



UFOP

Universidade Federal
de Ouro Preto

Métodos da Física Computacional - FMT 112

Segundo semestre 2020

Prof. Dr. Julio C. S. Rocha - Sala 80 (ICEB-I - Segundo Andar).

Aulas síncronas - Google Meet:

Terça-Feira 15:20 - 17:00

Quinta-Feira 15:20 - 17:00

- Avaliações:
 - Exercícios (2 pts).
 - Trabalhos práticos (formato de artigo):
 - * Dinâmica Molecular (4 pts).
 - * Monte Carlo (4 pts).
- São necessários 6 pts para aprovação na disciplina.
- Livro texto: D. Frenkel and B. Smit, Understanding Molecular Simulation: From Algorithms to Applications, Academic Press, 1996.
- Bibliografia auxiliar:
 - Claudio Scherer, Métodos Computacionais da Física, Editora Livraria da Física, 2005
 - Monte Carlo Methods in Statistical Physics - Newman ,M. E. J; Barkema, G. T.
 - Steven E. Koonin e Dawn C. Meredith, Computational Physics, Perseus Books, 1990
- Atendimento ao estudante:
 - Terça-Feira 17:20 - 18:00
 - Quinta-Feira 17:20 - 18:00
 - Agendamento.

Cronograma

mês		Dia	Conteúdo
Agosto	18	Terça-Feira	Apresentação do curso - Introdução
	20	Quinta-Feira	Revisão de Mecânica Clássica
	25	Terça-Feira	EDO - Método de Euler - Runge-kutta - Potencial harmônico
	27	Quinta-Feira	Velocity-Verlet - Leapfrog - Potencial de Lennard-Jones
Setembro	01	Terça-Feira	Condições de contorno - Distribuição de velocidade - Pressão
	03	Quinta-Feira	Potenciais: WCA, Morse, FENE e Kremer-Gres
	08	Terça-Feira	Números aleatórios - Equação de Langevin
	10	Quinta-Feira	Função de autocorrelação - Movimento Browniano
	15	Terça-Feira	Estimativa para π - Integração por Monte Carlo
	17	Quinta-Feira	Revisão de Termodinâmica
	22	Terça-Feira	Revisão de Mecânica Estatística - Ensemble Microcanônico
	24	Quinta-Feira	Ensemble Canônico
29	Quinta-Feira	Amostragem por importância	
Outubro	06	Terça-Feira	Discussão do Primeiro Trabalho Prático
	08	Quinta-Feira	Discussão do Primeiro Trabalho Prático
	13	Terça-Feira	Entrega do Primeiro trabalho prático
	15	Quinta-Feira	Algoritmo de Metropolis - Modelo de Ising
	20	Terça-Feira	Transição de fase - Funções resposta
	22	Quinta-Feira	Análise canônica - Cálculo médias - Jackknife
	27	Terça-Feira	Correlação - Critical Slowing Down
	29	Quinta-Feira	Análise de erro - Parallel tempering
	03	Terça-Feira	Análise de tamanho finito
Novembro	05	Quinta-Feira	Métodos entrópicos
	10	Terça-Feira	Algoritmo de Wang-Landau - Implementação Modelo de Ising
	12	Quinta-Feira	Médias canônicas - Comparação com algoritmo Metropolis
	17	Terça-Feira	Paralelização - Troca de Réplicas
	19	Quinta-Feira	Análise Microcanônica - Derivada de 5 pontos - Curva de Bézier
	24	Terça-Feira	Zeros de Fisher - Cálculo de zeros de polinômios
	26	Quinta-Feira	Zeros de Fisher - Modelo de Ising
Dezembro	01	Terça-Feira	Zeros Reduzidos - Modelo de Ising
	03	Quinta-Feira	Discussão do Segundo Trabalho Prático
	08	Terça-Feira	Discussão do Segundo Trabalho Prático
	10	Quinta-Feira	Entrega do Segundo trabalho prático