

Optativa para o Quinto período versão  
2019, então deve ser oferecida no diurno  
em 202/1

Pré-requisito: EDB e FIS616-Intro. Computação em Física

## Programa para o Curso

### Métodos Computacionais em Física-FIS633

(1° semestre de 2021)

**Bismarck Vaz da Costa**

#### 1. Introdução

Este curso tem como característica principal sua multidisciplinaridade uma vez que a gama de assuntos a serem abordados permitem o desenvolvimento de técnicas usadas em quaisquer áreas das ciências. São eles:

- Simulação de Monte Carlo
- Diferenças Finitas
- Dinâmica Molecular
- Processamento de Sinais
- Algoritmos Genéticos
- Computação de Alta Performance

Espera-se que ao final do curso o estudante deverá saber usar as técnicas básicas aprendidas para: 1. Resolver numericamente problemas de muitos corpos. Calcular

#### 2. Programa Detalhado

Antes de ir diretamente para o assunto da ementa é necessário discutir algumas técnicas computacionais com o intuito de tornar os códigos mais eficientes, isto é, usando de forma racional a memória do computador e gastando o mínimo possível de tempo de computação. A maior parte destas técnicas é simples e assimilável em qualquer linguagem.

- Vetorização do Código,
- Paralelização do Código (MPI e OMP),
- Criação de listas de Verlet

Estas técnicas serão aplicadas aos problemas desenvolvidos. O curso é montado de forma encadeada, isto é, os exemplos desenvolvidos em sala e problemas propostos deverão usar todo o conhecimento adquirido até aquele momento.

Ao final do curso espera-se que o estudante tenha compreendido as técnicas mais modernas de solução de problemas complexos e seja

capaz de aplicar este conhecimento para a solução de problemas físicos de dificuldade média.

Iniciamos o curso com uma pequena digressão para apresentar conceitos básicos de probabilidades. Isto é necessário para que o estudante compreenda o que processos estocásticos, cadeias de Markov etc. e a Equação Master. Nos fixaremos em seu uso para obter configurações em equilíbrio termodinâmico e no processo de cinética estocástica. Além de tratar o problema clássico, daremos alguns elementos de Monte Carlo Quântico junto com técnicas modernas de busca no espaço de configurações. Logo após a introdução destes métodos, introduzirei técnicas de solução de equações diferenciais usando discretização das equações. Os principais problemas

#### **a. Monte Carlo**

A técnica de Monte Carlo não representa qualquer método específico, mas sim uma forma, ou estratégia, de resolver numericamente problemas não solúveis por métodos puramente analíticos. O método de Monte Carlo é essencialmente construído com sua base em probabilidade e estatística. Como um método estocástico uma simulação de MC gera um conjunto de eventos aleatórios

##### **Monte Carlo Clássico**

- i. Algoritmo de Metropolis
- ii. Estimativa de erros
- iii. Exemplo
  - Gás em uma caixa

##### **Monte Carlo Quântico**

- i. Decomposição de Susuki-Trotter
- ii. Introdução de tempo imaginário
- iii. Exemplos na rede
  - Modelo XY
  - Modelo de Hubbard

#### **b. Diferença Finita**

Integração de equações diferenciais ordinárias

- i. Elementos Finitos em Física
- ii. Representação discreta de uma variável contínua
- iii. Derivadas no espaço
- iv. Problema de valor inicial
- v. Convergência
- vi. Fidedignidade
- vii. Estabilidade

- viii. Métodos de Integração
- Euler
  - Leapfrog
  - Métodos explícitos e implícitos em dois passos
  - Equações diferenciais de ordem mais alta
  - Equações de Diferença para meios contínuos
  - Princípios de conservação
  - Relações de dispersão
  - Equação de onda
  - Equação advectiva
  - Equação de difusão
  - Equação elíptica
  - Equação hiperbólica
  - Equações parabólicas

### c. Técnicas de Dinâmica Molecular

Problemas com condições iniciais

- i. Nosè
- ii. Renormalização de Velocidades
- iii. Uso de Monte Carlo para definir a configuração inicial
- iv. Cálculo de Funções de Correlação  $C(\vec{r}, t)$

### d. Processamento de Sinais

- i. Cálculo da Transformadas de Fourier de  $C(\vec{r}, t)$
- ii. Cálculo do Fator de Estrutura Dinâmico:  $C(\vec{q}, t) = \mathcal{F}\{C(\vec{r}, t)\}$ .
- iii. Filtros

### e. Otimização Combinatorial (Multivariate)

- i. Simulated Annealing
- ii. Algoritmo genético
- iii. Método Wang-Landau

## 3. Avaliação

A avaliação do curso será feita através de 3 trabalhos práticos distribuídos a intervalos regulares ao longo do curso.

## 4. Pré-requisitos

- Alguma linguagem de programação de alto nível para implementação de códigos vetorizados e paralelos usando MPI e OMP.
- Acesso a uma máquina com "pelo menos" dois processadores.
- Cálculo I e II
- Geometria Analítica e Álgebra Linear

- Fundamentos de Mecânica
- Termodinâmica
- Fundamentos de Eletromagnetismo

Apesar de não ser condição exclusiva, para que o curso seja aproveitado em toda sua extensão sugiro ainda os seguintes cursos

- Física Quântica
- Física Estatística
- Métodos Matemáticos