I. INTRODUÇÃO À FÍSICA COMPUTACIONAL - 7600017 - 2S/2024

PROJETO 1 — INTRODUÇÃO À PROGRAMAÇÃO

PROFESSOR: FRANCISCO C. ALCARAZ

PRAZO DE ENTREGA: 25/08/2024 (DOMINGO)

DESCRIÇÃO

O objetivo deste projeto é propiciar um treinamento inicial da programação FORTRAN 77 através de tarefas simples.

1. 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.

2. Escreva um programa que dados três vetores (lidos na tela do terminal) $\vec{v}_i = (x_i, y_i, z_i)$, com $i = 1, 2, 3$, calcule a área lateral e o volume do paralelepípedo de base triangular formado pelos vetores $\vec{v}_1$, $\vec{v}_2$ e $\vec{v}_1 - \vec{v}_2$ e com arestas laterais dadas pelo vetor $\vec{v}_3$. Os resultados devem ser mostrados na tela do terminal. Note que o vetor $\vec{v}_3$ não pode estar no mesmo plano formado pelos vetores $\vec{v}_{1,2}$ e $\vec{v}_1$ não pode ser paralelo a $\vec{v}_2$. Seu programa deve acusar caso uma dessas condições seja violada.

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

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

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

   (b) Modifique seu programa para dupla precisão e teste pare até que valores você conseguiria diminuir a variável ϵ para que a sua precisão seja a mesma da função dcos(x): a função $\cos(x)$ 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 $\Gamma(1/2) = \sqrt{\pi}$, $\Gamma(1) = 1$, $\Gamma(x+1) = x\Gamma(x)$.

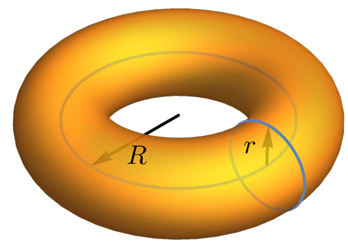
7. (a) Usando a expressão acima, faça um programa que, dando como entrada o raio R e a dimensão d, calcule os volumes das esferas nas dimensões $0,\ 1,\ 2, \ldots, d$. Os resultados devem estar em um arquivo de saída.
   (b) Usando o graficador XMGRACE faça em um mesmo gráfico V_d como função de d para 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 $d \to \infty$?
   (b) Se o volume de uma proteína em d dimensões fosse 1 μm^D, se volume de átomo neste mundo fosse 1 Å^d, e se tipicamente um volume macroscópico fosse de 1 mm^d, qual deveria ser a ordem típica do número de Avogadro neste mundo d-dimensional (número de átomos que comporiam os objetos macroscópicos)?

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



$$A = \int_0^{2\pi} R d\phi \int_0^{2\pi} r d\theta = 4\pi^2 R r.$$

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,

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

O determinante é dado pela fórmula de Leibniz

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

onde $\operatorname{sgn}(\boldsymbol{\sigma})$ é o sinal (ou paridade) de $\boldsymbol{\sigma}$. Aqui, a soma é sobre todas as permutações $\boldsymbol{\sigma}$ do conjunto $\{1, 2, 3, \ldots, N\}$, com a paridade de $\boldsymbol{\sigma}$ 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 $\boldsymbol{\sigma} = (1, 3, 2)$, 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

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

onde $\operatorname{sgn}(\boldsymbol{\sigma})$ é o sinal (ou paridade) de $\boldsymbol{\sigma}$. Aqui, a soma é sobre todas as permutações $\boldsymbol{\sigma}$ do conjunto $\{1, 2, 3, \ldots, N\}$, com a paridade de $\boldsymbol{\sigma}$ 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 $\boldsymbol{\sigma} = (1, 3, 2)$, então $\sigma(1) = 1$, $\sigma(2) = 3$ e $\sigma(3) = 2$. Note que, neste caso, $n = 1$. Logo, a paridade correspondente é -1.