



Disciplina: Métodos Computacionais Aplicados à Química

Carga Horária: 60

Créditos: 4

1. OBJETIVO GERAL:

A disciplina de Métodos Computacionais Aplicados à Química tem por objetivo principal transmitir aos estudantes os conceitos e os métodos que lhes permitam desenvolver a capacidade de aprender a ler, interpretar e escrever programas em linguagem Fortran. A segunda etapa da disciplina versará sobre os métodos numéricos e suas aplicações na química.

2. EMENTA:

Introdução à computação. Características dos computadores. Sistemas de computação. Fundamentos de algoritmos e sua representação em linguagens de alto nível. Introdução ao Fortran. Tipos de dados, constantes e variáveis. Operações aritméticas e funções. A instrução de atribuição. Formatação e composição de programas. Erros aritméticos. Estruturas de controle: seleção. Expressões lógicas. A instrução IF. As instruções IF-ELSE IF. Dados do tipo LOGICAL. Estruturas de controle: repetição. Ciclo básico DO. Técnicas de programação e depuração de erros. Operações de entrada/saída. Saída formatada. Entrada formatada. As instruções WRITE e READ. Processamento de arquivos. Subprogramas: funções. Subprogramas: subrotinas. Tabelas unidimensionais e multidimensionais. Outros tipos de dados. Introdução aos métodos numéricos e sua aplicação em Química: revisões de Análise Matemática e Álgebra Linear; introdução à teoria dos erros; determinação de raízes de equações não lineares; resolução de sistemas de equações lineares e diagonalização de matrizes; método dos mínimos quadrados; quadratura numérica; diferenciação numérica; equações diferenciais ordinárias; discussão e aplicação a problemas de interesse químico.

3. BIBLIOGRAFIA:

1. FORTRAN 77 Full Language: ANSI X313/90A (<http://www.j3-fortran.org/>)
2. Interactive FORTRAN 77: I.D. Chivers e J. Sleightholme (<http://www.kcl.ac.uk/kis/support/citllfortran/f77book.pdf>).
3. Professional Programmer's Guide to Fortran77: Clive G. Page (<http://www.star.le.ac.uk/%7Ecqp/prof77.html>).
4. Numerical Recipes: W.H. Press, B.P. Flannery, S.A. Teukolski e W.T. Vetterling (Cambridge University Press, 1986) (<http://www.ulib.or/webRoot/Books/NumericalRecies/bookfdf.html>)
5. Computational Chemistry: an Introduction to Numerical Methods. A.C. Norris (Wiley, 1981).
6. Mathematical Techniques, D.W. Jordan e P. Smith (Oxford, 2000).
7. Numerical Methods for Mathematics, Science and Engineering. Mathews, J.H. second edition (Prentice-Hall, 1992).