

# Fundamentos Computacionais de Simulações em Química

Leandro Martínez

leandro@iqm.unicamp.br

## Soluções de atividades selecionadas

### Atividade 6

```
program at6
  integer :: i, j
  i = 1
  do while( i > 0 )
    j = i
    i = i + 1
  end do
  write(*,*) ' Greatest integer = ', j
end program at6
```

Comentários: O programa vai naturalmente ser mais rápido se, em lugar de começar com  $i=1$ , começarmos com um valor próximo do maior inteiro. Aqui são definidas duas variáveis inteiras,  $i$  e  $j$ , sendo que  $j$  assume o valor de  $i$  *antes* de que este seja modificado. Assim, quando o  $i$  ultrapassar o maior inteiro representável, e se tornar negativo, o *loop* termina e  $j$  preserva o valor anterior à última modificação.

### Atividade 14

O loop do programa que propaga as concentrações usando a discretização das equações diferenciais deve ser algo como:

```
do i = 1, nsteps
  CA = CA - k1*CA*dt + km1*CB*dt ! Concentration of A
  CB = CB + k1*CA*dt - km1*CB*dt ! Concentration of B
  error = ( CA + CB ) - ( CA0 + CB0 ) ! Testing balance of mass
  time = time + dt
  write(*,*) time, CA, CB, error
end do
```

Dentro deste loop, deve ser adicionado um teste sobre o erro, que deve sair do loop e escrever uma mensagem de erro caso a diferença da soma das concentrações com relação às concentrações iniciais seja muito grande:

```
...
write(*,*) time, CA, CB, error
if ( error > 1.d-3 ) then
  write(*,*) ' ERROR: Balance of mass failed. error = ', error
  exit
end if
...
```

O `exit` acima vai terminar o loop, e o programa termina depois disto. Poderíamos, também, parar o programa diretamente, usando `stop`. No exemplo, escolheu-se um erro de  $10^{-3}$  como erro máximo tolerável. Naturalmente, o erro máximo tolerável depende do problema.

## Atividade 18

No código abaixo, foram introduzidas duas variáveis, `i` e `ntrial`, e o loop foi modificado para dar no máximo `ntrial` voltas. Além disso, removemos a parte do código que parava o programa no caso de aumento do valor da função. Compare com o programa `min1`.

```
program atividade18
  implicit none
  integer :: i, ntrial
  double precision :: x, dfdx, deltax, deltaf, xbest, fbest
  deltax = 1.1d0 ! Step size
  x = 10.d0 ! Initial guess
  fbest = x**2
  xbest = x ! Save best point
  write(*,*) ' Initial point: '
  write(*,*) x, x**2
  ntrial = 1000
  do i = 1, ntrial
    ! Move x in the descent direction, with step deltax
    dfdx = 2.d0*x ! Computing the derivative
    x = x - dfdx * deltax ! Move x in the -f' direction
    ! Test new point
    deltaf = x**2 - fbest
    ! Write current point
    write(*,*) x, x**2, deltaf
    ! If the function decreased, save best point
    if ( deltaf < 0 ) then
      xbest = x
      fbest = x**2
    end if
  end do
end program atividade18
```

[\[Clique para baixar o código\]](#)

## Atividade 21

```
program min2
  implicit none
  double precision :: x, dfdx, deltax, f
  double precision :: xtrial, ftrial
  deltax = 0.1d0 ! Step size
  x = 10.d0 ! Initial guess
  f = x**2
  write(*,*) ' Initial point: '
```

```

write(*,*) x, f
write(*,*) ' x, f, deltax, dfdx : '
do
    ! Move x in the descent direction, with step deltax
    dfdx = 2.d0*x ! Computing the derivative
    ! If the derivative is very small, stop
    if ( dabs(dfdx) < 1.d-10 ) then
        write(*,*) ' Critical point found. '
        write(*,*) ' x = ', x, ' f = ', f, ' dfdx = ', dfdx
        stop
    end if
    ! Computing trial point
    xtrial = x - deltax * dfdx ! Move x in the -f' direction
    ! Compute function value at trial point
    ftrial = xtrial**2
    ! If the function decreased, accept trial point and increase step
    if ( ftrial < f ) then
        x = xtrial
        f = ftrial
        deltax = deltax * 2.d0
        write(*,*) ' Accepted: ', x, f, deltax, dfdx
    else
        deltax = deltax / 2.d0
        write(*,*) ' Not accepted: ', xtrial, ftrial, deltax, dfdx
    end if
end do
end program min2

```

[\[Clique para baixar o código\]](#)

## Atividade 29

Nesta atividade as rotinas de cálculo da função e do gradiente são separadas do programa principal. Há alguns detalhes importantes: Os vetores são declarados, aqui, com dimensões *fixas* no programa principal, por exemplo, `x(1000)`. Nas subrotinas, declaramos os vetores usando, por exemplo, `x(n)`, sendo `n` um parâmetro de entrada da subrotina. Esta declaração, dentro da subrotina é, na verdade, apenas um lembrete de quantos elementos do vetor vão se usados. O que o programa passa para a subrotina é apenas o *endereço na memória* do vetor. Isto é, o programa principal diz à subrotina: “trabalhe com este vetor, está neste lugar na memória”. O tamanho efetivo do vetor é aquele declarado no programa principal, e a declaração na subrotina é, na verdade, redundante. De fato, a mesma declaração `x(n)` poderia ser feita usando `x(1)`, ou mesmo `x(*)`. Note, também, que como critério de parada usamos o quadrado da norma do gradiente.

```

program ativ29
    implicit none
    integer :: i, n

```

```

double precision :: x(1000), g(1000), deltax, f
double precision :: xtrial(1000), ftrial, gnorm
deltax = 0.1d0 ! Step size
! Number of variables
n = 1000
! Initial guess
do i = 1, n
    x = 10.d0
end do
call compute_f(n,x,f)
write(*,*) ' f at initial point: ', f
do
    ! Compute the gradient
    call compute_g(n,x,g)
    ! If the derivative is very small, stop
    gnorm = 0.d0
    do i = 1, n
        gnorm = gnorm + g(i)**2
    end do
    if ( gnorm < 1.d-10 ) then
        write(*,*) ' Critical point found. '
        write(*,*) ' f = ', f, ' gnorm = ', gnorm
        stop
    end if
    ! Computing trial point
    do i = 1, n
        xtrial(i) = x(i) - deltax * g(i) ! Move x in the -f' direction
    end do
    ! Compute function value at trial point
    call compute_f(n,xtrial,ftrial)
    ! If the function decreased, accept trial point and increase step
    if ( ftrial < f ) then
        do i = 1, n
            x(i) = xtrial(i)
        end do
        f = ftrial
        deltax = deltax * 2.d0
        write(*,*) ' Accepted: ', f, deltax
    else
        deltax = deltax / 2.d0
        write(*,*) ' Not accepted: ', ftrial, deltax
    end if
end do
end program ativ29
!
! Subroutine that computes the function value

```

```

!
subroutine computef(n,x,f)
  implicit none
  integer :: i, n
  double precision :: x(n), f
  f = 0.d0
  do i = 1, n
    f = f + x(i)**2
  end do
end subroutine computef
!
! Subroutine that computes the gradient
!
subroutine computeg(n,x,g)
  implicit none
  integer :: i, n
  double precision :: x(n), g(n)
  do i = 1, n
    g(i) = 2.d0*x(i)
  end do
end subroutine computeg

```

[\[Clique para baixar o código\]](#)

## Atividade 34

```

program randomsearch2
  implicit none
  integer :: i, ntrial
  double precision :: random, x(2), f, fbest, xbest(2)
  ! Test 10000 points
  ntrial = 10000
  call random_number(random)
  xbest(1) = -10.d0 + 20.d0*random
  call random_number(random)
  xbest(2) = -10.d0 + 20.d0*random
  call computef(xbest,fbest)
  do i = 1, ntrial
    call random_number(random)
    x(1) = xbest(1) + 1.d-3*(-1.d0 + 2.d0*random)
    call random_number(random)
    x(2) = xbest(2) + 1.d-3*(-1.d0 + 2.d0*random)
    call computef(x,f)
    if ( f < fbest ) then

```

```

        fbest = f
        xbest(1) = x(1)
        xbest(2) = x(2)
        write(*,*) i, ' New best point: ', x(1), x(2), ' f = ', f
    end if
end do
write(*,*) ' Best point found: ', xbest(1), xbest(2), ' f = ', fbest
end program randomsearch2
!
! Subroutine that computes the function value
!
subroutine computef(x,f)
    implicit none
    double precision :: x(2), f
    f = x(1)**2 + x(2)**2
end subroutine computef

```

[\[Clique para baixar o código\]](#)