



CONCEITOS BÁSICOS DE COMPUTAÇÃO CIENTÍFICA: FUNDAMENTOS DA SIMULAÇÃO DE SISTEMAS FÍSICOS

Alex Sandro M. Bonete*, Michael N. M. Campos, Guilherme Z. M. F. Bottino, Kaue C. Capellato, Vinicius Piccoli, Leandro Martínez.

Resumo

Simulações de dinâmica clássica são ferramentas úteis para estudar fenômenos com bases mecânicas bem estabelecidas, tendo como únicos pré-requisitos o entendimento das soluções físicas do sistema e a descrição clara dessas soluções e seus passos para um computador por meio de uma linguagem de programação. Neste trabalho, aprendemos e exploramos uma linguagem de programação chamada Julia - desenvolvida recentemente para computação científica - por meio de uma série de exercícios nos quais resolvemos computacionalmente problemas simples de física do ensino médio. Em seguida, aplicamos os conhecimentos adquiridos para desenvolver um programa de computador baseado em dinâmica gravitacional para computar a trajetória dos planetas do sistema solar e do cometa Halley. As trajetórias resultantes exibiram tamanho, formato e período compatíveis com os dados astronômicos conhecidos, e mantiveram sua estabilidade mesmo após 70 anos de simulação. O único corpo que não apresentou o comportamento esperado foi o cometa Halley, porque a simulação não descrevia alguns fenômenos importantes para sua trajetória, como a variação de massa e interação com outros planetas.

Palavras-chave:

Dinâmica - Simulação por computador, Mecânica Clássica, Julia (Linguagem de programação de computador)

Introdução

Dentre os vários tipos de simulação, as de Dinâmica Clássica, baseadas nas equações de movimento Newtonianas, são utilizadas para descrever trajetórias de partículas em vários tipos de sistema, como por exemplo os milhares de átomos componentes de uma proteína em solução. Sistemas físicos mais simples podem ser estudados utilizando basicamente as mesmas ferramentas e os mesmos tipos de cálculos, conforme mostrado na Figura 1. Para que uma simulação computacional ocorra, é necessário que o computador receba dados bem estruturados e instruções bem definidas que precisam ser executadas; para isso é necessário aprender e utilizar uma linguagem de programação. Nesse projeto, foi utilizada a linguagem Julia [1], uma linguagem de vanguarda para computação científica de alto desempenho.

$$|\vec{F}(t)| = \frac{GMm}{r^2}$$

$$\vec{a}(t) = \frac{\vec{F}(t)}{m}$$

$$\vec{v}(t + \Delta t) = \vec{v}(t) + \vec{a}(t)\Delta t$$

$$\vec{x}(t + \Delta t) = \vec{x}(t) + \vec{v}(t)\Delta t + \frac{\vec{a}(t)\Delta t^2}{2}$$

Figura 1. Equações de movimento discretizadas para simulação de dinâmica gravitacional [2].

Resultados e Discussão

As simulações realizadas produziram trajetórias que podem ser observadas na Figura 2. O formato das trajetórias e o período orbital observado são compatíveis com os dados reais [3] para todos os planetas, mas não para o cometa Halley. Isso aconteceu porque a simulação foi planejada para descrever apenas a

interação gravitacional com o sol de corpos com massas constantes.

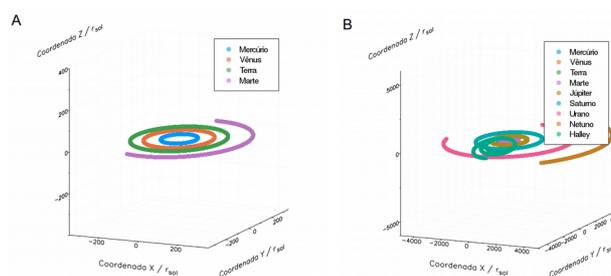


Figura 2. Trajetórias resultantes nas simulações para planetas telúricos, por 1 ano e com passo de tempo de 6 segundos (A) e para todos os planetas e o cometa Halley, por 70 anos e passo de tempo de 1 dia (B).

Conclusão

A linguagem de programação Julia permitiu o desenvolvimento de uma simulação de dinâmica gravitacional, que reproduziu adequadamente os dados reais sobre as trajetórias dos planetas mas não a do cometa Halley, que exige a introdução de elementos mais complexos no programa desenvolvido.

Agradecimentos

FAPESP - Processo 2010/16947-9, 2013/05475-7, 2013/08293-7, 2018/14274-9; CNPq processo 157325/2018-0; Faepex/UNICAMP processo 332/18

¹ BEZANSON, Jeff et al. *Julia: A fresh approach to numerical computing*. SIAM review, v. 59, n. 1, p. 65-98, 2017.

² BASTOS NETO, Renato Brito. *Fundamentos de mecânica*. 2. ed. Fortaleza, CE: Vestseller, 2010-. 3 v., il. ISBN 9788560653027 (v.2 : broch.).

³ JET PROPULSION LABORATORY (CALTECH/NASA). *HORIZONS Web-Interface*. Disponível em: <<https://ssd.jpl.nasa.gov/horizons.cgi>>. Acesso em: 20 mai. 2019.