7600017 - Introdução à Física Computacional - Projeto 2

Raphael Vieira Moreira da Serra

Setembro de 2025

Primeira Tarefa

Na primeira tarefa, deveríamos implementar um Gerador Congruente Linear cuja fórmula é a seguinte:

$$x_{n+1} = (ax_n + b)\ mod\ m, n = 1, 2, ...$$

Posteriormente, deveríamos testar a distribuição calculando seus momentos. Eles são calculados da seguinte forma:

$$\langle x^n \rangle = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^{N} (X_k - c)^n$$

O código em Fortran foi da seguinte forma:

```
REAL FUNCTION N_MEDIA(soma, N, rmedia, iord, NUM_RAND)
        INTEGER NUM_RAND(1600,2)
        soma = 0
        DO i = 1, N
          soma = soma + ((NUM_RAND(i,2) - rmedia))**iord
        END DO
        N_MEDIA = soma/N
END FUNCTION

PROGRAM LCG
INTEGER NUM_RAND(1600, 2)
REAL N_MEDIA

WRITE(*,*) 'Digite A'
READ(*,*) iA
WRITE(*,*) 'Digite B'
READ(*,*) iB
WRITE(*,*) 'Digite M'
READ(*,*) M
```

```fortran
WRITE(*,*) 'Digite a quantidade de repetições N'
READ(*,*) N
WRITE(*,*) 'Digite a seed'
READ(*,*)iseed

NUM_RAND(1, 1) = 1
NUM_RAND(1, 2) = iseed

DO i=2,N
  NUM_RAND(i, 1) = i
  NUM_RAND(i, 2) = MOD((iA*(NUM_RAND((i-1), 2)) + iB),M)
END DO

DO i=1,N
  WRITE(*,*) NUM_RAND(i,1), NUM_RAND(i,2)
END DO

!Média
soma = 0
DO i=1,N
  soma = soma + NUM_RAND(i,2)
END DO
rmedia = soma / N
WRITE(*,*) 'A média é: ', rmedia

!VariÂncia
WRITE(*,*)'A variância é: ', N_MEDIA(soma, N, rmedia, 2, NUM_RA
&ND)
!Assimetria
WRITE(*,*)'O terceiro momento é: ', N_MEDIA(soma, N, rmedia, 3,
&NUM_RAND)
!Curtose
WRITE(*,*)'O quarto momento é: ', N_MEDIA(soma, N, rmedia, 4, NU
&M_RAND)
END
```

Segunda Tarefa

A segunda tarefa tinha como objetivo simular andarilhos aleatórios em uma única dimensão. Na primeira parte, com probabilidades iguais e, na segunda, com probabilidadades diferentes.

O código da primeira parte foi da seguinte forma:

```fortran
REAL FUNCTION N_MEDIA(soma, N, rmedia, iord, NUM_RAND)
      INTEGER NUM_RAND(1600,2)
```

```
        soma = 0
        DO i = 1, N
          soma = soma + ((NUM_RAND(i,2) - rmedia))**iord
        END DO
        N_MEDIA = soma/N
END FUNCTION

PROGRAM ANDARILHOS
INTEGER IP(1600, 2), MN(1000,2)
INTEGER arquivo
REAL N_MEDIA

arquivo = 1

OPEN(UNIT=arquivo, FILE='dados.dat', STATUS='UNKNOWN')

WRITE(*,*) 'Quantos andarilhos?'
READ(*,*) M
WRITE(*,*) 'Quantidade de passos?'
READ(*,*) N

!Organização da matriz de passos
DO i = 1, M
  IP(i,1) = i
END DO
!Fim da Organização

!Cálculo dos passos
DO i = 1, M
  k = 0
  DO j = 1, N
    r = rand()
    IF (r .GT. 0.5) THEN
            k = k + 1
    ELSE
            k = k - 1
    END IF
  END DO
  IP(i, 2) = k
END DO
!Fim cálculo

!Calculor o valor máximo e mínimo
MAXIMA = IP(1,2)
DO i = 1, M
  IF (MAXIMA .LT. IP(i,2)) THEN
```

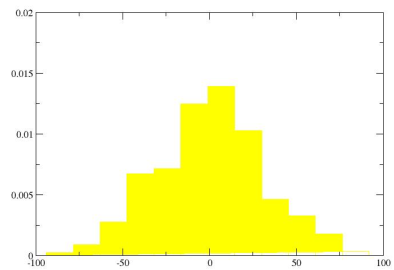
```
        MAXIMA = IP(i,2)
  ELSE
  END IF
END DO

MINIMA = IP(1,2)
DO i = 1, M
  IF (MINIMA .GT. IP(i,2)) THEN
        MINIMA = IP(i,2)
  ELSE
  END IF
END DO
!Fim cálculo

!Criação da função N(x)
DO i = MINIMA, MAXIMA
  k = 0
  DO j = 1, M
    IF (i .EQ. IP(j,2)) THEN
          k = k + 1
    ELSE
    END IF
  END DO
  MN(i+1-MINIMA,1) = i
  MN(i+1-MINIMA,2) = k
END DO
!Fim da criação

rmedia = N_MEDIA(soma, M, 0.0, 1, IP)
WRITE(*,*) 'A média é: ', N_MEDIA(soma, M, 0.0, 1, IP)
WRITE(*,*) 'A variância é: ', N_MEDIA(soma, M, rmedia, 2, IP)

DO i=1,M
  WRITE(arquivo,*)IP(i,1), IP(i,2)
END DO
CLOSE(UNIT=arquivo)
!Fim Debugging
END PROGRAM
```

Para a segunda parte, foi somente alterado a condição do loop contido nas linhas 33 até 44:

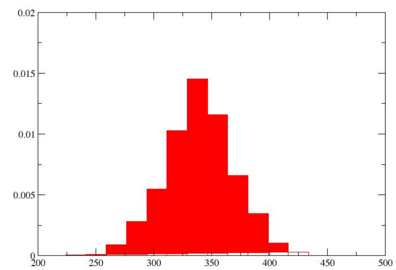
```
DO i = 1, M
  k = 0
  DO j = 1, N
    r = rand()
```

```
      IF (r .GT. prob) THEN
              k = k + 1
      ELSE
              k = k - 1
      END IF
    END DO
    IP(i, 2) = k
  END DO
```

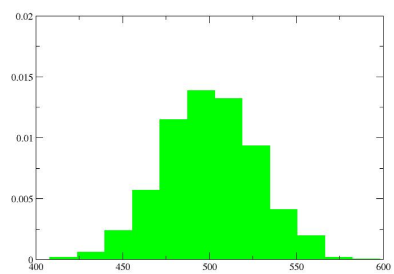
Os histogramas mapeando quantos andarilhos existem por cada posição foram os seguintes:



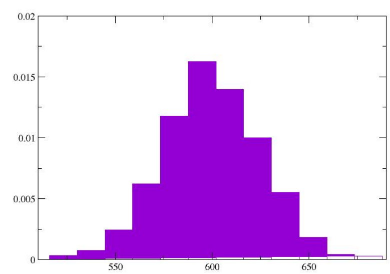
Histograma para $p = \frac{1}{2}$. $\langle x \rangle = 0.9$ e $\langle x^2 \rangle = 959.7$.



Histograma para $p = \frac{1}{3}$. $\langle x \rangle = 339$ e $\langle x^2 \rangle = 888$.



Histograma para $p = \frac{1}{4}$. $\langle x \rangle = 500$ e $\langle x^2 \rangle = 758$.



Histograma para $p = \frac{1}{5}$. $\langle x \rangle = 600$ e $\langle x^2 \rangle = 662$.

As curvas tem comportamento Gaussiano como seria esperado pelo Teorema do Limite Central.

Terceira Tarefa

A fim de resolver o problema de andarilhos bidimensionalmente, eu generalizei a lógica da segunda tarefa usando números complexos. Assim:

Resultado de rand()	Soma
r <0.25	+1
0.25 <r <0.5	+i
0.5 <r <0.75	-1
0.75 <r	-i

A implementação foi da seguinte forma:

```
REAL FUNCTION N_MEDIA(N, rmedia, iord, NUM_RAND)
        COMPLEX NUM_RAND(1600,8)
        soma = 0
        DO i = 1, N
          soma = soma + ((NUM_RAND(i,8) - rmedia))**iord
        END DO
        N_MEDIA = soma/N
END FUNCTION

COMPLEX FUNCTION WALK(inicio)
  COMPLEX inicio
  r = rand()
  IF (r .LT. 0.25) THEN
          WALK = inicio + (1,0)
  ELSE IF (r .LT. 0.5) THEN
          WALK = inicio + (0,1)
  ELSE IF (r. LT. 0.75) THEN
          WALK = inicio + (-1,0)
  ELSE
          WALK = inicio + (0, -1)
  END IF
END FUNCTION

PROGRAM ANDARILHOS_2D
INTEGER arquivo
REAL N_MEDIA
COMPLEX IP(1600, 8)
COMPLEX passo, media, WALK
PARAMETER (N = 1E6)

arquivo = 1

OPEN(UNIT=arquivo, FILE='dados.txt', STATUS='UNKNOWN')
```

```
WRITE(*,*) 'Quantos andarilhos?'
READ(*,*) M

DO i = 1, M
  IP(i,1) = i
END DO

DO i = 1, M
  IP(i,2) = WALK((0,0))
    DO j = 0, 5
    passo = IP(i,2+j)
      DO k = 1, (9*10**j)
        passo = WALK(passo)
      END DO
    IP(i,3+j) = passo
    END DO
END DO

!Média
media = N_MEDIA(M, 0.0, 1, IP)
WRITE(*,*) 'A média é: ', media
!Fim Média

!Debugging
DO i = 1, M
  WRITE(arquivo,*)IP(i,1), IP(i,2), IP(i,3), IP(i,4), IP(i,5),  IP
&(i,6),IP(i,7), IP(i,8)
END DO
!Fim Debugging

CLOSE(UNIT=arquivo)
END PROGRAM
```

Posteriormente, montei um diagrama dos passos em cada geração:

Quarta Geração

A fim de calcular o aumento de entropia, usei-me de células no formato de círculos concêntricos de raio igual a $20n, n \in N, 1 < n < 100$ porque os últimos pontos estavam perto do número 2000. Assim, para descobrir quais pontos estavam em quais células somente seria necessário calcular o módulo do número complexo, dividir ele por 20, pegar a parte inteira da divisão e somar 1. Facilitando a computação da entropia.

A implementação foi:

```
REAL FUNCTION N_MEDIA(N, rmedia, iord, NUM_RAND)
        COMPLEX NUM_RAND(1600,8)
        soma = 0
        DO i = 1, N
          soma = soma + ((NUM_RAND(i,8) - rmedia))**iord
        END DO
        N_MEDIA = soma/N
END FUNCTION

COMPLEX FUNCTION WALK(inicio)
  COMPLEX inicio
  r = rand()
  IF (r .LT. 0.25) THEN
          WALK = inicio + (1,0)
  ELSE IF (r .LT. 0.5) THEN
          WALK = inicio + (0,1)
  ELSE IF (r. LT. 0.75) THEN
          WALK = inicio + (-1,0)
  ELSE
          WALK = inicio + (0, -1)
  END IF
END FUNCTION

PROGRAM ANDARILHOS_2D
INTEGER arquivo
REAL N_MEDIA
REAL ABSOLUTES(1600, 7), CIRCULOS(1600,7), ENTROPIA(1,7)
COMPLEX IP(1600, 8)
COMPLEX passo, media, WALK

WRITE(*,*) 'Quantos andarilhos?'
READ(*,*) M

DO i = 1, M
  IP(i,1) = i
END DO
```

```
DO i = 1, M
  IP(i,2) = WALK((0,0))
    DO j = 0, 5
    passo = IP(i,2+j)
      DO k = 1, (9*10**j)
        passo = WALK(passo)
      END DO
    IP(i,3+j) = passo
    END DO
END DO

!Tomar uma lista de valores absolutos/passo
DO i = 1, M
  DO j = 1, 7
    ABSOLUTES(i, j) = CABS(IP(i, j+1))
  END DO
END DO

!Tomar uma lista de qual círculo contem cada andarilho
DO i = 1, M
  DO j = 1,7
    CIRCULOS(i,j) = INT(ABSOLUTES(i,j)/20)+1
  END DO
END DO

!Cálculo de entropia
DO i = 1,7
vez = 0
  DO j = 1, 100
  counter = 0
    DO k = 1, M
      IF (j .EQ. CIRCULOS(k,i)) THEN
             counter = counter + 1
      ELSE
      END IF
    END DO
  P = counter/M
  IF (P .GT. 0) THEN
    entrop = P * LOG(P)
  ELSE
    entrop = 0
  END IF
  vez = vez + entrop
  END DO
ENTROPIA(1,i) = -vez
```

```fortran
END DO

!Debugging
DO i = 1,M
WRITE(*,*) 'Andarilho número', i
  DO j = 1,7
    WRITE(*,*)ABSOLUTES(i,j)
    WRITE(*,*)CIRCULOS(i,j)
  END DO
END DO

DO i = 1, 7
  WRITE(*,*)ENTROPIA(1,i)
END DO
END PROGRAM
```

Depois, montei um gráfico dos resultados usando o mesmo esquema de cores do mapa.