

Mecânica Quântica Computacional

7600065

Lista 1

16/03/2025

- Sistema operacional: **Linux**
- Linguagem: **Fortran**
- Avaliação: 6 listas de exercícios (na média final serão utilizadas as 5 melhores notas, com peso 7% para cada lista) e 2 projetos (com peso 32.5% para cada projeto)
- Aulas: sexta-feira, 14:20-16:00, sala 149 + Lab. 206
- Email: attilio@ifsc.usp.br
- **Enviar as soluções por email até o dia 10 de Abril (quinta-feira) às 23:59; serão considerados somente os arquivos enviados no primeiro envio; no email e no projeto indicar claramente os exercícios não resolvidos**
- No relatório indicar claramente como os códigos foram compilados
- Para os códigos usar os nomes **LN-numerousp-ex-n**, onde N é o número da lista e n é o número do exercício. No caso de mais de um código para o mesmo exercício, usar letras a, b, c, etc. (além do número). Para os relatórios usar os nomes **LN-numerousp-relatorio**. Exemplos: **L1-12345678-ex-2b.F90**, **L1-12345678-relatorio.pdf**

Machine Precision and Errors

Capítulos 1, 2 e 3 do livro *Computational Physics: Problem Solving with Computers*, R. H. Landau e M. J. Páez (John Wiley & Sons, EUA, segunda edição, 2007).

- **Lista de exercícios:**

1. Calcular a área de um círculo. Opções: entrada e saída usando teclado e monitor; entrada e saída usando arquivos; calcular a área em uma subrotina.
2. Testar *overflow* e *underflow* em precisão simples e dupla.
3. Achar a precisão ϵ do computador, i.e., o maior número positivo ϵ tal que $1 + \epsilon = 1$, usando precisão simples e dupla.

4. Calcular

$$e^{-x} = 1 - x + \frac{x^2}{2!} - \frac{x^3}{3!} + \dots$$

para $x = 0.1, 1, 10, 100$ e 1000 com um erro menor do que 10^{-8} . Problema: quando truncar a série? É preciso calcular o fatorial explicitamente? Comparar o valor obtido usando a série com o resultado exato.

5. Considerar a somatória

$$\Sigma(N) = \sum_{n=1}^{2N} (-1)^n \frac{n}{n+1} = -\sum_{n=1}^N \frac{2n-1}{2n} + \sum_{n=1}^N \frac{2n}{2n+1} = \sum_{n=1}^N \frac{1}{2n(2n+1)}$$

e calcular $\Sigma(N)$ para $N = 1, 2, \dots, 10^6$ usando as três fórmulas acima. Comparar os resultados usando precisão simples.

6. Estudar numericamente o erro da aproximação

$$e^{-x} \approx \sum_{n=0}^N \frac{(-x)^n}{n!}$$

em função de N , para diferentes valores de x . Sugestão: faça um gráfico do erro em função de N . O que acontece quando e^{-x} é calculado usando a série $e^x \approx \sum_{n=0}^N x^n/n!$ e, depois, calculando $1/e^x$?