

AULAS 5 E 6: FIS271 - Física Computacional I

Exercício 1. Baseando-se no arquivo `20180319_exemplo.f90` e também na referência [1], implemente códigos em Fortran para realizar os itens abaixo. Os programas podem ser criados utilizando o compilador `gfortran`, por exemplo,

```
gfortran 20180319_exemplo.f90 -o nome_do_programa.out
```

e o comando para executar o programa é

```
./nome_do_programa.out
```

Sugestão: crie um arquivo `.f90` para cada item, *e.g.* `ex01a.f90`.

a) Escreva um código em Fortran para criar um programa que implementa um *loop* através do comando `do i=1,Ndados ... end do` e que escreva na tela a variável `i` do *loop* utilizando o comando `write(*,*)`.

b) Crie um programa utilizando o comando `read` para ler uma linha de cada vez do arquivo `dados.dat` e, logo em seguida, escreva cada uma das linhas na tela (compare a lista dos números de saída na tela com os números que estão escritos no arquivo `.dat`). Note que cada linha de dados desse arquivo possui uma coluna dupla com valores que devem ser associados à duas variáveis do tipo `real`.

c) Refaça o item (b) mas agora, ao invés de escrever na tela, guarde os dados lidos nas variáveis `t(0:Ndados)` (primeira coluna) e `f(0:Ndados)` (segunda coluna). Faça um *loop* para escrever na tela as componentes `t(k)` e `f(k)` dessas variáveis (com `k=0,...,Ndados`) e compare com o que está escrito no arquivo `.dat`.

d) Crie um programa para calcular e escrever a função

$$f(t) = A + Bt + \frac{C}{2}t^2 \quad ,$$

nas componentes do vetor `f(0:Ndados)`, isto é, $f(k) = f(t_k)$ com $t_k = t_0 + k\Delta t$. Assumindo o intervalo $t \in [0.0, 4.0]$ e que $k = 0, \dots, \text{Ndados}$, calcule o intervalo de discretização Δt para que haja 80 subintervalos e $80 + 1$ entradas nos vetores, de modo que $f(0) = f(t_0)$ com $t_0 = 0.0$ e $f(\text{Ndados}) = f(t_{\text{Ndados}})$ com $t_{\text{Ndados}} = 4.0$. Considerando 5 conjuntos de valores diferentes para os três parâmetros, dentro dos seguintes intervalos: $A \in [-1.5, 1.3]$, $B \in [0, 0.8]$ e $C \in [0, 0.5]$, escreva em arquivos diferentes (linha por linha) os valores de `t(k)`, `f(k)` no formato coluna dupla como exemplificado no arquivo `dados.dat` do item (b). Crie um arquivo diferente para cada conjunto de valores dos parâmetros A , B e C , dando nomes como, por exemplo, `ex01d_A-1.0_B0.44_C0.21.dat` para $A = -1.0$, $B = 0.44$ e $C = 0.21$, e `ex01d_A01.3_B0.70_C0.46.dat` para $A = 1.3$, $B = 0.7$ e $C = 0.46$.

e) Utilizando a função exponencial intrínseca do Fortran para variáveis com dupla precisão, `dexp(x)`, crie um programa para calcular e escrever em arquivos a função

$$r(t) = \delta \left[1 - e^{-\left(\frac{t}{\tau}\right)^p} \right] \quad ,$$

no intervalo $t \in [10^{-5}, 10^2]$. De maneira similar ao item anterior, forneça 5 arquivos para conjuntos diferentes de valores dos três parâmetros restringindo-se aos seguintes intervalos: $\delta \in [0.001, 0.500]$, $\tau \in [0.0001, 0.0010]$ e $p \in [0.4, 0.9]$. Dê nomes aos arquivos como, por exemplo, `ex01e_delta0.0020_tau0.0006_p0.609.dat` para $\delta = 0.002$, $\tau = 0.0006$ e $p = 0.609$. Diferentemente do item anterior, obtenha o valor de Δ para que o intervalo de discretização seja feito baseado em uma relação logarítmica do tipo $\ln(t_{k+1}) - \ln(t_k) = \Delta$ de maneira que $t_0 = 10^{-5}$ e $t_{\text{Ndados}} = 10^2$, com $k = 0, \dots, \text{Ndados}$ sendo $\text{Ndados} = 100$.

Exercício 2. Utilize o programa `xmgrace` para fazer os gráficos dos dados relacionados ao Exercício anterior. Algumas dicas de utilização desse programa podem ser encontradas no *User's Guide* na Ref. [2].

a) Utilize o comando `cp` para copiar o arquivo `dados.dat` para o arquivo `dados_backup.dat` (dessa maneira você ficará com uma cópia intacta do arquivo caso você destrua o arquivo original). Utilize o comando

```
xmgrace dados.dat
```

para visualizar um gráfico com os dados do arquivo `dados.dat`.

b) Utilize o comando da aba “Save as...” da menu “File” para salvar o gráfico como um arquivo `.agr`. Após entrar nessa aba, digite o nome do arquivo à direita do “caminho/diretório” indicado dentro da caixa “Selection”, por exemplo, `ex2b_grafico_dados.agr`. Saia do `xmgrace` e teste se a operação deu certo tentando abrir o arquivo `.agr` que você acabou de salvar digitando

```
xmgrace ex2b_grafico_dados.agr
```

É sempre importante guardar os arquivos fonte `.agr` caso você precise fazer pequenas modificações nos gráficos (note que não existe “Ctrl+z” no `xmgrace`).

c) Para obter o gráfico nos formatos de figura aceitas pelo *pdflatex* são necessárias duas etapas: (i) ir para a aba “Print setup” dentro do menu “File” e escolher um “Device”; (ii) clicar na aba “Print” dentro do menu “File”. Faça o teste de imprimir o gráfico no formato `.eps` e depois, já no terminal, utilize o comando

para converter a figura *.eps* para o formato *.pdf* (que é um formato aceito para figuras a serem incluídas nos seus Trabalhos feito em L^AT_EX!!). Sempre verifique se o arquivo **ex2b_grafico_dados.pdf** foi gerado. Alternativamente, você pode criar arquivos *.png* selecionando diretamente o “Device” na aba “Print setup” dentro do **xmgrace**.

d) Outra maneira de obter gráficos no **xmgrace** é importando os dados de arquivos *.dat*. Isso pode ser feito através do menu “Data”, depois a aba “Import”, em seguida, “ASCII...”, e depois clicando duas vezes em cada arquivo *.dat* dentro da caixa “Files”. Faça um teste abrindo o **xmgrace** pelo terminal e depois importando os 5 arquivos criados no item (d) do Exercício 1. Se você não estiver visualizando os gráficos, clique no botão azul “AS” (auto-scale) no canto superior esquerdo do gráfico. Salve o arquivo fonte do gráfico com o nome **ex2d_grafico.agr** e, tal como descrito no item (c) acima, obtenha a figura **ex2d_grafico.pdf** para incluir no seus Trabalhos.

e) As opções mais importantes para melhorar a apresentação do seu gráfico são encontradas nas abas “Set appearance...” e “Axis properties...” dentro do menu “Plot”. Em particular, explore a aba “Axis properties” para (i) definir os limites mostrados tanto no eixo x quanto no eixo y e (ii) escrever quais as quantidades que estão sendo mostradas nos eixos, por exemplo, “ $f(t)$ ” no eixo y e “ t ” no eixo x (o tamanho dos números também pode ser ajustado nessa aba) do gráfico obtido no item anterior que inclui os 5 conjuntos de dados. Além disso, explore a aba “Set appearance...” para (iii) alterar as cores (verde, azul, vermelho, preto, laranja) e símbolos (círculo, quadrado, triângulo, diamante, etc) dos diferentes conjuntos de dados e também para (iv) incluir a legenda de cada conjunto com informações sobre os parâmetro A , B e C utilizados quando você gerou as curvas pelo Fortran. Salve o arquivo fonte como **ex2e_grafico.agr** e obtenha a figura *.pdf* correspondente para incluir nos seus Trabalhos.

f) Utilizando o arquivo **ex2e_grafico.agr** como base (isto é, preservando os conjuntos de dados e aparência definida no item anterior), utilize o comando **cp** para criar um arquivo **ex2f_grafico.agr**, onde agora as linhas que ligam os pontos do gráfico deverão ficar escondidas (isso pode ser feito alterando o “Type” de “Straight” para “None” em “Lines properties” dentro da aba “Set appearance...”). Agora, clicando com o botão “direito” do mouse na caixa “Select set” dentro da aba “Set appearance...”, selecione o menu “Create new” e, logo que aparecer, “By formula”. Utilize essa função do **xmgrace** para criar as mesmas funções obtidas no item (d) do Exercício 1 (*i.e.* com os mesmos parâmetros e definidas nos mesmos intervalos). Mostre as funções criadas pelo **xmgrace** utilizando a mesma cor dos dados obtidos pelo seu programa em Fortran porém selecionando “Type=Straight” no menu “Lines properties” dentro da aba “Set appearance...”. Atualize as legendas para descrever o que são as linhas contínuas, salve o arquivo fonte e obtenha a figura **ex2f_grafico.pdf** para incluir no seus Trabalhos.

g) Repita os itens (d) e (e) utilizando os dados obtidos no item (e) do Exercício 1 mas agora mostrando o gráfico utilizando escalas log-log (isso é feito dentro da aba “Axis properties...” do menu “Plot”). Salve o arquivo fonte como **ex2g_grafico.agr** e obtenha a figura *.pdf* correspondente para incluir no seus Trabalhos.

Referências:

- [1] http://nautilus.fis.uc.pt/personal/pvalberto/downloads/for_lang.pdf
- [2] <http://plasma-gate.weizmann.ac.il/Grace/doc/UsersGuide.html>