

Disciplina eletiva - Departamento de Física - UFJF

Semestre letivo: 2026-1

Código e nome: FIS131 - Tópicos de Física Teórica III

Carga horária: 60 horas

Pré-requisito(s): FIS040 - Mecânica Clássica I, FIS052 - Termodinâmica, DCC-199 - Algorítmos

Professor Responsável:

Prof. Sócrates de Oliveira Dantas

Objetivo:

O principal objetivo desta disciplina é abordar os aspectos teóricos e práticos (via desenvolvimento de códigos computacionais) de simulações envolvendo fluidos. A linguagem de programação de alto nível que será utilizada para o desenvolvimento dos códigos vai depender da experiência de cada aluno matriculado mas poderá ser: C, C++, FORTRAN, Python ou Julia.

Ementa:

Aspectos teóricos:

Abordar as diversas teorias para efetuar simulações computacionais de fluidos a saber:

1. Algorítmos envolvendo partículas:
 - Dinâmica molecular (DM);
 - Dinâmica Browniana - baseada nas equações de Langevin;
 - Dinâmica de partículas dissipativas (DPD);
2. Algorítmos baseados em rede - discretização espacial do sistema:
 - Rede de gás (RG);
 - Rede de Boltzmann (RB);

Do ponto de vista prático iremos nos concentrar na metodologia envolvendo DPD. Estudar seu desenvolvimento desde a década de 1990 até os dias atuais.

Aspectos práticos:

Desenvolver um simulador em computador utilizando uma linguagem de programação de alto nível envolvendo a metodologia DPD. O simulador deverá simular sistemas:

1. Com e sem condições periódicas de contorno;
2. Lista de vizinhos via lista de células;
3. Obter propriedades estáticas e de transporte tais como:
 - função distribuição de pares - $g(r)$;
 - pressão total e parciais;
 - coeficiente de difusão;
 - etc;
4. Além do termostato natural do DPD, incluir barostato;

Bibliografia:

1. *Computer Simulation of Liquids*, Second Edition, Michael P. Allen and Dominic J. Tildesley, Oxford University Press - 2017
2. *Statistical Mechanics and Thermodynamics*, Claude Garrod, Oxford University Press - 1995