I. INTRODUÇÃO À FÍSICA COMPUTACIONAL - 7600017 - 2S/2025 PROJETO 1 — INTRODUÇÃO À PROGRAMAÇÃO PROFESSOR: FRANCISCO C. ALCARAZ PRAZO DE ENTREGA: 17/08/2025 (DOMINGO)

DESCRIÇÃO

O objetivo deste projeto é propiciar um treinamento inicial da programação FORTRAN 77 através de tarefas simples. Lembre-se que semântica das variáveis será aquela do fortran-77.

- 1. Caso queira emprestar uma quantia "Q" e que a dívida seja paga em "N" parcelas mensais fixas, pagando juros mensais porcentuais "AJM", qual será o valor da parcela mensal "V" a ser paga? Faça um programa que leia no terminal os valores de "Q, N, AJM" e forneça no terminal o valor de "V". Teste seus resultados para Q=2000,N=12, AJM=1.1
- 2. Escreva um programa FORTRAN que leia do terminal os raios r_1 interno e r_2 externo de um torus, forneça a área total e o volume do mesmo. Os resultados devem ser mostrados na tela do terminal.
- 3. Escreva um programa que lê os N números reais (do tipo REAL*8) do arquivo tarefa-3-entrada-1.in disponível na página do e-disciplinas do curso curso. Seu programa deve descobrir e imprimir na tela do terminal o valor de N. Em seguida, seu programa deve ler do terminal o valor de $M \leq N$ e ordenar apenas os M primeiros menores números desse arquivo. O resultado deve ser salvo em um arquivo de saída juntamente com o número M.
- 4. (a) Escreva um programa que dado $x \in \mathbb{R}$ calcule com precisão $\epsilon = 10^{-5}$ o valor de $\cos(x)$ utilizando a série

$$\ln(x) = -[(1-x) + (1-x)^2/2 + (1-x)^3/3 + \cdots] = -\sum_{n=1}^{\infty} (1-x)^n/n.$$

Compare seus resultados com o valor obtido pela função intrínseca $\log(x)$ do FORTRAN.

- (b) Modifique seu programa para dupla precisão e teste até que valores você conseguiria diminuir a variável ϵ para que a sua precisão seja a mesma da função dlog(x): a função log(x) intrínseca do FORTRAN 77 em precisão dupla.
- 5. (a) Escreva um programa que leia de um arquivo de entrada (vide exemplo abaixo) as permutações de N inteiros (1, 2, ..., N) e as correspondentes paridades (-1 ou +1) e produza as permutações de (N+1) números com a devida paridade.

Ex: $N = 3 \ (p_1, p_2, p_3, paridade)$

 $1\ 2\ 3$ 1

 $2\ 3\ 1$ 1

 $3\ 1\ 2\ 1$

 $1\ 3\ 2\ -1$

 $2\ 1\ 3\ -1$

 $3\ 2\ 1\ -1$

- (b) Utilize o programa anterior para calcular o determinante de uma matriz real $N \times N$. Utilize as permutações geradas no programa anterior.
- (c) Faça um programa utilizando o anterior que calcule a solução de um sistema de equações lineares

$$\mathbb{A}\vec{x} = \vec{y}$$

sendo \mathbb{A} é uma matriz real de ordem $N \times N$, e \vec{y} um vetor real $N \times 1$, ambos dados em um arquivo de entrada (que você deve construir). Teste seus resultados para N = 4, 5 e 6.

6. Utilizando a função rand() do FORTRAN (que gera números reais pseudo-aleatórios entre 0 e 1), faça um programa que calcule o volume V_d de uma esfera em d dimensões. Teste seus resultados variando o número M de números aleatórios para $d=2,\ 3$ e 4. Analise se suas respostas são razoáveis. Compare com a expressão $V_d = \frac{\pi^{d/2}}{\Gamma(1+d/2)}R^d$, onde $\Gamma(1/2) = \sqrt{\pi}$, $\Gamma(1) = 1$, $\Gamma(x+1) = x\Gamma(x)$.

- 7. (a) Usando a expressão acima, faça um programa que, dando como entrada o raio R e a dimensão d, calcule os volumes das esferas nas dimensões $0, 1, 2, \ldots, d$. Os resultados devem estar em um arquivo de saída.
 - (b) Usando o graficador XMGRACE faça em um mesmo gráfico V_d como função de d para d variando de 0 até 25 e $R=0.9,\,1.0$ e 1,1.
- 8. (a) O volume de um cubo de d dimensões de raio 1 m será 1 m d , quantas vezes este volume será maior que uma esfera de raio R=1 m nesta dimensão? Qual seria seu resultado para $d\to\infty$?

BREVE DISCUSSÃO SOBRE A EXECUÇÃO DOS PROBLEMAS

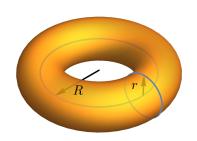
Área e volume de um torus

Seja um torus cujos raios dos círculos maior e menor são, respectivamente, R e r como ilustrado na figura ao lado. A área superficial é simplesmente dada por

$$A = \int_0^{2\pi} Rd\phi \int_0^{2\pi} rd\theta = 4\pi^2 Rr.$$

O volume, por outro lado, é dado por

$$V = \int_0^{2\pi} R d\phi \int_0^{2\pi} d\theta \int_0^r r' dr' = 2\pi^2 R r^2.$$



Solução de sistemas lineares pelo método de Cramers

Seja o sistema linear de equações

$$\mathbb{A}\vec{x} = \vec{y}, \text{ onde } \mathbb{A} = \begin{pmatrix} a_{1,1} & a_{1,2} & \cdots & a_{1,N} \\ a_{2,1} & a_{2,2} & \cdots & a_{2,N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{N,1} & a_{N,2} & \cdots & a_{N,N} \end{pmatrix}, \ \vec{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_N \end{pmatrix} \text{ e } \vec{y} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_N \end{pmatrix}.$$

A solução \vec{x} , de acordo com o método de Cramer, é dada por

$$x_i = \frac{\det \mathbb{A}_i}{\det \mathbb{A}},$$

onde \mathbb{A}_i é a matriz \mathbb{A} com a *i*-ésima coluna substituída pelo vetor coluna \vec{y} , ou seja,

$$\mathbb{A}_1 = \begin{pmatrix} y_1 & a_{1,2} & \cdots & a_{1,N} \\ y_2 & a_{2,2} & \cdots & a_{2,N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ y_N & a_{N,2} & \cdots & a_{N,N} \end{pmatrix}, \ \mathbb{A}_2 = \begin{pmatrix} a_{1,1} & y_1 & \cdots & a_{1,N} \\ a_{2,1} & y_2 & \cdots & a_{2,N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{N,1} & y_N & \cdots & a_{N,N} \end{pmatrix}, \dots, \ \mathbb{A}_N = \begin{pmatrix} a_{1,1} & a_{1,2} & \cdots & y_1 \\ a_{2,1} & a_{2,2} & \cdots & y_2 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{N,1} & a_{N,2} & \cdots & y_N \end{pmatrix}.$$

O determinante é dado pela fórmula de Leibniz

$$\det \mathbb{A} = \sum_{\boldsymbol{\sigma} \in S_N} \operatorname{sgn}(\boldsymbol{\sigma}) a_{1,\sigma(1)} a_{2,\sigma(2)} \dots a_{N,\sigma(N)},$$

onde sgn (σ) é o sinal (ou paridade) de σ . Aqui, a soma é sobre todas as permutações σ do conjunto $\{1,2,3,\ldots,N\}$, com a paridade de σ sendo dada por $(-1)^n$, com n sendo o número de transposições (trocas). O conjunto de todas essas permutações é denotado pelo S_N . Finalmente, $\sigma(i)$ é o valor da i-ésima posição da permutação de $\{1,2,3,\ldots,N\}$. Por exemplo, para o caso N=3 e $\sigma=(1,3,2)$, então $\sigma(1)=1$, $\sigma(2)=3$ e $\sigma(3)=2$. Note que, neste caso, n=1. Logo, a paridade correspondente é -1.

O determinante é dado pela fórmula de Leibniz

$$\det \mathbb{A} = \sum_{\boldsymbol{\sigma} \in S_N} \operatorname{sgn}(\boldsymbol{\sigma}) a_{1,\sigma(1)} a_{2,\sigma(2)} \dots a_{N,\sigma(N)},$$

onde $\operatorname{sgn}(\sigma)$ é o sinal (ou paridade) de σ . Aqui, a soma é sobre todas as permutações σ do conjunto $\{1,2,3,\ldots,N\}$, com a paridade de σ sendo dada por $(-1)^n$, com n sendo o número de transposições (trocas). O conjunto de todas essas permutações é denotado pelo S_N . Finalmente, $\sigma(i)$ é o valor da i-ésima posição da permutação de $\{1,2,3,\ldots,N\}$. Por exemplo, para o caso N=3 e $\sigma=(1,3,2)$, então $\sigma(1)=1$, $\sigma(2)=3$ e $\sigma(3)=2$. Note que, neste caso, n=1. Logo, a paridade correspondente é -1.