

Caracterização da disciplina							
Código da disciplina:	NHZ3010-15	Nome da disciplina:	Física Computacional				
Créditos (T-P-I):	(3-1-4)	Carga horária:	4 horas	Aula prática:	-	Câmpus:	Santo André
Código da turma:	NANHZ3010-15SA	Turma:	A	Turno:	Diurno	Quadrimestre:	QS
Docente(s) responsável(is):	Pedro Alves da Silva Autreto						

Alocação das turmas						
	Segunda	Terça	Quarta	Quinta	Sexta	Sábado
8:00 - 9:00						
9:00 - 10:00						
10:00 - 11:00						
11:00 - 12:00						
12:00 - 13:00						
13:00 - 14:00						
14:00 - 15:00						
15:00 - 16:00						
16:00 - 17:00						
17:00 - 18:00						
18:00 - 19:00						
19:00 - 20:00			Atendimento online(a) (síncrona)			
20:00 - 21:00	Prazo limite para entrega de TOs		Atendimento online(a) (síncrona)		Prazo Limite para a entrega de uma AV	
21:00 - 22:00	Plano de estudos (assíncrono)					
22:00 - 23:00	Plano de estudos (assíncrono)					

(a) Em substituição às aulas definidas no plano original da disciplina (de caráter presencial), teremos horários de atendimento online (atividade síncrona) utilizando fórum da plataforma Moodle (à qual todos os alunos têm, em princípio, acesso), bem como por meio de chamadas de vídeo (Jitsi, Google Hangouts/Meet, Skype ou outro) sempre que os alunos e o professor achem necessário em um ou dois dos horários indicados. Nos horários de atendimento, definidos no plano original, será gravado e disponibilizado um plano de estudos para a semana. Este plano será gravado e escrito para ser disponibilizado todas as semanas às segundas-feiras.

Planejamento da disciplina
Objetivos gerais

Apresentar os métodos computacionais utilizados para a simulação de sistemas físicos e resolver numericamente os problemas que surgem em física, astronomia, engenharias, bem como em outras áreas afins.

Objetivos específicos

Adquirir conhecimento, intuição e habilidade matemática em situações físicas envolvendo:

- 1- Linguagem e algoritmos
- 2- Erros e aproximações
- 3- Derivação e integrações numéricas
- 4- Dinâmica Molecular
- 5- Monte Carlo

Ementa

Linguagem e Algoritmo. Precisão da máquina. Derivação numérica. Quadratura de uma função. Equações diferenciais ordinárias, técnicas de soluções: algoritmos de Euler, de Runge-Kutta. Problemas de valores de contorno e autovalores. Técnicas de soluções de equações diferenciais parciais: Equações elípticas, equações parabólicas, equações hiperbólicas. Probabilidade. Variáveis aleatórias e processos estocásticos. Dinâmica molecular. Dinâmica estocástica. Método de Monte Carlo.

Conteúdo programático

Aula/ Semana (período)	(Unidade) Tema principal	(Subunidade) Subtema	Objetivos específicos	Atividades teóricas, recursos midiáticos e ferramentas	Atividades práticas, recursos midiáticos e ferramentas
Semana 1 (21/09 a 27/09)	Ambientação	<ul style="list-style-type: none"> • Instalação e configuração de softwares; • Ambientação com princípios básicos de programação. 	<ul style="list-style-type: none"> • Instalar compiladores e/ou escolha do compilador online a ser usado; • Instalar e configurar sistema de gravação de vídeos • Compreender e praticar 	<ul style="list-style-type: none"> • Assistir aula síncrona (vídeo será disponibilizado – Dedicação 30 minutos) • Assistir aula assíncrona (Dedicação: 30 minutos) • Leitura das seções: 2.1, 2.2 (até 2.2.4) do Livro Texto • (Dedicação: 2 	<ul style="list-style-type: none"> • Instalação de setup inicial (Dedicação 2 horas) • Participação no Fórum da Disciplina (Dedicação 30 minutos) • TOEXTRA: Produção de um vídeo de 15 minutos mostrando o setup a ser utilizado (Dedicação: 30 minutos) • TO1 (Dedicação: 2 horas)

			programação com recursos básicos	horas)	
Semana 2 (28/09 a 04/10)	Conceitos mais avançados de programação	<ul style="list-style-type: none"> • Vetores e arrays • Uso de bibliotecas nas linguagens de programação; • Problema de autovetores e autovalores 	<ul style="list-style-type: none"> • Entender e aplicar os conceitos de arrays e vetores em programação; • Entender e aplicar importação de bibliotecas • Entender e aplicar para uso em problema de massa-mola 	<ul style="list-style-type: none"> • Assistir aula assíncrona (Dedicação: 1 hora) • Leitura das seções: 2.2.4, 2.3, 2.4, 2.5 3 2.6 e 2.7 do Livro Texto (Dedicação: 2 horas) 	<ul style="list-style-type: none"> • Participação no Fórum da Disciplina (Dedicação 30 minutos) • TO2 - (Dedicação: 2 horas)
Semana 3 (05/10 a 11/10)	Gráficos e visualização	<ul style="list-style-type: none"> • Uso de softwares gráficos como gnuplot, python para produção de gráficos científicos • Produção de histogramas 	<ul style="list-style-type: none"> • Produzir gráficos com acurácia científica por meio de softwares com pré-configurações; • Entender a concepção de histograma e aplicar no problema de massa-mola 	<ul style="list-style-type: none"> • Assistir aula assíncrona (Dedicação: 1 hora) • Leitura de texto auxiliar e slides (Dedicação: 2 horas) 	<ul style="list-style-type: none"> • Participação no Fórum da Disciplina (Dedicação 30 minutos) • TO3 - (Dedicação: 2 horas)
Semana 4 (12/10 a 18/10)	Acurácia e velocidade	<ul style="list-style-type: none"> • Uso de diferentes linguagens para comparação de velocidades. • Erros e estabilidade 	<ul style="list-style-type: none"> • Entender a origem dos erros; • Manipular código em diferentes linguagens de programação. 	<ul style="list-style-type: none"> • Assistir aula assíncrona (Dedicação: 30 minutos) • Assistir vídeo de AP (Dedicação: 1:30 hora) • Leitura Capítulo 4 do Livro Texto (Dedicação: 2 horas) 	<ul style="list-style-type: none"> • Participação no Fórum da Disciplina (Dedicação 30 minutos) • TO4 - (Dedicação: 2 horas)
Semana 5 (19/10 a 25/10)	Integração	<ul style="list-style-type: none"> • Métodos computacionais para integração de uma função; <ul style="list-style-type: none"> ○ Método de Simpsons ○ Roomberg ○ Métodos de integração de ordem 	<ul style="list-style-type: none"> • Entender e aplicar os diferentes métodos computacionais para cálculo de uma integral • Estimar o erro e escolher variáveis 	<ul style="list-style-type: none"> • Assistir aula assíncrona (Dedicação: 30 minutos) • Assistir vídeo de AP (Dedicação: 1:30 hora) • Leitura de texto texto 5.1 a 5.5 	<ul style="list-style-type: none"> • Participação no Fórum da Disciplina (Dedicação 30 minutos) • TO5 - (Dedicação: 2 horas)

		maior	adequadas para	(Dedicação: 2	
		• Estimativa de erro nos métodos de integração	resolução de integrais	horas)	
Semana 6 (26/10 a 01/11)	Integração	• Método da quadratura Gaussiana	• Entender, estimar erros e aplicar o método da quadratura Gaussiana	• Assistir aula assíncrona (Dedicação: 30 minutos) • Assistir vídeo de AP (Dedicação: 1:30 hora) • Leitura de texto texto 5.5 a 5.7 (Dedicação: 2 horas)	• Participação no Fórum da Disciplina (Dedicação 30 minutos) • TO6 - (Dedicação: 2 horas)
Semana 7 (02/11 a 08/11)	Integrais com limites infinitos e integrais múltiplas	• Integrais sem limites; • Escolha do melhor método de integração; • Erros	• Entender, estimar erros e aplicar de métodos de integração.	• Assistir aula assíncrona (Dedicação: 30 minutos) • Assistir vídeo de AP (Dedicação: 1:30 hora) • Leitura de texto texto 5.7 a 5.10 (Dedicação: 2 horas)	• Participação no Fórum da Disciplina (Dedicação 30 minutos) • TO7 - (Dedicação: 2 horas)
Semana 8 (09/11 a 15/11)	Derivadas	• Métodos de derivação; • Erros associados; • Aproximação de ordens maiores para derivação; • Derivada segunda • Derivadas parciais; • Derivadas de dados com ruídos; • Interpolação	• Entender, estimar erros e aplicar de métodos de derivação; • Entender e aplicar interpolação usando gnuplot	• Assistir aula assíncrona (Dedicação: 30 minutos) • Assistir vídeo de AP (Dedicação: 1:30 hora) • Leitura de texto texto 5.7 a 5.11 (Dedicação: 2 horas)	• Participação no Fórum da Disciplina (Dedicação 30 minutos) • TO8 - (Dedicação: 2 horas)
Semana 9 (16/11 a 22/11)	Resolução de Sistemas Lineares de Equações	• Método de substituição; • Método LU	• Entender e aplicar métodos computacionais para resolução de sistema lineares de equações	• Assistir aula assíncrona (Dedicação: 30 minutos) • Assistir vídeo de AP (Dedicação: 1:30 hora) • Leitura de texto texto 5.7 a 5.11 (Dedicação: 2 horas)	• Participação no Fórum da Disciplina (Dedicação 30 minutos) • TO9 - (Dedicação: 2 horas)
Semana 10	Resolução de	• Uso de	• Entender e	• Assistir aula	• Participação no Fórum da

(23/11 a 29/11)	problemas de autovalores e autovetores	bibliotecas; • Método QR	aplicar métodos computacionais para resolução de problemas de autovalores e autovetores; • Aplicação usando o método de Huckel.	assíncrona (Dedicação: 1 hora) • Assistir vídeo de AP (Dedicação: 1:30 hora) • Leitura de texto texto (Dedicação: 2 horas)	Disciplina (Dedicação 30 minutos) • TO10 - (Dedicação: 2 horas)
Semana 11 (30/11 a 06/12)	Equações diferenciais e Dinâmica Molecular	• Método de Euler e Euler-Cromer; • Método de Runge-Kutta; • Dinâmica Molecular (Método de Verlet; Método de Leap-Frog) • Aplicação em pêndulo e pêndulo amortecido • Equações diferenciais parciais de Laplace e Poisson	• Entender equações diferenciais e as bases da dinâmica molecular	• Assistir aula assíncrona (Dedicação: 1 hora) • Assistir vídeo de AP (Dedicação: 1:30 hora) • Leitura de texto texto 5.7 a 5.11 (Dedicação: 2 horas)	• Participação no Fórum da Disciplina (Dedicação 30 minutos) • TO11 - (Dedicação: 2 horas)
Semana 12 (07/12 a 12/12)	Variáveis aleatórias e Monte Carlo	• Gerador aleatório • Método de Monte Carlo	• Entender o cálculo utilizando um método estocástico	• Assistir aula assíncrona (Dedicação: 1 hora) • Assistir vídeo de AP (Dedicação: 1:30 hora) • Leitura de texto texto 5.7 a 5.11 (Dedicação: 2 horas)	• Participação no Fórum da Disciplina (Dedicação 30 minutos) • TO12 - (Dedicação: 2 horas)

TO: Testes online: Essa avaliação semanal constará de 1 exercícios a ser resolvido. Maiores detalhes na seção de instrumentos de avaliação.

AV: Avaliação Virtual: Atividade realizada em grupo cujo tema será sorteado na primeira semana de aula.

(1) A avaliação dos TOs será considerada para 12 atividades. Desta maneira o aluno poderá deixar, sem prejuízo na avaliação, de entregar uma das atividades, visto haver um teste online EXTRA.

Descrição dos instrumentos e estratégias didáticas para as aulas

A matéria da disciplina será ministrada assincronamente sob o formato de vídeo-aula e indicação de outras mídias.

Para cada semana haverá um plano de estudo composto por 1 a 2 vídeos com duração entre 20 a 30 minutos, indicação de textos e demais mídias, e uma teste online. Essas atividades compreendem 3 horas de dedicação semanal utilizando material disponibilizado.

Os vídeos serão disponibilizados na página Moodle da disciplina em formatos diversos: (i) arquivo vídeo para download; (ii) link para vídeo no YouTube;

Os PDFs dos slides anotados das aulas continuarão a ser colocados na página da disciplina no Moodle, tal como antes da interrupção das atividades acadêmicas presenciais.

As 4 horas de dedicação individual devem ser utilizadas para fixação do conteúdo a partir da leitura de material suplementar e pela execução das listas de exercícios.

Descrição dos instrumentos para os horários de atendimento aos alunos

O formato do atendimento privilegiará o chat e o fórum da página Moodle da disciplina.

Os horários de atendimento também serão realizados via chamada de voz e/ou vídeo (Jitsi, Google Meet, ou outros).

Todos esses links de atividades síncronas constarão em uma agenda compartilhada com indicação na página da disciplina no Moodle.

Descrição dos instrumentos e critérios de avaliação qualitativa

Todas as atividades serão avaliadas seguindo os conceitos indicados para cada atividade e com base nos objetivos traçados. O conceito final (CF1) será observado com base nestes conceitos e entendendo que 40% da nota está relacionada a avaliação virtual, 50% a média das atividades dos testes online e 10% a sua participação na disciplina.

Teste Online (TO): Essa avaliação semanal constará de 1 exercício a ser resolvido e entregue na seguinte forma:

- 1- Códigos utilizados com documentação para sua compilação;
- 2- Fluxograma do código;
- 3- Resultados apresentados (texto em word/pdf ou slides com gráficos e números)
- 4- Apresentação utilizando vídeo de sua área de trabalho mostrando você rodando o programa e analisando os resultados apresentados. Estima-se que este vídeo deva ter no máximo 15 minutos.

Os vídeos, slides e códigos apresentados pelos alunos poderão ser disponibilizados pelo professor aos demais alunos do curso e podem ser utilizados apenas no contexto do curso - exclusivo para este fim e não devem ser compartilhados, postados em outras plataformas e serem utilizados fora da plataforma Moodle do curso, ao menos que haja autorização expressa dos autores do conteúdo.

Feedback: Geral e Específico

Comunicação: Devolutiva por meio da Ferramenta de Atividades e Quadro de Notas

Avaliação: Individual

Importante destacar que essas habilidades serão analisadas única e exclusivamente por meio dos itens enviados pela tarefa online.

Reconhecer o problema e endereçar uma solução plausível, mas sem conseguir codificar	D
Endereçar uma solução para o problema e codificar corretamente.	C
Solucionar o problema proposto e analisar os dados por meio de gráficos corretamente	B
Solucionar o problema proposto, analisar os dados e gráficos corretamente e propor alterações ou experiências relevantes ao problema para expandir o seu escopo.	A

Avaliação Virtual (AV): **Atividade realizada em grupo cujo tema será sorteado na primeira semana de aula. O grupo deverá entregar na data indicada:**

- 5- texto escrito em LateX (entregar código fonte e pdf) com explicação dos métodos e códigos;
- 6- uma apresentação em pdf ou powerpoint gravada em vídeo (slides e rosto) explicando o tema em detalhes e com ao menos 3 exemplos resolvidos e codificados.
- 7- envio do vídeo (espera-se que tenha entre 30 e 60 minutos) e slides em formato ppt ou pdf e todos os códigos utilizados;

Os vídeos, slides e códigos apresentados pelos alunos poderão ser disponibilizados pelo professor aos demais alunos do curso e podem ser utilizados apenas no contexto do curso - exclusivo para este fim e não devem ser compartilhados, postados em outras plataformas e

serem utilizados fora da plataforma Moodle do curso, ao menos que haja autorização expressa dos autores do conteúdo.

Os temas a serem estudados são:

- 1- Uso de softwares gráficos como gnuplot, python para produção de gráficos científicos. Produção de histogramas (cobrir ao menos o capítulo 3 do livro texto) **(Entrega 02/10);**
- 2- Uso de diferentes linguagens para comparação de velocidades. Erros e estabilidade (cobrir ao menos o capítulo 4 do livro texto) **(Entrega 08/10);**
- 3- Métodos computacionais para integração de uma função (Parte do Capítulo 5 do livro texto) **(Entrega 15/10);**
 - Método de Simpsons;
 - Métodos de integração de ordem maior;
 - Estimativa de erro nos métodos de integração;
- 4- Métodos computacionais para integração de uma função **(Entrega 15/10);**
 - Método de Roomberg
 - Métodos de integração de ordem maior
 - Estimativa de erro nos métodos de integração
- 5- Método da quadratura Gaussiana **(Entrega (23/10)**
- 6- Integrais sem limites **(Entrega 30/10);**
 - Escolha do melhor método de integração;
 - Erros
- 7- Métodos de derivação **(Entrega 06/11);**
 - Erros associados;
 - Aproximação de ordens maiores para derivação;
 - Derivada segunda
- 8- Derivadas parciais **(Entrega 06/11);**
 - Derivadas de dados com ruídos;
 - Interpolação
- 9- Sistemas Lineares **(Entrega 13/11):**
 - Método de substituição;
 - Método LU
- 10- Sistemas Lineares **(Entrega 20/11)**
 - Uso de bibliotecas;
 - Método QR
- 11- Equações diferenciais e Dinâmica Molecular **(Entrega 27/11)** (Método de Euler e Euler-Cromer; Método de Runge-Kutta) ;
- 12- Variáveis aleatórias e Monte Carlo **(Entrega 27/11)** (Gerador aleatório, Método de Monte Carlo)

Para todos os seminários haverá uma seção de orientação por parte do professor, bem como disponibilização de slides que podem (não obrigatório) serem usados como base para o seminário.

Os seguintes critérios serão utilizados para a avaliação, seguindo conceitos:

Feedback: Geral e Específico

Comunicação: Devolutiva por meio da Ferramenta de Atividades e Quadro de Notas

Avaliação: Grupo

Importante destacar que essas habilidades serão analisadas única e exclusivamente por meio dos itens enviados pela tarefa online.

Reconhecer o problema e endereçar minimamente o tema proposto	D
Entender e comunicar corretamente o tema proposto com apresentação de exemplos codificados.	C
Entender, comunicar corretamente o tema proposto, apresentar exemplos codificados e analisá-los por meio de gráficos e outros tipos de análises	B
Endereçar os itens anteriores e propor análises extras como outras teorias complementares ou aplicações em outras áreas da ciência.	A

Por se tratar de atividades contínuas e que terão prazo de entrega de no mínimo 5 dias, não haverá avaliação substitutiva, salvo problema médio que exceda este prazo, devidamente comprovada.

A prova de recuperação (REC) ficará condicionalmente marcada para a última semana e destinada aos alunos que obtiveram conceitos D e F. A média final (CF), neste caso, será:

$$CF = ((CF-ANTES)+REC)/2$$

Critérios de presença. O curso exige presença mínima baseada nas atividades online e nas provas presenciais. É exigido que o aluno realize pelo menos 5 TO (Teste Online) e AV (Avaliação Virtual).

Referências bibliográficas básicas

1. SPERANDIO, Décio; MENDES, João Texeira; MONKEY E SILVA, Luiz Henry. Cálculo numérico: características matemáticas e computacionais dos métodos numéricos. São Paulo:

2. Pearson Prentice Hall, 2003. A.L. Garcia, Numerical Methods for Physics.(Não Disponível).
3. SCHERER, C. , Métodos Computacionais da Física.(Não Disponível).
4. TANG, P. Introduction to Comp. Phys. (Tao Pang)

LIVRO TEXTO - MARK, N. , Computational Physics (<http://www-personal.umich.edu/~mejn/cp/index.html>)

Referências bibliográficas complementares

1. GOULD, Harvey; TOBOCHNIK, Jan; CHRISTIAN, Wolfgang. An introduction to computer simulation methods: applications to physical systems. San Francisco: Pearson, 2006.