



Plano de estudo

Motivação

Física computacional é o estudo e implementação de métodos numéricos para resolver problemas em física para os quais já existe uma teoria quantitativa. Historicamente, a física computacional foi a primeira aplicação dos computadores modernos na ciência e agora é um subárea da computação científica. Uns consideram a física computacional como sendo uma ramificação da física teórica, entretanto, outros a consideram como ramo intermediário entre a física teórica e a experimental, sendo uma área de estudo que suplementa tanto a teoria quanto o experimento.

A compreensão de um sistema físico, combinado com análise numérica nos dá regras necessárias para desenvolver um algoritmo, ou seja, um conjunto de regras para resolver um problema específico. Nossa concepção do sistema físico sob o estudo é obviamente descrito pelas leis da natureza, por condições iniciais, essas sendo condições de contorno e outras restrições externas que influenciam o sistema em questão. Tendo explicado a física, por exemplo no formulário de um conjunto de equações diferenciais parciais acopladas, precisamos de métodos numéricos eficientes para configurar o algoritmo final. Este algoritmo é, por sua vez, codificado em um programa de computador e executado de inúmeras formas diferentes. Para desenvolver essa abordagem computacional, é necessário o estudo de vários sistemas físicos, abrangendo do pêndulo clássico à sistemas mecânicos quânticos.

Em vista disso, o grupo composto por alunos do curso de graduação em física propuseram a criação desse grupo de estudo para que seja discutido,

compreendido e desenvolvido aplicações computacionais de processos físicos no Departamento de Física da UFPB.

Objetivo

Desenvolver atividades de cálculo numérico aplicado em problemas de física.

Conteúdos

▼ Física Computacional I

- Linguagem de programação: C/Python;
- Diferenciação numérica;
- Integração numérica;
- Diagonalização de matrizes, solução de sistemas lineares;
- Equações não lineares e raízes de polinômios;
- Interpolação, extrapolação e ajuste de dados;
- Números aleatórios e método de Monte Carlo.

▼ Física Computacional II

- Aplicações de equações diferenciais;
- Mecânica quântica e estado sólido;
- Sistemas aleatórios, *random walk* e difusão;
- Mecânica estatística, transições de fase;
- Dinâmica molecular.

Programa

O grupo irá, inicialmente, fazer um estudo de conceitos básicos de programação, através das linguagens C e Python, aplicação de bibliotecas de álgebra linear, funções de visualização de dados para gerar gráficos, visualizar dados/resultados e entre outros. Logo após, para aqueles do grupo que pagaram a disciplina de física computacional I utilizando a linguagem C, será feito um novo estudo de todos os programas, agora aplicados à linguagem Python. Dessa forma, serão divididos assuntos de acordo com o cronograma adotado, seguindo os tópicos descritos na

sessão de "Conteúdos", iniciando com conceitos básicos de linguagem de programação até aplicações voltadas ao estudo de dinâmica molecular.

No final, ao cobrir todos os tópicos definidos na sessão "Conteúdos", será discutido qual melhor método para dar continuidade ao grupo.

Referências

LANDAU, Rubin; PÁEZ, Manuel; BORDEIANU, Cristian. **Computational Physics: Problem Solving with Computers**. 3. ed. atual. [S. l.: s. n.], 2012. 526 p. Disponível em: https://www.eidos.ic.i.u-tokyo.ac.jp/~tau/lecture/computational_physics/docs/computational_physics.pdf. Acesso em: 2 jan. 2022. - **Referência principal** -

HJORTH-JENSEN, Morten. **Computational Physics** (notes). Oslo: University of Oslo, 2010. 502p. (Disponível no site: <http://depts.washington.edu/ph506/Hjorth-JensenLectures2010.pdf>) - **Referência principal** -

DEVRIES, Paul L. **A first course in computational physics**. New York: John Wiley & Sons, 1994. 424 p.

THIJSEN, J. M. **Computational physics**. 2.ed. Cambridge: Cambridge University Press, 2013. 634p. ISBN: 978-1107677135.

GIORDANO, N. J.; NAKANISHI, H. **Computational physics**. 2.ed. Harlow: Pearson, 2005. 560p. ISBN: 978-0131469907.

PRESS, William H et al. **Numerical recipes in C++: the art of scientific computing**. 2.ed. Cambridge: Cambridge University Press, 2005. 1002 p. ISBN: 0521750334.

STICKLER, Benjamin A.; SCHACHINGER, Ewald. **Basic concepts in computational physics**. 2.ed. Berlin: Springer, 2016. 409p. ISBN: 978-3319272634.

FRANKLIN, Joel. **Computational Methods for physics**. 1.ed. Cambridge: Cambridge University Press, 2013. 420p. ISBN: 978-1107034303.

NEWMAN, Mark. **Computational physics**. 1.ed. CreateSpace Independent Publishing Platform, 2012. 562p. ISBN: 978-1480145511.

GOULD, Harvey; TOBOCHNIK, Jan. **An introduction to computer simulation methods: applications to physical systems**. 2.ed. Reading, Mass: Addison-Wesley, c1996. 721 p. ISBN: 0201506041.

PANG, Tao. **An introduction to computational physics**. 2.ed. Cambridge: Cambridge University Press, 2006. 402p.