

# 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, 5 de março de 2020

**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 detalhado

### Parte I - Método de Monte Carlo

#### 1. Probabilidade

- 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

- a) Caminhante aleatório
- b) Percolação

#### 3. Termodinâmica e mecânica estatística 1

- 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

- 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**

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

### **2. Termodinâmica e mecânica estatística 2**

- 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**

- 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

## **Metodologia e avaliação**

As aulas serão expositivas, alternadas com aulas práticas em laboratório de informática, conforme andamento da turma. A avaliação consistirá em dois trabalhos individuais, um sobre cada parte do curso.

## 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.