

Física computacional: uma experiência pedagógica no quarto ano dos cursos de Física e Engenharia Física da Universidade de Coimbra

FIOLHAIS, Carlos

Departamento de Física da Universidade de Coimbra

3000 COIMBRA

Pretende-se com esta cadeira familiarizar os alunos do quarto ano dos Cursos de Física e Engenharia Física da Universidade de Coimbra com a utilização de computadores em Física, nomeadamente com a simulação computacional de leis físicas. Atendendo aos recursos disponíveis, utilizam-se microcomputadores de 16 bits compatíveis IBM (sistema operativo MS-DOS), sendo as aulas exclusivamente práticas. Recorrem-se a exemplos da mecânica clássica, mecânica quântica e física estatística. É o seguinte o programa da cadeira:

0) Introdução:

Breve explicação da estrutura e funções de um computador. Evolução do cálculo automático, incluindo os principais desenvolvimentos do hardware e do software.

Principais aplicações dos computadores em física:

- utilizações gerais e indiferenciadas (processamento de texto, etc.);
- cálculo simbólico;
- análise numérica e gráfica;
- regulação de experiências em tempo real;
- ensino interactivo;
- simulação.

Os computadores pessoais compatíveis com a norma IBM. Introdução ao sistema operativo MS-DOS. Utilização de programas comerciais de utilidade em física como editores, programas de manipulação algébrica (**MuMath** e **Derive**) e programas de resolução de equações e representação gráfica de funções (**Eureka**).

O estudante é estimulado logo de início a interagir criativamente com o computador, aproveitando as possibilidades deste para resolver problemas usuais em física (por exemplo, solução numérica da equação de van der Waals e representação de curvas isotérmicas usando **Eureka** e simplificação de equações, integração e diferenciação algébricas, expansões em série de Taylor, etc., usando **Mumath** e **Derive**).

1) Linguagens de programação e algoritmos:

Linguagens mais comuns em aplicações científicas (Basic, Pascal, Fortran77). Programação estruturada e semelhanças entre as várias linguagens (a linguagem adoptada na cadeira foi o **Turbo Pascal 5.5** da Borland). Algoritmos elementares e a sua transcrição computacional.

Problemas simples em análise numérica:

- Integração (métodos do trapézio, Simpson, Newton-Cotes e Gauss, com a comparação dos respectivos erros). Extrapolação de Richardson e método de Romberg. Integração com pontos extremos singulares.

- Diferenciação numérica (de 1.a e 2.a ordem);

- solução de equações diferenciais ordinárias de 1.a ordem (métodos de Euler e de Euler modificado, método de meio passo, método de Runge-Kutte de 2.a ordem).

2) Simulação de fenômenos determinísticos em mecânica clássica e quântica:

Soluções das equações de Newton nos seguintes casos:

- Queda dos graves com e sem resistência do ar (a 1 e 2 dimensões): o problema do paraquedista e do lançador do dardo.

- Oscilador harmónico linear, livre e com atrito. Oscilador forçado (batimentos e ressonâncias). Retratos de fase.

- O problema de Kepler; verificação numérica e gráfica das leis de Kepler; outras forças centrais e análise da estabilidade de órbitas. O problema de um sistema solar com 2 planetas.

Solução da equação de Schrödinger independente do tempo para:

- o oscilador harmónico simples a 1 dimensão; precisão dos métodos aproximativos (perturbativo e variacional) em relação a soluções numéricas "exactas";

- átomo de hidrogénio a 1 e 2 dimensões (problema de Kepler quântico).

3) Simulação de fenómenos não lineares em dinâmica de partículas e de fluidos:

- O problema dos 3 corpos em mecânica celeste. O movimento de um planeta no campo de uma estrela dupla.

- Estudo de mapeamentos não lineares a 1 e 2 dimensões: a equação logística (caminho periódico para o caos por bifurcações sucessivas e relevância da constante de Feigenbaum), sistema de Henon, conjuntos Julia e de Mandelbrot.

- Atratores estranhos (sistemas de Lorentz e de Rössler). Fractais e dimensão fractal (ou de Hausdorff).

- Exemplos de atratores estranhos em física: o pêndulo amortecido e forçado. Secção de Poincaré e sua utilidade na análise de sistemas dinâmicos.

4) Simulações estocásticas:

- Números aleatórios. Definições operacionais de números pseudo-aleatórios. Determinação do período de um gerador de números aleatórios.

- Simulação de Ehrenfest da aproximação de equilíbrio. Tempo de relaxação e flutuações em termodinâmica do não-equilíbrio.

- Introdução a técnicas de Monte-Carlo: cálculo de integrais (aplicação à avaliação de momentos de inércia, volumes e hipervolumes). Algoritmo de Metropolis.

- Teoria da probabilidade: distribuições binomial, de Gauss e de Poisson. Passeios aleatórios (livres e com restrições) em 1, 2 e 3 dimensões. Indução da lei da difusão. Uso do método dos mínimos quadrados para análise de dados.

- Problemas de física estatística: caminhos aleatórios que se auto-evitam (polímeros), percolação (transição de fase geométrica) e modelo de Ising de um sólido magnético.

5) Métodos computacionais em física experimental:

Ajustes lineares e não lineares de curvas. Transformadas de Fourier rápidas.

O aproveitamento dos alunos é efectuado por meio de um trabalho de projecto, que consiste na elaboração de um ou mais programas para resolver problemas físicos específicos. A seguinte lista indica alguns dos trabalhos efectuados nos anos de 1987/1988 e 1988/1989.

Projectos desenvolvidos pelos estudantes:

1- Análise da dinâmica de um sistema de várias moléculas que interagem por um potencial de Lennard-Jones.

2- Estudo dos osciladores anarmónicos de Toda, Duffing e van der Pols em mecânica clássica.

3- Simulação do fluxo de um fluido perfeito em torno de um obstáculo esférico ou cilíndrico.

4- Estudo do átomo de hidrogénio perturbado por um campo externo (efeito Stark).

5- Estudo do potencial de Woods-Saxon da física nuclear, incluindo interacção spin-órbita, e construção de densidades nucleares.

6- Estudo da formação de fractais usando o método de D.L.A. (" Diffusion limited aggregation") e suas variantes, incluindo a descrição de descargas eléctricas em meios dieléctricos.

7- Método de simulação de Monte-Carlo para o "ensemble canónico" (exemplo do gás perfeito clássico).

8- Estudo do choque de um pacote de ondas gaussiano numa barreira de potencial.

9- Estudo de um plasma electroestático a 1 dimensão (equação de Poisson).

10- Estudo de um campo electroestático a 2 dimensões, com condições fronteiras dadas.

11- Estudo da cisão nuclear num modelo simples: potencial de oscilador harmónico com 2 centros.