7600017 - Introdução à Física Computacional - 2019

Prof. Guilherme Sipahi

Primeiro Projeto

Instruções

- Crie um diretório **`proj1_`*#usp*** em `/public/IntroFisComp19/projeto1`
- Proteja seu diretório para não ser lido por `g` e `o`
- Deixe no diretório apenas 5 arquivos de nomes `exer01.f90`, ..., `exer05.f90`
- Os códigos devem seguir rigorosamente os padrões especificados abaixo para `entrada/saída`
- **Se deixar de fazer algum exercício não inclua o arquivo correspondente**

Exercícios

1. **Precisão de números reais**

   Como a representação de números em computadores está sujeita a muitas possíveis escolhas, a representação de números reais gerou um padrão internacional conhecido como IEEE 754, revisto em 2008, que prevê a representação destes números com três diferentes precisões: simples e dupla e quádrupla.

   Neste exercício, você vai determinar a precisão da mantissa, ou o número de casas decimais que cada representação fornece, com um algoritmo que implementa um *loop* para a comparação da soma do valor de $1 + a$, sendo a uma variável real, ao número `1`. A variável deve ser inicializada com o valor de `1` e a cada passo do *loop*, deve ser dividida por `2`. A precisão da mantissa será dada pelo valor de a na última iteração em que os valores da soma e o número divirjam. O número de bits da representação é dado pelo número de passos executados até a obtenção da precisão.

   O programa `exer01.f90` deve implementar este algortimo para a determinação das precisões das três representações.

Atenção: Os testes das 3 precisões precisam de números definidos com o formato adequado: use `real(4)` para a precisão simples, `real(8)` para a precisão dupla e `real(16)` para a precisão quádrupla. Para inicializar os valores no gfortran, use o formato `X.Ye0` para precisão simples, `X.Yd0` para precisão dupla e `X.Y_16` para precisão quádrupla.

Os resultados numéricos devem ser apresentados em 3 linhas diferentes, com uma precisão em cada, na seguinte ordem: precisão simples, dupla e quádrupla. Em cada linha deve ser escrito apenas o número de bits e a precisão da mantissa, nesta ordem.

2. **Máximo número inteiro representável - Número de Stirling**

Neste exercício nós focaremos nas representações de números inteiros. Qual o maior número inteiro (`integer`) que pode ser representado no computador? Provavelmente é um número muito grande, não? Mas será que é fácil atingir este limite? Como fatoriais são muito usados em séries, uma função que dependa do fatorial de um número atingirá este limite rápido?

Escreva um programa `exer02.f90` que execute um *loop* em que verifique se o valor de uma variável inteira é negativo e em seguida multiplique esta variável por `2`. Na primeira iteração a variável deve ter o valor de `1`. Quando o resultado for um número negativo, significa que você excedeu o maior número inteiro representável do formato. Use o número de passos dados até a penúltima iteração para determinar o valor do maior número representável (N_{lim}) como $2^{i-1} - 1$ e com, determine o valor do maior fatorial representável ($N_{max} = n_{max}!$).

Escreva no terminal os valores de N_{lim}, N_{max} e n_{max}, nesta sequência, na primeira linha.

Como os fatoriais crescem muito rapidamente, não se devem usar em expressões fatoriais n maiores que n_{max} ou seu logaritmo, que pode ser aproximado pela fórmula de Stirling

$$\ln(n!) \approx n\ln(n) - n + \frac{1}{2}\ln(2\pi n).$$

Conclua o programa fornecendo (no terminal), a partir da segunda linha, a seguinte "tabela": para valores de n de `1` até n_{max}, um por linha, com quatro colunas contendo os valores de n, $n!$, $\ln(n!)$ e a correspondente aproximação de Stirling.

Sugestão: se você quiser saber por que há a troca de sinal procure pela representação de inteiros baseada no complemento de 2.

3. **Erro númerico em séries - Aproximações de funções trigonométricas**

   Quase sempre, quando precisamos fazer a aproximação numérica de uma função, começamos por usar uma série de Taylor. Será que esta é uma boa ideia para a determinação das funções trigonométricas?

   Vamos usar a série de Taylor para o seno

   $$\sin(x) = 1 - \frac{x^2}{2!} + \frac{x^4}{4!} - \frac{x^6}{6!} + \frac{x^8}{8!} - \cdots$$

   e determinar a precisão da aproximação nos formatos de precisão simples e dupla. A precisão da aproximação será ϵ, dado pelo menor termo da série representável no formato numérico.

   Implemente um programa `exer03.f90` que determine a precisão para $x = 0.1, 0.2, 0.3$ e $0, 4$. A saída numérica deve apresentar uma tabela com um valor de x e sua precisão em cada linha, na ordem dada anteriormente. Depois da tabela, responda a questão: você acha que as funções trigonométricas devem ser aproximadas por séries? Justifique a sua resposta.

   Você pode usar tantas linhas adicionais quanto quiser em sua resposta.

4. **Ordenamento numérico**

   Escreva o programa `exer04.f90` para ordenar números.

   Leia os números inteiros N e M ($M \leq N$) um por linha a partir do terminal. Leia N números reais (um por linha) a partir do arquivo `ord_in.dat` e imprima, em ordem crescente, os M maiores números (um por linha) no arquivo `ord_out.dat`. Você pode supor que $N < 1000$ e que não haja números repetidos na lista dada.

5. **Determinação de autovalores**

   Uma matriz não é um número, como sabemos. Um vetor multiplicado por uma matriz resulta em um novo vetor, apontando em uma direção diferente da anterior. No entanto, para alguns vetores especiais, a multiplicação por uma matriz terá o mesmo efeito que multiplicá-los por um simples número, não alterando sua direção. Para uma dada matriz M , tais vetores especiais são chamados de seus **autovetores** $\vec{u}$, e os números correspondentes são os **autovalores**: para cada autovetor $\vec{u}$ temos um autovalor λ associado à sua multiplicação por M

   $$M\vec{u} = \lambda\vec{u}\,.$$

   Os autovalores e autovetores de uma matriz possuem propriedades importantes que auxiliam no estudo de diversos problemas físicos (em particular, são essenciais para o estudo da mecânica quântica!) e portanto sua determinação é de grande importância. Ao mesmo tempo, trata-se geralmente de uma tarefa computacionalmente intensa, para a qual foram desenvolvidos vários métodos visando máxima eficiência.

   Vamos utilizar um "truque", o chamado método das potências, para determinar o mais alto valor de λ (com maior módulo) para uma dada matriz M . Uma das propriedades dos autovetores de matrizes fisicamente importantes é que, dada a matriz M, qualquer vetor $\vec{x}$ do espaço estudado pode ser escrito como uma combinação linear dos autovetores $\vec{u}_i$ (correspondendo aos autovalores λ_i) de M . Ao multiplicarmos um grande número de vezes k a matriz M (de dimensão $n \times n$) por um vetor $\vec{x}$ arbitrário teremos que apenas a componente de maior autovalor (que vamos supor que seja a de índice 1) "sobreviverá"

$$M^k\vec{x} = M^k(c_1\vec{u}_1 + c_2\vec{u}_2 + \cdots + c_n\vec{u}_n) = (c_1\lambda_1^k\vec{u}_1 + \cdots)\,,$$

já que, quanto maior o valor de k, maior será a importância relativa do primeiro termo da soma acima. Dessa forma, podemos determinar λ_1 e $\vec{u}_1$ por simples multiplicações de matriz por vetor. Mais exatamente, a cada iteração do método, uma estimativa cada vez mais precisa para λ_1 é obtida de

$$\lambda_1 \approx \frac{\vec{x}_k \cdot M\vec{x}_k}{\vec{x}_k \cdot \vec{x}_k}$$

onde definimos $\vec{x}_k \equiv M^k\vec{x}$. (Note que o valor de λ_1 acima corresponde ao passo $k+1$ do método.) Diremos que o valor encontrado para λ_1 no passo k tem precisão ϵ se a diferença entre as estimativas dos passos $k-1$ e k não for maior do que ϵ.

Elabore o programa `exer05.f90` para determinar estimativas para λ_1 e $\vec{u}_1$ correspondendo a uma dada precisão ϵ para λ_1.

Leia, a partir do terminal: a precisão ϵ (na primeira linha de entrada), a dimensão da matriz M (na segunda linha de entrada) e seus elementos, linha por linha (com n colunas) nas linhas seguintes. Imprima como saída: o valor de λ_1 , como última palavra da primeira linha, seguido das posições do autovetor correspondente, uma por linha. Suponha $n \leq 20$ e que M seja real e simétrica.