

Métodos Computacionais em Física

4300331 – 3a-f, 21h – 23h 6a-f 19h-21h

Sala 201 – Ala Central - IF

Prof. Luis Gregório Dias da Silva

Depto. Física Materiais e Mecânica – IF – USP

Ed. Alessandro Volta, bloco C, sala 214

luisdias@if.usp.br

Página do curso ([Stoa -> Cursos -> IF -> 430 -> 4300331](#))

<http://disciplinas.stoa.usp.br/course/view.php?id=11118>

Avisos via Twitter: <https://twitter.com/ProfLuisDias>

O que é este curso?

- É uma disciplina eletiva de introdução à aplicação de métodos numéricos em diferentes problemas de Física:
 - Mecânica
 - Eletromagnetismo
 - Física Estatística
 - Mecânica Quântica

Preciso saber programar para fazer o curso?

- Alguma familiaridade ajuda mas não é pré-requisito. Noções básicas de MatLab[©] serão apresentadas ao longo do curso.
-

Este curso não é...

- ...um curso de programação de MatLab.
 - ...um curso de Cálculo Numérico.
 - ..um curso de métodos computacionais avançados (DFT, Dinâmica Molecular, Monte Carlo quântico, DMRG, etc.)
 - (Para este último, vide curso do prof. Caetano Miranda no semestre que vem).
-

Conteúdo do curso:

- Introdução ao MatLab (~4 aulas)

Aplicação de métodos computacionais a problemas de:

- Mecânica (Projeto 1).
 - Ondas e séries temporais (Projeto 2).
 - Eletromagnetismo (Projeto 3).
 - Mecânica Estatística (Projeto 4).
 - Mecânica Quântica (Projeto 5).
-

Avaliação (regras do jogo):

- Tarefas feitas em sala (20%)
- Projetos 1-5 (80%)

$$M_1 = 0.2M_T + 0.8M_P$$

M_T : Média das tarefas.
 M_P : Média dos Projetos.
 M_1 : Média 1a avaliação.
 N_F : Nota FINAL do curso.

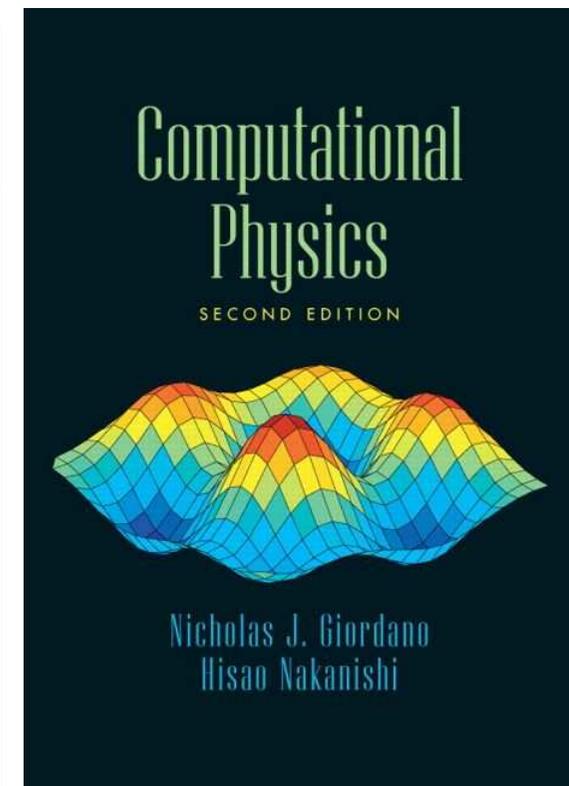
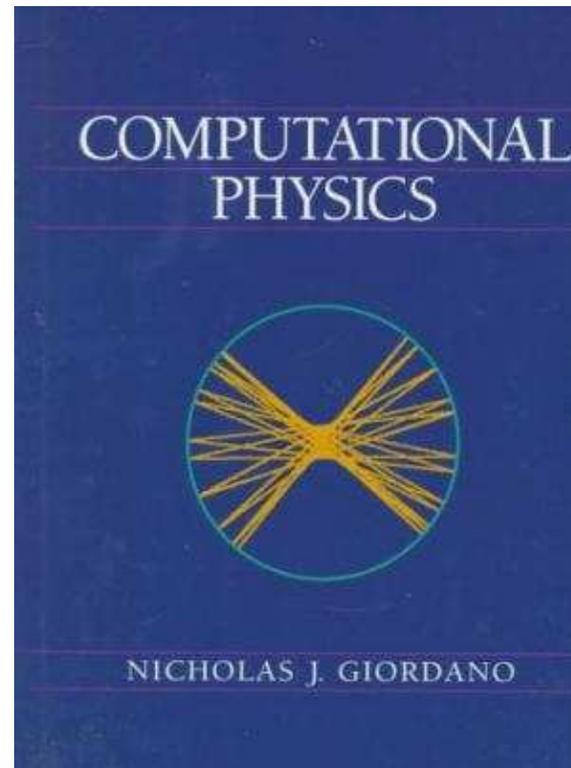
- Se $M_1 \geq 5.0$ (e frequência mínima 70%) $\rightarrow N_F = M_1$ **Aprovado** 😊
 - Se $3.0 \leq M_1 < 5.0$ \rightarrow Trabalho de Recuperação (N_R) em data a ser confirmada.
$$N_F = (M_1 + N_R) / 2$$
 - Se $M_1 < 3.0$ $\rightarrow N_F = M_1$ **Reprovado** ☹️
 - Cuidado com ausências!!
 - M_T é DIRETAMENTE proporcional à frequência nas aulas!!
-

Material do curso:

- Notas de aula do professor – em pdf (PowerPoint das aulas)
- Apostilas de MatLab – em pdf
Disponíveis no site da disciplina.
- Nicholas Giordano, *Computational Physics*, Pearson- Prentice Hall (1984).

O curso está estruturado na sequência deste livro.

A biblioteca tem uma cópia da 1ª edição.



Calendário e datas:

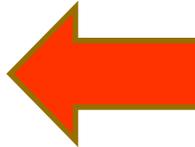
2016 – 1º sem - CALENDARIO Métodos Computacionais em Física - 4300331								
	Dom	Seg	Ter	Qua	Qui	Sex	Sab	atividade
fevereiro	14	15	16	17	18	19	20	Aula 1 (16/02): Apresentação do Curso; Abrindo o MatLab Aula 2: MatLab básico: interface, variáveis, vetores (arrays)
	21	22	23	24	25	26	27	Aula 3: MatLab básico: Operadores e funções; Gráficos em 2D e 3D. Aula 4: MatLab básico: Loops (for, do) e estruturas (if, while,). 1a simulação.
março	28	29	1	2	3	4	5	Aula 5: Resolvendo a 2a Lei de Newton numericamente: 1o exemplo Aula 6: Lei de Newton: 2o exemplo
	6	7	8	9	10	11	12	Aula 7: Oscilador Harmônico: simples, amortecido e forçado. Aula 8: O Pêndulo simples.
	13	14	15	16	17	18	19	Aula 9: Sistemas Caóticos. Aula 10: Discussão do Projeto 1 (entrega em 29/03)
	20	21	22	23	24	25	26	21-25/mar Semana Santa
	27	28	29	30	31	1	2	Aula 11: Ondas I Aula 12: Ondas II
	3	4	5	6	7	8	9	Aula 13: Espectro de Fourier Aula 14: Espectro de Fourier Aula 15: Análise espectral
abril	10	11	12	13	14	15	16	Aula 16: Discussão do Projeto 2 (entrega em 26/04) Aula 17: Eletromagnetismo: Equação de Laplace
	17	18	19	20	21	22	23	21 de abril - Tiradentes Aula 18: Campos magnéticos
	24	25	26	27	28	29	30	Aula 19: Potencial próximo de cargas pontuais Aula 20: Revisão
maio	1	2	3	4	5	6	7	Aula 21: Discussão do Projeto 3 (entrega em 13/05) Aula 22: Sistemas aleatórios
	8	9	10	11	12	13	14	Aula 23: Sistemas aleatórios Aula 24: Modelo de Ising: Campo médio
	15	16	17	18	19	20	21	Aula 25: Modelo de Ising: Monte Carlo Aula 26: Discussão do Projeto 4 (entrega em 31/05)
	22	23	24	25	26	27	28	26-27/Maio - Corpus Christi Aula 27: Mec Quântica: Sistemas de dois níveis
junho	29	30	31	1	2	3	4	Aula 28: Mec Quântica: Eq. de Schrodinger Aula 29: Eq. de Schrodinger dependente do tempo
	5	6	7	8	9	10	11	Aula 30: Método de tight-binding Aula 31:
	12	13	14	15	16	17	18	Aula 32: Discussão do Projeto 5 (entrega em 24/06)
	19	20	21	22	23	24	25	
o	26	27	28	29	30	1	2	30/06 - Encerramento das aulas.

“Física Computacional”?

- **Passo 1 – Modelagem de Sistemas Físicos**

Representação de um sistema a partir de regras básicas que descrevem seu comportamento nas *escalas apropriadas*.

- **Passo 2 – Computação**



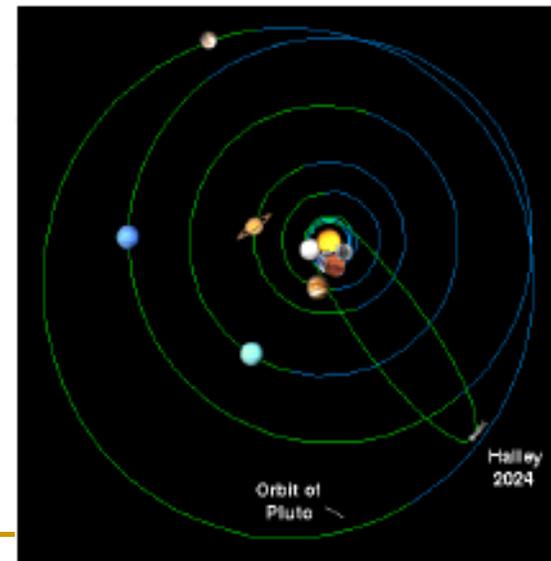
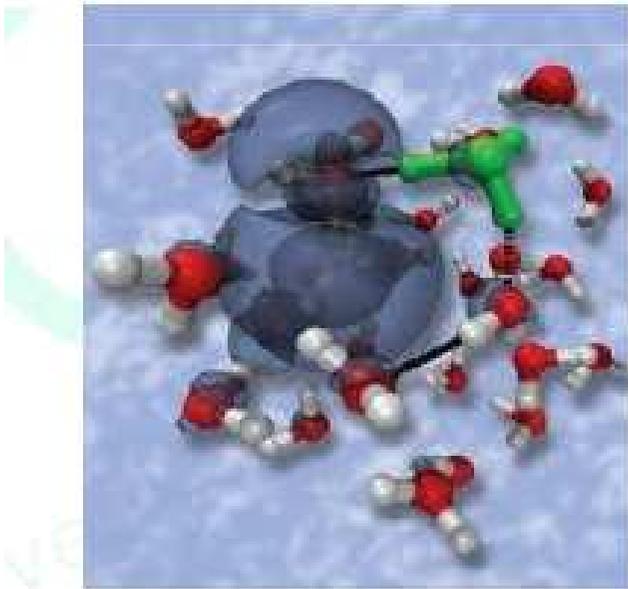
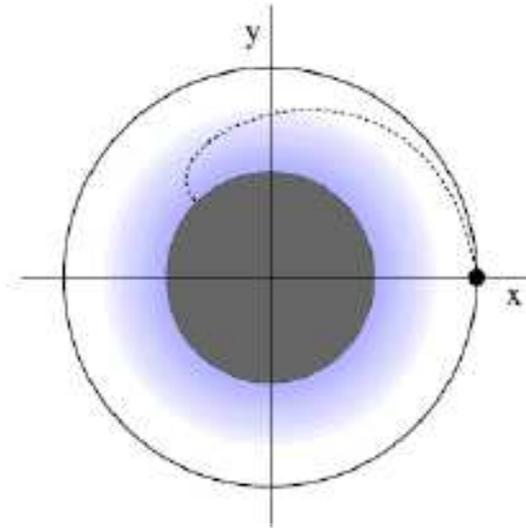
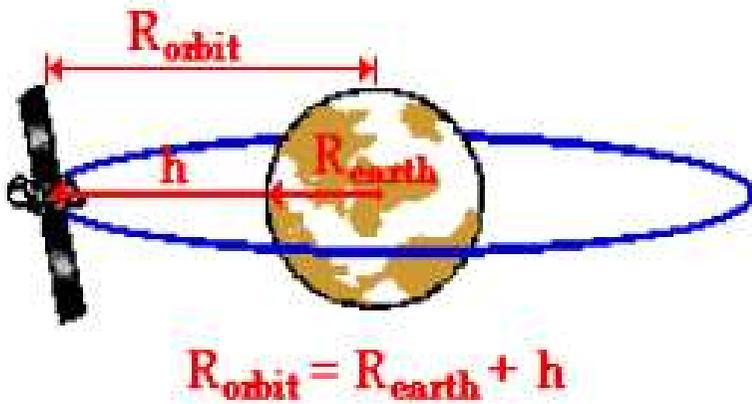
Utilização de **métodos computacionais** para calcular propriedades mensuráveis a partir das regras concebidas no modelo.

A qualidade dos resultados computacionais é sempre limitada. Seja pela precisão dos métodos, seja pela hipóteses do modelo.

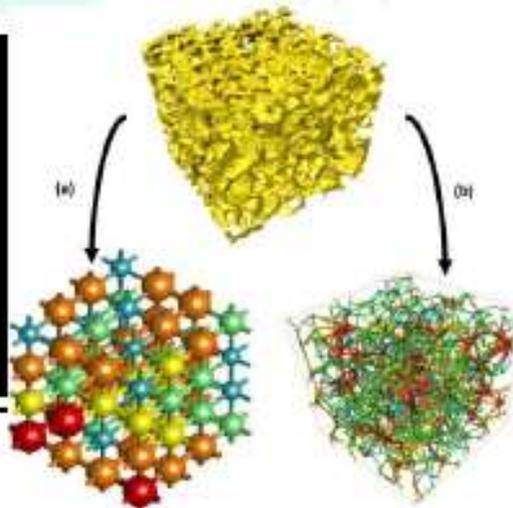
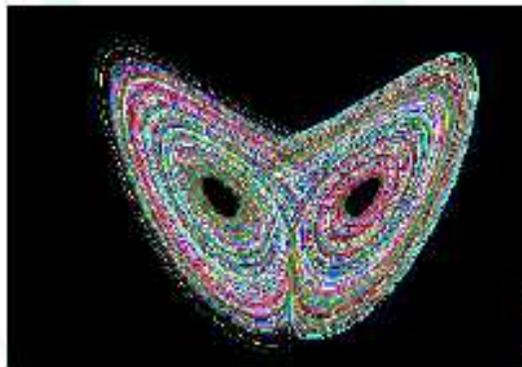
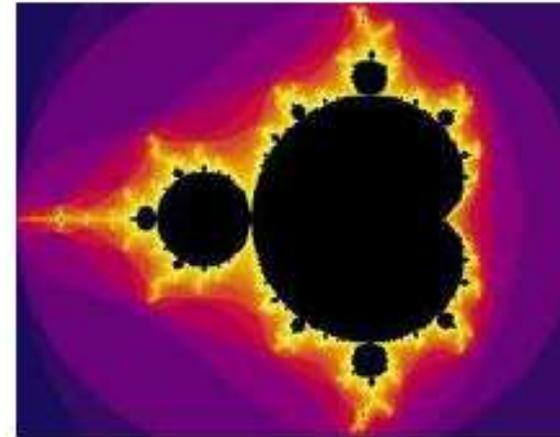
- **Passo 3 – Validação do modelo e resultados.**

Em Física, a palavra final sempre vem do experimento!

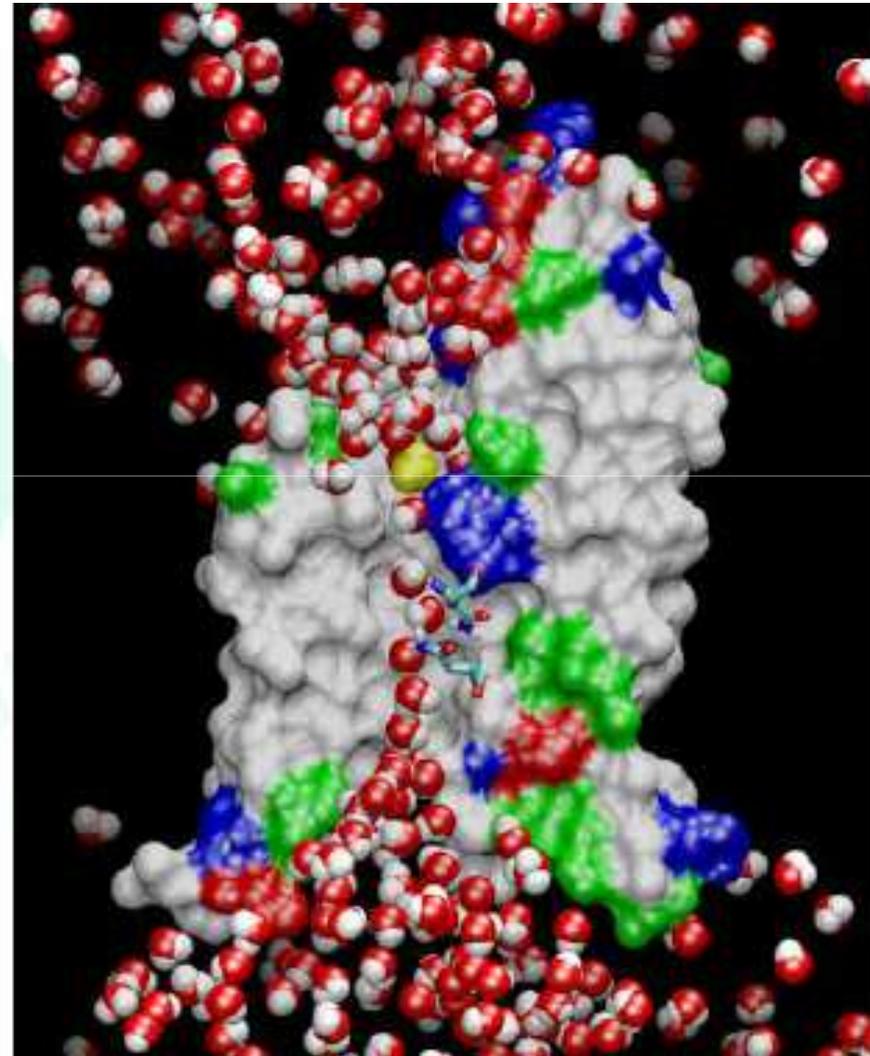
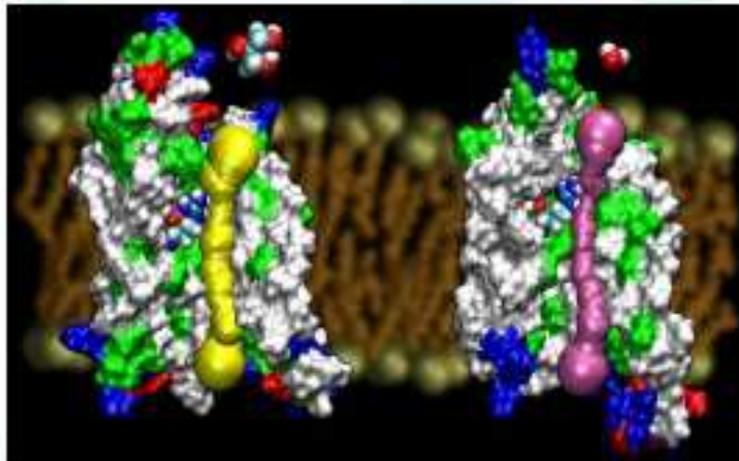
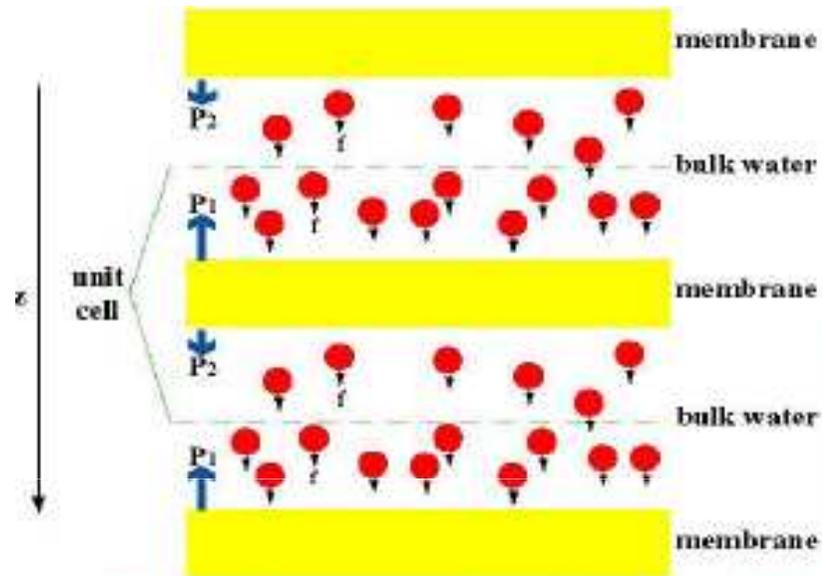
Exemplo: Dinâmica Clássica



Exemplo: Caos e fractais

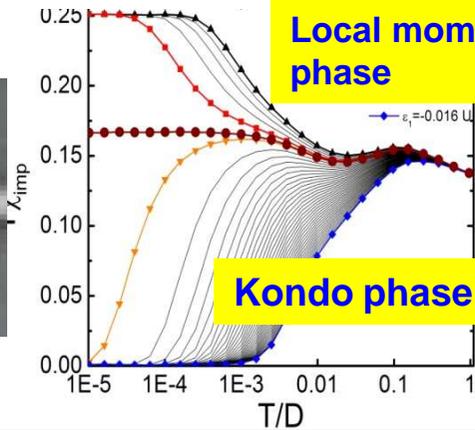
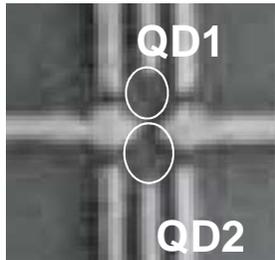


Exemplo: Dinâmica molecular



Exemplo: Matéria condensada (muitos corpos)

Pontos Quânticos semicondutores



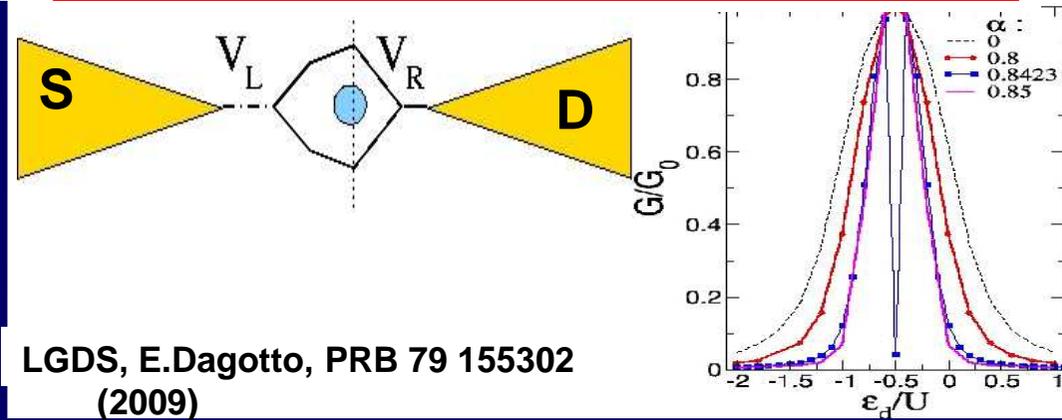
Local moment phase

Kondo phase

LGDS et al. PRL 97 096603(2006);

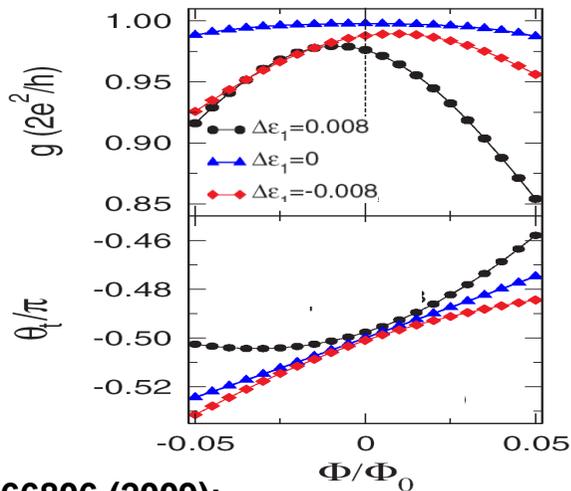
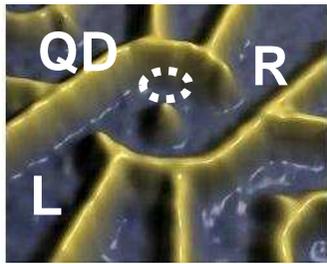
LGDS et al. PRB 78 155304 (2008).

Junções moleculares c/ vibrações



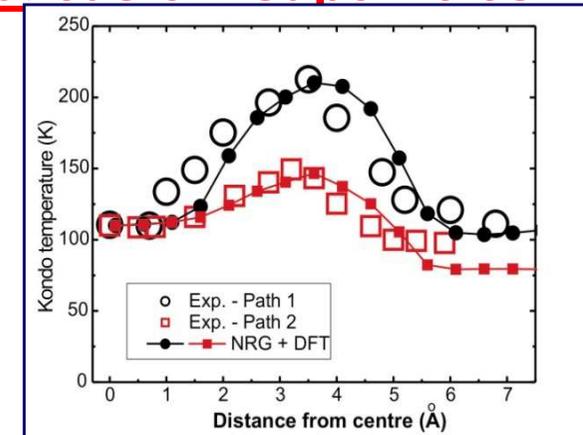
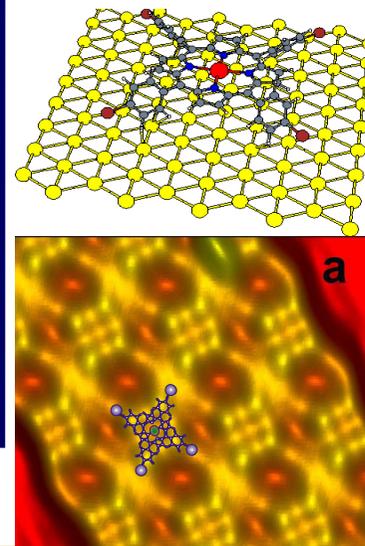
LGDS, E.Dagotto, PRB 79 155302 (2009)

Anéis Quânticos + efeito Aharonov Bohm



LGDS et al. PRL 102 166806 (2009);

Moléculas magnéticas em superfícies



LGDS et al. PRB 80 155143 (2009)

Perera et al. PRL 105 106601 (2010)