

Notas Teoria cuantica de campos

Daniel Vazquez Lago

11 de septiembre de 2024

Índice general

Introducción	5
1. Introducción a Fortran	7
1.1. Compilación y ejecución	7
1.2. Formato código fuente	7
1.3. Tipos de datos	8
1.3.1. Parámetros. Variables. Declaración. Asignación.	8
1.3.2. Arrays, subíndices, substrings	8
1.4. Operadores y expresiones	8
1.4.1. Aritméticas	8
1.4.2. Relación y expresiones lógicas	9

Introducción

Usaremos $N = 500$ partículas y una densidad de $0.5 \, N/V^3$. La variación máxima de energía permitida es $1/1000$.

Usaremos la aproximación de Lennard-Jones, hya que es suave, supone interacciones debiles ideales para los gases nobles.

$$v_{ij}(r_{ij}) = 4\epsilon \left[(\sigma/r_{ij})^{12} - (\sigma/r_{ij})^6 \right] \quad (1)$$

“Usar una suma doble para luego dividirlo por dos es para pegarle en la cara”. La parte de los sumatorios debe estar libre de polvo y paja para que corra veloz.

$$t_p = \frac{1}{2} \sum \sum v_{ij} = \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N v_{ij}$$

1

Introducción a Fortran

1.1. Compilación y ejecución

1.2. Formato código fuente

El formato de código fuente puede ser libre o fijo, y no deben mezclarse ambos en un fichero de código. El código fijo se considera obsoleto en Fortran95. En cualquier caso existen ciertas normas básicas y típicas de Fortran, algunas obligatorias, que todavía se mantienen, por lo que es importante mencionarlas. Estas son:

- Las sentencias de un programa se escriben en diferentes líneas.
- La posición de los caracteres dentro de las líneas es significativa.
- Columnas:
 - 1-5. Número de etiqueta (de 1 a 5 dígitos, se usan números usualmente).
 - 6. Carácter de continuación de línea.
 - Resto. Sentencia.
- Comentarios:
 - Las líneas en blanco se ignoran. Hacen más legible el programa.
 - Si el primer carácter de una línea es *, c o C la línea es de comentario.
 - Si aparece el carácter ! en una línea (salvo en la columna 6) lo que sigue es un comentario.
- Una línea puede contener varias sentencias separadas por punto y coma (;), el cual no puede estar en la columna 6. Sólo la primera de estas sentencias podría llevar etiqueta.
- Los espacios en blanco son significativos: **IMPLICIT NONE**, **DO WHILE** (obsoleto), **CASE DEFAULT**. Son opcionales en:
 - Palabras clave dobles que comienzan por **END** o **ELSE**.

- `DOUBLE PRECISION`, `GO TO`, `IN OUT`, `SELECT CASE`.
- El indicador de continuación de una línea es el carácter `&`.

1.3. Tipos de datos

Fortran tiene los siguientes tipos de datos:

- Enteros (`INTEGER`)
- Reales (`REAL`, `DOUBLE PRECISION`)
- Complejos (`COMPLEX`)
- Lógicos (`LOGICAL`)
- Caracteres (`CHARACTER`, `CHARACTER(LEN=n)`, `CHARACTER*n`)

1.3.1. Parámetros. Variables. Declaración. Asignación.

- Un parámetro tiene un valor que no se puede cambiar (`PARAMETER`).
- Una variable puede cambiar su valor cuantas veces sea necesario.
- Por defecto, todas las variables que empiecen por `i, j, k, l, m` o `n` son enteras y las demás reales. Es muy recomendable declarar las variables que se utilicen (la sentencia `IMPLICIT NONE` obliga a declarar todas las variables).

1.3.2. Arrays, subíndices, substrings

- Un array se define mediante su nombre y dimensiones (cantidad y límites).
- Por defecto el primer índice es 1. En otro caso hay que indicar el rango `i1:i2`.
- Los elementos del array se acceden por sus índices entre paréntesis.

1.4. Operadores y expresiones

1.4.1. Aritméticas

- Los operadores aritméticos son `+`, `-`, `*`, `/`, `**`.
- El orden de prioridades es el mismo que en el álgebra.
- No puede ver operadores seguidos (incorrecto `a*-b`, correcto `a*(-b)`).

1.4.2. Relacion y expresiones lógicas

- Los operadores de expresiones son:

.EQ.	.NE.	.LT.	.LE.	.GT.	.GE.
==	/=	<	<=	>	>=

- Se pueden relacionar expresiones aritméticas con expresiones lógicas y expresiones de caracteres.
- Es recomendable utilizar paréntesis y/o sustituir las expresiones complicadas por combinaciones de expresiones más simples.
- Los operadores lógicos son:

Operador	.NOT.	.AND.	.OR.	.EQV.	.NEQV.
Prioridad	1	2	3	4	4