



Universidade Federal
de São João del-Rei

COORDENADORIA DO CURSO DE FÍSICA

PLANO DE ENSINO



UNIDADE CURRICULAR: Física Computacional III

PERÍODO: 5º

CURRÍCULO: 2019

DOCENTE: Horácio Wagner Leite Alves

DEPARTAMENTO: DCNAT

PRÉ-REQUISITO: Física Computacional II

CO-REQUISITO: -

CARGA HORÁRIA

Carga Horária Total: 72 ha - 66 h

Carga Horária Prática: 36ha - 33h

Carga Horária Teórica: 36ha - 33h

GRAU: Bacharelado

ANO: 2022

SEMESTRE: 1º

EMENTA

Equações diferenciais parciais na Física. Discretização. Funções especiais. Espalhamento quântico. Termodinâmica e hidrodinâmica. Equação de Schroedinger dependente do tempo. Método de Monte Carlo. Algoritmo de Metropolis. Modelo de Ising bidimensional.

OBJETIVOS

Habilitar o estudante para o tratamento computacional de problemas físicos usando os conhecimentos adquiridos nas unidades curriculares de Física.

CONTEÚDO PROGRAMÁTICO

Equações Diferenciais Parciais (EDP):

Tipos de EDP;
Discretização das Equações;
Método da Matriz;
Método da Relaxação;
Equação de Poisson;
Equação de Calor;
Algoritmo "Leap frog";
Equação de onda;
Exemplos & Problemas.

Simulações usando Dinâmica Molecular:

Comportamento geral de um sistema clássico;
Métodos básicos para sistemas de muitos corpos;
Algoritmo de Verlet;
Simulação de um movimento planetário com 2 e 3 corpos;
Estrutura de aglomerados atômicos;
Método Predictor-corretor de Gear;
Exemplos & Problemas.

Transformadas de Fourier:

Solução analítica e o método numérico da Transformada de Fourier Discreta;
Método numérico da Transformada de Fourier rápida;
Estudo do pêndulo simples usando as Transformadas de Fourier;
Espectro de potencia;
Problemas.

Mecânica Estatística e o Método de Monte Carlo:

Noções de Mecânica Estatística e Termodinâmica;
Método de Monte Carlo;
Amostragem e integração;
Algoritmo de Metropolis;
Aplicações em Física Estatística;
Método de Monte Carlo Cinético e simulações de crescimento epitaxial de materiais;
Problemas;

Modelo de Ising unidimensional e bidimensional:

Modelo de Ising unidimensional;
Soluções analíticas;
Conceito de Escala e transformações de renormalização;
Renormalização via Monte Carlo;
Indo além das interações entre primeiros vizinhos: modelo ANNNI e a simulação de polítipos;
Exercícios.

METODOLOGIA E RECURSOS AUXILIARES

- Aulas expositivas com revisões teóricas sobre o conteúdo das atividades computacionais;
- Atividades computacionais em laboratório orientadas pelo professor.

AVALIAÇÃO

3 (três) Relatórios em forma de monografia sobre os problemas propostos sobre os temas: equação de Difusão, Dinâmica Molecular e Espectro de potencia de um oscilador de van der Pol, no valor de 10,0 pontos cada. A nota final é a média aritmética das notas obtidas para cada relatório. Está prevista a realização de uma prova substitutiva para quem perder ou deixar de entregar um dos 3 (três) problemas propostos acima. A nota final é a média aritmética das notas obtidas para cada relatório. Será aprovado o aluno que obtiver pontuação maior ou igual a 6,0. (Reg. Geral - Art. 65).

BIBLIOGRAFIA BÁSICA

PANG, T. An introduction to computational physics. 2ª ed. Cambridge: Cambridge University, 2008.
KOONIN, S. E.; MEREDITH, D. C. Computational physics: FORTRAN version. [s.l.]: Westview, 1990. 639 p.
LANDAU, R. H.; PÁEZ MEJÍA, M. J.; BORDEIANU, C. C. Computational physics: problem solving with computers. 2.ed. Weinheim: Wiley - VCH, 2007. 593 p.

BIBLIOGRAFIA COMPLEMENTAR

BARROSO, L. C. et al. Cálculo numérico: (com aplicações). 2ª ed. São Paulo: Harbra, 1987. 367 p.
THIJSEN, J. M. Computational physics. 2.ed. Cambridge: Cambridge University, 2010. 620 p.
GIORDANO, N. J.; NAKANISHI, H. Computational physics. 2ª ed. Upper Saddle River: Pearson Prentice Hall, 2006. 544 p.
SCHERER, C. Métodos computacionais da Física. 2ª ed. São Paulo: Livraria da Física, 2010. 299 p.
BUTKOV, E. Física matemática. Rio de Janeiro: LTC. 1988. 725 p
NEWMAN, M. E. J.; BARKEMA, G. T. Monte Carlo methods in statistical physics. Oxford: Clarendon Press, 2011. 475 p.



Docente Responsável

Coordenador do Curso

São João del Rei -MG

Aprovado pelo Colegiado em: