

Física Computacional (LF)
Modelação em Física e Engenharia (MIEF)

Nuno Araújo

Centro de Física Teórica e Computacional, Universidade de Lisboa, Portugal

<http://www.namaraujo.net>

Aprender **Física**

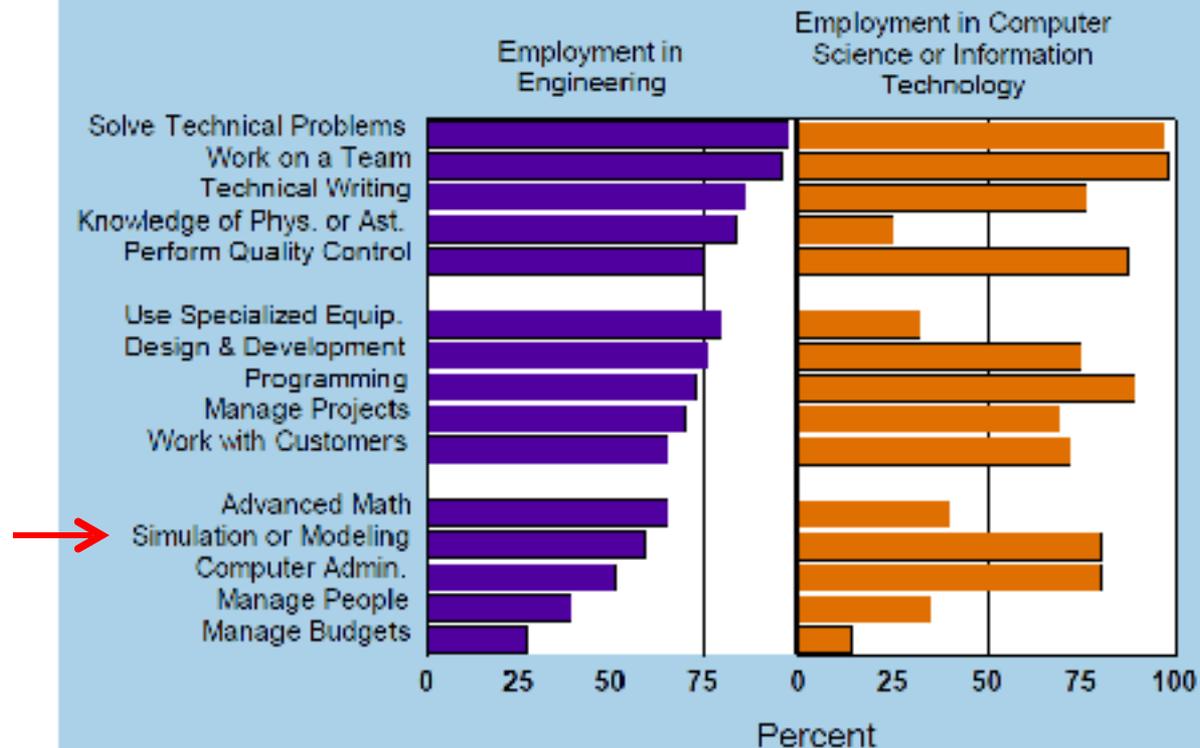
Computacional

dá Trabalho

**Mas vale
a pena!**

Importância

Knowledge and Skills Regularly Used by Physics Bachelor's Employed in the Private Sector, Classes of 2009 & 2010 Combined

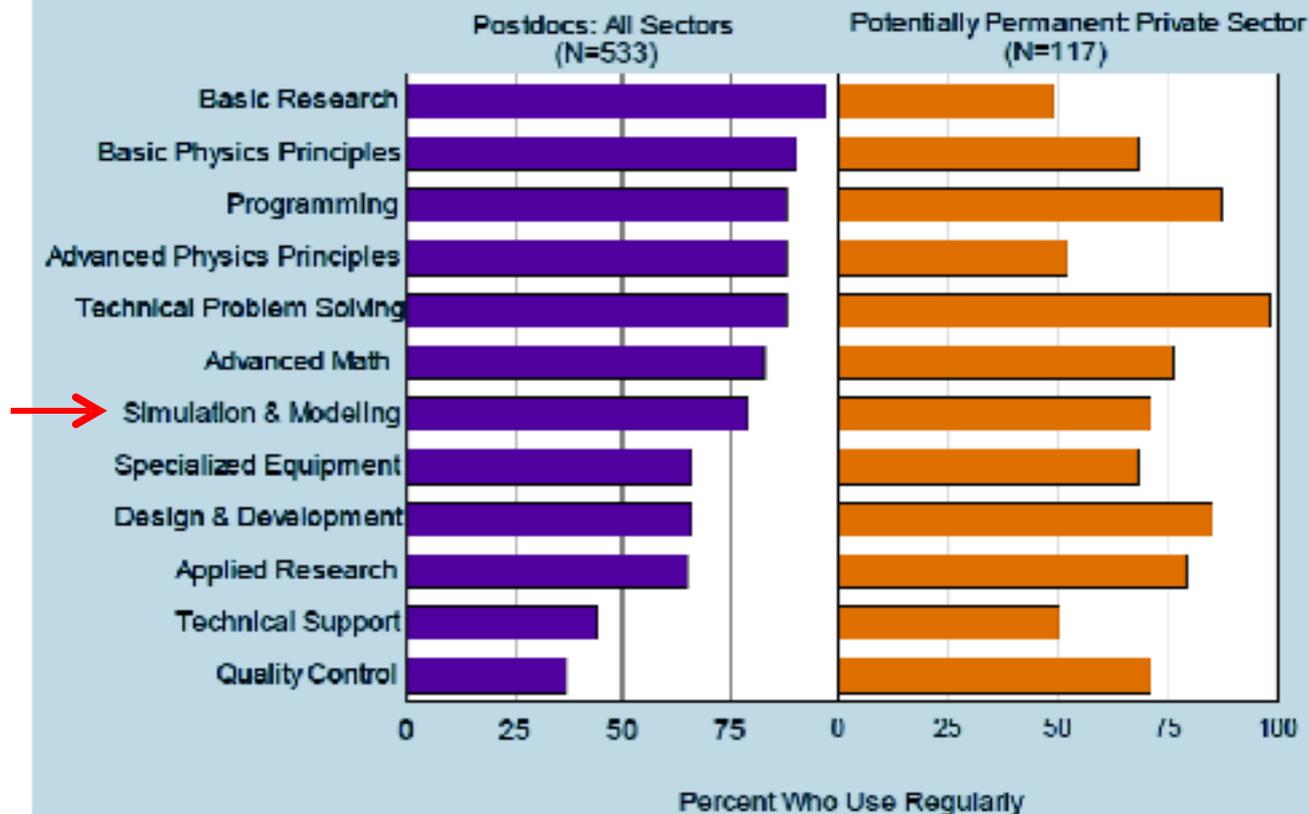


Percentages represent the physics bachelor's who chose "daily", "weekly", or "monthly" on a four-point scale that also included "never or rarely".

<http://www.aip.org/statistics>

Importância

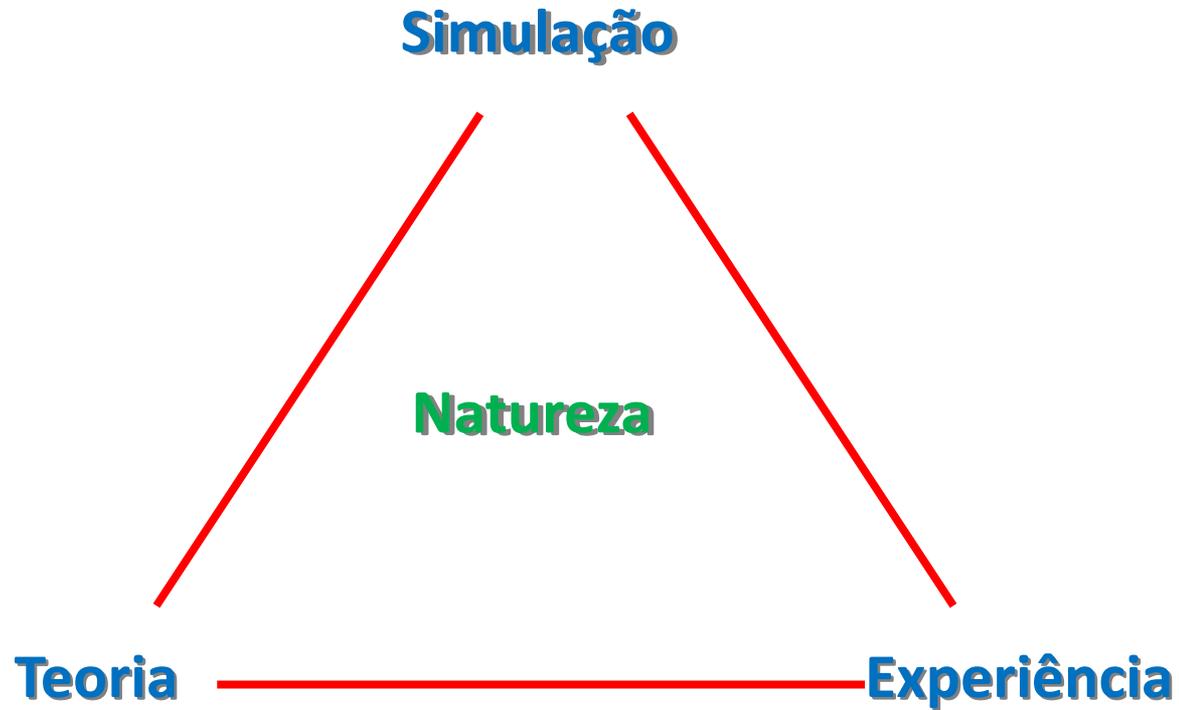
Scientific and Technical Knowledge Regularly Used by New Physics PhDs, Classes of 2009 & 2010 Combined



Percentages represent the proportion of physics PhDs who chose "daily", "weekly" or "monthly" on a four-point scale that also included "never or rarely". Data only include U.S. educated physics PhDs who remained in the U.S. after earning their degrees.

<http://www.aip.org/statistics>

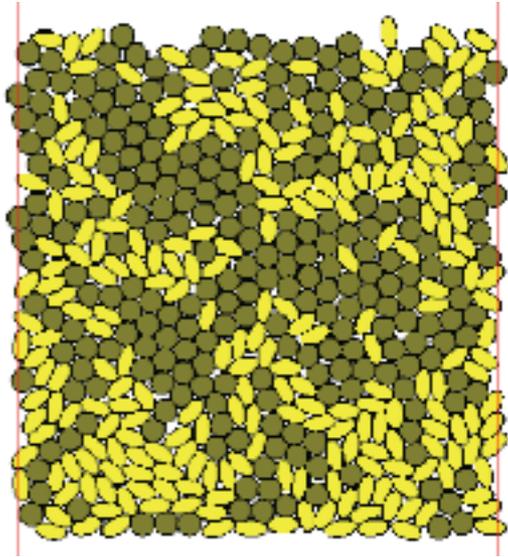
Teoria, experiência, simulação



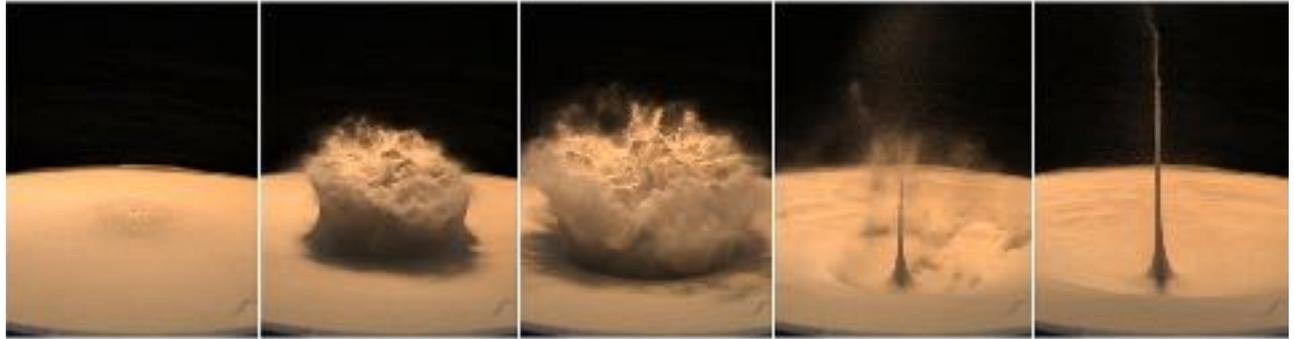
Três tipos de problemas resistência do ar



Três tipos de problemas problemas de muitos corpos



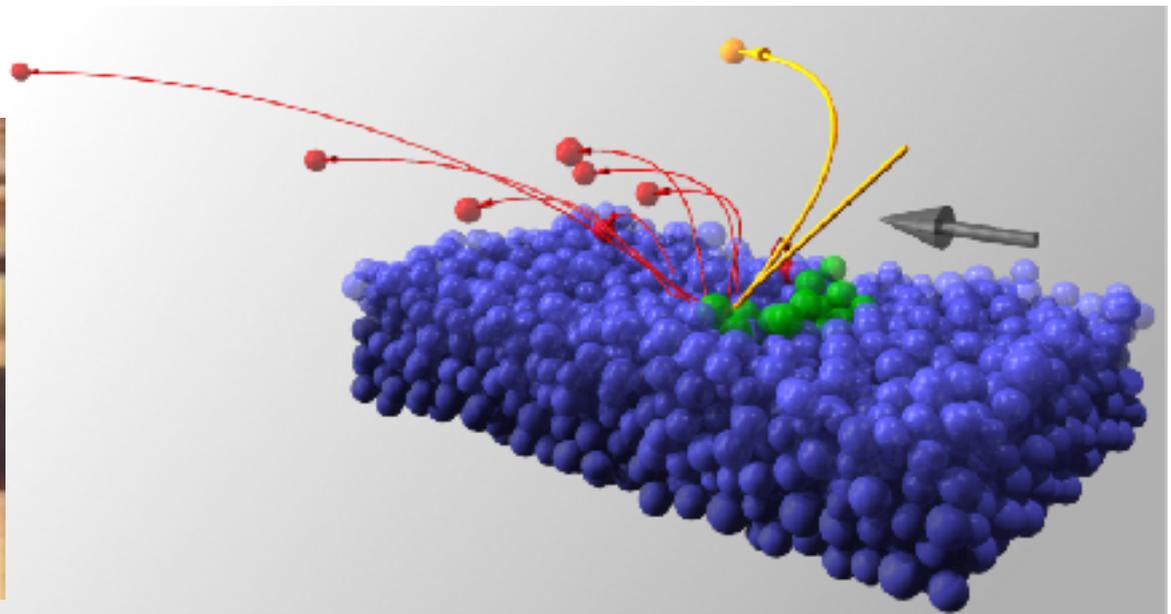
Kantawong Vuttivorakulchai



<http://grainslab.weebly.com/>

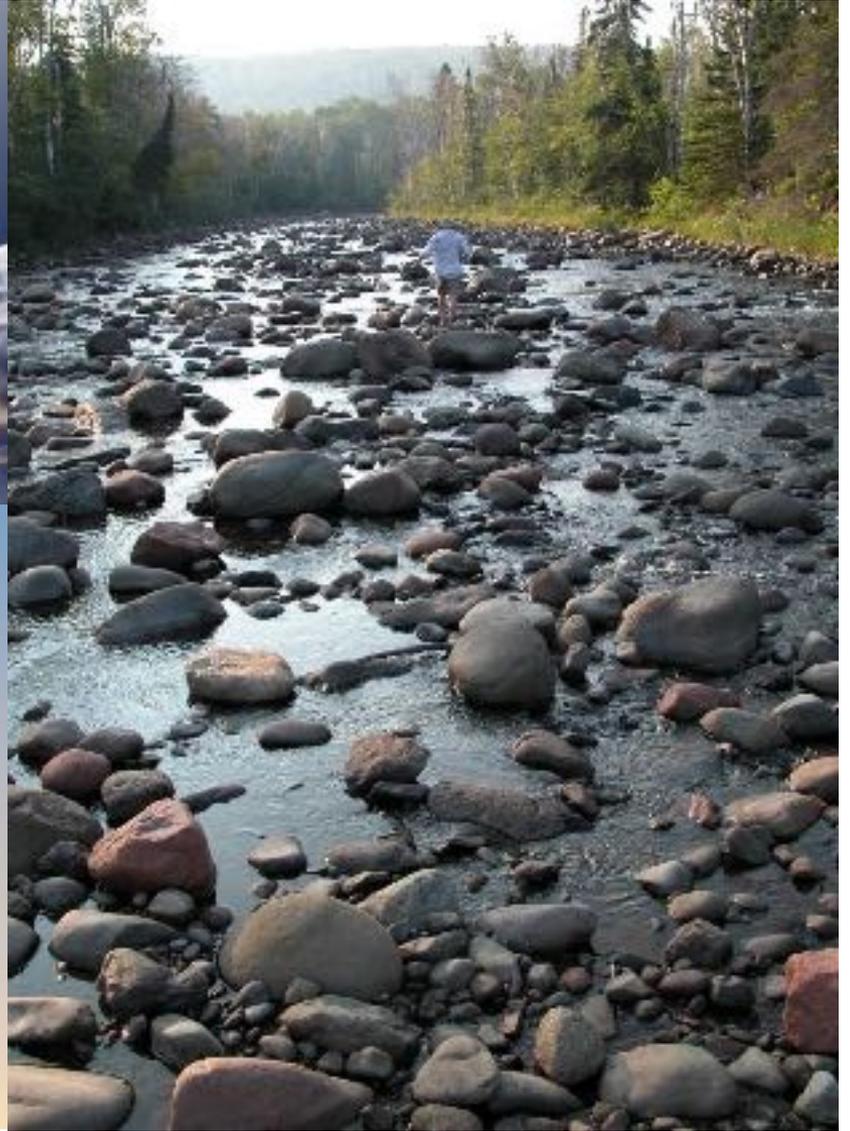


Hans J. Herrmann *et al.*



M. V. Carneiro, N. A. M. Araújo, T. Pätz, and H. J. Herrmann. *Phys. Rev. Lett.* **111**, 058001 (2013)

Três tipos de problemas problemas estocásticos



Simulação numérica

Vantagens

- ligar/desligar **interações**
- testar diferentes regiões do espaço de **parâmetros** (“caro” experimentalmente)
- simular sistemas que não queremos/podemos **testar** experimentalmente:
 - *bombas nucleares*
 - *origem do universo*
 - *propagação de doenças*
- abordar sistemas para os quais só temos uma **descrição mecanicista**.

Simulação numérica

Desafios

- **recursos** limitados (tempo/velocidade do CPU; memória; ...)



$1 \text{ cm}^3 \approx 0.06 \text{ moles de H}_2\text{O} \approx 10^{22} \text{ moléculas}$



esferas e sem rotação!!!

10^{23} equações do movimento

10^{23} bytes de informação ($10^5 \text{ EB} = 10^{11} \text{ TB}$)

Sunway TaihuLight (China): 93 PFLOPS

93×10^{15} operações/segundo

Facebook: $10^5 \text{ TB} = 0.1 \text{ EB}$

Google: $10^6 \times 1 \text{ TB} = 1 \text{ EB}$

1 fs em $10^5 \text{ s} \approx 27 \text{ horas}$

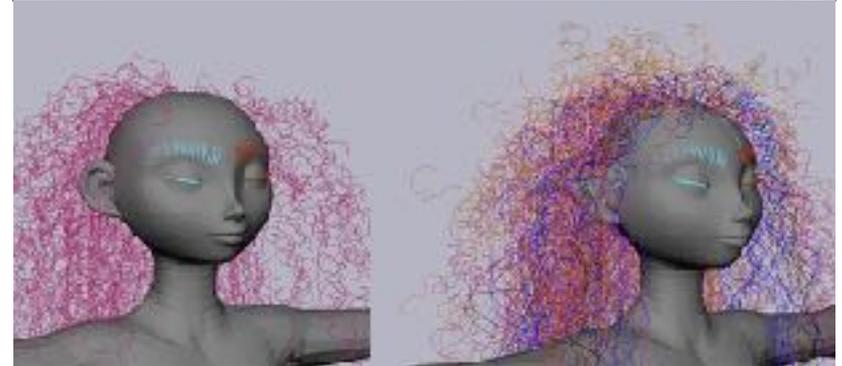
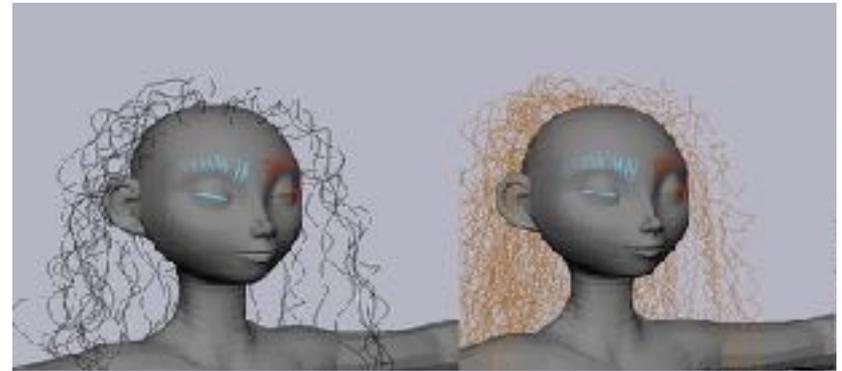
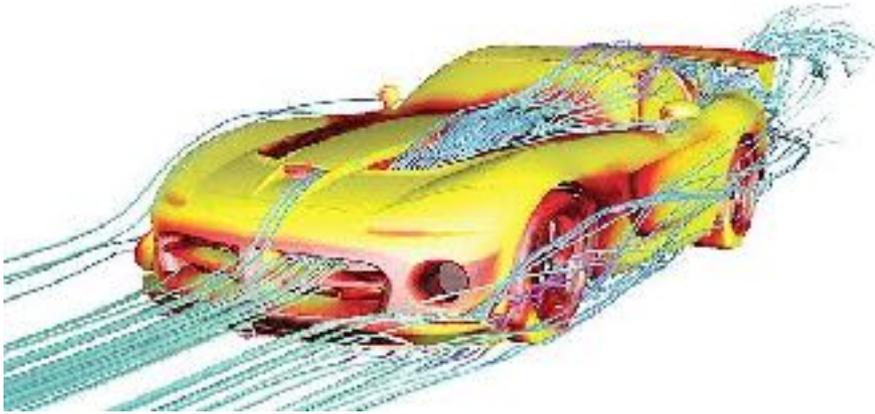
- efeitos de **tamanho**

10^{-3} s em 10^{12} dias

- **precisão** (erros de arredondamento e truncagem)

Simulação numérica

Desafios



Simulação numérica

Estratégia

- começar com um **problema simples**
- comparar com **resultados analíticos**
- aumentar a **complexidade**
- usar sempre a **intuição física**
- comparar com **resultados experimentais**
- avaliar a **exequibilidade** do projeto (tempo, recursos, ...)

Simulação numérica

Estratégia



Disciplina

- 14 aulas teóricas (110 min) + 13/14 aulas práticas (110 min)
- **Aulas práticas:**
 - 1+12 trabalhos que incluem programação
 - **Frequência obrigatória:** mínimo de 10 aulas.
 - Relatórios entregues por e-mail para ***fiscompfcul@gmail.com***
 - ***Data limite:*** duas semanas depois do trabalho
 - Formato pdf (usar o modelo disponibilizado no *moodle*)
 - Incluir ficheiro cpp (não incluir executável)
- **Avaliação:**
 - **6 relatórios** dos trabalhos práticos [0 – 8 valores]
 - média sobre os 6 relatórios
 - **teste 1 [31/10/2019] e teste 2 [Primeira data de exame]** [0 – 12 valores]
 - Nota mínima nos testes: 6 valores

Disciplina

1. Introdução à Física Computacional
2. Gerador de números aleatórios
3. Modelos estocásticos
4. Monte Carlo
5. Dinâmica Molecular
7. Equações diferenciais parciais
8. Simulação de fluídos

Bibliografia

J. M. Thijssen. *Computational Physics*. **Cambridge University Press**, United Kingdom, 1999.

D. C. Rapaport. *The art of molecular dynamics simulations*. **Cambridge University Press**, United Kingdom, 2004.

D. Frenkel and B. Smit. *Understanding molecular simulations*. **Academic Press**, United States, 2002.

H. J. Herrmann. *Lecture Notes: Introduction to Computational Physics*. **ETH Zurich**, Switzerland, 2009.

D. P. Landau and K. Binder. *A guide to Monte Carlo simulations in Statistical Physics*. **Cambridge University Press**, United Kingdom, 2013.

S. Succi. *The Lattice Boltzmann Equation: For Fluid Dynamics and Beyond*. **Oxford University Press**, United Kingdom, 2001.

D. E. Knuth. *The art of computer programming (volumes 1-4a)*. **Addison Wesley**, Boston, 2011.

W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. Vetterling, and B. P. Flannery. *Numerical Recipes in C++*. **Cambridge University Press**, United Kingdom, 2005.

C++ tutorial. <http://www.cplusplus.com/doc/tutorial/>