

# COMPUTATIONAL PHYSICS

---

*Rui Coelho*

Physics Department

Instituto Superior Técnico

[\*rui.alves.coelho@tecnico.ulisboa.pt\*](mailto:rui.alves.coelho@tecnico.ulisboa.pt)

# Course content

- Basic in C++ programming and object programming.
- Construction and usage of C++ libraries for general applications.
- Using the ROOT graphical interface for analysis and representation of physics/numerical results.
- Numerical representation of numbers and rounding errors.
- Linear systems of equations, data interpolation, numerical differentiation, integration and root finding.
- Random numbers and Monte-Carlo methods.
- Ordinary and partial differential equations.

# Course organization

- **Aulas Teóricas**

- Cobrir toda a matéria a ser leccionada com a apoio de slides a serem distribuídos aos alunos

- **Aulas Práticas**

- Realização de exemplos práticos sobre a matéria leccionada e eventual complemento da matéria de índole mais prático.

- **Aulas de Laboratório**

- Resolução de exercícios pré-definidos pelos alunos com apoio do docente
  - ✓ Grupos de 2 alunos
  - ✓ Máximo\* de 6 grupos por turno de laboratório (*\*a confirmar*)
  - ✓ Definição dos grupos decidida até 20 de Setembro → Coordenação a cargo do Delegado de Ano.

# Course organization (cont.)

- Dependências de software (A VOSSO CARGO)
  - Sistema Operativo
    - **Linux** (nativo, partição, máquina virtual e.g. VirtualBox)
    - **Mac OSX** (UNIX based kernel)
  - Compilador
    - **GCC** (GNU Compiler Collection) → facilmente instalável em qualquer distro Linux ou OSX e.g. Homebrew...
  - Debugger
    - **gdb** (GNU debugger) → utilíssima ferramenta ao longo do curso
  - Controle de Versão
    - **SVN** (Subversion) → Todos os grupos terão uma pasta num servidor onde cada elemento do grupo deverá colocar o(s) trabalho(s) realizados, sincronizado com o seu computador pessoal.
  - Outros: **ROOT** e **gnuplot** (*visualização gráfica no terminal*)

# Dependências de software (+INFO)

- **Linux**

- Gcc já vem instalado ! Para GDB, GNUPLOT e CMAKE (necessário para instalar o ROOT) :
  - `sudo apt-get gdb, gnuplot, cmake`
- Para instalar o ROOT → <https://root.cern.ch/build-prerequisites> tem lista de todos os pré-requisitos
  - *Alguns opcionais são necessários !*
  - Não é tão simples como “`cmake /root_source`”
  - Seguir passos de build em <https://root.cern.ch/building-root>.
  - Não esquecer de alterar o vosso `.bashrc` ou `.bash_profile` (!)

```
#Include the vars needed by ROOT (cern.ch) library  
export ROOTSYS="/BUILD_DIR_PATH"  
export PATH=$PATH:$ROOTSYS/bin  
export LD_LIBRARY_PATH=$LD_LIBRARY_PATH:$ROOTSYS/lib
```

# Dependências de software (+INFO)

- **Mac OSX** (OSX10.11 and above)
  - ROOT: Seguir indicações específicas para Mac OSX nos sites acima. (C++11 e *libc++ removíveis nas makefiles dos vossos códigos*)
  - Gcc 7\*, gdb, gnuplot, cmake,... → Homebrew facilita imenso !
    - brew install gcc@7, gdb, gnuplot, nedit
  - No vosso .bash\_profile → export PATH=/usr/local/bin:\$PATH para privilegiar as versões Homebrew (Xcode tb tem Gcc !)

```
#Include the vars needed by ROOT (cern.ch) library  
export ROOTSYS="BUILD_DIR_PATH"  
export PATH=$PATH:$ROOTSYS/bin  
export LD_LIBRARY_PATH=$LD_LIBRARY_PATH:$ROOTSYS/lib
```

# Course organization (Horário)

Aulas	Dia da Semana	Dia da Semana
Teórica	Seg, 14:00 — 15:00 (EA3)	Qui, 14:00 — 15:00 (QA1.3)
Prática	Ter, 15:30 — 16:30 (FA3)	Ter, 16:30 — 17:30 (FA3)
Laboratório	Ter, 17:00 — 19:00 (V0.02)	Qua, 10:00 — 12:00 (F8)
	Qua, 14:00 — 16:00 (P8)	Qua, 17:00 — 19:00 (V0.03)
	Qui, 16:30 — 18:30 (P8)	Sex, 15:30 — 17:30 (V1.10)

→ **Aula de dúvidas:** Coordenar com Delegado de Ano e informar Regente.

# Course organization (Avaliação)

- 2 trabalhos (15% + 25%) + avaliação contínua (25%) + projecto (35%)
- *Trabalhos computacionais*
  - **25 Nov** → trabalho de grupo (15%)
  - **30 Jan** → trabalho individual (25%)
- *Projecto*
  - Enunciado a 21 Dezembro
  - Entrega a 4 Janeiro (relatório + código fonte compilável/executável)
  - Discussão oral a 8 e 9 Janeiro
- *Avaliação contínua*
  - 2 problemas de lista pré-selecionada ao longo do semestre
- **NOTA: Só é avaliado o que estiver submetido no servidor SVN à data indicada ou no final do momento de avaliação.**



# Course organization (Avaliação)

- **NOTA: Só é avaliado o que estiver submetido no servidor SVN à data indicada ou no final do momento de avaliação.**
- **NOTA: Não deixem a submissão no SVN para o último minuto**
- **NOTA: Ter sempre à mão uma “cheat-sheet” de SVN para resolver os problemas → comunicação sempre aberta com o vosso colega de grupo**

# Course organization (Bibliografia)

- **A First Course in Computational Physics and Object-Oriented Programming with C++:** David Yevick 2005 ISBN-13: 978-0521827782
- **An Introduction to Computational Physics:** Tao Pang 2010 ISBN-13: 978-0521532761
- **A first course in computational physics:** Paul L DeVries - Wiley (1994); ISBN-13: 978-0471548690
- **A Survey of Computational Physics: Introductory Computational Science:** Rubin H. Landau, Cristian C. Bordeianu, José Páez 2008 ISBN-13: 978-0691131375
- Online
  - [www.cplusplus.com](http://www.cplusplus.com)
  - <https://www.learncpp.com>
  - <https://www.geeksforgeeks.org>
  - <http://root.cern.ch> (manual de toda a biblioteca ROOT)
  - Stackoverflow para tudo o que seja computação (*handle with care*)