

FÍSICA COMPUTACIONAL - RELEVÂNCIA E APLICAÇÕES

Gustavo G. Rondina, Luiz Gonzaga da Silva

Texto para Estudo Dirigido - 25/05/2011

1 Introdução

A revolução dos computadores tornou possível abordar problemas que antes não podiam ser tratados pelos métodos teóricos usuais, seja pela complexidade dos cálculos envolvidos, seja pela quantidade de dados a serem processados, ou mesmo pela capacidade limitada do ser humano de detectar padrões em conjuntos brutos de dados. A simulação computacional, ou experimento virtual, juntamente com outras técnicas de física computacional, apresentam-se então como uma nova maneira de fazer pesquisa em física, complementar à teoria e ao experimento. Os computadores também possibilitaram uma revolução nas técnicas experimentais, pois através de automação de experimentos é possível coletar uma grande quantidade de dados que são armazenados e posteriormente analisados. O avanço tecnológico possibilitou, além disso, a verificação de métodos numéricos existentes que antes não eram compreendidos em todo seu potencial, e consequentemente a melhoria de tais métodos e o desenvolvimento de novas técnicas.

2 O que é Física Computacional?

A ciência contemporânea caminha de mãos dadas com o progresso computacional, e este avanço exerce forte influência nas mais diversas áreas do conhecimento humano, em particular na forma como se faz física hoje. Física computacional consiste no emprego de métodos computacionais para estudar fenômenos que regem a Natureza, e apesar do campo se beneficiar dos desenvolvimentos tecnológicos, se faz necessário deixar explícito que a física computacional remete ao desenvolvimento de modelos e métodos que existem independente da existência de sistemas computacionais.

Muitos dos métodos ainda hoje empregados foram desenvolvidos muito antes da invenção dos computadores, de modo que o real objeto de trabalho da área consiste no desenvolvimento e aplicação de técnicas numéricas que complementem métodos analíticos para que se obtenha a maior quantidade possível de resultados acerca da realidade física que se estuda. Uma vez obtidos os resultados, os mesmos precisam ser analisados à luz das formulações teóricas e comparados com dados experimentais, caso existam. Só assim os modelos podem ser validados e melhorados. Uma pergunta fundamental do campo é “Como posso formular o problema para que um computador o entenda e produza resultados úteis?” A resposta para essa pergunta depende, naturalmente, do problema em questão e muitas vezes exige a criação de novos métodos e aprimoramento de técnicas existentes.

A física computacional pode ser dividida em cinco categorias gerais: análise numérica, manipulação simbólica, visualização computacional, simulação, e coleta e análise de dados.

2.1 Análise Numérica

Análise numérica refere-se a soluções de problemas bem definidos em termos matemáticos, pelas quais se obtém dados numéricos (e não simbólicos ou analíticos). Um exemplo desse tipo de

aplicação é a solução de sistemas lineares de equações. Quando o sistema linear é composto de algumas poucas equações com poucas variáveis independentes é fácil resolvê-lo de forma analítica, porém a medida que as dimensões do sistema aumentam a solução analítica se torna inviável, sendo necessário utilizar um método numérico implementado na forma de um software para se obter as soluções. Nesse contexto o computador representa uma ferramenta de análise numérica. Outros exemplos incluem o cálculo de integrais multidimensionais, manipulação de matrizes com dimensões muito grandes (muito comuns em problemas de física do estado sólido e mecânica quântica), resolução de equações diferenciais não lineares (presentes no estudo de sistemas dinâmicos), entre outros problemas inerentes de diversos campos da física.

2.2 Manipulação Simbólica

A capacidade de representar problemas de forma abstrata proporcionada pela matemática também é explorada pela física computacional na forma de manipulação simbólica. Equações complexas podem ser simplificadas com o auxílio de softwares de manipulação simbólica, operações trabalhosas como diferenciação, integração, inversão de matrizes, expansão em séries, fatoração, entre outras, podem ser realizadas no computador e auxiliar na solução de problemas complexos sem que se perda o foco empreendendo muito esforço numa tarefa secundária.

2.3 Visualização Computacional

A medida que os computadores assumem um papel cada vez mais importante na compreensão de fenômenos físicos, a representação visual de resultados numéricos complexos se torna cada vez mais necessária e relevante. O uso de sistemas gráficos e de visualização pode aumentar nossa capacidade de compreender soluções numéricas e analíticas. O olho humano em conjunto com toda a capacidade de processamento do cérebro constitui um aparato sofisticado, capaz de reconhecer padrões em conjuntos de dados que podem não ser evidentes quando apresentados por meio de tabelas, e também capaz de identificar mudanças temporais que podem ajudar a elucidar o comportamento do sistema em estudo. Tomando a função seno, por exemplo: é mais fácil pensar nela em termos de uma curva periódica de amplitude constante do que imaginar sua expansão em série de Taylor.

2.4 Simulação

Um dos papéis fundamentais da ciência é desenvolver modelos que representem fenômenos naturais, e para garantir que um modelo é consistente com observações é necessário compreender o comportamento do modelo e analisar as previsões que o mesmo é capaz de realizar. Uma forma de fazer isso é implementar o modelo em questão em um computador, e esse tipo de implementação é o que se chama de simulação em física computacional. Uma simulação consiste em analisar o progresso de um sistema físico mediante o emprego das leis que modelam o fenômeno que se estuda, e pode ser encarada como um experimento virtual que pode complementar um experimento real, ou que pode servir de auxílio na compreensão de fenômenos que não podem ser realizados em laboratório, seja por serem muito perigosos, muito caros, ou por impossibilidades práticas ou tecnológicas.

É importante lembrar que simulações computacionais, assim como experimentos de laboratório, não são substitutos para a criatividade humana e para a capacidade crítica de pensar. São ferramentas que ajudam na compreensão de fenômenos naturais e produzem dados que devem ser interpretados no contexto de uma fundamentação teórica.

2.5 Coleta e Análise de Dados

Mesmo quando um experimento é realizado no laboratório é comum haver necessidade de empregar métodos computacionais para coletar e analisar dados gerados pelo experimento. Além disso, muitos parâmetros de experimentos reais são similares a parâmetros encontrados em simulações (controle de temperatura, por exemplo), e portanto podem ser acoplados a sistemas computacionais responsáveis pelo controle do experimento. A área da física computacional que se destina a desenvolver sistemas de controle e análise em tempo real é a área de instrumentação e envolve o desenvolvimento de hardware, software e interfaces para equipamentos de laboratório.

3 Exemplo: Dinâmica Molecular

Uma aplicação simples de física computacional é a dinâmica molecular clássica, onde a ideia básica é construir um sistema onde muitos corpos interagem entre si (e.g., átomos em uma caixa) por meio de um potencial bem definido. Cada átomo é descrito por suas coordenadas de posição e velocidade em um campo de força, e a cada passo da simulação novas posições e velocidades são calculadas de acordo com as forças agindo nos átomos, simulando assim a dinâmica de um sistema de muitos corpos.

O exemplo que vamos estudar nesta seção considera que cada corpo é um átomo cujo movimento é descrito pelas leis de Newton e um potencial empírico clássico, porém existem outros tipos de dinâmica molecular. Pode-se considerar interações quânticas, por exemplo, descritas por meio de teoria do funcional da densidade. Outro tipo de dinâmica molecular muito comum é a *coarse-grained*, na qual um conjunto de átomos é tratado como um único corpo, sendo muito utilizada para simular sistemas mais complexos como moléculas biológicas ou partículas muito grandes. A ideia básica, porém, é sempre a mesma: atualizar a posição e a velocidade dos corpos utilizando um campo de forças que determina a interação entre os mesmos.

3.1 Modelo

A dinâmica molecular clássica é baseada primordialmente na Segunda Lei de Newton:

$$m_i \frac{\partial^2 \mathbf{r}_i}{\partial t^2} = \mathbf{F}_i \quad (i = 1, 2, \dots, N)$$

Onde N é o número de corpos no sistema. A força em cada átomo é obtida por meio de uma energia potencial:

$$\mathbf{F}_i = -\frac{\partial U}{\partial \mathbf{r}_i} \quad (i = 1, 2, \dots, N)$$

$$U = U_{\text{bond}} + U_{\text{angle}} + U_{\text{torsion}} + U_{\text{LJ}} + U_{\text{coulomb}}$$

Onde cada termo que compõe U contribui com a energia total, sendo que U_{bond} , U_{angle} e U_{torsion} são comumente modelados como um potencial elástico, similar a uma interação num sistema massa-mola. Explicando o significado de cada termo:

- U_{bond} : Energia de ligação entre dois átomos.
- U_{angle} : Energia associada ao ângulo entre três átomos.
- U_{torsion} : Energia associada ao ângulo de diedro entre quatro átomos.

- U_{LJ} : Energia de interação dada pelo potencial empírico de Lennard-Jones que reproduz o princípio da exclusão de Pauli e atração de Van der Waals.
- $U_{coulomb}$: Energia de interação eletrostática.

Um sistema muito simples pode ser descrito por uma energia total U composta apenas por um potencial empírico de Lennard-Jones. Nesse caso, temos:

$$U(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]$$

Onde σ corresponde à distância de equilíbrio, ou seja, a distância na qual a energia potencial é zero, ϵ é a profundidade do poço de potencial e r é a distância entre duas partículas. Esse potencial empírico foi amplamente parametrizado para sistemas reais por meio de dados experimentais e até correções quânticas. A Figura (3.1) ilustra o potencial. Note que a pequenas distâncias (corpos muito próximos) o potencial explode, ou seja, há uma repulsão muito grande, e a distâncias maiores existe uma cauda atrativa.

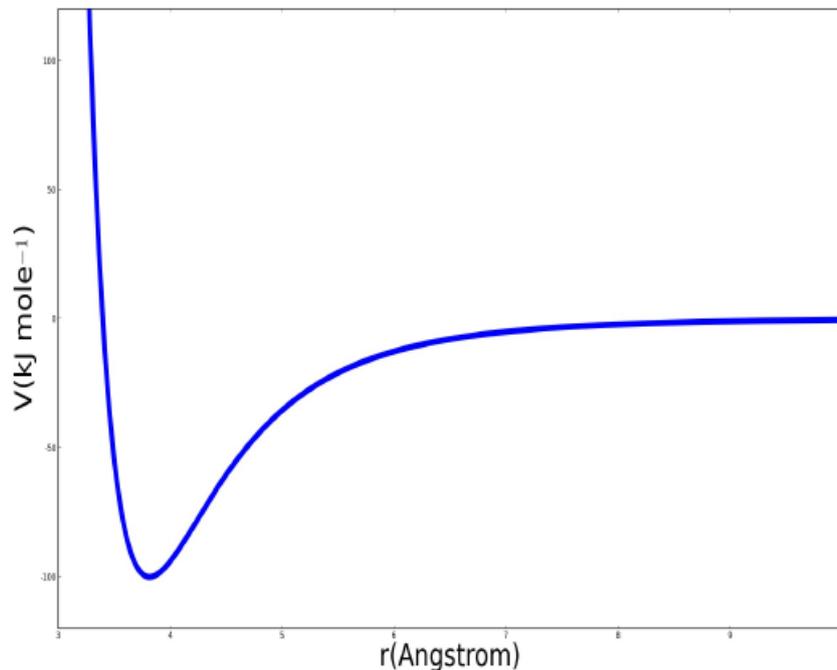


Figura 1: Potencial empírico de Lennard-Jones

3.2 Cut-off

Pela Figura (3.1) podemos perceber que para uma distância r razoavelmente grande a energia potencial entre duas partículas modeladas pelo potencial de Lennard-Jones é quase zero. Dessa maneira, quando se está calculando a dinâmica de um sistema grande, onde existe milhares ou centenas de milhares de corpos, é recomendável adotar uma distância de *cut-off* a partir da qual as interações são ignoradas. Assim, considera-se no cálculo apenas as interações que contribuem de forma mais significativa para a energia total do corpo, ou seja, somente as partículas mais próximas. A razão de fazer essa aproximação (que na prática é muito boa) leva em conta a eficiência computacional do problema: não há motivos para perder um número considerável de ciclos de processamento calculando energias que serão muito próximas de zero.

Para o potencial de Lennard-Jones o raio de *cut-off* utilizado é comumente $r_c = 2.5\sigma$, e a energia entre duas partículas fica:

$$U(r) = \begin{cases} 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^6 \right] - 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r_c}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_c}\right)^6 \right] & \text{para } r \leq r_c, \\ 0 & \text{para } r > r_c \end{cases}$$

3.3 Método Numérico

Dinâmica molecular é, essencialmente, um problema de muitos corpos onde deseja-se resolver um sistema composto por milhares de partículas que interagem entre si sob condições predeterminadas. Como não existe solução analítica para esse tipo de problema, deve-se recorrer a soluções que utilizam métodos numéricos. Um esquema que é normalmente utilizado para atualizar as coordenadas da posição e da velocidade dos corpos em cada passo é chamado esquema de integração *leapfrog* de dois estágios. Nesse esquema a força total agindo sobre cada partícula é calculada baseada nas posições atuais de cada uma delas, e então sabendo-se a força (i.e., conhecendo a aceleração em cada partícula) as posições e as velocidades são atualizadas da seguinte maneira:

$$\begin{aligned} \mathbf{v}_i(t + \frac{h}{2}) &= \mathbf{v}_i(t) + \frac{h}{2} \mathbf{a}_i(t) \\ \mathbf{r}_i(t + h) &= \mathbf{r}_i(t) + h \mathbf{v}_i(t + \frac{h}{2}) \end{aligned}$$

Onde h é o número do passo da simulação. No segundo estágio as novas coordenadas são utilizadas para o cálculo das novas forças (acelerações), e então a velocidade é atualizada:

$$\mathbf{v}_i(t + h) = \mathbf{v}_i(t) + \frac{h}{2} \mathbf{a}_i(t + h)$$

Portanto a ideia é iniciar com um passo $h = 1$ e um conjunto inicial de posições aleatórias e velocidades que podem ser determinadas utilizando uma distribuição de probabilidade termodinâmica, e a cada iteração atualizar as posições, velocidades e forças. O resultado será a dinâmica do sistema, através da qual pode-se obter as propriedades de interesse.

4 Questões

Por favor, entregar por escrito as respostas para as questões abaixo. Não há necessidade de respostas muito elaboradas, seja objetivo.

- **1** - Como foi dito no texto, uma simulação computacional pode ser considerada como um experimento virtual. Faça uma analogia entre uma simulação e um experimento de laboratório. Por exemplo, na simulação o que corresponde ao aparato físico de laboratório? O que corresponde à calibração do equipamento? Pense em mais itens.
- **2** - Do ponto de vista prático, quais são duas grandes vantagens de simulações computacionais em relação a métodos analíticos ou experimentais?
- **3** - Como você simularia um objeto em queda livre na superfície da Terra? Não é necessário explicitar algoritmos ou computações complexas, apenas uma idéia geral.
- **4** - Por que é empregada uma distância de *cut-off* em simulações de dinâmica molecular?

5 Bibliografia

F. J. Vesely. *Computational Physics - An Introduction*, Second Edition, Kluwer Academic, 2001.

H. Gould, J. Tobochnik, Wolfgang Christian. *Introduction to Computer Simulation Methods: Applications to Physical Systems*, Third Edition, Addison-Wesley, 2006.

M. P. Allen, D. J. Tildesley. *Computer Simulation of Liquids*, First Edition, Oxford Science Publications, 1989.

L. Post, G. Votta, *Computational science demands a new paradigm*, **Physics Today** 58 (1), 3541 (2005).