



INSTITUTO DE FÍSICA DE SÃO CARLOS
UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

[7600017] - INTRODUÇÃO À FÍSICA COMPUTACIONAL

Projeto 1

Docente:

Francisco Castilho Alcaraz

Aluno:

Breno Henrique Pelegrin da Silva (13687303)

31 de agosto de 2023

Sumário

1	Contexto	3
2	Tarefa 1	3
2.1	Exemplo de funcionamento	4
3	Tarefa 2	5
3.1	Exemplo de funcionamento	6
4	Tarefa 3	7
4.1	Exemplo de funcionamento	9
5	Tarefa 4	10
5.1	Exemplo de funcionamento	12
5.2	Testes para $N = 100, 1000, 10000$	13
6	Tarefa 5	14
6.1	Dupla precisão	16
6.2	Exemplo de funcionamento	18
7	Tarefa 6	19
7.1	Exemplo de funcionamento	21
7.2	Testes para $N = 1, 2, 3, 4, 5, 6$	22
8	Tarefa 7	22
8.1	Exemplo de funcionamento	26
8.2	Testes para $d = 2, 3, 4$	27
9	Tarefa 8	28
9.1	Exemplo de funcionamento e análise gráfica	31
9.2	Pergunta A	33
9.3	Pergunta B	34

Lista de Figuras

1	Código-fonte da tarefa 1	4
2	Testes de entrada e saída da tarefa 1	5
3	Código-fonte da tarefa 2	6
4	Testes de entrada e saída da tarefa 2	7
5	Código-fonte da tarefa 3	8
6	Entrada e saída do terminal para a tarefa 3	9
7	Arquivo de entrada da tarefa 3	10
8	Arquivo de saída da tarefa 3	10
9	Código-fonte da tarefa 4	11
10	Entrada e saída do terminal para a tarefa 4	12
11	Arquivo de saída da tarefa 4	13

12	Testes para $N = 10^2, 10^3, 10^4$ na tarefa 4	13
13	Código-fonte da tarefa 5 (precisão simples)	15
14	Código-fonte da tarefa 5 (precisão dupla)	17
15	Entrada e saída do terminal para a tarefa 5 (precisão simples)	18
16	Entrada e saída do terminal para a tarefa 5 (precisão dupla)	19
17	Código-fonte da tarefa 6	21
18	Entrada e saída do terminal para a tarefa 6 para $N = 6$	21
19	Entrada e saída do terminal para a tarefa 6 para N de 1 a 4	22
20	Entrada e saída do terminal para a tarefa 6 para N de 5 a 6	22
21	Geometria do método de Monte Carlo para $d = 2$	23
22	Código-fonte da tarefa 7	25
23	Entrada e saída do terminal para a tarefa 7 para $N = 10^6$ e $d = 3$. .	26
24	Tempo de execução da tarefa 7 para $M = 10^6$ e $d = 3$	26
25	Entrada e saída do terminal para os testes da tarefa 7 com $M = 10^9$.	27
26	Código-fonte da tarefa 8	30
27	Entrada e saída do terminal para a tarefa 8	32
28	Arquivo de saída da tarefa 8	32
29	Gráfico do volume em função da dimensão	33
30	Gráfico de V_d e r_d em função da dimensão	34

1 Contexto

Após a execução das tarefas do primeiro projeto de Introdução à Física Computacional, foi possível perceber que o objetivo do projeto é exercitar os conhecimentos da linguagem *Fortran 77*, como a declaração implícita de variáveis, estruturas de decisão, laços, leitura e escrita de arquivos, algoritmos básicos e métodos estatísticos básicos. Assim, realizar esse trabalho contribuiu de forma positiva para o aprendizado da linguagem, reforçando os conceitos já vistos anteriormente.

Para a leitura do relatório, vale ressaltar ao leitor que todos os códigos foram elaborados utilizando as especificações da linguagem *Fortran 77*, portanto, não foi permitida a utilização de alocação dinâmica de vetores e declaração explícita de variáveis (práticas e ferramentas geralmente utilizadas no *Fortran 90* e versões mais recentes). Além disso, os códigos foram testados após sua compilação utilizando o compilador *gfortran* do GNU (*Operating System and the Free Software Movement*), nas máquinas do servidor *basalto.ifsc.usp.br* e enviados utilizando a padronização de nomes estabelecida pelo docente.

2 Tarefa 1

Nessa tarefa, foi criado um programa que lê os coeficientes a , b e c de uma equação de segundo grau na forma exposta pela equação 1, e em seguida, calcula as raízes reais dessa equação, se houver alguma, utilizando a equação 2. As raízes de uma equação desse tipo são os valores x tais que a equação é zero, ou seja, se graficarmos a função em um plano cartesiano, as raízes são os valores de x tais que o gráfico intersecta o eixo x do plano.

$$ax + bx + c = 0 \quad (1)$$

$$x = \frac{-b \pm \sqrt{\Delta}}{2a} \quad (2)$$

Para verificar se existem uma, duas, ou zero raízes reais, o programa inicialmente calcula o discriminante Δ , dado pela equação 3. Se $\Delta = 0$, então existe apenas uma raiz real. Se $\Delta > 0$, então existem duas raízes reais diferentes. Por fim, se $\Delta < 0$, então não existem raízes reais para a equação. O código-fonte criado é exibido na figura 1 e a explicação para ele é dada logo abaixo do código, no verbete 1.

$$\Delta = b^2 - 4ac \quad (3)$$

Figura 1: Código-fonte da tarefa 1

```
1      program Bhaskara
2      c      Tarefa 1 - Intro. Fiscomp - Prof. Alcaraz
3      c      Aluno: Breno Henrique Pelegrin da Silva (13687303)
4          write(*,100)
5      100    format("Digite os coef. a, b, c da equação  $ax^2+bx+c=0$ : ", $)
6          read(*,*) a, b, c
7          delta = b**2 - 4*a*c
8          if (delta .lt. 0.0e0) then
9              write(*,*) "A equação não possui raízes reais."
10         else
11             if (delta .eq. 0.0e0) then
12                 x1 = (-b + sqrt(delta))/2*a
13                 write(*,*) "1 raiz real:", x1
14             else if (delta .gt. 0.0e0) then
15                 x1 = (-b + sqrt(delta))/2*a
16                 x2 = (-b - sqrt(delta))/2*a
17                 write(*,*) "2 raízes reais:", x1, x2
18             end if
19         end if
20     end program
```

Verbetes 1: Explicação do código da tarefa 1

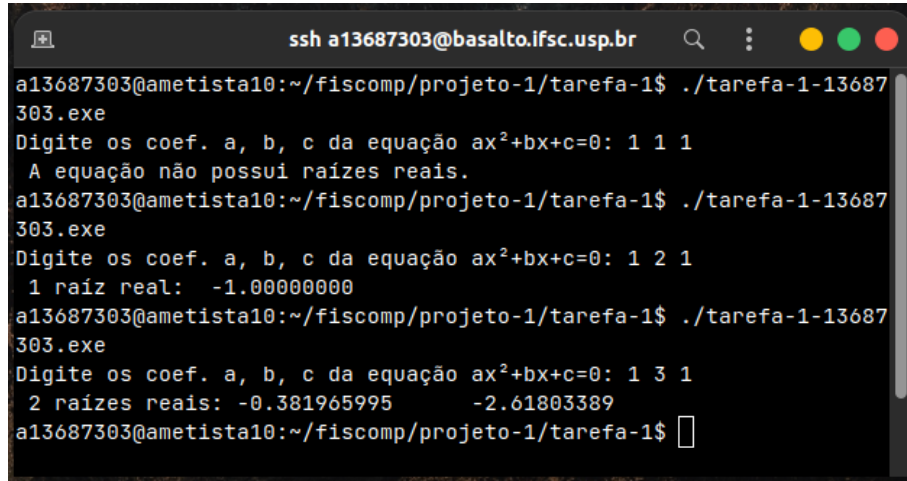
Inicialmente, é pedido ao usuário os coeficientes a , b , c da equação e seus valores são armazenados nas respectivas variáveis. O cifrão $\$$ foi utilizado no *FORMAT* para colocar o cursor na linha, sinalizando que deve ser feita uma entrada de dados pelo usuário.

Em seguida, o Δ é calculado e armazenado na variável. Se $\Delta > 0$, o programa calcula as duas raízes e as mostra. Se $\Delta = 0$, o programa calcula a única raiz e a mostra. Se $\Delta < 0$, o programa exibe uma mensagem de erro, pois não existem raízes reais e não mostra nenhum valor. Por fim, o programa termina.

2.1 Exemplo de funcionamento

Na figura 2, são expostos alguns testes de entrada/saída do programa da tarefa 1, para vários valores de coeficientes a , b , c evidenciando os casos $\Delta = 0$, $\Delta > 0$ e $\Delta < 0$.

Figura 2: Testes de entrada e saída da tarefa 1



```

ssh a13687303@basalto.ifsc.usp.br
a13687303@ametista10:~/fiscomp/projeto-1/tarefa-1$ ./tarefa-1-13687303.exe
Digite os coef. a, b, c da equação ax²+bx+c=0: 1 1 1
A equação não possui raízes reais.
a13687303@ametista10:~/fiscomp/projeto-1/tarefa-1$ ./tarefa-1-13687303.exe
Digite os coef. a, b, c da equação ax²+bx+c=0: 1 2 1
1 raiz real: -1.00000000
a13687303@ametista10:~/fiscomp/projeto-1/tarefa-1$ ./tarefa-1-13687303.exe
Digite os coef. a, b, c da equação ax²+bx+c=0: 1 3 1
2 raízes reais: -0.381965995 -2.61803389
a13687303@ametista10:~/fiscomp/projeto-1/tarefa-1$ 

```

3 Tarefa 2

Nessa tarefa, foi criado um programa que, dados dois vetores do espaço vetorial \mathbb{R}^3 , calcula a área do triângulo formado por esses vetores. Sejam dois vetores $\vec{u} = (u_x, u_y, u_z)$ e $\vec{v} = (v_x, v_y, v_z)$ do \mathbb{R}^3 , a área do triângulo formado entre eles é dada pela equação 6, onde $\vec{R} = \vec{u} \wedge \vec{v}$ é o produto vetorial entre \vec{u} e \vec{v} , dado pela equação 4 e $\|\vec{u} \wedge \vec{v}\|$ é a norma do vetor resultante \vec{R} do produto vetorial, dada pela equação 5. Os vetores só formam um triângulo se eles não forem colineares, ou seja, se a norma do produto vetorial for diferente de zero.

$$\vec{R} = \vec{u} \wedge \vec{v} = \begin{vmatrix} \hat{x} & \hat{y} & \hat{z} \\ u_x & u_y & u_z \\ v_x & v_y & v_z \end{vmatrix} = \hat{x}(u_y v_z - u_z v_y) + \hat{y}(u_z v_x - u_x v_z) + \hat{z}(u_x v_y - u_y v_x) \quad (4)$$

$$\|\vec{R}\| = \|\vec{u} \wedge \vec{v}\| = \sqrt{R_x^2 + R_y^2 + R_z^2} \quad (5)$$

$$A = \frac{1}{2} \|\vec{u} \wedge \vec{v}\| \quad (6)$$

Na figura 3, é exibido o código-fonte dessa tarefa e, logo abaixo, no verbete 2, o código é explicado de forma sucinta.

Figura 3: Código-fonte da tarefa 2

```
1      program Triangulo
2      c      Tarefa 2 - Intro. Fiscomp - Prof. Alcaraz
3      c      Aluno: Breno Henrique Pelegrin da Silva (13687303)
4          dimension v1(3)
5          dimension v2(3)
6          dimension vetorial(3)
7          write(*,*) "Digite as componentes x,y,z do vetor v1:"
8          read(*,*) v1
9          write(*,*) "Digite as componentes x,y,z do vetor v2:"
10         read(*,*) v2
11      c      Calcula o produto vetorial v1 x v2
12         vetorial(1) = v1(2)*v2(3) - v2(2)*v1(3) ! i*(y1*z2 - y2*z1)
13         vetorial(2) = v1(3)*v2(1) - v2(3)*v1(1) ! j*(z1*x2 - z2*x1)
14         vetorial(3) = v1(1)*v2(2) - v2(1)*v1(2) ! k*(x1*y2 - x2*y1)
15      c      Area = 0.5*modulo(vetorial)
16         area = 0.5e0 * sqrt(vetorial(1)**2 + vetorial(2)**2 +
17      &   vetorial(3)**2)
18
19         write(*,*) "Área:", area
20     end program
```

Verbetes 2: Explicação do código da tarefa 2

Inicialmente, são alocados os vetores com três dimensões reais, $v1$, $v2$ e $vetorial$. Depois, é perguntado ao usuário as componentes x , y e z dos vetores $v1$ e $v2$ que compõem o triângulo.

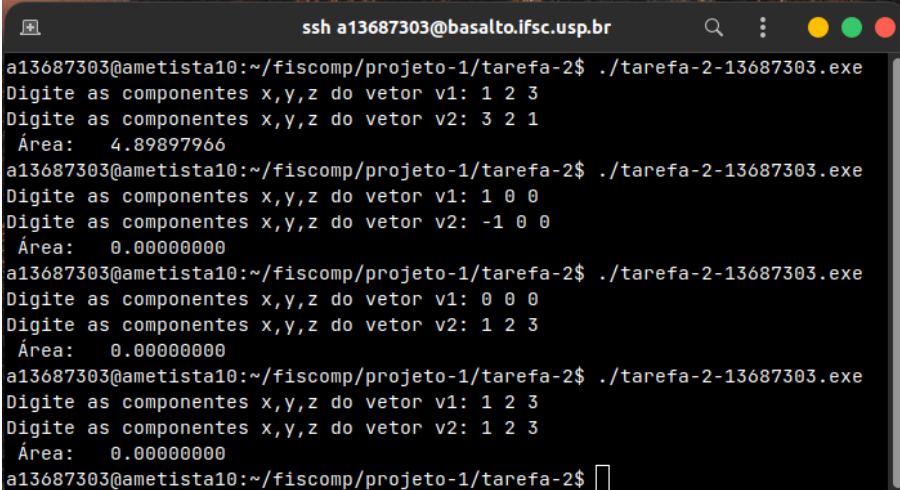
Com os valores obtidos, o produto vetorial é calculado utilizando a equação 4 e armazenado no vetor $vetorial$.

Por fim, calcula-se a norma do produto vetorial com a equação 5, utilizando a função nativa $SQRT$ do *Fortran 77*, e a área utilizando a equação 6. Após efetuado o cálculo, a área é mostrada ao usuário.

3.1 Exemplo de funcionamento

Na figura 4, são realizados alguns testes de entrada/saída no programa da tarefa 2, utilizando diversos valores para as coordenadas dos vetores que formam o triângulo, para os casos onde eles são colineares ou não colineares.

Figura 4: Testes de entrada e saída da tarefa 2



```
ssh a13687303@basalto.ifsc.usp.br
a13687303@ametista10:~/fiscomp/projeto-1/tarefa-2$ ./tarefa-2-13687303.exe
Digite as componentes x,y,z do vetor v1: 1 2 3
Digite as componentes x,y,z do vetor v2: 3 2 1
Área: 4.89897966
a13687303@ametista10:~/fiscomp/projeto-1/tarefa-2$ ./tarefa-2-13687303.exe
Digite as componentes x,y,z do vetor v1: 1 0 0
Digite as componentes x,y,z do vetor v2: -1 0 0
Área: 0.00000000
a13687303@ametista10:~/fiscomp/projeto-1/tarefa-2$ ./tarefa-2-13687303.exe
Digite as componentes x,y,z do vetor v1: 0 0 0
Digite as componentes x,y,z do vetor v2: 1 2 3
Área: 0.00000000
a13687303@ametista10:~/fiscomp/projeto-1/tarefa-2$ ./tarefa-2-13687303.exe
Digite as componentes x,y,z do vetor v1: 1 2 3
Digite as componentes x,y,z do vetor v2: 1 2 3
Área: 0.00000000
a13687303@ametista10:~/fiscomp/projeto-1/tarefa-2$
```

4 Tarefa 3

Nessa tarefa, foi criado um programa que lê um arquivo de entrada com N números reais, e em seguida, ordena apenas os M primeiros valores lidos, escrevendo-os em um arquivo de saída, junto com o número M . Para ordenar os números, foi utilizado um algoritmo baseado no famoso *selection sort*. A explicação do algoritmo é exibida no verbete 3. O código-fonte do programa escrito está exposto na figura 5 e a explicação sucinta do código é provida no verbete 4.

Verbete 3: Explicação do algoritmo de ordenação da tarefa 3

Seja A uma lista com n números reais, indexada com início em 1.

Para ordenar os m primeiros números reais de A , usamos o seguinte algoritmo:

1. Para cada elemento $A[i]$, $i \in [1, m]$, estabeleça um chute inicial d para o menor número, por exemplo, $d = A[1]$.
2. Para cada elemento $A[j]$, $j \in [i + 1, n]$, verifique se ele é menor que d . Se for maior, então trocamos o valor de d e $A[j]$.
3. Quando $j = n$, salvamos o valor final de d no arquivo, pois esse é o mínimo global da seção $[i + 1, n]$ da lista A .

Após terminados os laços de repetição, teremos no arquivo de saída os m menores números da lista, pois, a cada iteração de i , descobrimos o mínimo global da lista desconsiderando os valores com índice menor que $i + 1$ (que já foram ordenados).

Figura 5: Código-fonte da tarefa 3

```
1      program MenoresNumeros
2      c      Tarefa 3 - Intro. Fiscomp - Prof. Alcaraz
3      c      Aluno: Breno Henrique Pelegrin da Silva (13687303)
4
5      c      Como não é permitido usar alocação dinâmica, então
6      c      define-se um valor máximo de tamanho para o vetor.
7          parameter(maxlinhas = 1000)
8          dimension alista(maxlinhas)
9          write(*,100)
10     100    format("Quantos M menores números você quer na saída: ", $)
11          read(*,*) m
12      c      Lê arquivo de input e coloca dentro de uma lista
13          ilinhas = 0
14          open(unit=50, file='entrada-3-13687303', status='old')
15          do
16              read(50, *, end=10) alista(ilinhas+1)
17              ilinhas = ilinhas + 1
18          end do
19     10      close(unit=50)
20      c      Ordena os M primeiros e salva em um arquivo de output
21          open(unit=51, file='saida-3-13687303', status='new')
22          write(51, *) "M", m
23          do i=1, m, 1
24              amenor = alista(1)
25              do j=i+1, ilinhas, 1
26                  if (alista(j) < amenor) then
27                      aux = amenor
28                      amenor = alista(j)
29                      alista(j) = aux
30                  end if
31              end do
32              write(51, *) amenor
33          end do
34          close(unit=51)
35      end program
```

Verbetes 4: Explicação do código da tarefa 3

Inicialmente, define-se um parâmetro *maxlinhas*, que indica o número máximo de reais no arquivo. Esse parâmetro é utilizado para declarar estaticamente um vetor *alinh*, que irá armazenar os valores do arquivo.

Esse método de declaração estática foi utilizado pois não era permitido utilizar alocação dinâmica nesse projeto. Todavia, vale notar que, a fim de evitar a reescrita do código-fonte para permitir outros tamanhos de arquivo, é recomendado utilizar a alocação dinâmica do vetor, com os comandos *ALLOCATE* e *DEALLOCATE*.

Em seguida, o arquivo “*entrada-3-13687303*” é lido e conta-se o número de linhas dele utilizando o contador *ilinh* e os valores do arquivos são armazenados no vetor. A contagem de linhas é necessária pois, como o vetor é alocado estaticamente, se acessarmos um índice maior que o número de linhas do arquivo, obteremos valores de “lixo” da memória, que são flutuações nos espaços não utilizados do vetor. Após ler o arquivo, ele é fechado.

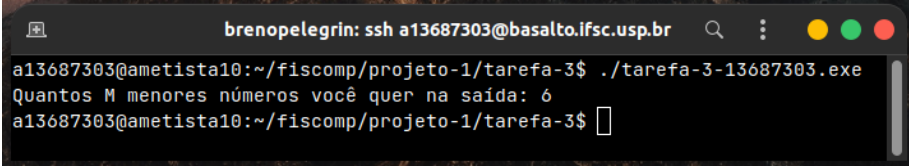
Nesse código, a marcação de *STATUS='old'* foi utilizada na hora da abertura do arquivo (*OPEN*), para sinalizar que ele é um arquivo de entrada que já deveria estar presente no diretório antes da execução e *STATUS='new'* para sinalizar que ele é um arquivo de saída que não deve existir no diretório antes da execução. Assim, se os arquivos não satisfizerem essas condições, o compilador do *Fortran 77* acusará um erro, avisando o usuário.

Por fim, abre-se o arquivo de saída “*saida-3-13687303*” e então, o algoritmo de ordenação do verbete 3 é executado, e durante sua execução, os menores valores são escritos no arquivo. Após terminado o algoritmo, fecha-se o arquivo e encerra-se o programa.

4.1 Exemplo de funcionamento

Nas figuras 6, 7 e 8 são expostas a entrada/saída do terminal, o arquivo de entrada do programa, e o arquivo de saída do programa, respectivamente, a fim de testar o resultado do programa para uma entrada específica. Ao observar as figuras, pode-se perceber que o programa funcionou corretamente, ordenando os 6 primeiros menores números do arquivo de entrada, lidando bem com os casos de números repetidos e números negativos.

Figura 6: Entrada e saída do terminal para a tarefa 3



```
breno@pelegrin: ssh a13687303@basalto.ifsc.usp.br
a13687303@ametista10:~/fiscomp/projeto-1/tarefa-3$ ./tarefa-3-13687303.exe
Quanto M menores números você quer na saída: 6
a13687303@ametista10:~/fiscomp/projeto-1/tarefa-3$
```

Figura 7: Arquivo de entrada da tarefa 3

```
1 1.125
2 2.45
3 3.367775
4 0.0
5 0.0
6 5.2
7 98.0
8 7.0
9 -4.0
10 -5.0
11 -10.0
12 -8.0
13 -8.0
14 4.0
15 9.0
16 12.0
```

Figura 8: Arquivo de saída da tarefa 3

```
1 M 6
2 -10.00000000
3 -8.00000000
4 -8.00000000
5 -5.00000000
6 -4.00000000
7 0.00000000
```

5 Tarefa 4

Nessa tarefa, foi criado um programa que, dado um número inteiro N informado pelo usuário, calcula todos os números primos menores ou iguais a N e salva esses números em um arquivo de saída. Um número primo é um inteiro $x > 2$ que só é divisível por 1 e por x , ou seja, por 1 e por ele mesmo. Assim, para verificar se um número x qualquer é um número primo, basta verificar se ele é divisível por $(x-1, x-2, x-3, \dots, x-n)$ até $x-n=2$. Se for divisível, então o resto da divisão inteira ($\%$ ou MOD) de x por $x-n$ será zero e, portanto não é um número primo. Não é necessário verificar se ele é divisível por 1 ou por x pois todo inteiro é divisível por 1 e por ele mesmo.

O código feito para essa tarefa é exposto na figura 9 e uma explicação sucinta para ele é dada no verbete 5.

Figura 9: Código-fonte da tarefa 4

```
1      program NumerosPrimos
2      c      Tarefa 4 - Intro. Fiscomp - Prof. Alcaraz
3      c      Aluno: Breno Henrique Pelegrin da Silva (13687303)
4          write(*,100)
5      100      format("Digite um inteiro N: ", $)
6          read(*,*) n
7          open(unit=50, file='saida-4-13687303', status='new')
8      c      Se n <= 1, não existem primos.
9          if (n .gt. 1) then
10             iatual = 2
11      c      Laço while (numero_atual <= numero_maximo)
12      101      if(iatual .le. n) then
13      c      Todo número é divisível por 1 e por ele mesmo, então
14      c      podemos excluir esses casos para otimizar o código.
15          do i=2, iatual-1, 1
16              if(MOD(iatual, i) .eq. 0) then
17                  iatual = iatual+1
18                  goto 101
19              endif
20          enddo
21      c      Como o laço concluiu sem redirecionar, então é um número
22      c      primo.
23          write(50,*) iatual
24          iatual = iatual+1
25          goto 101
26      endif
27      else
28          write(*,*) "Não existe primo <= 1"
29      endif
30      close(unit=50)
31  end program
```

Verbetes 5: Explicação do código da tarefa 4

Inicialmente, pede-se ao usuário o inteiro N e abre-se o arquivo de saída “saida-4-13687303”, utilizando a flag `STATUS='new'`. Em seguida, é verificado se $N > 1$, pois não existem primos menores ou iguais a 1. Caso $N < 1$, o programa exibe uma mensagem de erro e encerra. Caso contrário, a execução continua.

Após, é iniciado um laço de repetição *while* (identificado pelo *label* 101), com um contador *iatual* que irá contar de 2 até N , e a cada repetição, o laço verifica se $iatual \leq N$. Esse contador é o candidato à número primo.

Dentro do laço *while*, é utilizado um laço *do*, que itera o contador i de 2 a $iatual - 1$, verificando se a divisão inteira de *iatual* por i é zero. Note que os casos $i = 1$ e $i = iatual$ são descartados, pois todo inteiro é divisível por 1 e por ele mesmo (um primo é divisível **apenas** por 1 e por ele mesmo)

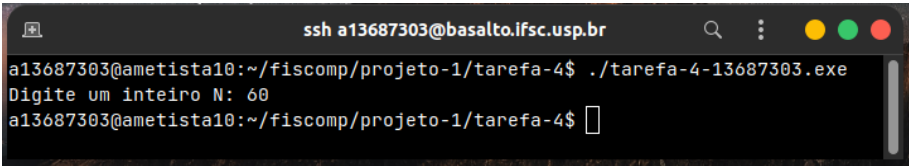
Se for divisível, então *iatual* não é um número primo, portanto incrementamos *iatual* e retornamos ao *label* 100. Se não for divisível por nenhum i , então o laço *do* é encerrado sem redirecionar e *iatual* é um número primo, que é então escrito no arquivo de saída “saida-4-13687303”.

Ao final do laço *while*, o programa terá terminado e todos os números primos menores ou iguais a N estarão escritos no arquivo, e então o arquivo é fechado.

5.1 Exemplo de funcionamento

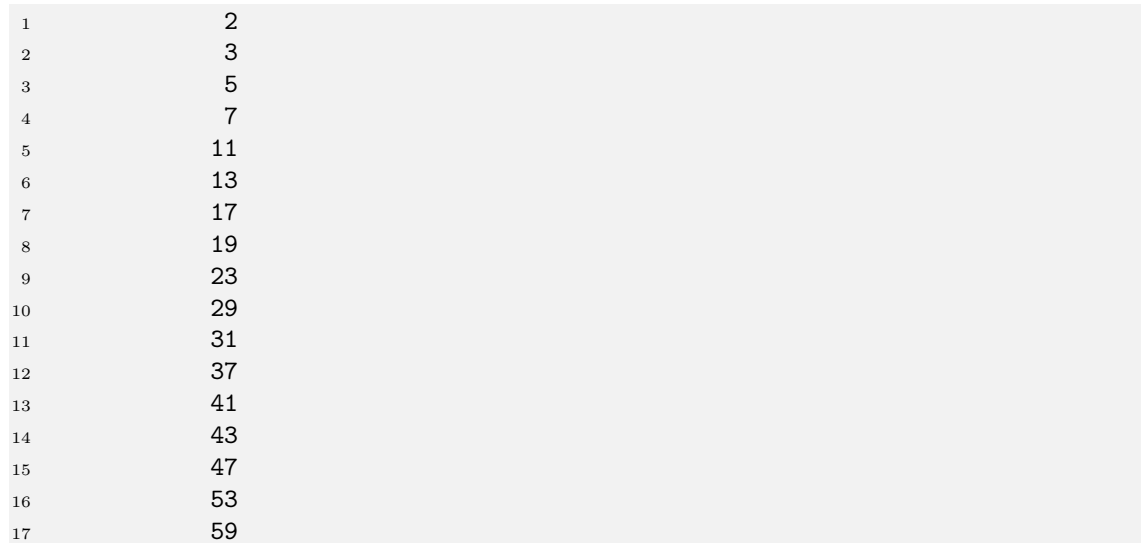
Nas figuras 6, 7 e 8 são expostas a entrada/saída do terminal, e o arquivo de saída da tarefa 4, respectivamente, sendo possível observar os números primos gerados para o N especificado na entrada do terminal.

Figura 10: Entrada e saída do terminal para a tarefa 4



```
ssh a13687303@basalto.ifsc.usp.br
a13687303@ametista10:~/fiscomp/projeto-1/tarefa-4$ ./tarefa-4-13687303.exe
Digite um inteiro N: 60
a13687303@ametista10:~/fiscomp/projeto-1/tarefa-4$
```

Figura 11: Arquivo de saída da tarefa 4

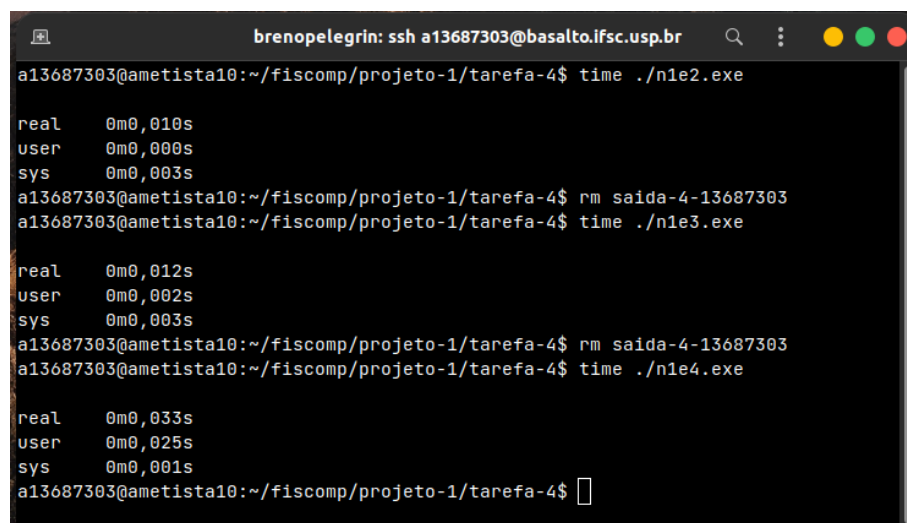


1	2
2	3
3	5
4	7
5	11
6	13
7	17
8	19
9	23
10	29
11	31
12	37
13	41
14	43
15	47
16	53
17	59

5.2 Testes para $N = 100, 1000, 10000$

Em todos os casos, os arquivos de saída estavam coerentes. Eles não serão anexados no relatório pois são muitos números primos, o que iria ocupar um número grande de páginas. A fim de observar a velocidade do programa, as perguntas ao usuário foram removidas e N foi definido diretamente no código.

A figura 12 mostra o tempo de execução dos códigos *n1e2*, *n1e3* e *n1e4*, para $N = 10^2, 10^3, 10^4$, respectivamente, utilizando o comando *time* do *Linux*. Ao observar a figura, nota-se que o algoritmo executa em um tempo muito pequeno, na ordem de 0,01 s, mas conforme N aumenta, maior é o tempo de execução.

Figura 12: Testes para $N = 10^2, 10^3, 10^4$ na tarefa 4

```
breno@pelegrin: ssh a13687303@basalto.ifsc.usp.br
a13687303@ametista10:~/fiscomp/projeto-1/tarefa-4$ time ./n1e2.exe
real    0m0,010s
user    0m0,000s
sys     0m0,003s
a13687303@ametista10:~/fiscomp/projeto-1/tarefa-4$ rm saida-4-13687303
a13687303@ametista10:~/fiscomp/projeto-1/tarefa-4$ time ./n1e3.exe
real    0m0,012s
user    0m0,002s
sys     0m0,003s
a13687303@ametista10:~/fiscomp/projeto-1/tarefa-4$ rm saida-4-13687303
a13687303@ametista10:~/fiscomp/projeto-1/tarefa-4$ time ./n1e4.exe
real    0m0,033s
user    0m0,025s
sys     0m0,001s
a13687303@ametista10:~/fiscomp/projeto-1/tarefa-4$
```

6 Tarefa 5

Nessa tarefa, foi criado um programa para calcular o logaritmo natural de um número qualquer, utilizando uma expansão de Taylor centrada em 0, expressa na equação 7, que converge para números $x \in [0, 2]$. Inicialmente, o programa foi implementado utilizando inteiros de simples precisão. O cálculo da série foi feito utilizando um laço de repetição, até que a diferença entre o valor atual e o valor anterior seja menor ou igual a uma precisão pré-definida como 10^{-5} , chamada de *eprec*.

$$\ln(x) = - \sum_{n=1}^{\infty} (1-x)^n \quad (7)$$

Como a série não converge para números maiores que 2, para $x > 2$, pode-se usar a propriedade de logaritmos expressa na equação 8, pois $\frac{1}{x}$ é sempre menor que 1 quando $x > 1$.

$$\ln(x) = -\ln\left(\frac{1}{x}\right) \quad (8)$$

O código-fonte da implementação do programa para precisão simples e usando $eprec = 10^{-5}$ é exposto na figura 13, e a explicação sucinta para o código é dada no verbete 6.

Figura 13: Código-fonte da tarefa 5 (precisão simples)

```
1  program LnSimples
2  c    Tarefa 5 (simples precisão) - Intro. Fiscomp - Prof. Alcaraz
3  c    Aluno: Breno Henrique Pelegrin da Silva (13687303)
4      write(*,100)
5  100  format("Digite x para calcular ln(x): ", $)
6      read(*,*) x
7      aLnFortran = log(x)
8
9      if (x .le. 0.0e0) then
10         write(*,*) "Erro: ln(x) não está definido para x <= 0."
11         call exit()
12     else if (x .le. 1.0d0) then
13         aLn = fLnSerie(x)
14     else if (x .gt. 1.0d0) then
15 c    Como a série só converge para x entre 0 e 2, podemos fazer
16 c    -ln(1/x) = ln(x), já que 1/x < 1 quando x > 1
17         aLn = -1.0e0*fLnSerie(1.0e0/x)
18     end if
19
20     diff = abs(aLn - aLnFortran)
21     write(*,*) "ln(x) simples precisão = ", aLn
22     write(*,*) "ln(x) fortran simples precisão = ",
23 &aLnFortran
24     write(*,*) "Diferença: ", diff
25
26 end program
27
28 function fLnSerie(x)
29 c    Função válida apenas para 0 <= x <= 2
30     parameter( eprec = 1.0E-5)
31     soma = 0.0e0
32     i = 1
33     do
34         anterior = soma
35         soma = soma - ((1.0e0-x)**i)/i
36         if(abs(soma - anterior) .lt. eprec) then
37             exit
38         else
39             i = i + 1
40         end if
41     end do
42     fLnSerie = soma
43     return
44 end function
```


Verbetes 6: Explicação do código da tarefa 5 (precisão simples)

Inicialmente, é perguntado ao usuário o valor de x para calcular $\ln(x)$. Em seguida, se $x \leq 0$, o programa exibe uma mensagem de erro e termina, chamando a subrotina *exit* nativa do *Fortran 77* para efetuar um *graceful shutdown*.

A fim de comparar depois o resultado do $\ln(x)$ do programa com a função nativa $\text{LOG}(x)$ do *fortran*, é calculado o $\text{LOG}(x)$ e armazenado em uma variável. Caso $x \in [0, 1]$, o programa irá chamar a função $fLnSerie(x)$, responsável por calcular o $\ln(x)$ utilizando a série da equação 7. Caso $x > 1$, o programa irá calcular o $\ln(x)$ fazendo $\ln(x) = -\ln\left(\frac{1}{x}\right)$, conforme exposto na equação 8.

Por fim, é exibido ao usuário o $\ln(x)$ calculado pelo programa, o $\ln(x)$ calculado utilizando a função nativa $\text{LOG}(x)$ e a diferença absoluta entre os dois resultados.

A função $fLnSerie(x)$ foi implementada da seguinte forma:

Primeiro, define-se o parâmetro $eprec = 10^{-5}$, e uma variável para armazenar o resultado do somatório, chamada $soma = 0$.

Depois, é realizado um laço de repetição enquanto a diferença entre o termo atual e o termo anterior for maior que $eprec$. Dentro do laço, é somado o novo termo da série na variável $soma$. Quando a condição de parada é satisfeita, o programa sai do laço de repetição e retorna o valor obtido pela série.

6.1 Dupla precisão

O código-fonte da implementação do programa para precisão dupla e usando $eprec$ como uma variável informada pelo usuário é exposto na figura 14, e a explicação sucinta para o código é dada no verbete 7.

Figura 14: Código-fonte da tarefa 5 (precisão dupla)

```

1      program LnDupla
2          implicit real*8 (a-h, o-z)
3      c      Tarefa 5 (simples precisão) - Intro. Fiscomp - Prof. Alcaraz
4      c      Aluno: Breno Henrique Pelegrin da Silva (13687303)
5          write(*,100)
6      100      format("Digite o valor de eprec: ", $)
7          read(*,*) eprec
8
9          write(*,101)
10     101      format("Digite x para calcular ln(x): ", $)
11          read(*,*) x
12
13          aLnFortran = dlog(x)
14
15          if (x .le. 0.0d0) then
16              write(*,*) "Erro: ln(x) não está definido para x <= 0."
17              call exit()
18          else if (x .le. 1.0d0) then
19              aLn = fLnSerie(x, eprec)
20          else if (x .gt. 1.0d0) then
21      c      Como a série só converge para x entre 0 e 2, podemos fazer
22      c      -ln(1/x) = ln(x), já que 1/x < 1 quando x > 1
23              aLn = -1.0d0*fLnSerie(1.0d0/x, eprec)
24          end if
25
26          diff = abs(aLn - aLnFortran)
27          write(*,*) "ln(x) dupla precisão = ", aLn
28          write(*,*) "ln(x) fortran dupla precisão = ",
29      &aLnFortran
30          write(*,*) "Diferença: ", diff
31
32      end program
33
34      function fLnSerie(x, eprec)
35      c      Função válida apenas para 0 <= x <= 2
36          implicit real*8 (a-h, o-z)
37          soma = 0.0d0
38          i = 1
39          do
40              anterior = soma
41              soma = soma - ((1.0d0-x)**i)/i
42              if(abs(soma - anterior) .lt. eprec) then
43                  exit
44              else
45                  i = i + 1
46              end if
47          end do
48          fLnSerie = soma
49          return
50      end function

```

Verbetes 7: Explicação do código da tarefa 5 (precisão dupla)

O código implementado para dupla precisão é extremamente parecido com o exposto no verbete 7, e portanto, não será explicado novamente. Apenas algumas modificações foram feitas:

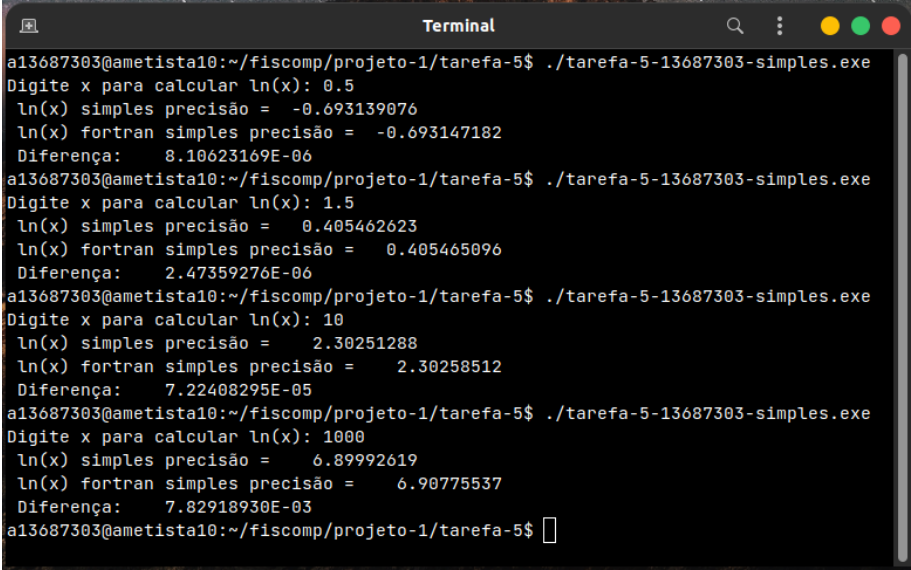
Ao invés de definir o parâmetro *eprec*, a função *fLnSerie* recebe esse parâmetro como argumento do programa principal. No programa principal, a variável *eprec* é perguntada ao usuário, e então passada para a função *fLnSerie(x, eprec)* no momento em que o $\ln(x)$ é calculado.

Além disso, todas as variáveis reais do programa foram definidas com dupla precisão.

6.2 Exemplo de funcionamento

Na figura 15, são exibidos alguns casos de teste para $x = 0,5, 1,5, 10, 1000$ do programa de precisão simples com $eprec = 10^{-5}$ em todos os casos, e na figura 16 são exibidos os mesmos testes, mas utilizando o programa de precisão dupla, com $eprec = 10^{-16}$ em todos os casos.

Figura 15: Entrada e saída do terminal para a tarefa 5 (precisão simples)



```
a13687303@ametista10:~/fiscomp/projeto-1/tarefa-5$ ./tarefa-5-13687303-simples.exe
Digite x para calcular ln(x): 0.5
ln(x) simples precisão = -0.693139076
ln(x) fortran simples precisão = -0.693147182
Diferença: 8.10623169E-06
a13687303@ametista10:~/fiscomp/projeto-1/tarefa-5$ ./tarefa-5-13687303-simples.exe
Digite x para calcular ln(x): 1.5
ln(x) simples precisão = 0.405462623
ln(x) fortran simples precisão = 0.405465096
Diferença: 2.47359276E-06
a13687303@ametista10:~/fiscomp/projeto-1/tarefa-5$ ./tarefa-5-13687303-simples.exe
Digite x para calcular ln(x): 10
ln(x) simples precisão = 2.30251288
ln(x) fortran simples precisão = 2.30258512
Diferença: 7.22408295E-05
a13687303@ametista10:~/fiscomp/projeto-1/tarefa-5$ ./tarefa-5-13687303-simples.exe
Digite x para calcular ln(x): 1000
ln(x) simples precisão = 6.89992619
ln(x) fortran simples precisão = 6.90775537
Diferença: 7.82918930E-03
a13687303@ametista10:~/fiscomp/projeto-1/tarefa-5$
```

Figura 16: Entrada e saída do terminal para a tarefa 5 (precisão dupla)

```

a13687303@ametista10:~/fiscomp/projeto-1/tarefa-5$ ./tarefa-5-13687303-dupla.exe
Digite o valor de eprec: 1.0E-16
Digite x para calcular ln(x): 0.5
ln(x) dupla precisão = -0.69314718055994506
ln(x) fortran dupla precisão = -0.69314718055994529
Diferença: 2.2204460492503131E-016
a13687303@ametista10:~/fiscomp/projeto-1/tarefa-5$ ./tarefa-5-13687303-dupla.exe
Digite o valor de eprec: 1.0E-16
Digite x para calcular ln(x): 1.5
ln(x) dupla precisão = 0.40546510810816438
ln(x) fortran dupla precisão = 0.40546510810816438
Diferença: 0.0000000000000000
a13687303@ametista10:~/fiscomp/projeto-1/tarefa-5$ ./tarefa-5-13687303-dupla.exe
Digite o valor de eprec: 1.0E-16
Digite x para calcular ln(x): 10
ln(x) dupla precisão = 2.3025850929940459
ln(x) fortran dupla precisão = 2.3025850929940459
Diferença: 0.0000000000000000
a13687303@ametista10:~/fiscomp/projeto-1/tarefa-5$ ./tarefa-5-13687303-dupla.exe
Digite o valor de eprec: 1.0E-16
Digite x para calcular ln(x): 1000
ln(x) dupla precisão = 6.9077552789818339
ln(x) fortran dupla precisão = 6.9077552789821368
Diferença: 3.0286884111774270E-013
a13687303@ametista10:~/fiscomp/projeto-1/tarefa-5$ 

```

Analisando as figuras, é possível observar que, no caso da precisão simples, existe uma diferença significativa entre o $\ln(x)$ do programa e o $\ln(x)$ calculado pela função $\text{LOG}(x)$ do *Fortran 77*. Essa diferença se acentua quanto maior é o argumento x da função.

Já no caso da precisão dupla, observa-se que, para pequenos valores de x (até $x = 10$), a diferença entre o $\ln(x)$ do programa de dupla precisão e a função $\text{DLOG}(x)$ do *Fortran 77* é nula. Todavia, para valores maiores, na ordem de $x = 10^3$, existe uma diferença na ordem de 10^{-13} , que é desprezível. Essa diferença acontece porque $\frac{1}{x}$ tende a 0 quando x tende ao infinito, e assim, se aproxima muito do limite de convergência da série.

7 Tarefa 6

Nessa tarefa, foi codificado um programa para calcular os números complexos z que satisfazem a equação 9, com N inteiro maior que zero.

$$(z - 2)^N = 3 \quad (9)$$

Exponenciando os dois lados da equação e, depois, somando 2 nos dois lados, obtém-se a expressão abaixo.

$$z = 3^{\frac{1}{N}} + 2$$

Todavia, utilizando a forma de Euler para um número complexo, exposta na equação

10, é possível expressar o número real 3 como um complexo de parte imaginária igual a zero, e de módulo $\rho = 3$.

Para a parte imaginária ser zero, o argumento do seno deve ser zero, então $\theta = 2k\pi$, com $k \in \mathbb{N}^*$. É necessário utilizar um inteiro k no argumento pois as funções seno e cosseno são cíclicas, logo $\cos(2k\pi) = 1$ e $\sin(2k\pi) = 0$, $\forall k \in \mathbb{N}^*$. Assim, o número complexo $w = (3 + 0i)$ pode ser expresso utilizando a equação 11.

$$\rho e^{i\theta} = \rho [\cos(\theta) + i\sin(\theta)] \quad (10)$$

$$3 = 3e^{2k\pi i} = 3 [\cos(2k\pi i) + i\sin(2k\pi i)] \quad (11)$$

Exponenciando os dois lados da equação 11 por $\frac{1}{N}$, obtém-se a equação 12. Todavia, é necessário impor um limite ao inteiro k , para evitar repetir as raízes, já que z terá 6 raízes. Assim, $k \in [1, N]$, $k \in \mathbb{N}^*$. Por fim, para obter a forma trigonométrica do número complexo $z = 3^{\frac{1}{N}} + 2$, basta somar $(2 + 0i)$ na expressão obtida para $(3^{\frac{1}{N}} + 0i)$, obtendo, por fim, a equação 13.

$$(3^{\frac{1}{N}} + 0i) = 3^{\frac{1}{N}} e^{\frac{2k\pi}{N}} = \left[3^{\frac{1}{N}} \cos\left(\frac{2k\pi}{N}\right) \right] + i \left[3^{\frac{1}{N}} \sin\left(\frac{2k\pi}{N}\right) \right], \quad k \in [1, N], k \in \mathbb{N}^* \quad (12)$$

$$z = \left[3^{\frac{1}{N}} \cos\left(\frac{2k\pi}{N}\right) + 2 \right] + i \left[3^{\frac{1}{N}} \sin\left(\frac{2k\pi}{N}\right) \right], \quad k \in [1, N], k \in \mathbb{N}^* \quad (13)$$

Dessa forma, o problema reduz-se a resolver a equação 13, dado o número N informado pelo usuário. O código-fonte do programa elaborado é exposto na figura 17, e uma explicação sucinta de seu funcionamento é dada no verbete 8.

Figura 17: Código-fonte da tarefa 6

```

1      program Complexos
2      c      Tarefa 6 - Intro. Fiscomp - Prof. Alcaraz
3      c      Aluno: Breno Henrique Pelegrin da Silva (13687303)
4          complex :: z
5          write(*,100)
6      100    format('Digite o valor de N: ', $)
7          read(*,*) n
8          pi = 4.0e0*atan(1.0e0)
9          do i=1, n, 1
10     c      Transforma Re(z) e Im(z) em um número complexo do fortran
11             zmod = 3.0e0**(1.0e0/N)
12             preal = 2 + zmod*cos(2.0e0*pi*i/N)
13             pimag = zmod*sin(2.0e0*pi*i/N)
14             z = cmplx(preal, pimag)
15             write(*,101) i, z
16     101    format('z'(i10) ' = ' (1f12.6) ' + ' (1f12.6) ' i')
17         enddo
18     end program

```

Verbetes 8: Explicação do código da tarefa 6

Inicialmente, pergunta-se ao usuário o inteiro N . Em seguida, define-se π para ser usado posteriormente nos cálculos, utilizando precisão simples.

Após, é implementada a equação 13, utilizando um laço *do* para variar k (no programa, é chamado de i) de 1 a N . A variável $zmod$ armazena $3^{\frac{1}{N}}$, que é o módulo de $(3^{\frac{1}{N}} + 0i)$ e as variáveis $preal$ e $pimag$ armazenam as partes real e imaginária de z , respectivamente.

Para cada iteração, o programa gera um número complexo z a partir das partes real e imaginária, utilizando a função *CMPLX* do *Fortran 77*, e mostra o número na tela, na forma cartesiana $z_i = Re(z) + iIm(z)$.

7.1 Exemplo de funcionamento

Na figura 18, é exposto um exemplo de funcionamento do programa para $N = 6$.

Figura 18: Entrada e saída do terminal para a tarefa 6 para $N = 6$

```

tarefa-6: ssh a13687303@basalto.ifsc.usp.br
(base) a13687303@ametista10:~/fiscomp/projeto-1/tarefa-6$ ./tarefa-6-13687303.exe
Digite o valor de N: 6
z1 = 2.600468 + 1.040042 i
z2 = 1.399531 + 1.040042 i
z3 = 0.799063 + -0.000000 i
z4 = 1.399532 + -1.040042 i
z5 = 2.600469 + -1.040042 i
z6 = 3.200937 + 0.000000 i
(base) a13687303@ametista10:~/fiscomp/projeto-1/tarefa-6$

```

7.2 Testes para $N = 1, 2, 3, 4, 5, 6$

Nas figuras 19 e 20, são expostos os testes do programa para N variando de 1 a 6.

Figura 19: Entrada e saída do terminal para a tarefa 6 para N de 1 a 4




```

tarefa-6: ssh a13687303@basalto.ifsc.usp.br
(base) a13687303@ametista10:~/fiscomp/projeto-1/tarefa-6$ ./tarefa-6-13687303.exe
Digite o valor de N: 1
z1 = 5.000000 + 0.000001 i
(base) a13687303@ametista10:~/fiscomp/projeto-1/tarefa-6$ ./tarefa-6-13687303.exe
Digite o valor de N: 2
z1 = 0.267949 + -0.000000 i
z2 = 3.732051 + 0.000000 i
(base) a13687303@ametista10:~/fiscomp/projeto-1/tarefa-6$ ./tarefa-6-13687303.exe
Digite o valor de N: 3
z1 = 1.278875 + 1.249025 i
z2 = 1.278875 + -1.249025 i
z3 = 3.442250 + 0.000000 i
(base) a13687303@ametista10:~/fiscomp/projeto-1/tarefa-6$ ./tarefa-6-13687303.exe
Digite o valor de N: 4
z1 = 2.000000 + 1.316074 i
z2 = 0.683926 + -0.000000 i
z3 = 2.000000 + -1.316074 i
z4 = 3.316074 + 0.000000 i
(base) a13687303@ametista10:~/fiscomp/projeto-1/tarefa-6$

```

Figura 20: Entrada e saída do terminal para a tarefa 6 para N de 5 a 6



```

tarefa-6: ssh a13687303@basalto.ifsc.usp.br
(base) a13687303@ametista10:~/fiscomp/projeto-1/tarefa-6$ ./tarefa-6-13687303.exe
Digite o valor de N: 5
z1 = 2.384952 + 1.184761 i
z2 = 0.992182 + 0.732222 i
z3 = 0.992182 + -0.732222 i
z4 = 2.384952 + -1.184761 i
z5 = 3.245731 + 0.000000 i
(base) a13687303@ametista10:~/fiscomp/projeto-1/tarefa-6$ ./tarefa-6-13687303.exe
Digite o valor de N: 6
z1 = 2.600468 + 1.040042 i
z2 = 1.399531 + 1.040042 i
z3 = 0.799063 + -0.000000 i
z4 = 1.399532 + -1.040042 i
z5 = 2.600469 + -1.040042 i
z6 = 3.200937 + 0.000000 i
(base) a13687303@ametista10:~/fiscomp/projeto-1/tarefa-6$

```

8 Tarefa 7

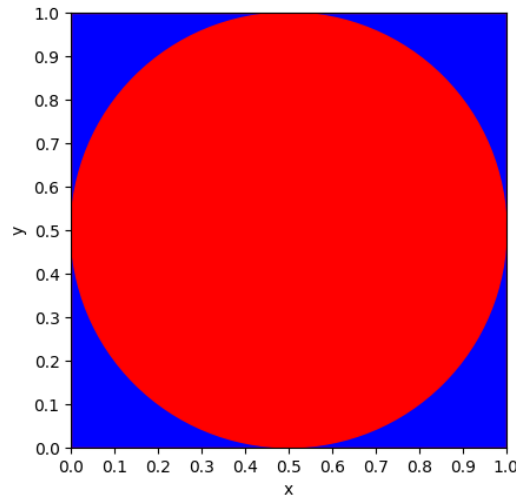
Nessa tarefa, foi criado um programa para calcular o volume de uma d-esfera em um espaço euclidiano de d dimensões. Para isso, foi utilizado o algoritmo de Monte Carlo generalizado para d dimensões. Inicialmente, suponha $d = 2$ para simplificar o raciocínio e considere um espaço euclidiano E^2 dotado de uma métrica euclidiana e um sistema de coordenadas (x, y) com origem $(0, 0)$. Assim, a distância entre um ponto $p_2 = (x_2, y_2)$ e outro ponto $p_1 = (x_1, y_1)$ nesse espaço é dada pela equação 14.

$$f(p_2, p_1) = \sqrt{(x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2} \quad (14)$$

Seja Q um quadrado (em azul) de lado $L = 1$ centrado em $(0,5,0,5)$ e uma circunferência C (em vermelho) de raio $R = 0,5$ inscrita nesse quadrado, ou seja, centrada em $(0,5,0,5)$, conforme mostra a figura 21. Suponha um ponto aleatório $p_n = (x_n, y_n)$ com coordenadas variando de 0 a 1, ou seja, dentro do quadrado. Assim, o ponto p_n está dentro da circunferência se a sua distância em relação ao centro da circunferência é menor que o raio da circunferência, ou seja, se a equação 15 é satisfeita.

$$f((x_n, y_n), (0,5,0,5)) = \sqrt{(x_n - 0,5)^2 + (y_n - 0,5)^2} < 0,5 \quad (15)$$

Figura 21: Geometria do método de Monte Carlo para $d = 2$



Fonte: Autoria própria

A probabilidade P_{circ} de um ponto aleatório p_n cair dentro da circunferência é dada pela equação 16, e no caso onde são gerados N pontos aleatórios p_n com $n \in [1, N]$, a razão entre o número de pontos n_{dentro} que caíram dentro da circunferência e o número de pontos aleatórios gerados n_{total} será proporcional à razão entre a área da circunferência A_{circ} e a área do quadrado A_{quad} . No limite em que $n \rightarrow \infty$, a razão não é apenas proporcional, mas exatamente igual, conforme mostra a equação 17.

$$P_{circ} = \frac{A_{circ}}{A_{quad}} \propto \frac{n_{dentro}}{n_{total}} \quad (16)$$

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \left(\frac{n_{dentro}}{n_{total}} \right) = P_{circ} = \frac{A_{circ}}{A_{quad}} = \frac{\pi R^2}{1} \quad (17)$$

Generalizando para d dimensões, devem ser gerados pontos aleatórios p_n de coordenadas (a_1, a_2, \dots, a_d) em um espaço euclidiano E^d , com um sistema de coordenadas (e_1, e_2, \dots, e_d) de origem no ponto nulo (todas as coordenadas iguais a zero). Nesse

espaço, a distância entre dois pontos $p_2 = (a_1, a_2, \dots, a_d)$ e $p_1 = (b_1, b_2, \dots, b_d)$ é dada pela métrica da equação 18.

$$f(p_2, p_1) = \sqrt{(b_1 - a_1)^2 + (b_2 - a_2)^2 + \dots + (b_d - a_d)^2} \quad (18)$$

Assim, uma d-esfera nesse espaço é um objeto geométrico caracterizado por uma única propriedade: o conjunto de todos os pontos de E^d que distam R do centro da d-esfera. Dessa forma, para um ponto p_n qualquer estar dentro da d-esfera, é necessário que ele satisfaça a equação 19. No caso $d = 2$, uma esfera 2-dimensional é uma circunferência, que é o caso particular utilizado para formular o raciocínio para o método de Monte Carlo. Para d arbitrário, a equação 17 é reformulada considerando uma d-esfera, obtendo a equação 20.

$$f = \sqrt{(a_1 - 0,5)^2 + (a_2 - 0,5)^2 + \dots + (a_d - 0,5)^2} < 0,5 \quad (19)$$

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \left(\frac{n_{dentro}}{n_{total}} \right) = P_{d-esfera} = \frac{V_{d-esfera}}{V_{d-cubo}} = V_{d-esfera} \quad (20)$$

Utilizando essa generalização, foi possível criar o programa desejado, cujo código fonte é exposto na figura 22. A explicação sucinta para o código é dada logo em seguida, no verbete 9.

Figura 22: Código-fonte da tarefa 7

```
1      program EsferasMonteCarlo
2      c      Tarefa 7 - Intro. Fiscomp - Prof. Alcaraz
3      c      Aluno: Breno Henrique Pelegrin da Silva (13687303)
4          write(*,100)
5      100      format("Digite o numero M de pontos aleatórios: ", $)
6          read(*,*) m
7          write(*,101)
8      101      format("Digite o numero d de dimensões: ", $)
9          read(*,*) idim
10         ndentro = 0
11         ntotal = 0
12         do i=1, m, 1
13             dist = 0
14         c      Gera d coordenadas aleatórias e calcula a distância euclidiana
15             do j=1, idim, 1
16                 coord = rand()
17                 dist = dist + (coord - 0.5e0)**2
18             enddo
19         c      Se satisfaz a equação da d-esfera, então caiu dentro da d-esfera
20             if(sqrt(dist) .lt. 0.5e0) then
21                 ndentro = ndentro + 1
22                 ntotal = ntotal + 1
23             else
24                 ntotal = ntotal + 1
25             endif
26         enddo
27         volume = real(ndentro)/ntotal
28         write(*,*) "Volume da d-esfera:", volume
29     end program
```

Verbetes 9: Explicação do código da tarefa 7

Inicialmente, o número de pontos aleatórios M a serem gerados é definido pelo usuário. Em seguida, inicializa-se o número de pontos dentro da d-esfera e pontos totais como zero.

Em seguida, é realizado um laço *do* com o iterador i de 1 a M , para gerar M pontos aleatórios. Dentro desse laço, é realizado outro laço *do*, com o iterador j de 1 a d , para gerar d coordenadas aleatórias para cada ponto i . Cada coordenada é gerada utilizando a função nativa *RAND* do *Fortran 77*, que gera um número aleatório real $x \in [0, 1)$.

Após gerar os números aleatórios, verifica-se se a distância $\sqrt{(x_1 - 0,5)^2 + (x_2 - 0,5)^2 + \dots + (x_d - 0,5)^2} < 0,5$. Se for verdadeiro, então o ponto está dentro da d-esfera, e $ndentro$ e $ntotal$ são incrementados. Caso falso, o ponto está fora da d-esfera, e apenas $ntotal$ é incrementado.

Por fim, o volume é calculado fazendo a razão entre $ndentro$ e $ntotal$ e é mostrado ao usuário. A função *REAL* foi utilizada para converter $ndentro$ em um real e evitar a divisão inteira, já que o resultado da divisão deve ser um real.

8.1 Exemplo de funcionamento

Na figura 23 é exibido um exemplo de funcionamento do programa para 3 dimensões (uma esfera comum), utilizando 10^6 números aleatórios. A fim de observar o tempo de execução do programa para $d = 3$ e $M = 10^6$, um novo programa foi compilado, com as perguntas removidas e a dimensão e quantidade de números aleatórios inseridos diretamente no código. A entrada/saída para esse programa, com seu tempo de execução mensurado pelo comando *time* do *Linux*, é exibido na figura 24.

Figura 23: Entrada e saída do terminal para a tarefa 7 para $N = 10^6$ e $d = 3$

```
fiscomp: ssh a13687303@basalto.ifsc.usp.br
(base) a13687303@ametista10:~/fiscomp/projeto-1/tarefa-7$ ./tarefa-7-13687303.exe
Digite o numero M de pontos aleatórios: 1000000
Digite o numero d de dimensões: 3
Volume da d-esfera: 0.524080992
(base) a13687303@ametista10:~/fiscomp/projeto-1/tarefa-7$
```

Figura 24: Tempo de execução da tarefa 7 para $M = 10^6$ e $d = 3$

```
tarefa-7: ssh a13687303@basalto.ifsc.usp.br
a13687303@ametista10:~/fiscomp/projeto-1/tarefa-7$ time ./d3-m1e6.exe
Volume da d-esfera: 0.524080992

real    0m0,034s
user    0m0,033s
sys      0m0,000s
a13687303@ametista10:~/fiscomp/projeto-1/tarefa-7$
```

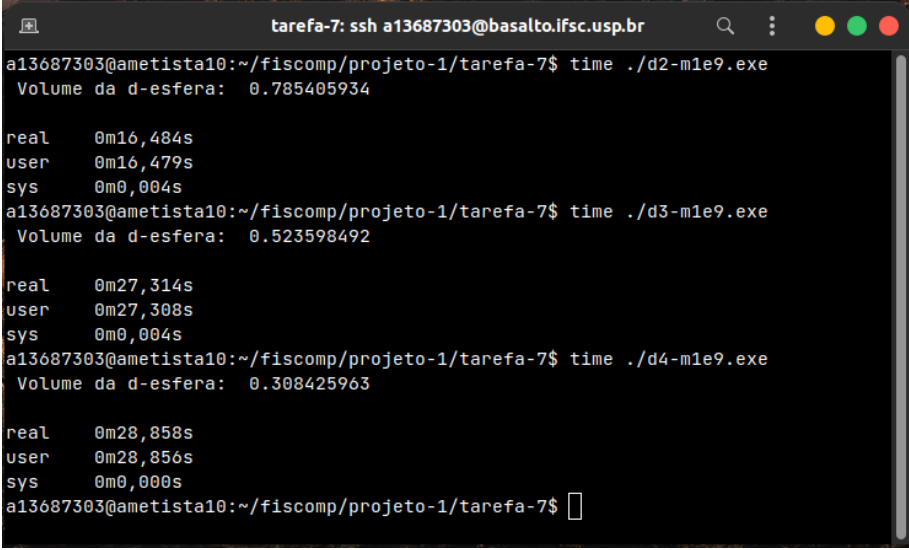
8.2 Testes para $d = 2, 3, 4$

O programa foi testado para d de 2 a 4, com o tempo de execução medido utilizando o comando *time* do *Linux* e os resultados para os volumes foram comparados com a expressão 21, a fim de verificar se estão corretos. Para os testes, as perguntas ao usuário foram removidas do código e a dimensão e quantidade de números aleatórios foram definidas diretamente no código.

As entradas/saídas do terminal para $d = 2, 3, 4$ com $M = 10^9$ (1 bilhão de números aleatórios) são exibidas na figura 25. Note que, na figura, os programas *d2-m1e9.exe*, *d3-m1e9.exe* e *d4-m1e9.exe* representam os casos $d = 2, 3, 4$, respectivamente.

$$V_d = \frac{\pi^{\frac{d}{2}} R^d}{\Gamma(\frac{d}{2} + 1)} \quad (21)$$

Figura 25: Entrada e saída do terminal para os testes da tarefa 7 com $M = 10^9$



```

tarefa-7: ssh a13687303@basalto.ifsc.usp.br
a13687303@ametista10:~/fiscomp/projeto-1/tarefa-7$ time ./d2-m1e9.exe
Volume da d-esfera: 0.785405934

real    0m16,484s
user    0m16,479s
sys      0m0,004s
a13687303@ametista10:~/fiscomp/projeto-1/tarefa-7$ time ./d3-m1e9.exe
Volume da d-esfera: 0.523598492

real    0m27,314s
user    0m27,308s
sys      0m0,004s
a13687303@ametista10:~/fiscomp/projeto-1/tarefa-7$ time ./d4-m1e9.exe
Volume da d-esfera: 0.308425963

real    0m28,858s
user    0m28,856s
sys      0m0,000s
a13687303@ametista10:~/fiscomp/projeto-1/tarefa-7$ 

```

Observando a figura 25, é possível concluir que o programa executa em um tempo razoável para 1 bilhão de pontos. No caso $d = 2$, executou em 16,5 s, para $d = 3$ em 27,3 s e para $d = 4$ em 28,8 s. A comparação dos resultados obtidos com a equação 21 é feita na tabela 1, onde são calculadas as variações percentuais entre os valores dos dois métodos, utilizando a equação 22. Ao observar a tabela 21, nota-se que a variação percentual entre os dois métodos é da ordem de 0,001 a 0,0001 %, então eles fornecem resultados praticamente iguais quando $M = 10^9$.

$$var\%(a, b) = 100 \cdot \frac{\max(a, b) - \min(a, b)}{\max(a, b)} \quad (22)$$

Vale notar que, ao reduzir M para 10^6 , conforme visto no exemplo da figura 24 para $d = 3$, o tempo de execução é extremamente baixo, na ordem de 0,01 s, ou seja, se o

usuário aceitar perder precisão, o programa pode executar de maneira extremamente rápida.

Tabela 1: Comparação entre Monte Carlo e expressão analítica do volume

d	Monte Carlo	Analítica	Variação percentual
2	0,785405934	0,785398185	0,001%
3	0,523598492	0,523598790	0,0001%
4	0,308425963	0,308425158	0,0003%

Além de os dois métodos serem muito próximos, observa-se que seus resultados também são razoáveis, pois, para $d = 2$ e $d = 3$, dimensões nas quais conhecemos o volume da d-esfera, os resultados são muito próximo das expressões conhecidas para essas dimensões, conforme é exposto abaixo.

$$V_2 = \pi(0,5)^2 = 0,785398163$$

$$V_3 = \frac{4}{3}\pi(0,5)^3 = 0,523598775$$

9 Tarefa 8

Nessa tarefa, foi criado um programa que, dado o raio R e a dimensão d , calcula o volume de uma d-esfera em $2, 3, \dots, d$ dimensões utilizando a expressão analítica da equação 23 e salva os volumes calculados em um arquivo de saída “*dimensoes-esferas*”. Algumas propriedades da função $\Gamma(x)$ foram providenciadas no enunciado da tarefa: $\Gamma(\frac{1}{2}) = \sqrt{\pi}$, $\Gamma(1) = 1$ e $\Gamma(x+1) = x\Gamma(x)$.

$$V_d = \frac{\pi^{\frac{d}{2}} R^d}{\Gamma(\frac{d}{2} + 1)} \quad (23)$$

Na expressão da equação 23, note que no denominador há $\Gamma(\frac{d}{2} + 1)$. Como $\Gamma(x+1) = x\Gamma(x)$, então temos que $\Gamma(\frac{d}{2} + 1) = \frac{d}{2}\Gamma(\frac{d}{2})$. Vamos chamar a expressão obtida de uma função da dimensão, $f(d) = \frac{d}{2}\Gamma(\frac{d}{2})$. Para $d = 0$, $f(d)$ não está definida, pois $\Gamma(0)$ diverge para infinito.

Todavia, como $\frac{d}{2}\Gamma(\frac{d}{2}) = \Gamma(\frac{d}{2} + 1)$, então pode-se considerar que $f(0) = \Gamma(\frac{0}{2} + 1) = \Gamma(1) = 1$. Assim, temos a condição inicial da função, já que não existe $d < 0$, e eliminamos a inconsistência da função para $d = 0$. Analisando os valores de $f(d)$ para $d = 1, 2, \dots, n$, é possível obter uma relação de recorrência para $f(d)$, expressa na equação 24.

$$f(0) = \Gamma\left(\frac{0}{2} + 1\right) = 1$$

$$f(1) = \frac{1}{2}\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \frac{1}{2}\sqrt{\pi}$$

$$f(2) = \frac{2}{2}\Gamma\left(\frac{2}{2}\right) = \frac{2}{2}f(0)$$

$$f(3) = \frac{3}{2}\Gamma\left(\frac{3}{2}\right) = \frac{3}{2}\Gamma\left(\frac{1}{2} + 1\right) = \frac{3}{2}\left[\frac{1}{2}\Gamma\left(\frac{1}{2}\right)\right] = \frac{3}{2}f(1)$$

$$f(d) = \frac{d}{2}f(d-2), \text{ para } d \geq 2, \text{ com } f(0) = 1 \text{ e } f(1) = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \quad (24)$$

Dessa forma, como a relação de recorrência possui condições iniciais e condição de parada bem definidas, o problema do cálculo do volume d-dimensional utilizando a expressão analítica pode ser reduzido a uma simples recursão, que pode ser transformada em um laço de repetição. A partir disso, escreveu-se o código-fonte do programa, exibido na figura 26. Uma explicação sucinta do código é exposta no verbete 10.

Figura 26: Código-fonte da tarefa 8

```
1      program EsferaGamma
2      c      Tarefa 7 - Intro. Fiscomp - Prof. Alcaraz
3      c      Aluno: Breno Henrique Pelegrin da Silva (13687303)
4      c      Como não é permitido usar alocação dinâmica, então
5      c      define-se um valor máximo de tamanho para o vetor.
6          parameter(maxdim=1000)
7          dimension vetor(0:maxdim)
8          pi = 4.0e0*atan(1.0e0)
9      c      Define os valores iniciais da função gamma(d/2 + 1)
10     c      do denominador da equação de volume
11         vetor(0) = 1
12         vetor(1) = 0.5e0*sqrt(pi)
13         open(unit=50, file='dimensoes-esferas', status='new')
14         write(*,100)
15     100     format("Digite o numero de dimensões d e o raio R: ", $)
16         read(*,*) idim, r
17     c      O exercício pede para escrever apenas os volumes 2,3,...,d no
18     c      arquivo, então d = 0 e d = 1 não serão escritos no arquivo.
19         if(idim .ge. 2 .and. idim .le. maxdim) then
20             do i=2, idim, 1
21                 vetor(i) = (i/2.0e0)*vetor(i-2)
22                 write(50, *) i, (pi**(i/2.0e0) * r**i)/vetor(i)
23             enddo
24         else if (idim .eq. 0) then
25             write(*,*) "Volume:", vetor(0)
26         else if (idim .eq. 1) then
27             write(*,*) "Volume:", vetor(1)
28         else if (idim .lt. 0) then
29             write(*,*) "Erro: Não existe volume negativo."
30             call exit()
31         else if (idim .gt. maxdim) then
32             write(*,*) "Erro: A máxima dimensão suportada é ", maxdim
33             call exit()
34         endif
35         close(unit=50)
36     end program
```

Verbetes 10: Explicação do código da tarefa 8

Inicialmente, define-se um parâmetro *maxdim*, que representará a máxima dimensão suportada pelo programa. Esse parâmetro é necessário pois não é permitido utilizar alocação dinâmica de vetores, então o vetor utilizado para a recursão precisa ser alocado de maneira estática previamente. Após, armazena-se os valores iniciais de $f(0)$ e $f(1)$ em *vetor(0)* e *vetor(1)*, define-se o valor da constante π e é aberto o arquivo “*dimensoes-esferas*” utilizando a flag *STATUS='new'*, pois é um arquivo de saída que não deveria existir antes da execução do programa.

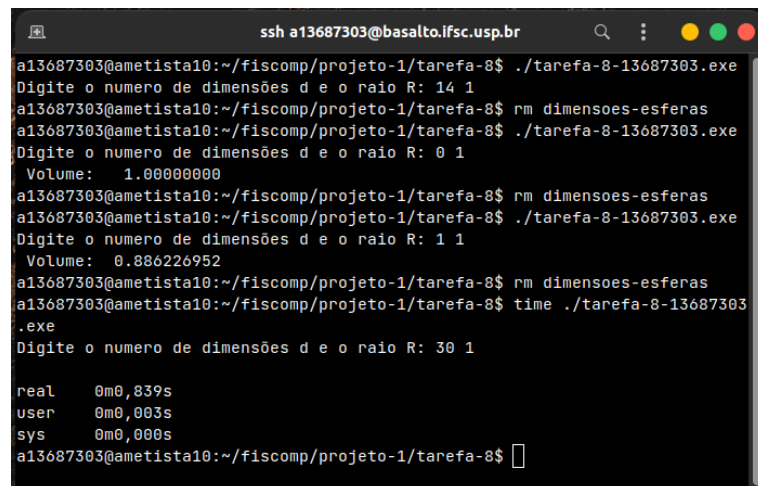
Após, é perguntado ao usuário a dimensão d e o raio R . Se $d > \text{maxdim}$, o programá exibirá uma mensagem de erro e irá terminar. Se d for menor que 0, o programa também irá mostrar um erro e terminar, pois não existe d -esfera com d negativo. Para terminar o programa em caso de erros, foi utilizada a subrotina *exit* nativa do *Fortran 77*, quem é responsável por fechar todas as unidades, limpar a memória e encerrar o programa.

Se $d = 0$ ou $d = 1$, o programa mostra o volume na tela e encerra, mas não escreve nada no arquivo, pois foi solicitado no enunciado da tarefa para imprimir apenas os valores para $2, 3, \dots, d$ dimensões. Caso $d \geq 2$, o algoritmo recurso será executado utilizando um laço *do* com o contador i de 2 a d e passo 1, para calcular os volumes de 2 a d . A cada i , é calculado o volume fazendo $V_i = \frac{\pi^{\frac{d}{2}} R^d}{\frac{d}{2} \text{vetor}(i-2)}$, e então ele é escrito no arquivo “*dimensoes-esferas*”, ao lado do contador i para graficar V em função de i posteriormente.

9.1 Exemplo de funcionamento e análise gráfica

Na figura 27 é exibido um exemplo de entrada/saída do terminal para o programa da tarefa 8, e na figura 28, é exibido o conteúdo do arquivo de saída “*dimensoes-esferas*” para $d = 14$ e $R = 1$. Note que, no último comando do terminal, foi feito um teste de tempo de execução do programa utilizando o comando *time*, sendo possível observar que o programa para a função analítica executa extremamente mais rápido que o programa da Tarefa 7. Na figura 29, é exibido o gráfico dos volumes em função da dimensão, elaborado no *xmgrace* utilizando os dados do arquivo de saída.

Figura 27: Entrada e saída do terminal para a tarefa 8



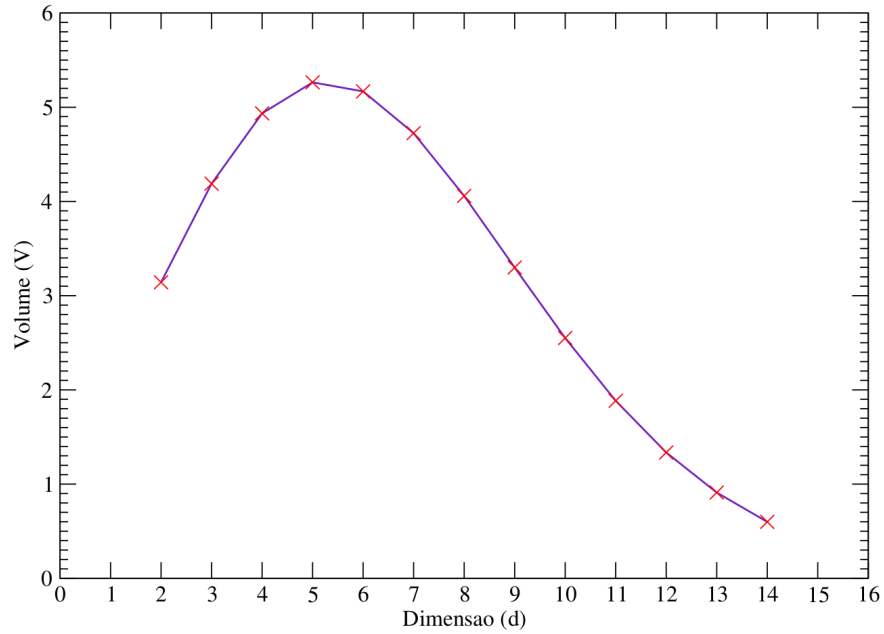
```
ssh a13687303@basalto.ifsc.usp.br
a13687303@ametista10:~/fiscomp/projeto-1/tarefa-8$ ./tarefa-8-13687303.exe
Digite o numero de dimensões d e o raio R: 14 1
a13687303@ametista10:~/fiscomp/projeto-1/tarefa-8$ rm dimensoes-esferas
a13687303@ametista10:~/fiscomp/projeto-1/tarefa-8$ ./tarefa-8-13687303.exe
Digite o numero de dimensões d e o raio R: 0 1
Volume: 1.00000000
a13687303@ametista10:~/fiscomp/projeto-1/tarefa-8$ rm dimensoes-esferas
a13687303@ametista10:~/fiscomp/projeto-1/tarefa-8$ ./tarefa-8-13687303.exe
Digite o numero de dimensões d e o raio R: 1 1
Volume: 0.886226952
a13687303@ametista10:~/fiscomp/projeto-1/tarefa-8$ rm dimensoes-esferas
a13687303@ametista10:~/fiscomp/projeto-1/tarefa-8$ time ./tarefa-8-13687303
.exe
Digite o numero de dimensões d e o raio R: 30 1

real    0m0,839s
user    0m0,003s
sys      0m0,000s
a13687303@ametista10:~/fiscomp/projeto-1/tarefa-8$
```

Figura 28: Arquivo de saída da tarefa 8

1	2	3.14159274
2	3	4.18879032
3	4	4.93480253
4	5	5.26378918
5	6	5.16771317
6	7	4.72476625
7	8	4.05871248
8	9	3.29850912
9	10	2.55016422
10	11	1.88410401
11	12	1.33526301
12	13	0.910628915
13	14	0.599264622

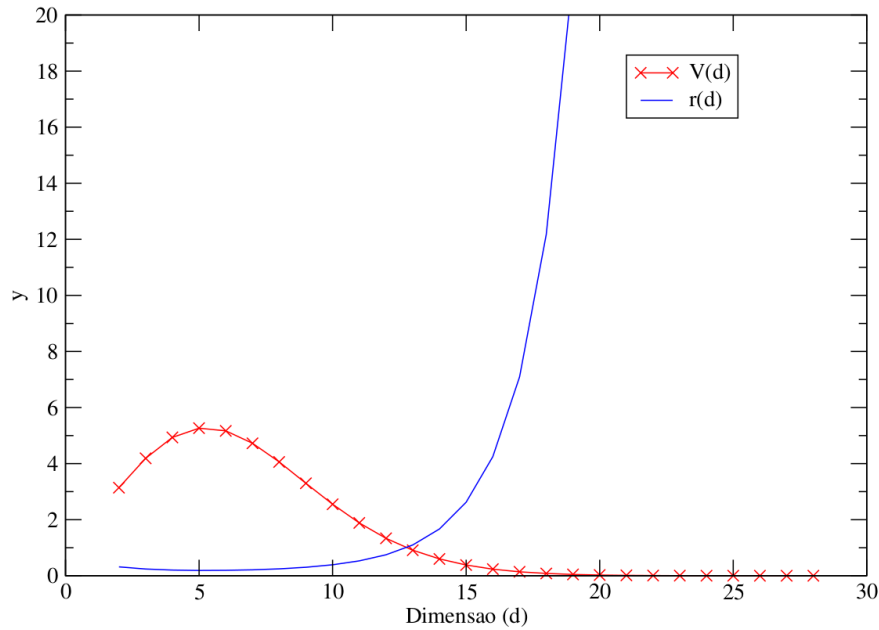
Figura 29: Gráfico do volume em função da dimensão



9.2 Pergunta A

Se um cubo d -dimensional tem volume $1m^d$, a razão r_d entre o volume do d -cubo e da d -esfera em uma dimensão d arbitrária, dada pela equação 25, mede quantas vezes o volume do d -cubo é maior que o volume da d -esfera. Calculando essa razão para d de 2 a 50 e graficando os resultados no *xmgrace*, obtém-se o gráfico da figura 30. Na figura, o eixo y representa o valor de V_d e r_d .

$$r_d = \frac{1}{V_d} \quad (25)$$

Figura 30: Gráfico de V_d e r_d em função da dimensão

A partir do gráfico, é possível observar que, quando $d \rightarrow \infty$, a razão $r_d \rightarrow \infty$, ou seja, o volume do d-cubo torna-se cada vez maior que o volume da d-esfera. Isso se deve ao fato de que, quanto maior a dimensão, mais difícil é um ponto do espaço satisfazer a equação da d-esfera, então o volume torna-se cada vez mais próximo de zero.

$$\lim_{d \rightarrow \infty} r_d = +\infty$$

$$\lim_{d \rightarrow \infty} V_d = 0$$

9.3 Pergunta B

O número de Avogadro N_A é um fator de conversão entre o microscópico e o macroscópico: ele pode ser definido como a quantidade de átomos de um elemento necessária para que a massa em gramas de todos os átomos seja numericamente igual à massa atômica de um átomo individual, assim, 1 mol de uma substância é a quantidade de átomos necessários para transformar x unidades de massa atômica em x gramas.

Se um volume macroscópico típico d-dimensional é 1 mm^d (ou seja, 10^{-3d}) e o volume de um átomo d-dimensional é \AA^d (ou seja, 10^{-10d}), então o número de Avogadro nessa dimensão será a razão entre o volume macroscópico e o microscópico, como mostra a equação 26. Assim, para $d = 3$, temos que $N_A = 10^{21}$, que está próximo do número esperado, $6,02 \times 10^{23}$.

$$N_A = \frac{10^{-3d}}{10^{-10d}} = 10^{7d} \quad (26)$$