

# Trabalho de Programação de Computadores 2020

Caros estudantes, este texto contém seis problemas de programação em contextos práticos. As aulas teóricas concentraram em conceitos e técnicas de programação em linguagem C, sem explorar muito os contextos onde estes conceitos e técnicas seriam aplicados. Portanto, aqui neste trabalho colocaremos o nosso aprendizado em contextos práticos relevantes. Entretanto os problemas colocados podem ser resolvidos com as estruturas e comandos de programação C assimilados durante as aulas. É altamente recomendável que leiam o contexto antes de resolver cada questão colocada.

Vale observar que as respostas deverão ser dadas pelo sistema `run.codes` no prazo estipulado, lembrando que serão feitas verificações automáticas e visuais de cópias e similaridades entre os códigos.

## Mapa Logístico

As equações diferenciais não lineares modelam sistemas dinâmicos interessantes em física, biologia e outros ramos da ciência. Neste exercício, realizaremos um estudo numérico do mapa logístico discreto como um "modelo matemático simples com propriedades dinâmicas complexas", semelhante ao encontrado em sistemas dinâmicos mais complicados e interessantes. Para certos valores do parâmetro do mapa, encontramos um comportamento caótico, dando-nos a oportunidade de abordar esse tópico muito interessante, com importantes consequências nos fenômenos físicos. Caótico a evolução restringe a capacidade de previsões *úteis* em um sistema dinâmico totalmente determinístico: medições usando condições iniciais levemente diferentes resultam em uma distribuição indistinguível da distribuição proveniente da amostragem de um processo aleatório.

A aplicação mais célebre do mapa logístico vem do estudo do crescimento populacional em biologia. Considera-se populações que se reproduzem em intervalos de tempo fixos e cujas gerações não se sobrepõem. O modelo mais simples (e mais ingênuo) é aquele que supõe razoavelmente que a taxa de crescimento populacional  $dP(t)/dt$  de uma população  $P(t)$  é proporcional à população atual:

$$\frac{dP(t)}{dt} = kP(t)$$

A solução geral da equação acima está  $P(t) = P(0)e^{kt}$  mostrando um crescimento populacional *exponencial* para  $k > 0$  um declínio de  $k < 0$ . É óbvio que esse modelo é razoável, desde que a população seja pequena o suficiente para que a interação com seu ambiente (alimentação adequada, doenças, predadores etc.) possa ser negligenciada. O modelo mais simples que leva em consideração alguns dos fatores da interação com o meio ambiente (por exemplo, fome) é obtido pela introdução de um termo não linear simples na equação, para que

$$\frac{dP(t)}{dt} = kP(t)(1 - bP(t))$$

O parâmetro  $k$  fornece a taxa máxima de crescimento da população e  $b$  controla a capacidade das espécies de manter um determinado nível populacional. A equação pode ser discretizada no tempo, assumindo que cada geração se reproduz a cada  $\delta t$  e que a  $n$ -ésima geração tenha população  $P_n = P(t_n)$  onde  $t_n = t_0 + (n + 1)\delta t$ . Então  $P(t_{n+1}) \approx P(t_n) + \delta t P'(t_n)$  e a equação anterior se torna

$$P_{n+1} = rP_n$$

Onde  $r = 1 + k\delta t$ . As soluções da equação acima são bem aproximadas, de  $P_n \sim P_0 e^{kt_n} \propto e^{(r-1)n}$  de modo que tenhamos crescimento populacional quando  $r > 1$  e declínio quando  $r < 1$ . A equação pode ser discretizada da seguinte forma:

$$P_{n+1} = P_n(r - bP_n)$$

Definindo  $x_n = (b/r)P_n$ , obtemos o mapa logístico:

$$x_{n+1} = rx_n(1 - x_n)$$

### Questão:

**1-** Escreva um programa em C que receba os valores de  $r$  e o número de iterações, ou seja, quanto valores serão gerados na série, e crie um arquivo com a sequência de  $N$  números da série. Ao fim, o programa deve salvar os números da serie em arquivo.

## Eletrostática

Nesta questão, estudaremos o campo elétrico gerado por uma distribuição de carga estática. Primeiro, calcularemos as linhas de campo elétrico e as superfícies equipotenciais do campo elétrico geradas por uma distribuição estática de carga pontual no plano. Em seguida, estudaremos o campo elétrico gerado por uma distribuição de carga contínua no avião. Isso requer a solução numérica de um problema de valor de limite elíptico que será feito usando métodos de relaxamento excessivo (SOR) sucessivos.

Considere  $N$  cargas pontuais  $Q_i$  as quais estão localizadas em pontos em locais fixos no plano dado por vetores de posições  $\vec{r}_i, i = 1, \dots, N$ . O campo elétrico é dado pela lei de Coulomb.

$$\vec{E}(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i=1}^N \frac{Q_i}{|\vec{r} - \vec{r}_i|^2} \hat{\rho}_i$$

Onde  $\hat{\rho}_i = (\vec{r} - \vec{r}_i)/|\vec{r} - \vec{r}_i|$  é o vetor unitário na direção  $\vec{r} - \vec{r}_i$ . Os componentes do campo são:

$$E_x(x, y) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i=1}^N \frac{Q_i(x - x_1)}{((y - y_1)^2 + (x - x_1)^2)^{3/2}}$$

$$E_y(x, y) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i=1}^N \frac{Q_i(y - y_1)}{((y - y_1)^2 - (x - x_1)^2)^{3/2}}$$

O potencial eletrostático em  $\vec{r}$  é:

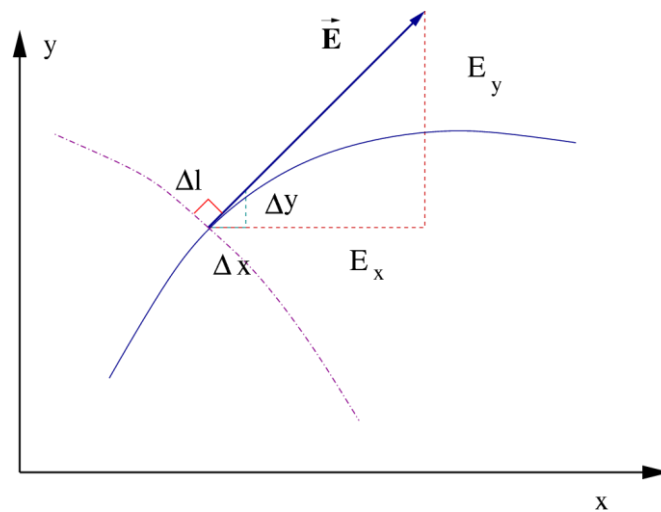
$$V(\vec{r}) = V(x, y) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i=1}^N \frac{Q_i}{((y - y_1)^2 - (x - x_1)^2)^{1/2}}$$

E temos que:

$$\vec{E}(\vec{r}) = -\vec{\nabla}V(\vec{r})$$

As linhas de campo elétrico são as curvas integrais do campo vetorial  $\vec{E}$ , ou seja, as curvas cujas linhas tangentes em cada ponto são paralelas ao campo elétrico naquele ponto. A magnitude do campo elétrico é proporcional à densidade das linhas de campo (o número de linhas de campo por área perpendicular). Isso significa que o fluxo elétrico  $\Phi_E = \int_S \vec{E} \cdot d\vec{A}$  através de uma superfície  $S$  é proporcional ao número de linhas de campo que cruzam a superfície. As linhas de campo elétrico das distribuições de carga pontual começam com cargas positivas (fontes), terminam com cargas negativas (sumidouros) ou se estendem até a infinidade.

As superfícies equipotenciais são os locais dos pontos do espaço em que o potencial eletrostático assume valores fixos. são superfícies fechadas. A equação nos diz que um forte campo elétrico em um ponto é equivalente a uma forte variação espacial do potencial elétrico nesse ponto, ou seja, a superfícies equipotenciais densas. A direção do campo elétrico é perpendicular às superfícies equipotenciais em cada ponto, que é a direção da variação espacial mais forte de  $V$  e aponta na direção da diminuição de  $V$ . As seções transversais planas das superfícies equipotenciais são curvas fechadas, chamadas de linhas equipotenciais.



O computador não pode resolver um problema no contínuo e temos que considerar uma discretização finita de uma linha de campo. Uma curva contínua é aproximada por um número grande, mas infinito, de pequenos segmentos de linha. A ideia básica é ilustrada

na figura O segmento de linha pequena  $\Delta l$  é levado na direção do campo elétrico e obtemos:

$$\Delta x = \Delta l \frac{E_x}{E}, \Delta y = \Delta l \frac{E_y}{E}$$

Onde  $E \equiv |\vec{E}| = \sqrt{E_x^2 + E_y^2}$ . Para calcular

### Questão:

2- Supondo uma função discreta que represente um campo escalar potencial elétrico ( $V$ ) bidimensional representada por uma matriz de dimensões 512 por 512, ou seja, uma variável numérica  $V[512][512]$ . Elabore um algoritmo em linguagem C que calcule o campo elétrico  $\vec{E}$  através do gradiente numérico em suas duas componentes: gradiente  $x$  e gradiente  $y$ .

$$\vec{E}(\vec{r}) = -\vec{\nabla}V(\vec{r})$$

Nota 1: as componentes podem ser calculadas por diferenças simples entre os elementos da matriz e seus vizinhos seguintes nas direções  $x$ , e  $y$ .

Nota 2: os limites da matriz, ou seja, a primeira e última coluna, e a primeira e última linha são desconsiderados. Portanto, as componentes do gradiente têm dimensões 510 por 510.

### Equação da difusão

A equação da difusão está relacionada ao estudo de caminhadas aleatórias. Considere uma partícula se movendo em uma linha (uma dimensão) executando uma caminhada aleatória. O movimento é estocástico e o núcleo

$$K(x, x_0; t)$$

É interpretada como a densidade de probabilidade de observar a partícula na posição  $x$  no tempo  $t$  se a partícula está em  $x_0$  no tempo  $t = 0$ . A equação que determina  $K(x, x_0; t)$  é:

$$\frac{\partial K(x, x_0; t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 K(x, x_0; t)}{\partial x^2}$$

O qual é a equação de difusão. O coeficiente  $D$  depende dos detalhes do sistema a ser estudado. Por exemplo, para o movimento Browniano de uma partícula de pó num fluido que se move sob a influência de colisões aleatórias com partículas do fluido, temos  $D = kT/\gamma$ , onde  $T$  é a temperatura absoluta do fluido,  $\gamma$  é o coeficiente de fricção da partícula no fluido e  $k$  é a constante de Boltzmann.

Usualmente, as condições iniciais são escolhidas tal que em  $t = 0$ , a partícula é localizada no ponto  $x_0$ :

$$K(x, x_0; t) = \delta(x - x_0)$$

A interpretação de  $K(x, x_0; t)$  como uma densidade de probabilidade implica que, para cada  $t$ , deveríamos ter que

$$\int_{-\infty}^{+\infty} K(x, x_0; t) dx = 1$$

Não é óbvio que essa relação possa ser imposta a cada instante de tempo. Mesmo que  $K(x, x_0; t)$  seja normalizado de modo que a equação seja válida para  $t = 0$ , a evolução temporal de  $K(x, x_0; t)$  é governada pela equação de difusão que pode estragar a equação acima em tempos posteriores.

Se impormos a equação em  $t = 0$ , ela permanecerá sempre

$$\frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{+\infty} K(x, x_0; t) dx = 0$$

Considerando que  $\frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{+\infty} K(x, x_0; t) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial K(x, x_0; t)}{\partial t} dx$  e que  $\frac{\partial K(x, x_0; t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 K(x, x_0; t)}{\partial x^2}$ , obtemos:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{+\infty} K(x, x_0; t) dx &= D \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{K(x, x_0; t)}{\partial x} \right) dx = \\ &= D \left. \frac{\partial K(x, x_0; t)}{\partial x} \right|_{x \rightarrow +\infty} - D \left. \frac{\partial K(x, x_0; t)}{\partial x} \right|_{x \rightarrow -\infty} \end{aligned}$$

A equação acima nos diz que, para funções para as quais o lado direito desaparece, a condição de normalização será válida para todos os  $t > 0$ .

Uma análise cuidadosa da equação de difusão indica que o comportamento assintótico de  $K(x, x_0; t)$  por pequenos tempos é

$$K(x, x_0; t) \sim \frac{e^{-\frac{|x-x_0|^2}{4Dt}}}{t^2} \sum_{i=0}^{\infty} a_i(x, x_0) t^i$$

Essa relação mostra que a diferença é isotrópica (a mesma em todas as direções) e que a probabilidade de detectar a partícula cai exponencialmente com a distância ao quadrado da posição inicial da partícula. Essa relação não pode ser mantida por todos os tempos, pois, por períodos suficientemente grandes, a probabilidade de detectar a partícula será a mesma em todos os lugares.

A probabilidade de retorno da partícula para sua posição inicial é

$$P_R(t) = K(x, x_0; t) \sim \frac{1}{t^{d/2}} \sum_{i=0}^{\infty} a_i(x_0, x_0) t^i$$

A relação acima define a dimensão espectral  $d$  do espaço.  $d = 1$  no nosso caso. O valor esperado da distância ao quadrado da partícula no momento  $t$  é facilmente calculado

$$\langle r^2 \rangle = \langle (x - x_0)^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} (x - x_0)^2 K(x, x_0; t) dx \sim 2Dt$$

Esta equação é muito importante. Diz-nos que a caminhada aleatória (movimento browniano) não é um movimento clássico, mas só pode ser dada uma descrição estocástica: Uma partícula clássica se movendo com velocidade constante  $v$ , de modo que  $x - x_0 \sim vt$  resulta em  $r^2 \sim t^2$ .

Nas seções seguintes, tomamos  $D = 1$  e definimos

$$u(x, t) \equiv K(x - x_0, x_0; t)$$

Condução de calor em uma haste fina

Considere uma haste fina de comprimento  $L$  e seja  $T(x, t)$  a distribuição de temperatura dentro da haste no momento  $t$ . As duas extremidades da haste são mantidas em temperatura constante  $T(0, t) = T(L, t) = T_0$ . Se a distribuição inicial de temperatura na haste for  $T(x, 0)$ , então a distribuição de temperatura será sempre determinada pela equação de difusão

$$\frac{\partial T(x, t)}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 T(x, t)}{\partial x^2}$$

onde  $\alpha = k/(c_p \rho)$  é o coeficiente de difusão térmica,  $k$  é a condutividade térmica,  $\rho$  é a densidade e  $c_p$  é o calor específico da barra.

Define

$$u(x, t) = \frac{T\left(xL, \frac{L^2}{\alpha} t\right) - T_0}{T_0}$$

onde  $x \in [0, 1]$ . A função  $u(x, t)$ , que dá a fração da diferença de temperatura com a temperatura nas extremidades da haste, é adimensional e

$$u(0, t) = u(1, t) = 0$$

Estes são chamados de condições de contorno de Dirichlet. A equação torna-se

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} = \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2}$$

A equação passa a ser

$$\frac{d}{dt} \int_0^1 u(x, t) dx = \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{x=1} - \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{x=0}$$

A relação acima não pode ser igual a zero em todos os momentos devido às condições de contorno. Isso pode ser facilmente entendido com um exemplo. Suponha que

$$u(x, 0) = \text{sen}(\pi x)$$

então é fácil confirmar que as condições de contorno são satisfeitas e que a função

$$u(x, t) = \text{sen}(\pi x) e^{-\pi^2 t}$$

é a solução para a equação da difusão. É fácil ver que

$$\int_0^1 u(x, t) dx = \frac{2}{\pi} e^{-\pi^2 t}$$

cai exponencialmente com o tempo e que

$$\frac{d}{dt} \int_0^1 u(x, t) dx = -2\pi e^{-\pi^2 t}$$

o que está de acordo com as equações.

A queda exponencial da magnitude de  $u(x, t)$  está de acordo com a expectativa de que a haste tenha temperatura constante por longos períodos, que será igual à temperatura em suas extremidades  $\left(\lim_{t \rightarrow \infty} u(x, t) = 0\right)$ .

A solução numérica da equação de difusão será calculada no intervalo  $x \in [0, 1]$  para  $t \in [0, t_f]$ . O problema será definido em uma rede discreta bidimensional e a equação diferencial será aproximada por equações de diferenças finitas.

A rede é definida pelos pontos espaciais de  $N_x$   $x_i \in [0, 1]$

$$x = 0 + (i - 1)\Delta x \quad i = 1, \dots, N_x,$$

onde os intervalos  $N_x - 1$  têm a mesma largura

$$\Delta x = \frac{1 - 0}{N_x - 1}$$

e pelos pontos de tempo  $N_t$  em  $t_j \in [0, t_f]$

$$t_j = 0 + (j - 1)\Delta t \quad j = 1, \dots, N_t,$$

onde o  $N_t - 1$  intervalos de tempo têm a mesma duração

$$\Delta_t = \frac{t_f - 0}{N_t - 1}$$

Observamos que os fins dos intervalos correspondem a

$$x_1 = 0, x_{N_x} = 1, t_1 = 0, t_{N_t} = t_f.$$

A função  $u(x, t)$  é aproximada por seus valores na rede  $N_x \times N_t$

$$u_{i,j} \equiv u(x_i, t_j).$$

As derivadas são substituídas pelas diferenças finitas

$$\begin{aligned} \frac{\partial u(x, t)}{\partial t} &\approx \frac{u(x_i, t_i + \Delta t) - u(x_i, t_i)}{\Delta t} \equiv \frac{1}{\Delta t} (u_{i,j+1} - u_{i,j}) \\ \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} &\approx \frac{u(x_i + \Delta x, t_i) - 2u(x_i, t_i) + u(x_i - \Delta x, t_i)}{(\Delta x)^2} \\ &\equiv \frac{1}{(\Delta x)^2} (u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}) \end{aligned}$$

Ao equacionar os dois lados das relações acima de acordo com a discretização acima, obtemos a evolução dinâmica de  $u_{i,j}$  no tempo

$$u_{i,j+1} = u_{i,j} + \frac{\Delta_t}{(\Delta_x)^2} (u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j})$$

Esta é uma relação iterativa de uma etapa no tempo. Isso é muito conveniente, porque não é necessário armazenar os valores  $u_{i,j}$  para todos os  $j$  na memória do computador. O segundo termo (a “segunda derivada”) na última equação contém apenas os vizinhos mais próximos  $u_{i \pm 1,j}$  do ponto da rede  $u_{i,j}$  em uma determinada fatia de tempo  $t_j$ . Portanto, ele pode ser usado para todos os  $i = 2, \dots, N_x - 1$ . As relações da equação não são necessárias para os pontos  $i = 1$  e  $i = N_x$  já que os valores  $u_{1,j} = u_{N_x,j} = 0$  são mantidos constantes. O parâmetro

$$\frac{\Delta_t}{(\Delta_x)^2}$$

determina a evolução do tempo no algoritmo. É chamado de parâmetro Courant e, para evoluir no tempo sem instabilidades, é necessário ter

$$\frac{\Delta_t}{(\Delta_x)^2} < \frac{1}{2}$$

Essa condição será verificada empiricamente em nossa questão.



### Questão:

3- Dada a situação de uma haste fina representada por um vetor de 20 elementos onde cada elemento é um pedacinho de haste, e o primeiro e o último elemento estão inicialmente a temperatura de 100 °C e os demais a 0 °C. Elabore um programa em C que compute a evolução da temperatura nos elementos da haste utilizando a equação de difusão abaixo.

$$u_{i,j+1} = u_{i,j} + \frac{\Delta_t}{(\Delta_x)^2} (u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j})$$

Considerando o parâmetro de Courant como 0,25, e imprima na tela os valores da evolução da distribuição de temperaturas na haste a cada iteração.

### Caminhada aleatória

Nesta questão, estudaremos o caminho típico seguido por um ... bêbado quando ele decide começar a andar de uma determinada posição. Por causa de sua embriaguez, seus passos estão em direções aleatórias e sem correlação. Essas são as propriedades básicas dos modelos que vamos estudar. Esses modelos estão relacionados a problemas físicos específicos, como o movimento browniano, a difusão, o movimento de impurezas em uma treliça, as propriedades de grande distância das macromoléculas etc. Na física de partículas elementares, caminhadas aleatórias descrevem a propagação de partículas escalares livres e são mais comuns. surgem claramente na formulação integral da trajetória de Feynman da teoria euclidiana do campo quântico. Passeios aleatórios são precursores da teoria de superfícies aleatórias, a qual está relacionada à teoria de membranas bidimensionais de "matéria mole", gravidade quântica bidimensional e teoria das cordas.

A geometria de um caminho típico de uma caminhada aleatória simples não é clássica e isso pode ser visto em duas de suas propriedades não clássicas. Primeiro, a distância média percorrida pelo caminhante aleatório é proporcional à raiz quadrada do tempo percorrido, ou seja, a relação clássica  $r = vt$  não se aplica. Segundo, a geometria do caminho do caminhante aleatório tem uma dimensão fractal maior que um. Estruturas semelhantes surgem no estudo de teorias quânticas de campo e superfícies aleatórias, onde as propriedades não clássicas de uma configuração típica podem ser descritas por generalizações apropriadas desses conceitos.

Para simular um sistema estocástico no computador, é necessário usar geradores de números aleatórios. Na maioria dos casos, esses são algoritmos determinísticos que geram uma sequência de números pseudo-aleatórios distribuídos de acordo com uma distribuição desejada. O coração desses algoritmos gera números distribuídos uniformemente a partir dos quais podemos gerar qualquer outra distribuição complexa. Neste capítulo, estudaremos geradores de números aleatórios simples e aprenderemos como usar geradores de números aleatórios portáteis e de alta qualidade.

A produção de números pseudo-aleatórios<sup>2</sup> está no centro de uma simulação de Monte Carlo. O algoritmo usado em sua produção é determinístico: o gerador é colocado em um estado inicial e a sequência de números pseudo-aleatórios é produzida durante sua

"evolução no tempo". O próximo número na sequência é determinado a partir do estado atual do gerador e é nesse sentido que o gerador é determinístico. As mesmas condições iniciais resultam exatamente na mesma sequência de números pseudo-aleatórios. Mas a "evolução do tempo" é caótica e os estados iniciais "vizinhos" resultam em sequências muito diferentes e não correlacionadas. As propriedades caóticas dos geradores são a chave para a pseudo-aleatoriedade dos números na sequência: os números na sequência decorrem exponencialmente rapidamente com o "tempo". Mas este também é o ponto fraco dos geradores de números pseudo-aleatórios. Geradores ruins introduzem correlações sutis que produzem erros sistemáticos. Números verdadeiramente aleatórios (úteis em criptografia) podem ser gerados usando dispositivos especiais baseados em, por exemplo, deterioração radioativa ou ruído atmosférico. Os números quase aleatórios são produzidos pelos arquivos especiais / dev / random e / dev / urandom disponíveis em sistemas unix, que lêem bits de um pool de entropia composto de várias fontes externas (temperatura do computador, ruído do dispositivo, etc.).

Geradores de números pseudo-aleatórios, no entanto, são a fonte de números aleatórios de escolha quando a eficiência é importante. Os geradores mais populares são os geradores de módulo (D.H. Lehmer, 1951) devido à sua simplicidade. Seu estado é determinado por apenas um número inteiro  $x_{i-1}$  a partir do qual o próximo  $x_i$  é gerado pela relação

$$x_i = ax_{i-1} + c \pmod{m}$$

para valores adequadamente escolhidos de  $a$ ,  $c$  e  $m$ . Há muita discussão sobre as boas e más escolhas de  $a$ ,  $c$ , e  $m$ , que dependem da linguagem de programação e se estamos em sistemas de 32 ou 64 bits.

O valor do número inteiro  $m$  determina o período máximo da sequência. É óbvio que, se a sequência encontrar o mesmo número após  $k$  etapas, a mesma sequência exata será produzida e  $k$  será o período da sequência. Como existem no máximo  $m$  números diferentes, o período é no máximo igual a  $m$ . Para uma má escolha de  $a$ ,  $c$ , o período será muito menor. Mas  $m$  não pode ser arbitrariamente grande, pois existe um número máximo de bits que os computadores usam para o armazenamento de números inteiros. Para números inteiros não assinados de 4 bytes (32 bits), o número máximo é  $2^{32} - 1$ , enquanto que para números inteiros assinados  $2^{31} - 1$ . Pode-se provar que uma boa escolha de  $a$ ,  $c$  resulta em uma sequência que é uma permutação  $\{\pi_1, \pi_2, \dots, \pi_m\}$  dos números  $1, 2, \dots, m$ . Isso é bom o suficiente para aplicativos simples que requerem geração rápida de números aleatórios, mas para cálculos sérios, é preciso equilibrar cuidadosamente a eficiência com a qualidade. Geradores aleatórios de boa qualidade são algoritmos mais complicados e seus estados são determinados por mais de um número inteiro. Se você precisar do código-fonte para esses geradores, poderá procurar na bibliografia.

Para entender o uso de geradores de números aleatórios, mas também para entender os problemas que podem surgir, listamos o código das duas funções `naiveran()` e `drandom()`. A primeira é obviamente problemática e a usaremos para estudar certos tipos de correlações que podem existir nas sequências geradas de números aleatórios. O segundo é muito melhor e pode ser usado em aplicações não triviais, como na geração de passeio aleatório ou nas simulações do modelo de Ising estudadas nos capítulos seguintes. Nesta Questão utilizaremos a função `rand()` em C, que servirá perfeitamente aos nossos propósitos, e tem como exemplo de uso:

```

#include <stdio.h>
#include <stdlib.h>

int main () {
    int i, n;
    time_t t;

    n = 5;

    /* Intializes random number generator */
    srand((unsigned) time(&t));

    /* Print 5 random numbers from 0 to 49 */
    for( i = 0 ; i < n ; i++ ) {
        printf("%d\n", rand() % 50);
    }

    return(0);
}

```

O que obtém como saída:

```

38
45
29
29
47

```

### Questão:

**4-** Considere a caminhada aleatória em uma dimensão a simples de números randômicos, digamos no intervalo  $[+10, -10]$ , e o ponto atual do “bêbado” é dado pela soma sequencial destes números. Assim, faça um programa em C em que calcule e imprima a posição do “bêbado” a cada instante.

## Simulação Monte Carlo

Neste capítulo, revisamos os princípios básicos das simulações de Monte Carlo em mecânica estatística. Na introdução, revisamos alguns dos conceitos fundamentais da física estatística. O leitor deve ter um entendimento básico de conceitos como o conjunto canônico, a função de partição, a entropia, a densidade dos estados e a descrição quantitativa das flutuações das quantidades termodinâmicas.

Para a maioria dos sistemas interessantes, a função de partição não pode ser calculada analiticamente e, nesse caso, podemos recorrer a uma computação numérica. É o que é feito de maneira mais eficiente usando simulações de Monte Carlo, que consistem em coletar uma amostra estatística de estados do sistema com uma distribuição de probabilidade escolhida adequadamente. É notável que, coletando uma amostra que seja uma fração minúscula do número total de estados, possamos realizar um cálculo preciso de suas quantidades termodinâmicas. Mas isso não é surpresa: acontece em nossos laboratórios o tempo todo!

A física estatística descreve sistemas com um número muito grande de graus de liberdade  $N$ . Para sistemas macroscópicos simples. Para tais sistemas, é praticamente impossível resolver as equações microscópicas que governam sua dinâmica. Mesmo que pudéssemos, a solução teria muito mais informações do que precisamos (e capaz de analisar!). É suficiente, no entanto, conhecer um pequeno número de propriedades em massa do sistema para ter uma descrição útil dele. Por exemplo, basta conhecer a energia interna e a magnetização de um ímã ou a energia e a densidade de um fluido, em vez do conhecimento detalhado da posição, momento, energia e momento angular de cada partícula de que são feitos. Essas quantidades fornecem uma descrição termodinâmica de um sistema. A física estatística tenta derivar essas quantidades dos graus microscópicos de liberdade e de sua dinâmica dada pelos hamiltonianos do sistema.

Considere um sistema que pode estar em um conjunto de estados discretos que pertencem a um conjunto contável  $\{\mu\}$ . Presume-se que o espectro de energia desses estados seja composto por valores discretos  $E_0 < E_1 < \dots < E_n < \dots$ . Este sistema está em contato e interage com um grande reservatório de calor com temperatura  $\beta = 1 / kT$ . O contato com o reservatório resulta em transições aleatórias que alteram a energia do sistema. O sistema é descrito pelos pesos  $w_\mu(t)$  que fornecem a probabilidade de encontrar o sistema em um estado  $\mu$  no tempo  $t$ . Esses pesos são a conexão entre a descrição microscópica e estatística do sistema. Quando este sistema está em equilíbrio térmico com o reservatório, suas propriedades estatísticas são descritas pelo chamado conjunto canônico.

Seja  $R(\mu \rightarrow \nu)$  as taxas de transição do estado  $\mu \rightarrow \nu$ .

### Questão:

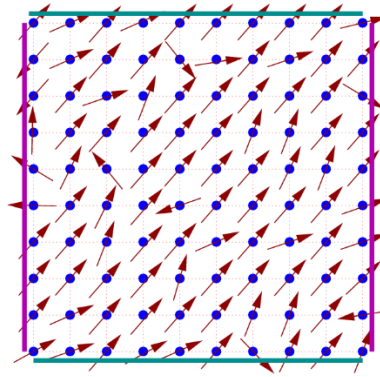
**5-** Aproveitando a função geradora de números randômicos do exercício anterior (rand), escreva um programa em C que crie um vetor de 100 elementos com números de acordo com a regra:

Um número randômico é gerado de 0 a 10, se este número for menor que 8, coloque-se -1 no vetor, se o número for maior ou igual a oito, coloque-se +1 no vetor.

## Modelo de Ising

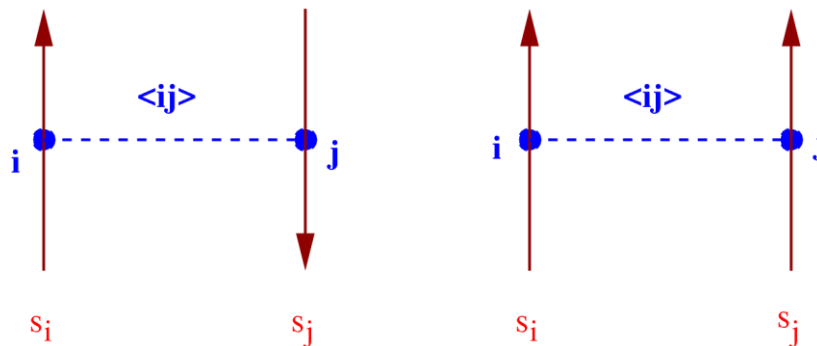
O modelo de Ising (1925) teve um papel importante na evolução das ideias na física estatística e na teoria quântica de campos. Em particular, o modelo bidimensional é complicado o suficiente para possuir propriedades não triviais, mas simples o suficiente para obter uma solução analítica exata. O modelo de campo magnético zero tem uma transição de fase de 2ª ordem para um valor finito da temperatura e somos capazes de calcular expoentes críticos e estudar seu limite contínuo em detalhes. Isso nos fornece informações valiosas sobre as propriedades não analíticas de um sistema passando por uma transição de fase de segunda ordem, a aparência de escala, o grupo de renormalização e a universalidade. Utilizando a solução exata de Onsager (1948) e outros, obtemos resultados exatos e os comparamos com os obtidos por métodos aproximados, como simulações de Monte Carlo, expansões de alta e baixa temperatura, teoria de campo médio etc. O resultado também é interessante do ponto de vista da física, uma vez que é o modelo mais simples, fenomenologicamente interessante, de um material ferromagnético. Devido à universalidade, o modelo descreve também a transição da fase líquido / vapor no ponto

triplo. Um livro bem conhecido para uma discussão de modelos mecânicos estatísticos que podem ser resolvidos exatamente é o livro de Baxter.



A rede quadrada bidimensional cujos locais  $i = 1, \dots, N$  são ocupados por "átomos" ou "ímãs" com rotação  $s_i$ . Nesta figura, as rotações podem ter qualquer orientação no plano (modelo XY). Os modelos mais simples levam em consideração apenas as interações vizinhas mais próximas  $-Js_i \cdot s_j$  onde  $\langle ij \rangle$  é um sítio da rede. Tomamos condições de contorno periódicas que resultam em uma topologia toroidal na treliça, onde os lados horizontal e vertical da treliça são identificados. Na figura, os lados identificados têm a mesma cor e seus respectivos sites são conectados por um sítio.

Para definir o modelo, considere uma estrutura quadrada bidimensional como a mostrada na figura. Em cada local ou nó da rede, temos um "átomo" ou um "ímã" de spin  $s_i$ . A geometria é determinada pela distância dos vizinhos mais próximos, pela constante de rede  $a$  e pelo número de locais  $N$ . Cada lado consiste em  $L$  locais, de modo que  $N = L \times L = L^d$ , onde  $d = 2$  é a dimensão do espaço. A topologia é determinada pela maneira como os sites são conectados entre si por meio de links. Cuidado especial é dado aos locais localizados nas laterais da treliça. Geralmente, adotamos condições de contorno periódicas, o que equivale a identificar os lados opostos do quadrado, conectando seus sites a um link. Isso é mostrado na figura (13.1). Condições de contorno periódicas dota o plano no qual a rede é definida com uma topologia toroidal. A dinâmica do sistema é determinada pela interação spin-spin. Consideramos o alcance curto e o caso mais simples considerado aqui leva em consideração apenas as interações com os vizinhos mais próximos.



Os spins do modelo de Ising assumem dois valores possíveis: "up" ou "down" e o hamiltoniano do sistema é a soma das contribuições da energia de todos os links ("bonds")  $\langle ij \rangle$ . A energia de cada ligação leva dois valores,  $+J$  para o oposto ou  $-J$  para os mesmos

spins, onde  $J > 0$  para um sistema ferromagnético. O sistema possui uma simetria discreta de  $Z^2$ : o hamiltoniano é invariante quando todo  $s_i \rightarrow -s_i$ .

No modelo de Ising, as rotações têm dois valores possíveis, "para cima" ou "para baixo", que mapeamos para os valores numéricos  $+1$  ou  $-1$ . Para o modelo ferromagnético, cada link é um "vínculo" cuja energia é maior quando as rotações de cada lado do link estão apontando na mesma direção e mais baixas quando apontam na direção oposta. Isso é mostrado na figura. O sistema também pode ser imerso em um campo magnético constante  $B$ , cuja direção é paralela à direção dos spins.

Agora estamos prontos para escrever a função hamiltoniana e de partição do sistema. Considere uma rede quadrada de  $N$  locais de rede (ou vértices) rotulados por um número  $i = 1, 2, \dots, N$ . A treliça tem ligações  $N_l$  (ou ligações) entre os vizinhos mais próximos. Estes são rotulados por  $\langle ij \rangle$ , onde  $(i, j)$  é o par de vértices em cada lado do sítio. Identificamos os lados do quadrado como na figura. Então, como dois vértices são conectados por um link e quatro links se cruzam em um vértice, temos esse

$$2N_l = 4N \Rightarrow N_l = 2N$$

Em cada vértice, colocamos um spin  $s_i = \pm 1$ . O Hamiltoniano do sistema é dado por

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j - B \sum_i s_i$$

O primeiro termo é a interação spin-spin e para  $J > 0$  o sistema é ferromagnético. Neste livro, consideramos apenas o caso  $J > 0$ . Um link que liga os mesmos spins possui energia  $-J$ , enquanto um link que liga os spins opostos possui energia  $+J$ . A diferença de energia entre os dois estados é  $2J$  e a dinâmica spin-spin favorece links que conectam os mesmos spins. A energia mínima  $E_0$  é obtido para o estado fundamental, que é

$$E_0 = -JN_l - BN = -(2J + B)N$$

### Questão:

**5-** O modelo Ising é definido numa coleção discreta de variáveis denominada spins, que podem assumir os valores  $1$  ou  $-1$ . Os spins  $S_i$  interagem em pares, com a energia possuindo um valor quando os dois spins são iguais e um segundo valor quando diferentes. No modelo aplicado a um material ferromagnético com interações supostamente unidimensionais, a função Hamiltoniana, considerando apenas as interações spin-spin, seria dada por:

$$H = -J \sum_{i=0}^{N-2} S_i \times S_{i+1}$$

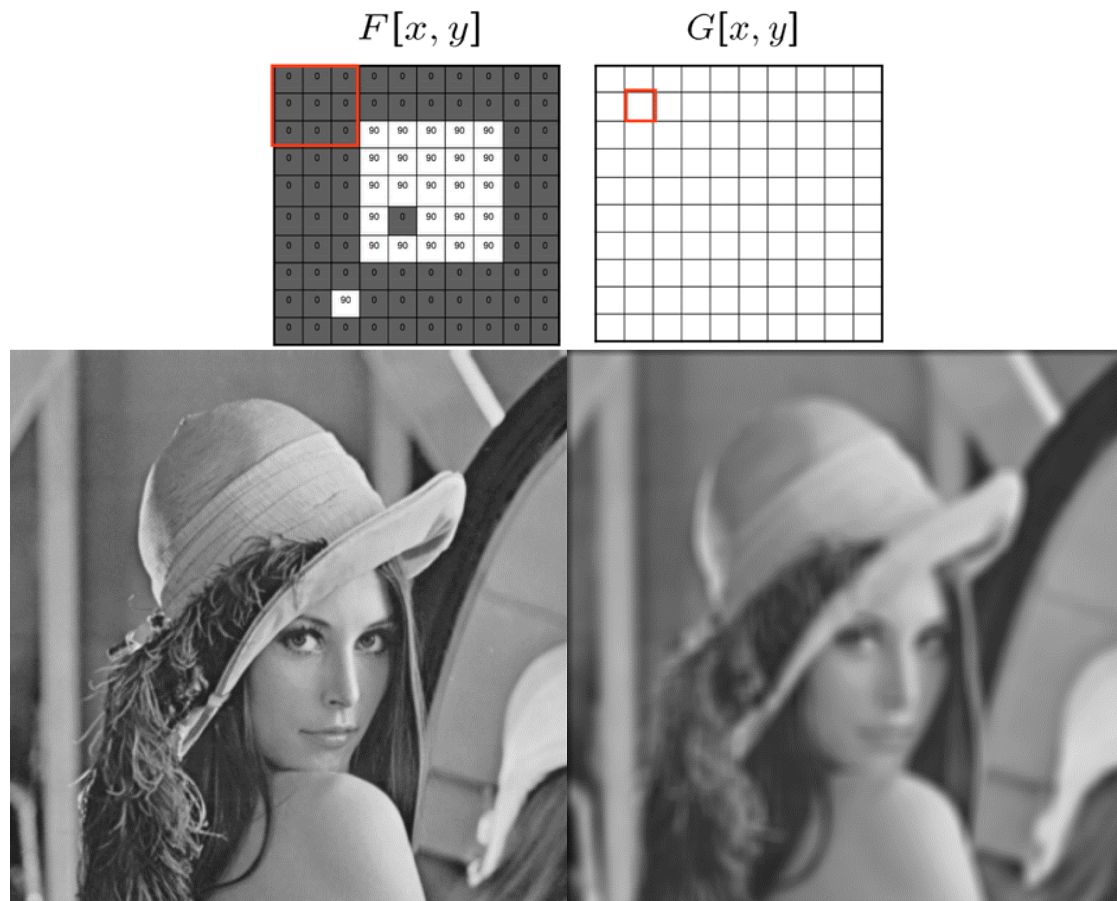
Onde  $S_i$  representam os spins num arranjo unidimensional, e  $J$  representa os termos de interação. Elabore um algoritmo em linguagem C que calcule a Hamiltoniana considerando um vetor unidimensional de spins, e  $J$  positivo representando um modelo ferromagnético com  $J=1,0$ .

## Filtro de médias móveis

Todas as imagens bidimensionais, incluindo imagens médicas, são tratadas nos computadores como matrizes, por exemplo  $img[][]$ . Os valores dos elementos da matriz estão relacionados ao brilho daquele pixel (abreviação de “picture element” ou elemento de imagem), sendo valores mais altos relacionados a pixels mais claros, e valores mais baixos relacionados a pixels mais escuros. A composição de elementos ou pixels claros e escuros formam a imagem digital como vemos na tela do computador ou impressa.

O filtro de média móvel substitui cada pixel pelo valor médio e uma janela vizinha de pixels adjacentes. O efeito é uma imagem mais suave com os recursos nítidos removidos.

Se usamos uma janela vizinha de 3x3:



Observe o artefato das bordas. \*

\* Muitas vezes, a aplicação de filtros, como visto nos filtros de média móvel, desfoque e nitidez, produzirá artefatos indesejados ao longo das bordas das imagens. Para eliminar esses artefatos, é possível usar preenchimento zero, replicação do valor da borda, extensão de espelho ou outros métodos.

### Questão:

**6-** Considerando a imagem como uma matriz de 256 x 256, digamos “ $img[][]$ ”, então desprezando as primeiras e últimas colunas (clausulas for indo de 1 até 254 para evitar

sair dos limites da imagem), para cada sítio na imagem deve ser calculada a média dos vizinhos imediatamente próximos  $3 \times 3$ , como a figura acima, e colocar o resultado na mesma localização em uma matriz resultante também  $256 \times 256$  na mesma localização.

O programa deve ler a imagem em uma sequência de 65.536 ( $256 \times 256$ ) números, e escrever uma sequência de mesmo tamanho como resultado.