

# FILOSOFIA DO CURSO: INTRODUÇÃO À FÍSICA COMPUTACIONAL

2022/02

Prof. F. C. Alcaraz

Tecemos aqui alguns pontos que serão importantes neste curso. O objetivo central deste curso é capacitar o estudante para o ataque de problemas físicos mediante a maquinaria numérica computacional.

Já há algum tempo, o entendimento de programação numérica é fundamental para qualquer pessoa que queira produzir ciência e tecnologia. A idéia deste curso é que o aluno aprenda de forma agradável a elaborar um problema físico elaborando-o numericamente (programando um código).

A linguagem de programação que usaremos é a linguagem FORTRAN (FOR— > formulador, TRAN— > tradutor). A razão para uso de tal linguagem é porque a mesma foi idealizada para o uso científico, e possui a mais extensa biblioteca de códigos numéricos para aplicação em ciência.

Existem atualmente várias formulações do FORTRAN com facilidades e versatilidades crescentes (FORTRAN-90, FORTRAN-95, FORTRAN-300). Por ser uma linguagem, o FORTRAN tem uma estrutura gramatical com sintaxe própria. Estas versões mais modernas do FORTRAN vieram da sua base que é o FORTRAN-77. Este seria o equivalente ao "latim", para as línguas latinas.

A experiência que tivemos nas várias vezes que o ministramos este curso (e na idealização original deste curso em 2003) nos recomenda que aprendamos primeiro o FORTRAN-77, com todas as suas regras de sintaxe. Uma vez aprendendo a linguagem poderemos fazer com segurança qualquer programação, notadamente as de cunho científico, mas também outras mais gerais. Mais ainda, uma vez dominando o FORTRAN-77 temos condições, se caso necessitemos um dia, aprendermos outras línguas sem problemas.

**Editor de texto (para escrevermos os programas)**

O Linux tem um editor universal (na realidade vem da versão que originou o Linux - o UNIX) que é o "vi" (de visual). Se quiser aprender vale a pena, tem um pequeno manual na página do Laboratório de Computação-LEF (verso do manual de referência do LINUX).

<http://www.lef.ifsc.usp.br/downloadFile/CartaoRefLinux.pdf>

Um editor mais simples que você pode usar é o "gedit". Para editar um arquivo FORTRAN (de nome primeiro.f) faça: gedit primeiro.f. O fato do nome do arquivo ter no seu final ".f" indica que é um programa FORTRAN, daí o editor coloca cores, evidenciando os comandos do FORTRAN.

### **Como compilar e rodar o seu programa:**

Suponha que seu programa tenha o nome primeiro.f

Você o compila executando: gfortran primeiro.f -o primeiro.exe

(o programa sera compilado e será gerado o arquivo executável: "primeiro.exe")

Para rodar o programa execute: ./primeiro.exe

### **Algumas característica do FORTRAN-77:**

a) Não existe diferença entre letra maiúscula ou minúscula ("case insensitive).

b) Ao escrever o seu código você tem as linhas limitadas a 72 caracteres. Os espaços 1-5 são reservados para anotações, no espaço 6 voce coloca um digito ex, 1, 2 ,...,ou o símbolos como & ou # ou \$ se quiser continuar a linha acima. De 7 a 72 voce escreve os seus comandos.

c) Todo programa termina com os comando "end", que significa que os comandos do seu programa terminou. Os programas podem conter vários comandos "stop" (que para o processamento).

d) Uma linha que se inicia com "c" ou "C" será uma linha de comentário apenas (muito usado para documentar o seu código).

e) Ao longo de uma linha o caracter "!" indica que o que se segue na linha serão apenas comentários (muito útil para comentar seu programa)

e) A estrutura típica de um programa é :

---

### **comandos de declaração de variáveis**

(aqui você informa os tamanhos das suas variáveis para o programa reservar espaço na memória para a compilação do programa (montagem do circuito lógico de programação))

---

### **comandos de leituras de dados**

(ou comentários se usar no início a exclamação "!")

---

### **comandos de execução dos cálculos**

(aqui pode haver subtarefas "subroutines")

---

comando de saída dos dados

---

end

---

## **Constantes e variáveis no FORTRAN**

A unidade mínima nos computadores é o bit, que pode armazenar apenas dois possíveis valores "0" ou "1". Variáveis e constantes de tamanhos maiores são definidas em múltiplos de 8 bits, que chamamos de "byte". Assim uma variável de 1 byte terá que ser escrita no espaço "\_\_\_\_\_". Se quisermos armazenar um inteiro (que pode ser positivo ou negativo), guardamos um bit para o sinal e temos somente os bits restantes (na realidade podemos armazenar os números de -128 a 127).

Os tipos de constantes e variáveis possíveis no FORTRAN são:

#### **inteiras:**

INTEGER\*1 128 a 127

INTEGER\*2 32768 a 32767

INTEGER\*4 2147483648 a 2147483647 (padrão)

INTEGER\*8 -9223372036854775808 a -9223372036854775808

### **reais ou de ponto flutuante**

Preciso simples, 6 casas decimais (padro):

REAL\*4 ou REAL 3.402823E+38 Preciso dupla, 15 casas decimais:

REAL\*8 ou DOUBLE PRECISION

REAL\*16 ou QUADRUPLE PRECISION

### **complexas**

COMPLEX\*8

COMPLEX\*16

COMPLEX\*32

### **caracteres**

character\*n (o inteiro "n" será o número de dígitos da variável character ou "hollerith")

### **SINTAXE DO FORTRAN:**

USAREMOS SEMPRE NESTE CURSO a sintaxe do FORTRAN. Comandos que violem a sintaxe não serão aceitos no curso (como por exemplo o IMPLICIT NONE). Lembrem-se estamos aprendendo o nosso "latim" computacional.

### **A sintaxe do FORTRAN 77:**

As variáveis e constantes devem sempre iniciar por letras. Se a primeira letra estiver no range (i-n) a variável será inteira. Caso esteja no intervalo (a-h) ou (o-z) a variável será real (ou ponto flutuante). O "default" do FORTRAN-77 são inteiros de 4 bytes e reais de 8 bytes (simples precisão). Se as suas variáveis forem desta forma não precisa haver comando de declaração de variáveis no seu código. No caso que você tenha vetores, ou matrizes, variáveis complexas, ou variáveis de caracteres voce então deve declará-las.

### **Veja o Cartão de Referência do FORTRAN-77 -para os demais comandos**

<http://www.lef.ifsc.usp.br/downloadFile/CartaoRefFortran.pdf>

+++++

## RECOMENDAÇÃO PARA UMA BOA PROGRAMAÇÃO EM FORTRAN

Uma parte substancial de suas notas nos relatórios estará atrelada ao fato de você ter feito um bom código:

r1) Usar o menor número de bytes de memória (para o programa ficar mais enxuto). Isto é, as variáveis do tipo: vetores, matrizes, etc, devem ser economizadas.

r2) Deve-se declarar apenas as variáveis que precisam ser declaradas, obedecendo a sintaxe sempre do FORTRAN.

r3) Evitar o uso de comandos condicionais ("IF") desnecessários.

r4) Documentar seu programa de uma forma razoável, sem exageros.

r5) A lógica deve ser a mais efetiva possível, isto é, aquela que utilize o menor número de operações. Consequentemente o programa utilizará menos tempo de processamento.

r6) Quando colocar valores em variáveis reais, ou em constantes, use sempre a terminação "e0" ou "d0", pois não colocando-os você poderá ter, dependendo das circunstâncias, problemas de precisão.

+++++