



Introdução à Física Computacional 1S/2018

Projeto 1 — Introdução à programação

Início: 26 de Fevereiro de 2018

Data da entrega do relatório: 19 de Março de 2018

Prof.: Eric C. Andrade

Descrição:

Esse projeto apresenta tarefas básicas para o treinamento em programação científica utilizando-se FORTRAN. Ele será desenvolvido ao longo das duas primeiras aulas do curso. Além da estrutura básica de um código FORTRAN, introduziremos algumas funções intrínsecas (DLOG, DCOS, DSQRT, ...), comandos (DO, IF, DO WHILE, ...), e operações básicas com vetores e matrizes.

1) Fatoriais e a aproximação de Stirling

(a) Escreva um programa que imprima, em um arquivo, uma tabela com os fatoriais de todos os inteiros entre 1 e 20. Verifique e discuta a precisão de seus resultados.

(b) Escreva agora um programa que imprima, em um arquivo, uma tabela com os *logaritmo* dos fatoriais de todos os inteiros entre 2 e 30. Novamente, verifique e discuta seus resultados.

(c) Compare os resultados do item (b) com a aproximação de Stirling

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

Especificamente, imprima novamente uma tabela com quatro colunas: n , $\ln n!$, $\ln \hat{n}!$ e $[\ln n! - \ln \hat{n}!] / \ln n!$. Discuta seus resultados.

2) Série de Taylor para o cosseno

Escreva um programa FORTRAN que, dado $x \in \mathbb{R}$, calcule o valor de $\cos(x)$ com precisão de 10^{-6} por meio de sua série de Taylor

$$\cos(x) = 1 - \frac{x^2}{2!} + \frac{x^4}{4!} - \frac{x^6}{6!} + \dots \quad (2)$$

Considere ao menos 5 valores de x e identifique a ordem da expansão para que a precisão exigida seja alcançada. Apresente sua resposta em forma de uma tabela

3) Valores médios e desvio padrão

Leia uma lista de números reais *positivos* $x_i > 0$, $i = 1, \dots, N$, e calcule

(a) Média aritmética: $\langle x \rangle = \sum_{i=1}^N x_i / N$.

(b) Desvio padrão: $\sigma = \sqrt{\sum_{i=1}^N (x_i - \langle x \rangle)^2 / N} = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}$.

Idealmente, seu programa deve funcionar para um número N arbitrário.

4) Organize uma lista

Escreva um programa que leia N números reais como um vetor e ordene os M primeiros menores números, imprimindo-os em um arquivo.

5) Método da potência para o cálculo do autovalor/autovetor dominante

Suponha que \mathbf{A} seja uma matriz $n \times n$. Os autovalores de \mathbf{A} são escalares λ que satisfazem a condição

$$\mathbf{A} \cdot \vec{v} = \lambda \vec{v}, \quad (3)$$

com o vetor \vec{v} sendo os autovetor associado a λ . Encontrar os autovalores e autovetores de uma matriz é um problema muito importante que encontra inúmeras aplicações, em particular em física. Em algum desses problemas, apenas o cálculo do maior autovalor da matriz, chamado de autovalor dominante, é necessário (por exemplo, no cálculo de um estado fundamental em Mecânica Quântica). Uma maneira de encontrarmos esse autovalor dominante, juntamente com o autovetor associado, é dada pelo método da potência.

Para entendermos como o método da potência funciona, considere uma matriz A , de dimensão $n \times n$, que possui autovetores $\vec{v}_1, \vec{v}_2, \dots, \vec{v}_n$ e autovalores associados $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$, respectivamente. Assumiremos que $|\lambda_1| > |\lambda_2| \geq |\lambda_3| \geq \dots \geq |\lambda_n|$, de modo que λ_1 é o autovalor dominante. Considere agora um vetor \vec{x} qualquer que possa ser escrito na forma

$$\vec{x} = c_1 \vec{v}_1 + c_2 \vec{v}_2 + \dots + c_n \vec{v}_n, \quad (4)$$

onde $c_i, i = 1, \dots, n$, são escalares. Assumiremos que $c_1 \neq 0$ de tal maneira que \vec{x} possua uma componente paralela a \vec{v}_1 . Desse modo, temos que

$$\begin{aligned} \mathbf{A} \cdot \vec{x} &= c_1 \mathbf{A} \cdot \vec{v}_1 + c_2 \mathbf{A} \cdot \vec{v}_2 + c_3 \mathbf{A} \cdot \vec{v}_3 + \dots + c_n \mathbf{A} \cdot \vec{v}_n, \\ &= c_1 \lambda_1 \vec{v}_1 + c_2 \lambda_2 \vec{v}_2 + c_3 \lambda_3 \vec{v}_3 + \dots + c_n \lambda_n \vec{v}_n, \end{aligned} \quad (5)$$

onde aplicamos a Eq. (3) a cada um dos autovetores. Podemos agora repetir esse processo e multiplicar o vetor \vec{x} por k -vezes a matriz A

$$\begin{aligned} \mathbf{A}^k \cdot \vec{x} &= c_1 \mathbf{A}^k \cdot \vec{v}_1 + c_2 \mathbf{A}^k \cdot \vec{v}_2 + c_3 \mathbf{A}^k \cdot \vec{v}_3 + \dots + c_n \mathbf{A}^k \cdot \vec{v}_n, \\ &= c_1 \lambda_1^k \vec{v}_1 + c_2 \lambda_2^k \vec{v}_2 + c_3 \lambda_3^k \vec{v}_3 + \dots + c_n \lambda_n^k \vec{v}_n \\ &= c_1 \lambda_1^k \left[\vec{v}_1 + \frac{c_2}{c_1} \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^k \vec{v}_2 + \frac{c_3}{c_1} \left(\frac{\lambda_3}{\lambda_1} \right)^k \vec{v}_3 + \dots + \frac{c_n}{c_1} \left(\frac{\lambda_n}{\lambda_1} \right)^k \vec{v}_n \right]. \end{aligned} \quad (6)$$

Dado que $|\lambda_i/\lambda_1| < 1$ para $i = 2, \dots, n$, a expressão entre colchetes acima tende ao autovetor \vec{v}_1 na medida em que $k \rightarrow \infty$. Portanto, a iteração $\vec{x}_{k+1} \leftarrow \mathbf{A} \cdot \vec{x}_k$ convergirá para um autovetor associado ao autovalor dominante de \mathbf{A} . Já o valor estimado de λ_1 é dado por

$$\lambda_1 = \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\vec{x}_k^T \cdot \mathbf{A} \cdot \vec{x}_k}{\vec{x}_k^T \cdot \vec{x}_k} = \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\vec{x}_k^T \cdot \vec{x}_{k+1}}{\vec{x}_k^T \cdot \vec{x}_k}. \quad (7)$$

É uma prática comum normalizarmos os vetores \vec{x}_k na medida em que eles são produzidos, de tal maneira que $\vec{x}_k^T \cdot \vec{x}_k = 1$. A Eq. (7) reduz-se então a

$$\lambda_1 = \lim_{k \rightarrow \infty} \vec{x}_k^T \cdot \vec{x}_{k+1}. \quad (8)$$

Explique em detalhes a implementação desse algoritmo por meio de um fluxograma. Escreva agora um código FORTRAN que implemente esse algoritmo. Seu código deve possuir uma tolerância ε para a convergência do autovalor dominante λ_1 bem como um número máximo de iterações k_{\max} , acima do qual ele termina, mesmo que a tolerância ε ainda não tenha sido alcançada. Discuta também seu palpite para \vec{x}_0 (o valor inicial do vetor \vec{x}).

Aplice seu algoritmo para as seguintes matrizes Hermitianas:

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 8 & 10 \\ 8 & 4 & 5 \\ 10 & 5 & 7 \end{pmatrix}; A = \begin{pmatrix} 10 & -2 & 3 & 2 \\ -2 & 10 & -3 & 4 \\ 3 & -3 & 6 & 3 \\ 2 & 4 & 3 & 6 \end{pmatrix}; A = \begin{pmatrix} -10 & 2 & -3 & -2 & -1 \\ 2 & -10 & 3 & -4 & -2 \\ -3 & 3 & -6 & -3 & -3 \\ -2 & -4 & -3 & -6 & -4 \\ -1 & -2 & -3 & -4 & -13 \end{pmatrix}.$$

Verifique e discuta suas respostas. A precisão para os autovalores é a mesma que para os autovetores para um dado valor da iteração k ?