



SERVIÇO PÚBLICO FEDERAL
MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO
UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO JOÃO DEL-REI

PROGRAMA CPD 058/2008
ÁREA: MODELAGEM MOLECULAR E QUIMIOMETRIA

- 1) Gases e Teoria Cinético-Molecular.
- 2) Primeira Lei da Termodinâmica.
- 3) Entropia e a Segunda e Terceira Leis da Termodinâmica.
- 4) As energias de Gibbs e Helmholtz
- 5) Métodos semi-empíricos.
- 6) Métodos ab initio: Hartree-Fock e Teoria do Funcional da Densidade (DFT).
- 7) Técnicas de Análise Exploratória de Dados: PCA e HCA.
- 8) Método de Regressão: Multivariada linear e Mínimos Quadrados Parci
- 9) Métodos de Classificação (reconhecimento de padrões): SIMCA e KNN.

