LISTA 01: FIS670 - Métodos Computacionais da Física. (Prof. Leandro Rizzi)

Exercício 1. Números decimais em um computador podem ser definidos como [1]

$$(-1)^s \times 2^{c-c^*} \times (1+f) \quad ,$$

onde os intervalos e valores assumidos por s, c, f e c^* são determinados dependendo de como a memória do computador é ocupada, isto é, 16-bits, 32-bits ou 64-bits. Por exemplo, representações em 32-bits (4 bytes) possuem 1 bit para o *sinal* (s), 8 bits para o *expoente* ($c = c_7 2^7 + c_6 2^6 + \dots c_1 2^1 + c_0 2^0$) e 23 bits para a *mantissa* ($f = f_1 2^{-1} + f_2 2^{-2} + \dots + f_{23} 2^{-23}$), com o *bias* dado por $c^* = 127$.

a) Escreva o número binário (32-bits) $\boxed{1}$ $\boxed{01101111}$ $\boxed{01001100000000000000000}$ na representação decimal acima.

b) Escreva o número decimal 1227,86 na representação binária (comente se o número encontrado é uma dizima periódica).

Exercício 2. Números decimais podem ser escritos como $0, d_1 d_2 \dots d_{k-1} d_k \times 10^n$, onde d_k representa o último digito significativo devido ao truncamento. Por exemplo: $fl_5(\pi) = 0,31415 \times 10^1$ para $k = 5$. Considere a seguinte operação de subtração $\Delta = x_1 - x_2$ com $x_1 = 22/7$ e $x_2 = 60/19$. Assumindo $\Delta_5 = fl_5(x_1) - fl_5(x_2)$ e o valor "exato" da subtração como Δ^*, calcule o erro absoluto $|\Delta_5 - \Delta^*|$ e o erro relativo $|\Delta_5 - \Delta^*|/|\Delta^*|$ cometido pelo truncamento.

Exercício 3. Implemente um programa para calcular numericamente o valor do seguinte somatório:

$$S = \sum_{i=k_i}^{k_f} (-1)^i i^5 \quad ,$$

com $k_i = 1$ e $k_f = 100$. Considerando diferentes precisões para a variável S, isto é, `real*4` e `real*8`, comente o que ocorre quando o cálculo é feito assumindo $k_i = 100$ e $k_f = 1$.

Exercício 4. Considere a equação de estado de um gás de van der Waals:

$$\left(p + \frac{N^2 a'}{V^2}\right)(V - Nb') = N k_B T \quad ,$$

onde p, V, T e N são, respectivamente, a pressão (atm), o volume (L), a temperatura (K) e o número de moléculas do gás; $k_B = 1,38064852(79).10^{-23}\,\mathrm{J.K^{-1}}$ é conhecida como constante de Boltzmann e relaciona-se com a constante do gás ideal R e o número de Avogadro N_A como $R = k_B N_A$.

a) Considere (i) dois mols ($n = N/N_A = 2$) de argônio, cujas constantes de van der Waals são dadas por $a = a' N_A^2 = 1.3373\,\mathrm{atm.L^2.mol^{-2}}$ e $b = b' N_A = 0.0320\,\mathrm{L.mol^{-1}}$; (ii) a mesma quantidade de hélio ($n = 2\,\mathrm{mols}$), com constantes dadas por $a = 0.0341\,\mathrm{atm.L^2.mol^{-2}}$ e $b = 0.0238\,\mathrm{L.mol^{-1}}$. Grafique a pressão (atm) por volume (L) para os dois gases à diferentes temperaturas: $T > T_c$, $T = T_c$ e $T < T_c$, sendo $T_c = 8a'/(27 k_B b')$ a temperatura crítica.

b) Refaça os gráficos considerando variáveis reduzidas $T' = T/T_c$, $p' = p/p_c$ e $V' = V/V_c$, com $p_c = a'/27(b')^2$ e $V_c = 3Nb'$ e comente a vantagem de sua utilização.

Exercício 5. Segundo a Física Estatística, a maioria das propriedades termodinâmicas de um sistema pode ser calculada a partir da sua função de partição canônica

$$\mathcal{Z}(\beta) = \sum_E \Omega(E) e^{-\beta E} \quad ,$$

onde $\beta = 1/k_B T$ é o "inverso da temperatura canônica" e E é a energia do sistema. A principal dificuldade no cálculo de $\mathcal{Z}(\beta)$ é que ele envolve a soma de números "astronômicos" da densidade de estados $\Omega(E)$. O arquivo `LngE.dat` contém duas colunas com k e $\ln \Omega(E_k)$ para o modelo de Ising bidimensional em uma rede quadrada com $N = 32 \times 32$ spins, onde $E_k = 4k - 2N$ (assumindo a constante de troca $|J| = 1$).

a) Escreva uma subrotina para implementar a soma/subtração C de dois números grandes, A e B, descrito em [2].

b) Utilizando a subrotina do item (a) escreva um programa para calcular a energia média por spin $\langle e \rangle = N^{-1} \langle E \rangle = (\mathcal{Z} N)^{-1} \sum_k E_k \Omega(E_k) e^{-\beta E_k}$ e o calor específico $c_v(\beta) = dE/dT = N\beta^2(\langle e^2 \rangle - \langle e \rangle^2)$.

c) Faça os gráficos de $\langle e \rangle$ e c_v em função da temperatura para o intervalo $T' = k_B T/J \in [1.0, 4.0]$ e identifique o valor de $T'_c = k_B T_c/J$ onde ocorre a transição entre as fases paramagnética e ferromagnética. Compare o valor obtido com o valor exato para o limite termodinâmico $T^* = 2/\ln(1+\sqrt{2})$.

Exercício 6. O método dos mínimos quadrados é bastante utilizado para obter uma regressão linear de um conjunto de pontos experimentais (x_k, y_k) com $k = 1, \ldots, N_m$. Em sua versão mais simples ele consiste em minimizar a soma das diferenças quadráticas

$$S = \sum_{k=1}^{N_m} [f(x_k) - y_k]^2 \quad , \tag{1}$$

considerando a função $f(x_k) = ax_k + b$ e obtendo um sistema de equações a partir de $\partial S/\partial a = 0$ e $\partial S/\partial b = 0$.
a) Escreva analiticamente a solução do sistema linear para obter os coeficientes angular a e linear b da função f.
b) Implemente uma subrotina para obter a e b relacionados ao famoso experimento das gotículas de óleo de Millikan [3]. Utilize os dados do arquivo `millikan.dat`, onde as colunas (n, q_n) representam, respectivamente, números inteiros (associados às massas) e às cargas das gotículas (em 10^{-19} C). Compare seus resultados com a regressão linear obtida pelo `xmgrace`.
c) Repita os cálculos de (a) e (b) impondo o coeficiente linear b igual a zero.
d) Discuta qual quantidade física a regressão linear fornece como resultado do experimento de Millikan. Calcule o erro absoluto e o erro relativo em relação ao valor atual aceito para essa quantidade física.

Exercício 7. Segundo a Cosmologia, objetos observados no espaço extragalático, isto é, à distâncias maiores que 10 megaparsecs (Mpc), obedecem a lei de Hubble

$$v = H_0 d \quad ,$$

onde d (Mpc) é a distância e v (km/s) é a velocidade de recessão desses objetos (medida a partir do deslocamento Doppler para o vermelho, ou *redshift*); H_0 é conhecida como a constante de Hubble, dada em (km/seg)/Mpc.
a) Considerando os dados experimentais apresentados no arquivo `hubble.dat`, cujas entradas são três colunas com d**,** v**,** `erro(`v`)`, utilize a(s) subrotina(s) que você escreveu no exercício anterior (*i.e.* com $b = 0$ e $b \neq 0$) para obter o valor de H_0. Compare os resultados com aqueles obtidos pela regressão linear do `xmgrace` e aqueles encontrados na literatura (vide Ref. [4]).
b) Escreva um programa que inclua a subrotina `fit` do *Numerical Recipes* [5], a qual leva em consideração os erros experimentais, para realizar a regressão linear e compare com os resultados obtidos no item (a).
c) Faça um gráfico com os resultados experimentais (incluindo as barras de erro) e todas as retas obtidas pelas regressões lineares dos items (a) e (b).

Referências:
[1] J. D. Faires e R. L. Burden. Numerical Methods (3rd ed.)
[2] Página 6 de B. A. Berg. Multicanonical Simulations Step by Step (2002). `http://arxiv.org/abs/cond-mat/0206333`.
[3] R. A. Millikan. The Isolation of an Ion, a Precision Measurement of its Charge, and the Correction of Stokes' Law. Phys. Rev. XXXII (1911) 349.
[4] Medida a partir dos dados de Supernovas (do tipo Ia) em W. L. Freedman *et al.*. Final Results from the Hubble Space Telescope Key Project to Measure the Hubble Constant (2000). `http://arxiv.org/abs/astro-ph/0012376`.
[5] Página 655 de W. H. Press *et al.*. Numerical Recipes in Fortran 77: The Art of Scientific Computing (2nd ed., vol. 1).
[6] C. Scherer. Métodos Computacionais da Física (2nd ed.,2010).