Universidade Federal de Jataí - UFJ
Unidade Acadêmica de Ciências Exatas
Programa de Pós Graduação em Química

Plano de Ensino

1 Identificação

Professor:	Paulo Freitas Gomes
Email:	paulofreitasgomes@ufj.edu.br
Disciplina:	Química Estatística Computacional
Curso:	Mestrado em Química
Ano/Semestre:	2022/1
Carga Horária:	64 horas (Teórica: 64, Prática: 0)
Horário das aulas:	terça e quinta feira das 9:30 às 11:30 horas
Local:	Google Meet
Horário de Atendimento:	terça feira das 13:30 às 15:30 horas

2 Ementa

- 1) Programação básica: noções de programação em computadores, linguagens de programação, laços de repetição, estrutura de algoritmos.
- 2) Linguagem de programação Python: conceitos básicos, características, exemplos de códigos.
- 3) Estatística básica utilizando Python: média, amostras, desvio padrão, mediana, etc...
- 2) Confecção de gráficos em Python: o que é um gráfico, seleção de dados, representação, técnica para gráficos científicos, tipos de gráficos, etc...
- 3) Números aleatórias em Python: definição de número aleatório, número pseudo-aleatório, gerador de números aleatórios, Método de Monte Carlo, distribuições aleatórias, caminhada aleatória, etc...
- 4) Redes e grafos: definição, vértices e arestas, tipos de grafos (simples, direcionado, com peso), conectividade, componentes, centralidades, coeficiente de clustering, grafos famosos (RGG, Erdos-Renyi, Albert-Barabazi, small-world, etc...).

3 Objetivo

Dar ao um aluno uma introdução a área de pesquisa de Química Estatística Computacional, focando nos conceitos teóricos de estatística e em métodos computacionais utilizando Python.

4 Conteúdo

Os tópicos abordados serão explorados em diversos livros, apostilas e notas do próprio professor. Todo o material será disponibilizado na forma digital.

5 Metodologia

Aulas expositivas no quadro negro, Google Meet, uso de datashow/slides, vídeos e demonstrações em sala de aula utilizando o computador.

6 Avaliação

Haverá 2 provas valendo de 0.0 a 10.0. A média final M é a média aritmética das provas.

7 Local de divulgação dos resultados e avaliações

As notas serão divulgadas juntamente com a entrega das provas em horário de aula e no SIGAA.

8 Bibliografia Básica e Complementar

1. TANENBAUM, A.S. Organização estruturada de computadores. Rio de Janeiro: LTC, 2001.
2. David P. Landau, Kurt Binder, A guide to Monte Carlo simulations in statistical physics. 4th ed. Cambridge University Press, 2015.
3. O. V. S. Heath, A estatística na pesquisa científica. São Paulo : E.P.U., 1981.
4. Notas de aula do professor.

Todos os livros indicados acima encontram-se na biblioteca Flor do Cerrado.

Paulo Freitas Gomes
Programa de Pós Graduação em Química

Jataí, 30 de Novembro de 2021.