



Universidade Federal de Goiás (UFG)  
Regional Jataí (REJ)  
Unidade Acadêmica Especial de Ciências Exatas (CIEXA)

## Plano de Ensino

### 1 Identificação

Professor:	Paulo Freitas Gomes
Email:	<a href="mailto:paulofreitasgomes@ufg.br">paulofreitasgomes@ufg.br</a>
Disciplina:	Química Estatística Computacional
Curso:	Mestrado em Química
Ano/Semestre:	2020/1
Carga Horária:	64 horas (Teórica: 64, Prática: 0)
Horário das aulas:	sexta feira das 7:30 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, introdução à Fortran e Python. Estatística básica: média, amostras, desvio padrão.
- 2) Confecção de gráficos: objetivo de fazer um gráfico, representação de grandezas, importância de gráficos em um trabalho acadêmico (uma imagem vale mais que mil palavras). Plataformas disponíveis: Origin, Igor, Matlab, Python, Qtiplot, etc...
- 3) Números aleatórios: definição de número aleatório, número pseudo-aleatório, gerador de números aleatórios, Método de Monte Carlo, implementação computacional em Fortran e Python, distribuições aleatórias.
- 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...).
- 5) Sistemas baseados em agentes: conceito, dinâmica de interação entre agentes, tempo de simulação, probabilidade das ações, média entre amostras, implementação computacional.
- 6) Exemplos de dinâmica: modelo ZGB, modelos epidêmicos, modelo de Axelrod.

### 3 Objetivo

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

### 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, 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 notas. Os itens da ementa que serão cobrados em cada prova são: P1 - itens 1), 2) e 3), P2 - itens 4), 5) e 6).

## 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.

## 9 Cronograma

Data	Atividade
10/07/2020	Aula 1: Apresentação da disciplina
28/09/2020	Prova 1
09/10/2020	Prova 2

Paulo Freitas Gomes  
Programa de Pós Graduação em Química  
Jataí, 09 de Julho de 2020.