

Métodos Computacionais em Física

4300331 – 3a-f, 21h 5a-f 19h

Sala 2001 (antiga 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](#))

<https://edisciplinas.usp.br/course/view.php?id=74467>

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
 - Redes Neurais e aprendizado de máquina

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).

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 e Redes Neurais (Projeto 5).

Avaliação (regras do jogo):

- Tarefas de sala de aula (*) (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!!
- (*) Apenas os alunos **presentes** na aula terão crédito na Tarefa.

Mais sobre as Tarefas

- Haverá tarefas em todas as aulas (cerca de 25).
- A média das tarefas vale 20% da nota final.
- Ausência na aula implica nota zero na Tarefa.
- Tarefas serão entregues e corrigidas on-line via site e-disciplinas.
- Em geral, envolve o upload de um arquivo .m e/ou pdf, etc.
- Prazos de entrega (salvo exceções que serão comunicadas);
 - Tarefas da aula de **terça-feira**: 23h55 do dia seguinte (quarta-feira).
 - Tarefas da aula de **quinta-feira**: 23h55 do Domingo seguinte.
 - **NUNCA** deixe para entregar no final do prazo!
 - Podem ocorrer problemas como falha na conexão, falha no computador, falha no envio, etc. etc. Não vale a pena arriscar e acabar ficando com zero!!
- **Tarefas enviadas por e-mail não serão corrigidas !!!**
- Logo: cuidado com ausências em sala e com atrasos na entrega!

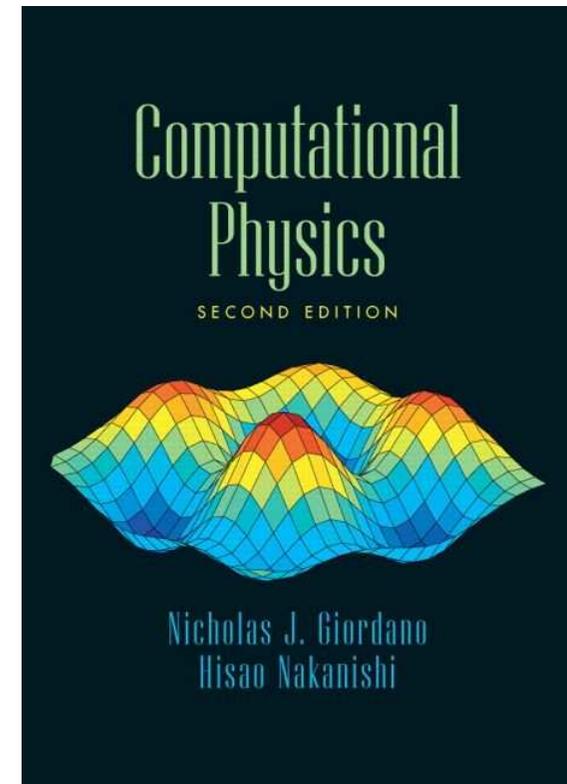
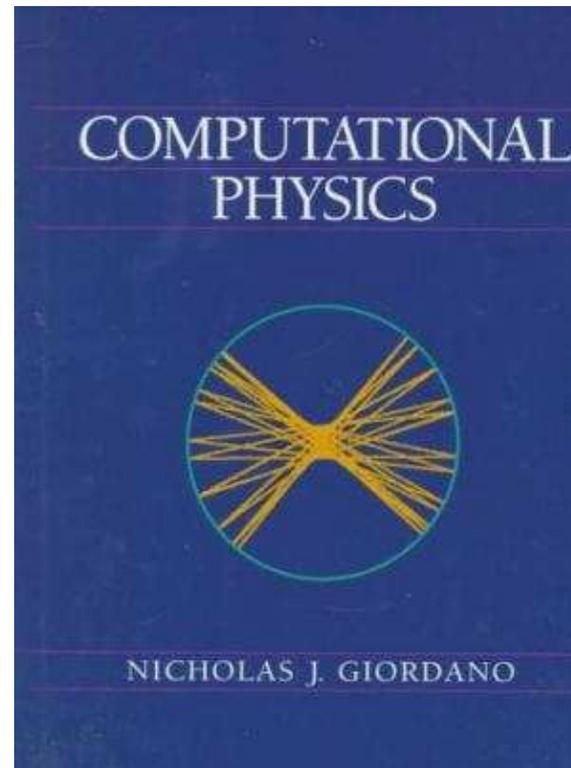
Responsabilidade com prazos e organização estão sendo avaliados!!!

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.



2020 – 1º sem - CALENDARIO Métodos Computacionais em Física - 4300331								
	Dom	Seg	Ter	Qua	Qui	Sex	Sab	atividade
fevereiro	16	17	18	19	20	21	22	Aula 1 (18/02): Apresentação; MatLab básico: interface, variáveis, vetores. Aula 2: Matlab básico: Operações com Matrizes e Vetores; Gráficos 2D e 3D
	23	24	25	26	27	28	29	25/02 - Carnaval (não haverá aula) Aula 3: MatLab básico: Loops (for, do) e derivada numérica. Primeira simulação. Aula 4: Resolvendo a 2a Lei de Newton numericamente: 1o exemplo Aula 5: Lei de Newton: 2o exemplo
março	1	2	3	4	5	6	7	Aula 6: Oscilador Harmônico: simples, amortecido e forçado.
	8	9	10	11	12	13	14	Aula 7: Pêndulo Simples
	15	16	17	18	19	20	21	Aula 8: Pêndulo Duplo
	22	23	24	25	26	27	28	Aula 9: O problema de 3 corpos e discussão do Projeto 1 (entrega em 29/03). Aula 10: Equação de Onda Aula 11: Ondas Estacionárias
	29	30	31	1	2	3	4	Aula 12: Transformada de Fourier Aula 13: Transformada de Fourier no espaço e discussão do Projeto 2 (entrega em 12/04)
	5	6	7	8	9	10	11	6-10/abril Semana Santa
abril	12	13	14	15	16	17	18	Aula 14: Eletromagnetismo: Equação de Laplace Aula 15: Capacitor de placas paralelas
	19	20	21	22	23	24	25	21/04 - Tiradentes (não haverá aula) Aula 16: Campos magneticos - Lei de Biot-Savard e discussão do Projeto 3 (entrega em 03/05)
	26	27	28	29	30	1	2	Aula 17: Sistemas aleatórios: Random walk Aula 18: Equação de difusão.
	3	4	5	6	7	8	9	Aula 19: Equação de difusão (2D): Entropia. Aula 20: Método de Monte Carlo: cálculo de pi.
maio	10	11	12	13	14	15	16	Aula 21: Modelo de Ising: Monte Carlo. Aula 22: Equipartição de energia: modelo de Fermi-Pasta-Ulam - Discussão do Projeto 4 (entrega em 31/05)
	17	18	19	20	21	22	23	Aula 23: Eq. de Schrodinger: Evolução temporal. Aula 24: Eq. de Schrodinger: Valores esperados.
	24	25	26	27	28	29	30	Aula 25: Eq. de Schrodinger: Tunelamento. Aula 26: Poço duplo: orbitais ligantes e não-ligantes.
	31	1	2	3	4	5	6	Aula 27: Modelo de tight-binding em 1D. Aula 28: Redes Neurais: Regressão Linear
junho	7	8	9	10	11	12	13	Aula 29: Redes Neurais: Portas XOR e hidden layers
	14	15	16	17	18	19	20	Aula 30: Aprendizado de máquina: Reconhecimento de padrões I. Aula 31: Aprendizado de máquina: Reconhecimento de padrões II.
	21	22	23	24	25	26	27	Aula 32: Discussão do projeto 5 (entrega em 5/07) Reposições (se necessário)
	28	29	30	1	2	3	4	Reposições (se necessário)
	5	6	7	8	9	10	11	02/07 - Encerramento das aulas.
julho	12	13	14	15	16	17	18	
	Dom	Seg	Ter	Qua	Qui	Sex	Sab	

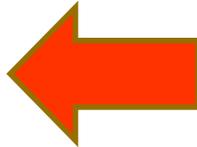
Aulas: terças-feiras, 21h-23h; quintas-feiras 19h-21h, sala 2001 (antiga 201, Ala Central)

“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!

Objetivos da disciplina

- Apresentar *métodos computacionais* utilizados para a *simulação de sistemas físicos* e resolver numericamente os problemas que surgem em física, astronomia, engenharias, bem como em outras áreas afins.

- Método-base: aprendizado indutivo.

Utilização da solução de **problemas** na construção do aprendizado.

A necessidade nos leva à assimilação de conceitos e à construção de novos conhecimentos!

- A pesquisa científica funciona desta forma!

Conceitos básicos

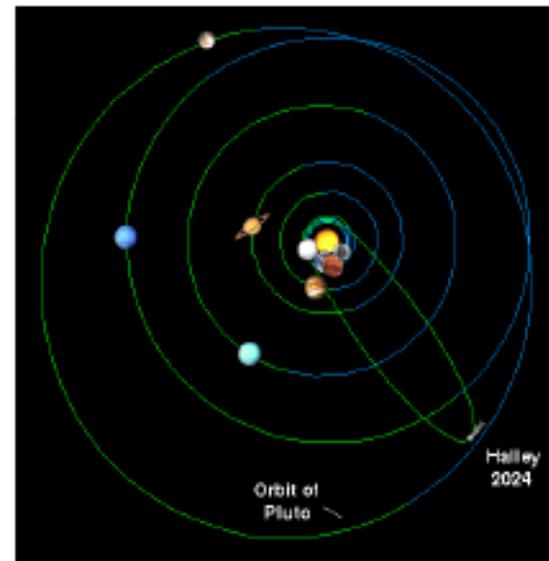
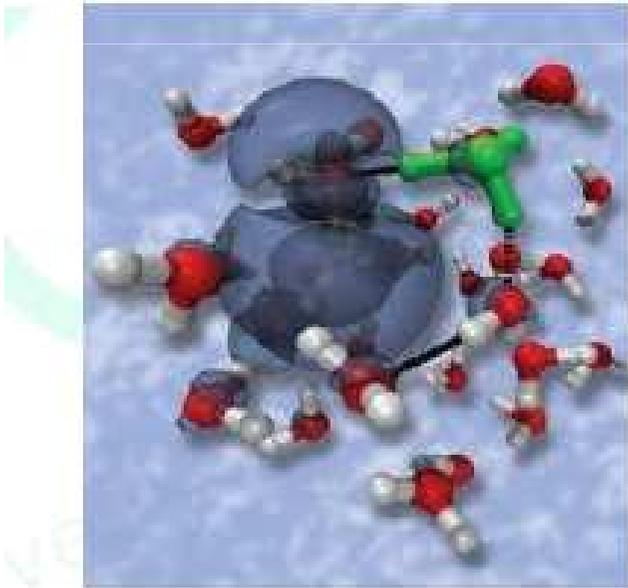
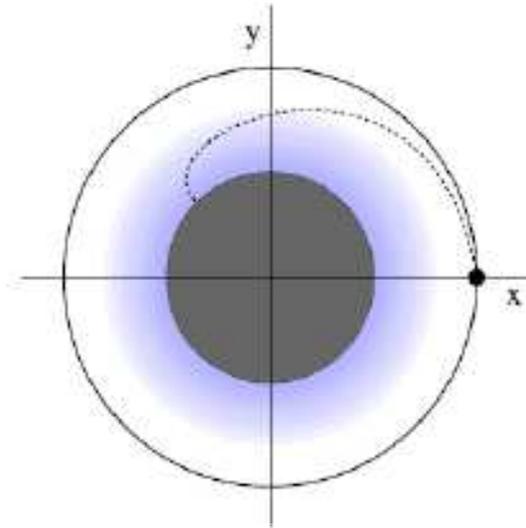
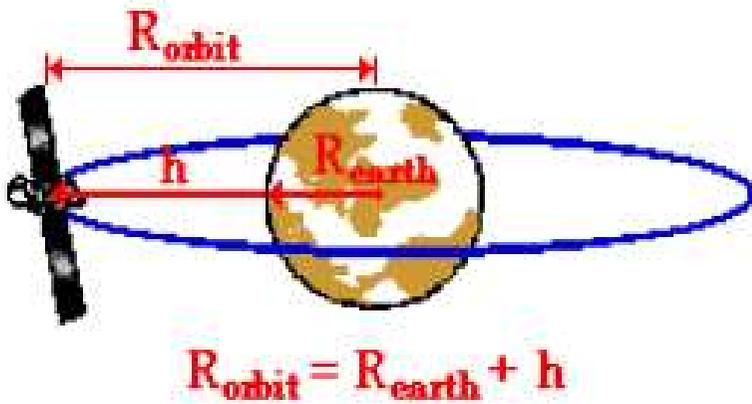
Algoritmo vs Programa (ou “código”):

- **Algoritmo:** processo passo-a-passo para realizar uma tarefa (cálculo, processo, etc.)
- **Programa:** uma série de instruções ou comandos passados a uma unidade de processamento (computador, tablet, smartphone, etc...)
- Um algoritmo não necessita necessariamente de um programa!

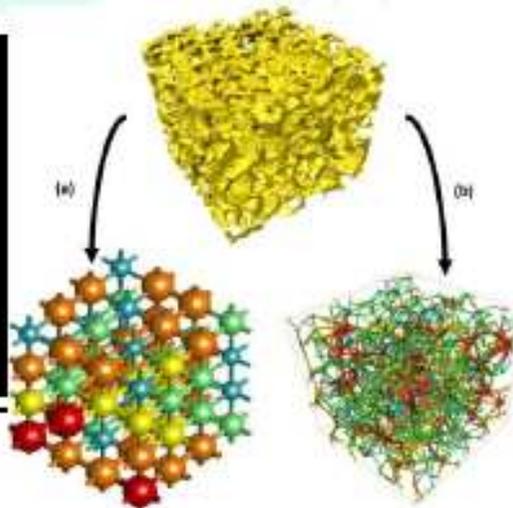
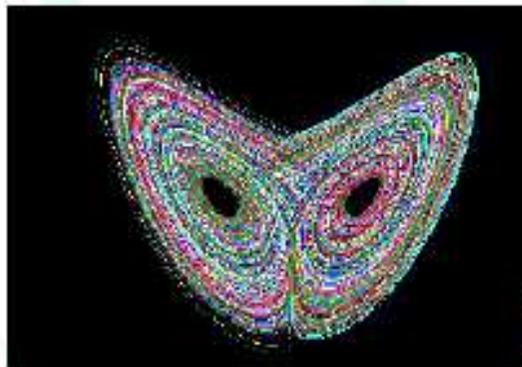
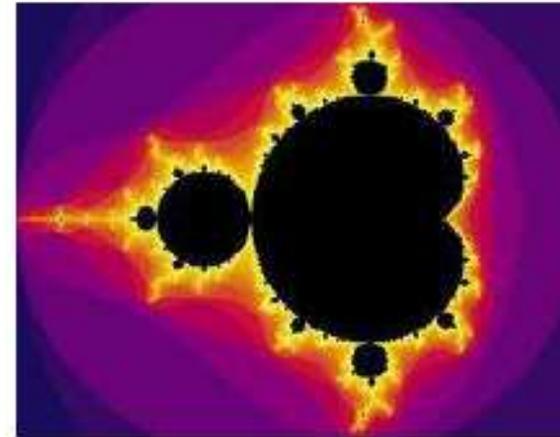
Exemplos: Como chegar à Ala I? → algoritmo.

Multiplique $2344 \times 435 = ?$ → algoritmo. Fatore 432 → algoritmo.

Exemplo: Dinâmica Clássica

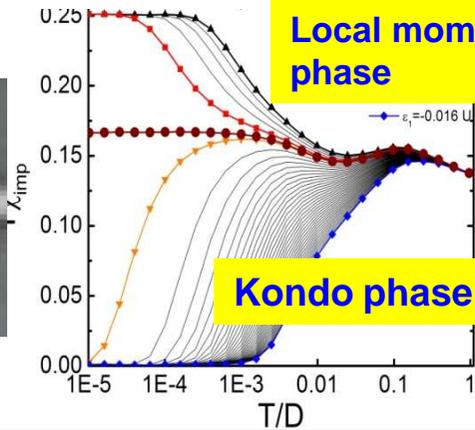
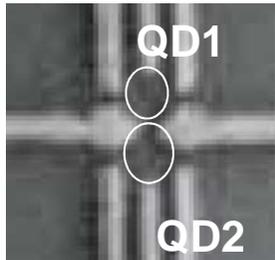


Exemplo: Caos e fractais



Exemplo: Matéria condensada (muitos corpos)

Pontos Quânticos semicondutores



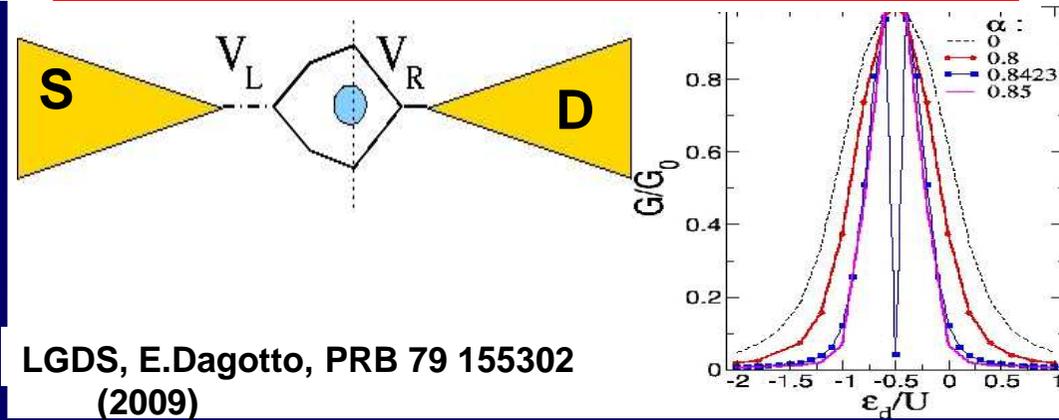
Local moment phase

Kondo phase

LGDS et al. PRL 97 096603(2006);

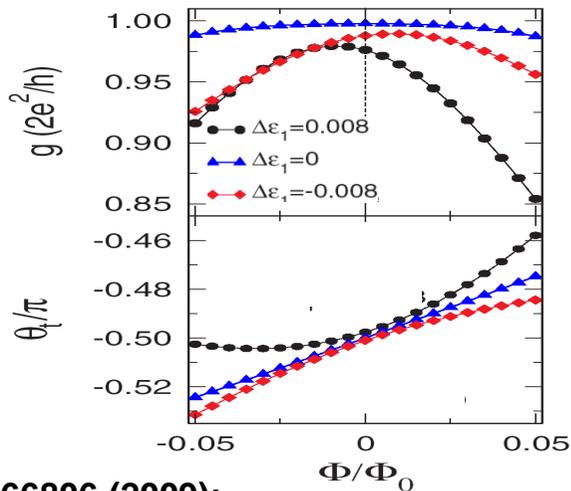
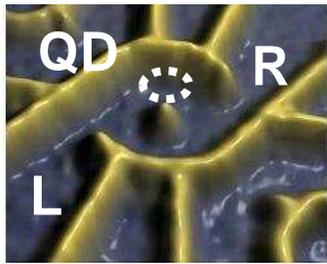
LGDS et al. PRB 78 155304 (2008).

Junções moleculares c/ vibrações



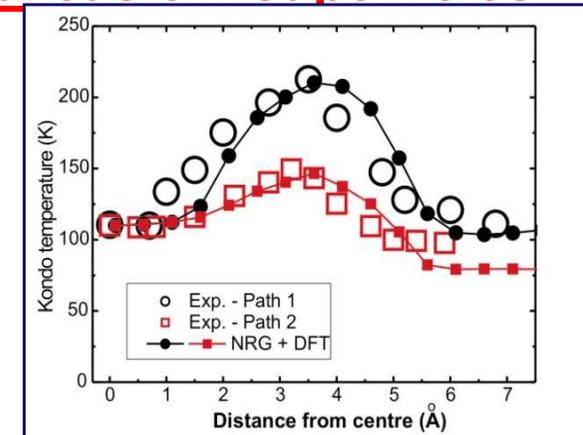
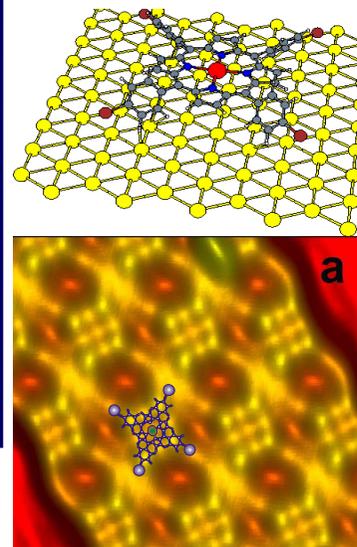
LGDS, E.Dagotto, PRB 79 155302 (2009)

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)