



2º Semestre - 2023

Disciplina	
Código	Nome
QF935	Fundamentos Computacionais de Simulação em Química

Turmas	Horário	Local
A	Segundas Feiras - 19:00-21:00	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. A lista de exercícios receberá uma nota de 0 a 10. Alunos com nota maior ou igual a 5 serão aprovados. O docente estará disponível presencialmente às quintas feiras das 10:00 às 12:00 e das 14:00 às 16:00, horário em que a disciplina é ministrada para a pós-graduação.

Os resultados das avaliações serão disponibilizados em até 10 dias úteis.

Calendário

03/08: Início das aulas da turma associada de pós-graduação.

21 a 25/08 - Semana da Química - não haverá aula para as disciplinas dos cursos 05/50.

07 a 09/09 - Feriado/Expediente Suspenso - Não haverá atividades

12 a 14/10 - Feriado/Expediente Suspenso - Não haverá atividades

02 a 04/11 - Feriado/Expediente Suspenso - Não haverá atividades

20/11 - Feriado/Expediente Suspenso - Não haverá atividades

30/11: Entrega da lista de exercícios/estudo dirigido.

Outras informações relevantes

Extenso material explicativo sobre a disciplina está disponível em:

<http://leandro.iqm.unicamp.br/m3g/main/didatico/simulacoes/index.shtml>

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.

Critérios de Avaliação

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)