7600017 - Introdução à Física Computacional - 2025

Prof. Guilherme Sipahi

Primeiro Projeto

27/08/2025

Entrega: 10/09/2025

Instruções

- Crie um diretório **proj1_*#usp*** em `/public/IntroFisComp25/projeto1`
- Proteja seu diretório para não ser lido por `g` e `o`
- Deixe no diretório apenas 5 arquivos de nomes `exerA.f90`, ..., `exerE.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

A) 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. Este padrão estabelece um formato para a representação com números bem estabelecidos de bits para mantissas e expoentes de cada precisão, determinando um número bem definido de casas decimais e o intervalo de extensão dos valores.

Neste exercício, você vai avaliar a precisão da mantissa usando uma variável auxiliar, a, que deve ser inicializada com o valor 1. O algoritmo deve implementar um *loop* para a comparação do valor da soma $1 + a$, com o número 1. Ao final de cada passo do *loop* a, deve ser dividida por 2. A precisão da mantissa será dada pelo valor de a na última iteração em que os valores de 1 e da soma divirjam e o *loop* deve ser finalizado uma vez que os valores deixem de divergir. O número de bits da representação é dado pelo número de passos executados até a obtenção da precisão.

O programa `exerA.f90` deve implementar este algoritmo para a determinação das precisões das três representações, respeitando as seguintes diretrizes:

- **Iniciando com a precisão simples, escreva na tela uma linha que explicite qual formato está sendo avaliado (por exemplo, "PRECISAO SIMPLES"). Nas linhas consecutivas imprima os valores de a, e $1+a$ para cada iteração. Repita o processo para as precisões dupla e quádrupla, nesta ordem.**
- **Após a finalização dos três *loops*, imprima em três linhas consecutivas (uma para cada precisão), o número de bits e o valor da precisão encontrada para precisões simples, dupla e quádrupla, nesta ordem.**

Dica: 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. Três aa diferentes devem ser inicializados. 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.

B) Erro númerico em séries - Aproximações de funções logarítmicas

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 logarítmicas?

Vamos usar a série de Taylor para o logaritmo natural, centrada em $x = 0$:

$$\ln(1+x) = x - \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{3} - \frac{x^4}{4} + \frac{x^5}{5} + \cdots \quad \text{para} \quad -1 < x \leq 1$$

e determinar a precisão da aproximação nos formatos de precisão simples e dupla. A precisão da aproximação será ϵ/v_p, onde ϵ é o menor termo da série que modifica o valor do resultado (ou seja, o último termo que de fato afeta a soma considerando a precisão pretendida) e v_p, o valor principal, é resultado da série truncada exatamente nesse termo.

Implemente um programa `exerB.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 logarítmicas devem ser aproximadas por séries? Justifique a sua reposta.

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

C) Números primos

Escreva o programa `exerC.f90` para determinar os números primos entre 1 e M.

Leia M a partir do terminal e escreva os resultados (um por linha) no arquivo `primos_out.dat`. Teste seu programa para $M = 100,\ 1000,\ 10000$.

Opcional: **tente otimizar seu programa para torná-lo mais rápido (você pode verificar a velocidade de processamento do programa utilizando o comando time do linux).**

D) Cálculo do valor de π

Vamos calcular o valor de π usando números aleatórios. Esta é uma versão do chamado método de Monte Carlo, onde se usam números gerados aleatoriamente para estimar valores ou em problemas de otimização numérica. Se usarmos a relação entre as áreas de um círculo $A_c = \pi R^2$ e de um quadrado no qual este círculo está inscrito $A_q = 4R^2$ temos a seguinte expressão

$$\frac{A_c}{A_q} = \frac{\pi R^2}{4R^2} = \frac{\pi}{4}.$$

Para achar esta relação usamos a seguinte estratégia: i) determinamos um ponto dentro do quadrado e checamos se este ponto também está dentro do círculo; ii) se estiver, adicionamos 1 a um contador específico para esta função; iii) há um segundo contador ao qual sempre é adicionado 1; iv) dividindo-se estes dois contadores, temos a relação entre as áreas.

Elabore um programa com base no roteiro descrito acima para o cálculo de π. Leia, a partir do terminal, o número de iterações – isto é, o número de pontos que será sorteado. Imprima o valor obtido de π com 4 dígitos além da mantissa.

E) 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 `exerE.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.