

# UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA

Centro de Ciências Físicas e Matemáticas

Departamento de Física

## Plano de Ensino da disciplina FSC 7150 Mecânica Estatística Computacional

Prof. Lucas Nicolao  
Florianópolis, 13 de agosto de 2020

Plano de ensino adaptado, em caráter excepcional e transitório, para substituição de aulas presenciais por aulas remotas em meios digitais, enquanto durar a pandemia do novo coronavírus – COVID-19, em atenção à Resolução Normativa 140/2020/Cun.

**Carga Horária:** 72 horas-aula

**Pré-requisitos:** FSC 5131 (Termodinâmica) e FSC 5705 (Física Computacional)

**Ementa:** Revisão de termodinâmica. Introdução à mecânica estatística. Método de Monte Carlo. Algoritmo de Metropolis. Modelo de Ising. Outros Algoritmos. Dinâmica molecular clássica. Potencial de Lennard-Jones. Outros ensembles.

**Programa:** disponível na íntegra em <http://fisica.paginas.ufsc.br/files/2019/08/FSC7150.pdf>.

## Plano detalhado e cronograma

### Parte I - Método de Monte Carlo

1. **Probabilidade** (*semanas 1-2*)
  - a) Probabilidade, distribuições de probabilidade, média, variância
  - b) Teorema do limite central
  - c) Geradores de números pseudo-aleatórios
  - d) Experimentos numéricos, média e distribuição amostral, erros, histogramas
2. **Processos estocásticos na rede** (*semanas 2-3*)
  - a) Caminhante aleatório
  - b) Percolação
3. **Termodinâmica e mecânica estatística 1** (*semana 4*)
  - a) Relações termodinâmicas para materiais magnéticos
  - b) Sistemas de dois níveis - paramagneto
  - c) Modelo de Ising para o ferromagneto, aproximação de campo médio
4. **Método de Monte Carlo para o modelo de Ising em 2D** (*semanas 5-8*)

- a) Prévia: minimização via *simulated annealing*
- b) Amostragem por importância
- c) Balanço detalhado
- d) Algoritmo de Metropolis
- e) Quantidades termodinâmicas, medidas e erros
- f) Convergência ao equilíbrio termodinâmico, irreversibilidade
- g) Funções de correlação temporal e espacial/FFT
- h) Estratégias de otimização numérica
- i) Transições de fase de segunda ordem

## Parte II - Dinâmica Molecular

### 1. Métodos numéricos (*semanas 9-10*)

- a) Integração numérica de EDO's, Verlet
- b) Processos estocásticos contínuos, movimento Browniano e o problema de Kramers

### 2. Termodinâmica e mecânica estatística 2 (*semanas 11-12*)

- a) Relações termodinâmicas para fluidos
- b) Sistemas de muitas partículas
- c) Gás ideal
- d) Gás de Van der Waals, expansão virial

### 3. Método de Dinâmica Molecular para o potencial de Lennard-Jones em 3D (*semanas 12-15*)

- a) Prévia: problema de Fermi-Pasta-Ulam-Tsingou, ergodicidade e teorema da equipartição
- b) Inicialização e relaxamento
- c) Cálculo de força
- d) Ensembles NVE, NVT e NPT
- e) Quantidades termodinâmicas: temperatura e pressão
- f) Funções de correlação temporal e espacial
- g) Difusão
- h) Caos molecular, irreversibilidade, convergência para equilíbrio
- i) Estratégias de otimização numérica
- j) Transições de fase de primeira ordem. Coexistência e metaestabilidade

## Adequação, metodologia e avaliação

Nas primeiras semanas será feita uma videoconferência de apresentação da nova metodologia de ensino e ambientação à plataforma moodle, bem como uma revisão do conteúdo ministrado presencialmente. Também será feito um assessoramento técnico remoto para

cada estudante afim de garantir a adequação de softwares livres e condições técnicas para as aulas práticas remotas.

As aulas remotas exposto conteúdo serão realizadas de maneira assíncrona, gravadas e disponibilizadas semanalmente no ambiente Moodle da turma, acompanhadas de notas de aula. O acesso a esses conteúdos será utilizado para aferir frequência.

Semanalmente serão realizadas atividades síncronas através de videoconferência para discussão de conteúdo e/ou para atividades computacionais práticas, conforme necessidade e andamento do conteúdo. Essas atividades serão disponibilizadas com antecedência na forma de um roteiro de atividade computacional prática, de forma que as atividades síncronas não sejam obrigatórias para realizar as atividades que deverão ser enviadas ao email do professor em prazo estipulado.

A avaliação consistirá em dois trabalhos individuais, um sobre cada parte do curso. A nota de cada parte do curso poderá ser complementada pelas atividades desenvolvidas ao longo do curso. O estudante será aprovado se obter média aritmética dessas duas notas superior ou igual a 6.0. Poderão ser realizadas atividades de recuperação para o estudante que possuir média maior ou igual a 3.0 e inferior a 6.0. Para aprovação final é necessária frequência superior à 75%.

## Bibliografia digital gratuita

1. P. Viot - Numerical Simulation in Statistical Physics. 2016. <https://www.lptmc.jussieu.fr/user/viot/COURS/simulation.pdf>
2. T.J.H. Vlucht, J.P.J.M. van der Eerden, M. Dijkstra, B. Smit, D. Frenkel - Introduction to Molecular Simulation and Statistical Thermodynamics. 2009. <http://homepage.tudelft.nl/v9k6y/imsst/index.html>

## Bibliografia

1. Newman, M. E. J. e Barkema, G. T. - Monte Carlo Methods in Statistical Physics. Clarendon Press. 1999.
2. Frenkel, D. e Smit, B. - Understanding Molecular Simulation: From Algorithms to Applications. Academic Press. 2001.
3. Gould, H. e Tobochnik, J. e Christian, W. - An introduction to computer simulation methods: applications to physical systems - Pearson Addison-Wesley, 2006.
4. Allen, M. P. e Tildesley, D. J. - Computer Simulation of Liquids. Oxford University Press. 2017.