

DISCIPLINAS ELETIVAS
2º Semestre / 2017

DISCIPLINA	NOME
F 057	Tópicos de Física Computacional VII

Horas Semanais						
Teóricas	Práticas	Laboratório	Orientação	Distância	Estudo em Casa	Sala de Aula
004	000	000	000	000	000	004
Nº semanas	Carga horária total		Créditos	Exame	Frequência	Aprovação
15	60		04	S	75%	N

Horário Proposto:
3ª 14h00 às 16h00 e 5ª 14h00 às 16h00

Ementa:
Elementos de programação em python. Parte gráfica: visualização e animação. Integração e diferenciação numérica. Transformadas de Fourier e aplicações. Equações diferenciais ordinárias de primeira e segunda ordem. Equações diferenciais parciais. Problemas de valores de contorno e iniciais. Processos estocásticos e método Monte Carlo. Integração e simulação por métodos Monte Carlo. Método Monte Carlo de Cadeia de Markov.

Objetivos:

Pré-Requisito na Graduação (se houver):
Pré-Req.: MA311 MS211

Programa:
<p>Introdução</p> <p>Física Estatística de sistemas de muitos corpos clássicos</p> <p>Simulação atomística aplicada a sistemas de muitos corpos clássicos</p> <p>Método Monte Carlo (MC)</p> <p>Método de Dinâmica Molecular (DM)</p> <p>Aspectos técnicos gerais: condições de contorno</p> <p>Aspectos técnicos de MC: Algoritmo de Metropolis</p> <p>Aspectos técnicos de MC: Amostragem de diferentes ensembles.</p> <p>Aspectos técnicos de DM: Equações de movimento para diferentes ensembles.</p> <p>Aspectos técnicos de DM: Integração numérica das equações de movimento.</p> <p>Aplicação do método MC: Transição de fase no Modelo de Ising 2D.</p> <p>Transição de fase no Modelo de Ising 2D: Algoritmo de cluster de Wolff</p> <p>Aplicação do método MD: Transições de fase no Modelo Lennard-Jones.</p> <p>Cálculo de energia livre através de métodos MC e DM.</p> <p>Simulação de processos fora do equilíbrio.</p> <p>Cálculo de energia livre através de processos fora do equilíbrio.</p> <p>Métodos MC aplicados a sistemas quânticos: Introdução.</p> <p>Métodos para o estado fundamental: MC variacional.</p> <p>Aplicações</p> <p>Métodos para o estado fundamental: MC de difusão.</p> <p>Aplicações</p> <p>Sistemas quânticos a temperatura finita: Integrais de trajetória.</p> <p>Integrais de trajetória para bósons idênticos.</p> <p>Amostragem MC de integrais de trajetória para bósons idênticos.</p> <p>Aplicação: Bósons não-interagentes numa armadilha harmônica.</p> <p>Simulação de sistemas de férmions idênticos.</p> <p>Problema do sinal.</p> <p>Integrais de trajetória para sistemas fermiônicos</p> <p>Resumo e perspectivas</p>



UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
INSTITUTO DE FÍSICA "GLEB WATAGHIN"



DISCIPLINAS ELETIVAS
2º Semestre / 2017

Critérios de Avaliação (alunos de Graduação):

Critérios de Avaliação (alunos de Pós-Graduação, no caso de oferecimento conjunto entre Graduação e Pós):

Bibliografia:

- 1) W. Krauth, *Statistical Mechanics: Algorithms and Computations*, Oxford University Press.
- 2) D. P. Landau and K. Binder, *A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics*, Cambridge University Press.
- 3) D. Frenkel and B. Smit, *Understanding Molecular Simulation*, Academic Press.
- 4) M. Tuckerman, *Statistical Mechanics: Theory and Molecular Simulation*, Oxford University Press

Observações:

EMISSÃO: 22 de June de 2017

PÁGINA: 2 de 2