



GUIÃO

Modelação e Física Estatística

2020/2021

Informação Genérica

Ano Letivo: 2019/2020

Ano / Semestre: 3º/2º

Área Científica: Engenharia Computacional

Escolaridade Semanal: 2h Teóricas / 2h Práticas

Período de Lecionação: ~14 semanas

Objetivos

A disciplina de Modelação e Física Estatística tem por objetivo fornecer conhecimentos de Física Estatística na perspetiva da sua aplicação à modelação de sistemas e à análise de dados, em diversas áreas do conhecimento. Um dos objetivos da disciplina é o de alertar o aluno para a diversidade de aplicações dos conceitos envolvidos.

Organização das Aulas

Os conceitos dos tópicos curriculares serão apresentados nas Aulas Teóricas, sendo a apresentação acompanhada pela resolução de exercícios que tenham uma componente mais formal. Nas aulas práticas são implementados pequenos programas de computador para discutir os vários conceitos teóricos e analisar resultados.

Procura-se também que os alunos desenvolvam trabalho sobre uma temática da sua preferência, ainda que supervisionados pelo docente. A orientação do docente tem em vista ajudar os alunos a encontrar e a demarcar uma temática ao seu alcance, e ainda conseguir prepará-los para apresentar esses conteúdos de forma apelativa e compreensiva aos colegas. O curso tem ainda como grande objetivo permitir a aquisição de conceitos teóricos fazendo (computacionalmente), algo que não é explorado em cursos de Física Estatística tradicionais. Para esse efeito são fornecidas competências em ferramentas computacionais e algorítmicas que permitem obter resultados numéricos que serão comparados com resultados obtidos por abordagens analíticas, sempre que possível.

Programa da disciplina

1) Conceitos de Estatística e Probabilidade.

Variáveis aleatórias. Variável de Bernoulli. Variável Gaussiana. Variável uniforme. Entropia de uma variável aleatória. Distribuição de probabilidade com entropia máxima. Desigualdade de Jensen para funções convexas. Divergência de Kulbach-Leibler entre duas distribuições de probabilidade. Probabilidade condicional e fórmula de Bayes. Variáveis aleatórias independentes. Acontecimentos mutuamente exclusivos. Correlação e informação mútua entre duas variáveis aleatórias. Sequências de variáveis aleatórias, processos estocásticos. Cadeias de Markov. Teorema do limite Central, Lei dos grandes números. Teoria dos desvios grandes.

2) Introdução à Teoria de Informação

Taxa de entropia. O problema da compressão de dados. Canais de Comunicação. Modelos de canais de comunicação. Capacidade de um canal de comunicação. Códigos de correção de erros. Taxa de um código, R . Probabilidade de erro. Caso do código de repetição. Teorema de codificação de Shannon.

3) De uma descrição microscópica a uma descrição macroscópica.

Descrição micro e macro de um sistema de partículas clássicas. Propriedades da dinâmica Hamiltoniana. Integração numérica das equações da dinâmica usando o algoritmo de leap-frog. Reversibilidade temporal e conservação de área. Sistema de partículas clássicas que interagem por um potencial de Lennard-Jones. Cálculo da pressão no sistema. Teorema do Virial. Método da dinâmica molecular. Algoritmo do *Demon* e simulações microcanónicas. Sistema em contacto térmico com um reservatório de energia. Ensemble canónico. Teorema do Virial no ensemble canónico. Distribuição de velocidades de Maxwell. Gases ideais quânticos. Sistemas no ensemble Grande-Canónico e método de simulação do *Demon* para o ensemble Grande Canónico. Modelos de spins. Estados Fundamentais em sistemas de spin do tipo Ising. Minimização da energia e relação com problemas de otimização.

4) Métodos de Monte Carlo em Física Estatística

Relação com Cadeias de Markov. Regime estacionário. Equilíbrio detalhado (detailed balance). Algoritmo de Metropolis para simular no ensemble Canónico. Algoritmo de

Metropolis para uma distribuição estacionária arbitrária. Cálculo de médias e erros no Método de Monte Carlo. Efeito da correlação temporal. Algoritmo de Banho Térmico. Aplicações a simulação de gases quânticos de Fermiões, Bosões e Fótons. Métodos de Monte Carlo em tempo contínuo.

5) Modelos de Spins e Transições de fase

Propriedades termodinâmicas de um sistema de spins independentes num campo magnético externo. Teoria de campo médio para o modelo Ising. Transição de fase contínua (ponto crítico). Expoentes críticos da magnetização (parâmetro de ordem) , suscetibilidade e capacidade térmica. Modelo Ising numa rede completamente conectada. Modelo Ising em $d=1$ com condições fronteira livres e campo nulo. Cálculo da função de partição. Modelo Ising $d=2$. Matriz de transferência no caso bidimensional. Análise da solução de Onsager em campo nulo. Análise da solução de Yang para a magnetização. Função de correlação spin-spin. Invariância de Escala. Expoentes críticos. Expansões de alta temperatura e baixa temperatura no modelo Ising a $d=2$. Conceito de rede dual. Valor exato da temperatura crítica no modelo Ising a $d=2$. Teoria de Landau e Teoria de Ginzburg-Landau. Escalonamento e relações entre expoentes. Escalonamento em tamanho finito

6) Miscelânea de aplicações (a seleccionar)

Propagação de epidemias em redes.

Percolação.

Redes neuronais.

Método de belief propagation e inferência estatística.

Bibliografia

Statistical and Thermal Physics: With Computer Applications, Harvey Gould and Jan Tobochnik, Princeton University Press

Information, Physics and Computation, M. Mézard and A. Montanari (Oxford University Press, 2009)

Statistical Mechanics: Algorithms and Computations, W. Krauth (Oxford Master Series in Physics)

Apontamentos de Física Estatística, António Luís Ferreira

Thermal Physics Kittel/Kromer John Wiley

Monte Carlo Methods in Statistical Physics, M. E. J. Newman and G. T. Barkema, Clarendon Press

Fundamentals of Statistical and Thermal Physics, F Reif, 1965 McGraw-Hill

L E Reichl, A modern course in Statistical Physics, Edward Arnold, 1980

Avaliação

A classificação na Época normal é obtida através da fórmula:

Classificação Final= 30% Teste 1 + 30% Teste 2 + 40% Trabalho

O Teste nº1 será realizado no horário da aula prática P1 do dia **28 de abril, quarta-feira**.

O Teste nº2 será realizado no dia **23 de Junho, quarta-feira**, também no horário da aula Prática, P1. Alternativamente, os alunos poderão **optar** pela realização de um Exame Final sobre toda a matéria a realizar na data definida no calendário de exames e que terá um **peso de 60%** na nota final.

Os trabalhos serão realizados em grupos de 2 alunos e deverão ser entregues até uma semana antes da sua apresentação que terá lugar em data a combinar durante o período de exames. A avaliação do trabalho levará em conta a clareza de exposição, originalidade e ambição (nível de dificuldade do tópico selecionado), qualidade científica e capacidade de utilizar uma abordagem computacional para discutir a temática escolhida.

A avaliação na época de Recurso será feita apenas por Exame de Recurso contando o Trabalho para a nota final, com peso de 40%, caso contribua para subir a média final.

Aveiro, 4 de março de 2021

Prof. António Luis Ferreira (alf@ua.pt)