



UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA
CENTRO DE CIÊNCIAS FÍSICAS E MATEMÁTICAS
Departamento de Física
Campus Trindade - CEP 88040-900 - Florianópolis SC
Tel: 48 3721-2876

PLANO DE ENSINO 2024.1

Em acordo com a Resolução nº 003/CEPE/8405 de Abril de 1984

I. IDENTIFICAÇÃO DA DISCIPLINA:

CÓDIGO	NOME DA DISCIPLINA	HORAS-AULA SEMANAIS		HORAS-AULA SEMESTRAIS
		TEÓRICAS	PRÁTICAS	
FSC 7150	Mecânica Estatística Computacional	4 HA	00	72 HA

II. PRÉ-REQUISITO(S)(Código(s) e nome da(s) disciplina(s))

FSC 5131	Termodinâmica
FSC 5705	Física Computacional

III. CURSO(S) PARA O(S) QUAL(IS) A DISCIPLINA É OFERECIDA

NOME DO CURSO	TURMA	HORÁRIO
Física	9002	316202/517102

IV. PROFESSOR(ES) MINISTRANTE(S)

Lucas Nicolao

V. 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.

VI. OBJETIVOS

Aprender fundamentos de simulações de modelos de mecânica estatística e análise de dados estatísticos. Aprender os métodos de Monte Carlo e de Dinâmica Molecular. Compreender a relação entre características microscópicas e propriedades macroscópicas/termodinâmicas, estabelecida pela Mecânica Estatística, e como ela se dá em uma simulação computacional. Experimentar e observar na prática fenômenos como irreversibilidade e transições de fase.

VII. CONTEÚDO PROGRAMÁTICO

1. Revisão de termodinâmica
2. Introdução à mecânica estatística
3. Método de Monte Carlo
 - 3.1 Métodos numéricos em processos estocásticos
 - 3.2 Princípios da simulação de Monte Carlo por cadeias de Markov
 - 3.3 Outros sistemas
4. Dinâmica Molecular
 - 4.1 Métodos numéricos em equações diferenciais ordinárias
 - 4.2 Princípios da simulação de dinâmica molecular
 - 4.3 Outros ensembles
5. Tópicos avançados

VIII. PROCEDIMENTOS METODOLÓGICOS / DESENVOLVIMENTO DO PROGRAMA

O semestre de 2024-1 terá duração de 18 semanas e as aulas serão presenciais. Serão disponibilizadas no ambiente Moodle atividades complementares. Os/as alunos/as terão um horário semanal para tirar dúvidas com o Professor.

IX. ATIVIDADES PRÁTICAS (se houver)

Havendo necessidade, serão realizadas em horário de aula atividades práticas em laboratório de informática. Serão realizadas na linguagem de programação de domínio/preferência de cada discente e o professor poderá dar

suporte apenas em nível de algoritmo e lógica de programação.

X. FORMAS DE AVALIAÇÃO E REGISTRO DE FREQUÊNCIA

Serão realizadas três avaliações parciais na forma de tarefas ou projetos para serem realizados fora de sala de aula e entregues com prazo a combinar com a turma. Se a média das notas obtidas for igual ou superior a 6,0 e a frequência na disciplina for igual ou superior a 75%, o/a estudante estará aprovado/a. Se a média for igual ou superior a 3,0 e inferior a 6,0, e a frequência for igual ou superior a 75% o/a estudante terá direito de realizar uma avaliação de recuperação. Essa avaliação de recuperação será realizada ao final do semestre letivo. A nota final será a média aritmética entre a média das avaliações parciais e a nota da recuperação e deverá ser maior ou igual a 6,0 para aprovação. A frequência será aferida pela presença nas aulas presenciais expositivas. A reposição de avaliação deve ser solicitada junto a secretaria do Departamento de Física, em formulário próprio, junto a documentação comprobatória (atestado médico) em até 72 horas após a realização da atividade avaliativa.

XI. LIMITES LEGAIS DO DIREITO DE AUTOR E IMAGEM (em acordo com a Lei nº 9.610/98 – Lei de Direitos Autorais)

A gravação ou a fotografia de trechos da aula com a finalidade exclusiva de anotação do conteúdo para posterior utilização própria pelo aluno em seus estudos são permitidas. Porém, é expressamente vedada a publicação ou a distribuição da aula ou de material usado em aula em qualquer formato, o que inclui compartilhamento pela internet, redes sociais, etc.

XII. ATENDIMENTO AO ESTUDANTE

Atendimento na sala do professor (sala 109C do Departamento de Física/CFM): sextas-feiras 10h-12hs.

XIII. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS (Básica e Complementar)

Bibliografia básica

1. Newman, M. E. J. e Barkema, G. T. - Monte Carlo Methods in Statistical Physics. Clarendon Press. 1999.
2. Allen, M. P. e Tildesley, D. J. - Computer Simulation of Liquids. Oxford University Press. 2017.

Bibliografia complementar

1. Barone, L. M. e Marinari, E. e Organtini, E. e Ricci-Tersenghi, F. - Scientific Programming: C-Language, Algorithms and Models in Science. World Scientific, 2013.
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.

XIV. CRONOGRAMA

Introdução - Análise estatística (semanas 1-4)

1. Probabilidade, distribuições de probabilidade.
2. Teorema do limite central, média, variância
3. Experimentos numéricos ou simulações
4. Distribuição amostral
5. Média, erros, histogramas
6. Geradores de números pseudo-aleatórios
7. Distribuições de probabilidade não uniformes

Parte I - Monte Carlo (semanas 5-11)

1. Revisão de termodinâmica e introdução a mecânica estatística 1
2. Modelo de Ising e aproximação de campo médio
3. Princípios da simulação de Monte Carlo
4. Amostragem por importância, Balanço detalhado
5. Algoritmo de Metropolis
6. Simulated annealing
7. Quantidades termodinâmicas, medidas e erros

8. Protocolos de variação de temperatura e campo aplicado
9. Funções de correlação temporal e espacial
10. Estratégias de otimização numérica
11. Introdução à dinâmica para o equilíbrio térmico
12. Aspectos gerais de transições de fase contínuas

Parte II - Dinâmica Molecular (*semanas 12-17*)

1. Revisão de termodinâmica e introdução a mecânica estatística 2
2. Gás de van der Waals, expansão virial e potencial de Lennard-Jones
3. Integração numérica de EDO's, Verlet, equação de Langevin
4. Movimento Browniano e o problema de Kramers
5. Problema de Fermi-Pasta-Ulam-Tsingou, ergodicidade e teorema da equipartição
6. Potencial de interação. Caixa e condições de contorno
7. Cálculo de força e inicialização
7. Ensemble NVE, temperatura e pressão
9. Receitas práticas para cálculo de forças e otimização
10. Distribuição radial de pares. Correlações temporais. Difusão
11. Ensembles NVT e NPT
12. Transições de fase de primeira ordem. Coexistência e metaestabilidade