

Física Computacional

Escuela de Física

M.R.Fulla¹

¹Escuela de Física, Universidad Nacional de Colombia Sede Medellín

marlonfulla@yahoo.com- Oficina:21-408

https://sites.google.com/view/fiscomunalmed/

August 21, 2023

Conjunto de Caracteres de Fortran



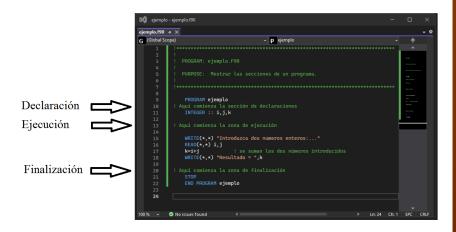
TABLE 2-1 The Fortran character set

Number of symbols	Туре	Values
26	Uppercase letters	A - Z
26	Lowercase letters	a - Z
10	Digits	0 - 9
1	Underscore character	_
5	Arithmetic symbols	+ - * / **
17	Miscellaneous symbols	() . = , ' \$: ! " % & ; < > ? and blank
11	Additional Fortran 2003 symbols	~ \ [] ` ^ { } # and @

Fortran es insensible a letras mayúsculas y minúsculas

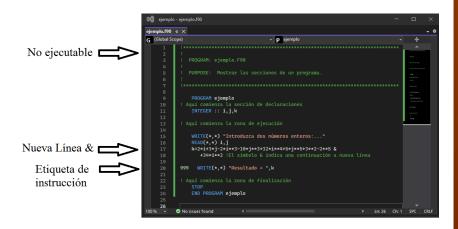
Estructura de un Programa





Estructura de un Programa





Estilos de Programación



- Palabras Reservadas (Keywords): Mayúsculas
- ► Constantes: Mayúsculas (PI)
- ► Variables:Minúsculas
- Nombres de programas y procedimientos: Minúsculas

Tipos de Datos Intrínsecos "Built-in" en FORTRAN



Numéricos

- ► INTEGER
- ► REAL
- ► COMPLEX

Lógicos

► LOGIC

Caracter

► CHARACTER

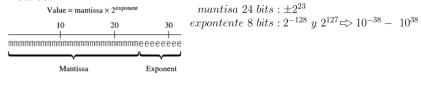
Precisión y Rango



Enteros:

más pequeño:
$$-2^{n-1}$$
 / más grande: $2^{n-1} - 1$ para 4 bytes = 32 bits

Reales:



 $-2,147,483,648 \rightarrow 2,147,483,647$

 $(-3.402823\ 10^{39}, -1.175495\ 10^{-39}), (1.175495\ 10^{-39}, 3.402823\ 10^{39}): 7\ d\'igitos$

Declaración Explícita y por Defecto



Explícita:

INTEGER :: i,j,k REAL :: tiempo

CHARACTER(len=9) :: resultado, mensaje

CHARACTER(9) :: resultado

El símbolo :: es opcional para compatibilidad con versiones anteriores de Fortran.

Por Defecto:

Si el tipo de variable no es explícitamente especificada entonces por defecto las variables que comiencen por las letras I,J,K,L,M o N, se asumirán como INTEGER, las demás se asumirán como REAL.

Constantes



REAL, PARAMETER :: PI=3.141593

CHARACTER, PARAMETER :: mensaje = "resultado ="

Las constantes en un programa nunca deben ser modificadas dentro del programa para guardar consistencia con el modelo físico en estudio.

Cálculos Aritméticos



Operadores:

- = Asignación (no confundir con igualdad matemática, i=i+1)
- + Adición
- Sustracción
- * Multiplicación
- / División
- ** Potenciación

Aritmética con Enteros y Reales



El computador automáticamente trunca la parte fraccionaria de la división de dos enteros.

$$\frac{3}{4} = 0$$
 $\frac{6}{4} = 1$ $\frac{8}{4} = 2$ etc...

La precisión limitada de los reales, a menudo presentan resultados ligeramente diferentes.

$$3.*(1./3.) \neq 1$$
 $2.*(1./2.) = 1$

Jerarquía entre operaciones



- 1. Primero se evalúan las expresiones entre paréntesis.
- 2. Se evalúan todas las operaciones con potencias de derecha a izquierda.
- 3. Se evalúan todas las operaciones de multiplicación y división de izquierda a derecha.
- 4. Se evalúan todas las operaciones de suma y diferencia de izquierda a derecha.

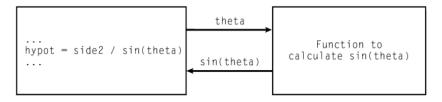
$$a = 3, b = 2, c = 3$$
 entonces $a * *b * *c = 3. **8. = 6561.$

Funciones Intrínsecas



Funciones construidas dentro del lenguaje Fortran. Sus valores de entrada se definen como **argumentos**.

y = SIN(theta)



Funciones Intrínsecas



Function name and arguments	Function value	Argument type	Result type	Comments
SQRT(X)	\sqrt{x}	R	R	Square root of x for $x \ge 0$
ABS(X)		R/I	*	Absolute value of x
ACHAR(I)		I	CHAR(1)	Returns the character at position I in the ASCII collating sequence.
SIN(X)	sin(x)	R	R	Sine of x (x must be in radians)
COS(X)	cos(x)	R	R	Cosine of x (x must be in radians)
TAN(X)	tan(x)	R	R	Tangent of x (x must be in radians)
EXP(X)	e^x	R	R	e raised to the xth power
LOG(X)	$\log_e(x)$	R	R	Natural logarithm of x for $x > 0$
LOG10(X)	$\log_{10}(x)$	R	R	Base-10 logarithm of x for $x > 0$
IACHAR(C)		CHAR(1)	I	Returns the position of the character $\mathbb C$ in the ASCII collating sequence.
MOD(A,B)		R/I	*	Remainder or Modulo function
MAX(A,B)		R/I	*	Picks the larger of a and b
MIN(A,B)		R/I	*	Picks the smaller of a and b
ASIN(X)	$\sin^{-1}(x)$	R	R	Inverse sine of x for $-1 \le x \le 1$ (results in radians)
ACOS(X)	$\cos^{-1}(x)$	R	R	Inverse cosine of x for $-1 \le x \le 1$ (results in radians)
ATAN(X)	$tan^{-1}(x)$	R	R	Inverse tangent of x (results in radians)

Notes:

^{* =} Result is of the same type as the input argument(s).
R = REAL, I = INTEGER, CHAR(1) = CHARACTER(len = 1)

R = REAL, I = INTEGER, CHAR(I) = CHARACTER(Ien = I)

Instrucciones de entrada y salida



Entrada: READ(*,*) *lista* – *variables* – *entrada* Salida: WRITE(*,*) *lista* – *variables* – *salida*



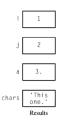
 $Unidad\ de \\ Entrada/Salida \\ Formato$



Program



Input data



Inicialización de Variables



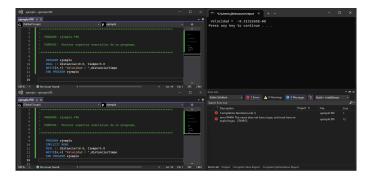
tipo :: var1=val1, var2=val2...

Siempre inicializar todas las variables en el programa antes de utilizarlas.

IMPLICIT NONE



Cuando se incluye la instrucción IMPLICIT NONE después de PROGRAM y antes de la sección de declaración, cualquier variable que no aparezca en forma explícita, se considerará como un error.



Depuración de Programas (Debugging)



- Errores de Sintáxis
- Errores en tiempo de Ejecución (run-time errors)
- Errores Lógicos (respuestas incorrectas o no deseadas)

¿Quienes contribuyen a disminuirlos?

- Compilador
- Buenas prácticas de programación
- ► IMPLICIT NONE, etc.

Errores Lógicos



- ► Fraccionar expresiones largas (&)
- Uso de Paréntesis
- ► Verificar el tipo de argumentos introducidos en funciones
- Aritmética de enteros y reales
- Usar WRITE para desplegar valores intermedios
- Un revisor externo o Debugger

Actividad



Escribir un programa que permita despliegue en consola las dos raíces de una ecuación cuadrática de la forma $ax^2 + bx + c = 0$.

Entradas: a, b y c.

Salidas: x_1 y x_2 .