

Programa Analítico de Disciplina

QAM 456 - Tópicos em Química Computacional

Campus Rio Paranaíba -

Catálogo: 2023

Número de créditos: 4

Carga horária semestral: 60h

Carga horária semanal teórica: 2h

Carga horária semanal prática: 2h

Carga horária de extensão: 0h

Semestres: I e II

Objetivos

A disciplina tem como eixo norteador o estudo de dois temas importantes da Química Computacional: Simulações por Dinâmica Molecular (DM) e Redes Neurais Artificiais (RNA). Os temas são abordados de forma teórica e prática, utilizando algoritmos desenvolvidos em sala de aula.

Ementa

A História da Química Computacional. Termodinâmica estatística. Tópicos de Mecânica clássica. Introdução aos Métodos numéricos de análise: Integradores numéricos. Introdução a linguagem de Programação Scilab. Introdução ao estudo de redes Neurais Artificiais. A Rede Multilayer-Perceptron (MLP). Implementação Computacional da Rede MLP usando Scilab.

Pré e correquisitos

Não definidos

Oferecimentos obrigatórios

Não definidos

Oferecimentos optativos

Curso

Grupo de optativas

Química - Bacharelado

Geral

QAM 456 - Tópicos em Química Computacional

Conteúdo					
Unidade	T	P	ED	Pj	To
1. A História da Química Computacional 1. Aplicações computacionais em química. Métodos Clássicos de análise. Primeiros modelos de simulação por dinâmica molecular. Aplicações	2h	0h	0h	0h	2h
2. Termodinâmica estatística 1. Teoria cinética molecular. Função de distribuição de Maxwell, velocidades moleculares médias e energias médias. Princípio de equipartição da energia. Definição termodinâmica da temperatura 2. Ensembles estatísticos: NVE, NVT e NPT	4h	0h	0h	0h	4h
3. Tópicos de Mecânica clássica 1. As leis de Newton e as equações de movimento. Formulação de Lagrange e Hamilton. Hamiltoneano clássico 2. Introdução às interações intermoleculares. Energia configuracional e tipos de interação intermolecular de curto e longo alcance. Modelos de superfície de energia potencial	4h	0h	0h	0h	4h
4. Introdução aos Métodos numéricos de análise: Integradores numéricos 1. Equações diferenciais. O método de Runge-Kutta. O método de Velet 2. Propagação das equações de Movimento de Newton e Hamilton	4h	0h	0h	0h	4h
5. Introdução a linguagem de Programação Scilab 1. Sistema Operacional Linux 2. Implementação Computacional da Dinâmica Molecular pelo método de Hamilton	4h	0h	0h	0h	4h
6. Introdução ao estudo de redes Neurais Artificiais 1. Histórico das Redes Neurais Artificiais 2. Principais topologias: Redes recorrentes e não recorrentes. Aprendizado Supervisionado e não supervisionado	4h	0h	0h	0h	4h
7. A Rede Multilayer-Perceptron (MLP) 1. Algoritmo Backpropagation. Definição de erro de treinamento e ajuste de pesos 2. Aplicações em Química	4h	0h	0h	0h	4h
8. Implementação Computacional da Rede MLP usando Scilab 1. Aplicações diversas de RNA em química	4h	0h	0h	0h	4h
9. Introdução ao Sistema Operacional Linux	0h	2h	0h	0h	2h
10. Programação em Scilab: comandos essenciais	0h	2h	0h	0h	2h
11. Implementação de Superfícies de Potenciais: O modelo de Lennard-Jones	0h	2h	0h	0h	2h

A autenticidade deste documento pode ser conferida no site <https://siadoc.ufv.br/validar-documento> com o código: DQMV.NQJA.K8P5

12. Estudo do Programa Dinamol 1. Condições Iniciais e Propagação das equações de Hamilton 2. Simulação de um sistema atômico simples	0h	4h	0h	0h	4h
13. Determinação computacional da temperatura termodinâmica. Ensembles NVE, NVT e NPT	0h	4h	0h	0h	4h
14. Implementação do Algoritmo de Nosé-Hoover	0h	2h	0h	0h	2h
15. Determinação da Função de Distribuição Radial (Gr)	0h	2h	0h	0h	2h
16. Modelagem de estruturas cristalinas metálicas: O potencial de Morse	0h	2h	0h	0h	2h
17. Estudo da Transição de fases de Sistemas Atômicos diversos	0h	2h	0h	0h	2h
18. Estudo do programa NeuroQuim: A rede MLP e o Algoritmo Backpropation	0h	4h	0h	0h	4h
19. Aplicações Diversas de MLP: estudo de casos	0h	4h	0h	0h	4h
Total	30h	30h	0h	0h	60h

Teórica (T); Prática (P); Estudo Dirigido (ED); Projeto (Pj); Total (To);

Planejamento pedagógico	
Carga horária	Itens
Teórica	Apresentação de conteúdo oral e escrito em quadro convencional; Apresentação de conteúdo oral e escrito com o apoio de equipamento (projektor, quadro-digital, TV, outros); Debate mediado pelo professor; e Seminários
Prática	Prática investigativa executada por todos os estudantes, Resolução de problemas e Desenvolvimento de projeto
Estudo Dirigido	Resolução de problemas e Projeto
Projeto	Resolução de problemas, Desenvolvimento de projeto e Projeto de pesquisa
Recursos auxiliares	<i>Não definidos</i>

QAM 456 - Tópicos em Química Computacional

Bibliografias básicas

Descrição	Exemplares
SILVA, Ivan Nunes da; SPATTI, Danilo Hernane; FLAUZINO, Rogério Andrade. Redes neurais artificiais: para engenharia e ciências aplicadas. São Paulo: Artliber, 2010. 399 p.	2
BRAGA, João Pedro. Físico-química: aspectos moleculares e fenomenológicos. Viçosa, MG: [s.n.], 2002. 265 p.	7
BARROSO, Leônidas Conceição. Cálculo numérico: (com aplicações). 2 ed. São Paulo: Harbra, 1987	10
SOUZA, Marco Antônio Furlan de. Algoritmos e lógica de programação :: um texto introdutório para engenharia. 2 ed. rev. e ampl. São Paulo: Cengage Learning, 2011.	5

Bibliografias complementares

Descrição	Exemplares
SPERANDIO, Décio; MENDES, João Teixeira; SILVA, Luiz Henry Monken E. Cálculo numérico: características matemáticas e computacionais dos métodos numéricos. São Paulo: Prentice Hall, 2003.	2
SCHERER, Claudio. Métodos computacionais da física. 1 ed. São Paulo: Livraria da Física, 2005	3
FRANCO, Neide Bertoldi. Cálculo numérico. São Paulo: Pearson Prentice Hall, 2006. 505 p.	9
CORMEN, Thomas H; MARQUES, Arlete Simile. Algoritmos: Teoria e prática. Rio de Janeiro: Elsevier, 2012 926 p.	2