinas Teóricas – Plano de Ação IQ 2S/2020

As disciplinas teóricas do 2S/2020, em virtude da pandemia de COVID-19 e da necessidade de manutenção de distanciamento social, serão conduzidas integralmente de forma remota e mediada por tecnologia, **incluindo os processos avaliativos**.

Forma de Condução das Aulas Remotas Mediadas por Tecnologia

- Aulas online síncronas (ao vivo)
- Aulas Gravadas
- Aulas online ao vivo + disponibilização da gravação da aula

Descrição: A disciplina contará com aulas online, eventualmente gravadas antecipadamente. Grande parte da disciplina consiste na realização de estudos dirigidos, e o docente estará disponível no horário da disciplina para acompanhamento e solução de problemas.

Forma de Atendimento às Dúvidas das Aulas Remotas

Descrição: Através de consultas online.

Plataforma Virtual que se pretende utilizar

- Google Classroom + Google Meet
- Moodle

Outra (especificar):

Forma de Condução das Avaliações e Prazos de Entrega

Descrição: Os estudantes deverão entregar até a data final da disciplina os exercícios da lista feitos.

Critérios de Avaliação e Aprovação

Descrição: A lista de exercícios receberá uma nota de 0 a 10, que consistirá na nota final da disciplina.

Calendário – Disciplinas Teórica

(incluir a data de todas as atividades avaliativas, inclusive exame)

18/09 - Início das aulas.

15/01 - Fim das aulas - data final para a entrega da lista de exercícios.

12/10 – Não haverá atividades

21 a 23/10 – Congresso de Iniciação Científica (no período em que estiver sendo realizado o congresso os alunos que participarem do evento estarão dispensados das aulas.)

28/10 – Não haverá atividades

02/11 – Não haverá atividades

23 a 27/11 – Semana da Química Virtual – Não haverá aula, sendo considerado dia letivo.

25/11 – Reunião de Avaliação de Curso

07 e 08/12 – Não haverá atividades

24 a 31/12 – Não haverá atividades (recesso).

19/01 – Término das Aulas do 2S/2020

20 a 26/01 – Semana de Exames Finais do 2S/2020

Outras informações relevantes

SEGUEM A EMENTA, PROGRAMA E BIBLIOGRAFIA



| Disciplina Eletiva | |
|--------------------|--|
| Código | Nome |
| QF939 | Simulações de sistemas dinâmicos: da pandemia ao movimento molecular |

| |
|---|
| Vetor OF: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 | Leandro Martínez |
|----------------|------------------|

| |
|---|
| Ementa Nesta disciplina serão abordados conceitos avançados de programação e simulação, visando a implementação de algoritmos de simulação para resolução de equações diferenciais acopladas e simulações atomísticas. É necessário ter algum conhecimento prévio de programação e familiaridade com ambientes computacionais. O curso será baseado na implementação comparativa da cinética de uma evolução de uma epidemia a partir de modelos diferenciais ("macroscópicos"), com modelos de transmissão entre indivíduos ("atomísticos"). A linguagem de programação de escolha é Julia. Detalhes da estrutura do código que será estudada ao longo do curso podem ser vistos em: http://github.com/m3g/CKP . |
|---|

| |
|---|
| Programa <ul style="list-style-type: none">- Solução numérica de equações diferenciais- Estrutura de dados- Listas ligadas- Campos de força / funções de energia potencial- Condições periódicas de contorno- Método das células ligadas para simulações atomísticas- Cinética de reações e parâmetros microscópicos.- Ajustes não-lineares- Otimização local e global de ajustes- Produção de gráficos |
|---|

| |
|---|
| Bibliografia <ul style="list-style-type: none">- Understanding Molecular Simulation: From Algorithms to Applications - Daan Frenkel , Berend Smit.- The Art of Computer Programming. D. E. Knuth. |
|---|

Critérios de Avaliação

A avaliação será feita através da entrega de atividades práticas, que receberão nota de 0 a 10. Alunos com nota final maior ou igual a 5 estarão aprovados.

Critérios 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)