

Fortran90/95入門と演習

後半

担当：坪倉 誠
(神戸大学大学院システム情報学研究科)

目標

- ・本演習で用いる数値計算用プログラム言語
「Fortran90/95」の基礎を習得する。

参考資料：

TECS-KOBE第二回シミュレーションスクール(神戸大学) 2010/12/6:Fortran 講義ノート (平尾 一)

「Fortran90/95入門」2010年度計算科学演習I 講義資料、神戸大院システム情報学専攻・陰山聰

<http://bit.ly/1n1E3ht>

<http://bit.ly/1fSA8Mi>

※本資料は昨年の臼井先生の資料を基に、坪倉が適宜加筆しました

予定

- 1. イントロダクション
 - 2. 入出力
 - 3. 変数の型
 - 4. 演算の基礎
 - 5. 条件の扱い
 - 6. 繰り返し処理
 - 7. 配列
 - 8. 副プログラム
 - 9. 数値計算に向けて
 - 10. 付録
-
- 前半
- 後半

繰り返し処理

Doループ

例: 1~10の整数を順番に画面に出力する

```
program sample_do2
!-----
 implicit none
!-----
 write(6,*) 1
 write(6,*) 2
 write(6,*) 3
 write(6,*) 4
 write(6,*) 5
 write(6,*) 6
 write(6,*) 7
 write(6,*) 8
 write(6,*) 9
 write(6,*) 10
!-----
end program sample_do2
```

面倒、非効率的
X

1以外の増分値を使う場合

```
do i=1,100,2
...
end do
```

結果

```
program sample_do
!-----
 implicit none
 integer :: i
!-----
 do i=1,10
   write(6,*) i
 end do
!-----
end program sample_do
```

制御変数iの増分値は
デフォルトで1

```
1
2
3
4
5
6
7
8
9
10
```

増分値が規則的な時に便利

多重ループ

例: 1~3の整数二つを組みとして順番に出力する:(1,1)、(1,2)、(1,3)、(2,1)…、(3,3)

```
program sample_domulti
!-----
implicit none
integer :: i, j
!-----
write(6,'(a)') "    i    j"
write(6,'(a)') "-----"
do i=1,3
  do j=1,3
    write(6,'(2i4)') i, j
  end do
end do
!
end program sample_domulti
```

結果

i	j
1	1
1	2
1	3
2	1
2	2
2	3
3	1
3	2
3	3

内側のループが先に回る

Doループにおけるcycle文とexit文

例:1~10の整数を順番に画面に出力し、3の時のみ飛ばす

```
program sample_docycle
!-----
 implicit none
 integer :: i
!-----
 do i=1,10
 if(i == 3) cycle 次の制御変数の
    write(6,*) i   処理へ飛ぶ
 end do
!-----
end program sample_docycle
```

結果

```
1
2
4
5
6
7
8
9
10
```

例:1~10の整数を順番に画面に出力し、3の時に出力せず処理を終える

```
program sample_doexit
!-----
 implicit none
 integer :: i
!-----
 do i=1,10
 if(i == 3) exit Doループから
    write(6,*) i   抜け出る
 end do
!-----
end program sample_doexit
```

結果

```
1
2
```

Doループの活用:和の計算

演習b1

例:1~10の整数の総和を計算する

```
program sample_dosum
!-----
implicit none
integer :: i, isum
!-----
isum = 0 ! 初期値として0を設定
do i=1,10
    isum = isum + i ! isumに、順にiを
end do           ! 足し込んで行く
write(6,*) isum
!-----
end program sample_dosum
```

結果

./a.out	55
---------	----

和を求めるのに非常によく使うパターン（重要）

`isum = isum + i`

もともとの`isum`の値(右辺)に*i*を加えて、
`isum`に新しい値を入れる(左辺)
→“=”は「代入」の意味

演習: `sample_dosum.f95`を作成および実行し、プログラムの意味を理解せよ。

配列

一次元配列

例:一次元配列(要素数3)の单精度実数変数a=a(i)を定義し、順番に実数1、2、3を代入し、画面に出力する

```
program sample_array
!-----
implicit none
#JISSU#
integer :: i
real(SP), dimension(3) :: a
!-----
do i=1,3
    a(i) = real(i,SP)      値の代入
    write(6,*) a(i)
enddo
write(6,*)                      空行出力
write(6,*) (a(i),i=1,3)          } 要素を全部出力
write(6,*) a
!-----
end program sample_array
```

何も指定しなければ、a(1)、a(2)、a(3)と、
配列インデックスは1から始まります

a(1)	1.0
a(2)	2.0
a(3)	3.0

ベクトルを定義できる

結果

1.000000	2.000000	3.000000
1.000000	2.000000	3.000000

二次元配列

例: 二次元配列(3×3)の整数変数 $a=a(i,j)$ を定義し、その成分 (i, j) に対して $10*i+j$ 代入し、画面に出力する

```
program sample_array2
!-----  

implicit none  

integer :: i, j  

integer, dimension(3,3) :: a  

!  

do i=1,3  

  do j=1,3  

    a(i,j) = 10*i + j  

  enddo  

  write(6, '(3i4)' ) (a(i,j), j=1,3)  

enddo  

!  

end program sample_array2
```

a(i, j)と数学的な表記と一致させて使うことができる

3×3の配列を宣言

例えば(2,1)要素が21となるようにしている

出力

配列のイメージ

a(1,1)	a(1,2)	a(1,3)
a(2,1)	a(2,2)	a(2,3)
a(3,1)	a(3,2)	a(3,3)

結果

11	12	13
21	22	23
31	32	33

行列を定義できる

3次元以上の配列も定義可能

課題2

① 前ページのプログラムを参考、もしくはひな形にして次のプログラムを作成せよ。

“3x3配列a(i,j)に「**单精度実数型**」の 10^*i+j 値を入れ、出力する。”
(ヒント:配列の宣言、write文における書式指定子)

② ①のプログラムとその出力結果をテキストファイル
(result_150507_1.txt)にまとめ、
坪倉(mtsubo)までメールで送ってください。

```
mail -s “メールアドレス_150507_1” mtsubo <  
result_150507_1.txt
```

配列演算のための組込み関数

例: 二次元配列(3×3)の整数変数a, b, cを定義し、 $a(i,j)=10^i+j$ とする。aの成分の総和、aの配列の大きさを求める。またaの自乗、aの転置をそれぞれbとcに代入する

```
program sample_array3
!-----
implicit none
integer :: i, j
integer, dimension(3,3) :: a, b, c
!-----
do i=1,3
  do j=1,3
    a(i,j) = 10*i + j  値の代入
  enddo
enddo
write(6, '(3i6)')
((a(i,j),j=1,3),i=1,3)
write(6,*) sum(a)
write(6,*) size(a,1), size(a,2)
b = matmul(a,a) 行列の積
write(6, '(3i6)')
((b(i,j),j=1,3),i=1,3)
c = transpose(a) aの転置行列
write(6, '(3i6)')
((c(i,j),j=1,3),i=1,3)
!-----
end program sample_array3
```

a	[11	12	13	
		21	22	23	
		31	32	33	
				198	
					3
b	[776	812	848	
		1406	1472	1538	
		2036	2132	2228	
				11	31
				12	32
c	[13	23	33	

$\sum a(i,j)$

$size(a,1)$

配列aの1次元配列の大きさ

a(1,1)	a(1,2)	a(1,3)
a(2,1)	a(2,2)	a(2,3)
a(3,1)	a(3,2)	a(3,3)

$size(a,2)$

配列aの2次元配列の大きさ

便利な配列演算法

例:二つの行列A、Bの和を求める(簡潔な書き方)

```

do i=1,10
  do j=1,10
    C(i,j) = A(i,j) + B(i,j)
  enddo
enddo
↓
C = A + B

```

要素を全部書いて和($A + B$)を計算するための古いやり方

同じ計算するための簡潔な書き方

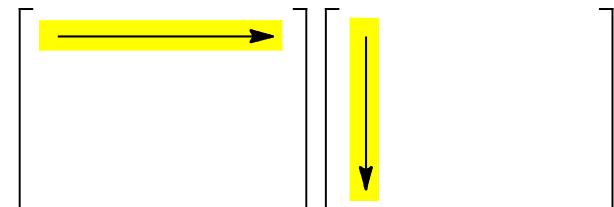
例:二つの行列A、Bに対してAの転置行列とBの積を求める(簡潔な書き方)

```

do i=1,10
  do j=1,10
    AT(i,j) = A(j,i)
  enddo
enddo
do i=1,10
  do j=1,10
    s = 0.0
    do k=1,10
      s = s + AT(i,k) * B(k,j)
    enddo
    C(i,j) = s
  enddo
enddo
↓
C = matmul(transpose(A), B)

```

$C = {}^t\!AB$ の計算をするための古い書き方



簡潔な書き方

内積は `dot_product(a,b)`

プログラムがシンプルになる例(1)

演習b2

$$\sum_{i=1}^{\infty} \frac{1}{i} \cdot \frac{1}{i+1} \cdot \frac{1}{i+2} = \frac{1}{1} \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{3} + \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{3} \cdot \frac{1}{4} + \frac{1}{3} \cdot \frac{1}{4} \cdot \frac{1}{5} + \dots = \frac{1}{4}$$

例:上の級数をi=1~1000までとして求める(組込関数sumを用いて)

```
program sample_series
    implicit none
#JISSU#
    integer, parameter :: nterms = 1000
    real(SP), dimension(nterms) :: x, y, z
    integer :: i

    do i = 1, nterms
        x(i) = 1.0 / i
        y(i) = 1.0 / (i+1)
        z(i) = 1.0 / (i+2)
    end do

    print *, 'ans = ', sum(x*y*z)

end program sample_series
```

配列の積→要素の和を計算

配列の動的な割り付け

例：二次元整数配列aとbを定義し、bについてはプログラムの中でその配列サイズを決める

```
program sample_arrayallocate
!-----
implicit none
integer :: nmax
integer, dimension(1000,1000) :: a
integer, dimension(:,:), allocatable :: b
!-----
write(6,'(a)',advance='no') "nmax: "
read(5,*)
nmax
allocate(b(nmax,nmax))
write(6,*) size(a,1), size(a,2)
write(6,*) size(b,1), size(b,2)
deallocate(b)
!-----
end program sample_arrayallocate
```

サイズを固定

サイズは後で決める

advance='no'は「改行しない」

サイズを決めた(1~nmaxに割り付けた)
i.e., b(1:nmax,1:nmax)

メモリを解放した

結果

nmax: 50

1000	1000
50	50

必要な分だけメモリ
を確保する

課題3

- ① 演習b2のプログラムを、ntermsを標準入力から指定し、かつ、
単精度計算と倍精度計算で比較できるようプログラムを修正し、適
当にntermsの値をいくつか変化させた際の結果を比較せよ。
- ② ①のプログラムとその出力結果をテキストファイル
(result_150507_2.txt)にまとめ、
坪倉(mtsubo)までメールで送ってください。

```
mail -s "メールアドレス_150507_2" mtsubo <  
result_150507_2.txt
```

配列要素の初期値の設定

例: 二次元整数配列a(3x3)、b(3x3)、d(3x3)、一次元整数配列c(3)を定義し、aとcについては配列宣言時に初期値(aは全て1、cは1~3)を代入する

```
program sample_array5
!-----
implicit none
#JISSU#
integer :: i, j
integer, dimension(3,3) :: a = 1
integer, dimension(3,3) :: b
integer, dimension(3) :: c = (/1, 2, 3/)
real(DP), dimension(3,3) :: d
!-----
b = 2
d = sqrt(real(b,DP))
write(6,'(3i3)') ((a(i,j),j=1,3),i=1,3)
write(6,'(3i3)') ((b(i,j),j=1,3),i=1,3)
write(6,'(3i3)') (c(i),i=1,3)
write(6,'(3f10.6)') ((d(i,j),j=1,3),i=1,3)
!-----
end program sample_array5
```

結果

1	1	1
1	1	1
1	1	1
2	2	2
2	2	2
2	2	2
1	2	3
1.414214	1.414214	1.414214
1.414214	1.414214	1.414214
1.414214	1.414214	1.414214

便利な配列処理

例:配列要素をコピーする(簡潔な書き方)

```

real(DP), dimension(NX,NY)      :: array02d
real(DP), dimension(NX,NY,NZ)   :: array03d

do j = 1 , NY
  do i = 1 , NX
    array03d(i,j,1) = arrya02d(i,j)
  end do
end do
↓
array03d(:,:,:1) = arrya02d(:,:)

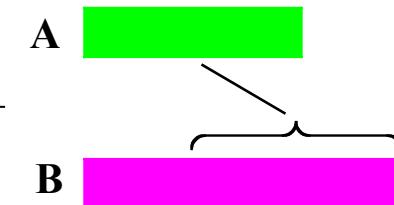
```

```

real(DP), dimension(10) :: A
real(DP), dimension(15) :: B

do i = 1 , 10
  A(i) = B(i+5)
end do
↓
A(:) = B(6:15)

```



シンプルに記述できる

副プログラム

サブルーチン、関数、モジュール

サブルーチン

演習b3

例: 実数を標準入力から読み込み、自乗計算を行う。標準入力と出力はメインルーチンで、自乗計算はサブルーチンで行う

```

program sample_subroutine
    implicit none
    #JISSU#
    real(SP) :: x, y
    write(6,*)
    read(5,*)
    call nijo(x,y)
    write(6,'(a,f8.4)') 'x = ', x
    write(6,'(a,f8.4)') 'x^2 = ', y
end program sample_subroutine

=====
subroutine nijo(x,y)
    implicit none
    #JISSU#
    real(SP), intent(in) :: x
    real(SP), intent(out) :: y
    y = x**2
    ! x = y
end subroutine nijo
=====
```

x,y: 引数

Subroutineの呼び出し

x,y: 仮引数

入力用変数
出力用変数

結果

```

x?
2.5
x      =   2.5000
x^2    =   6.2500
```

値を二乗するサブルーチン

特定の作業をsubroutineとして
まとめておき、callで呼び出す

演習: subroutine内の $x=y$ を実行してみよ。 x の属性をinoutとしたときの結果も確認せよ。

引数／仮引数と入出力属性

引数／仮引数

①主プログラム

```
...  
call subtest(x,y)  
...
```

引数

②サブルーチン

```
subroutine subtest(a,b)  
...
```

仮引数

- 引数と仮引数の名前は違っていてもよいが、順番と型を揃えなければならない
- サブルーチンから別のサブルーチンを呼んでもよい

入出力属性

Intent(in): ①→②へと渡される変数(変更不可)

Intent(out): ②の処理の結果として①へと戻る値

Intent(inout): 両方の性質を持つ仮引数

入出力属性の指定はFortranのメリット

intent宣言
仮引数の属性授受属性
無くてもコンパイルは通るが、
宣言することでバグを防ぐことができる

関数

例: 実数を標準入力から読み込み、自乗計算を行う。標準入力と出力はメインルーチンで、自乗計算は関数副プログラムで定義する。

```
program sample_function
    implicit none
    #JISSU#
    real(SP) :: nijo
    real(SP) :: x
    write(6,*) "x?"
    read(5,*) x
    write(6,'(a,f8.4)') 'x^2 = ', nijo(x)
end program sample_function
```

```
!=====
function nijo(x)
    implicit none
    #JISSU#
    real(SP) :: nijo
    real(SP), intent(in) :: x
    nijo = x**2
end function nijo
=====
```

結果

```
x?
2.5
x^2 = 6.2500
```

関数名そのものが戻り
値のようになっている

sin(x)のような組込み関数を思い出してみましょう

モジュール:定数をまとめると

例1

```
module module_constants
implicit none
integer, parameter :: SP = kind(1.0)
integer, parameter :: DP = selected_real_kind(2*precision(1.0_SP))
real(DP), parameter :: pi = 3.141592653589793238_DP
real(DP), parameter :: planck = 6.62606896e-34_DP
end module module_constants
```

```
program sample_module1
use module_constants
implicit none
write(6,*) pi
write(6,*) planck
end program sample_module1
```

useによってモジュールの使用を宣言

位置はプログラム開始文のすぐ下

結果

```
3.141592653589793
6.626068959999999E-034
```

- 同じ定数を何度も定義する必要がなくなる
- Moduleはmainプログラムの前に置く

データ、型などをひとまとめにできる。必要なモジュールだけ使う

モジュール:変数の共有

例2

```
module module_com_var
    implicit none
    integer, parameter :: SP = kind(1.0)
    integer, parameter :: DP = selected_real_kind(2*precision(1.0_SP))
    real(DP) :: shared_var = 1.0_DP  モジュール内で変数宣言(および初期化)
end module module_com_var
```

```
program sample_module1
    use module_com_var
    implicit none
    write(6,*) shared_var
    call substitute
    write(6,*) shared_var
end program sample_module1
```

```
subroutine substitute
    use module_com_var
    implicit none
    shared_var = 10.0_DP
end subroutine substitute
```

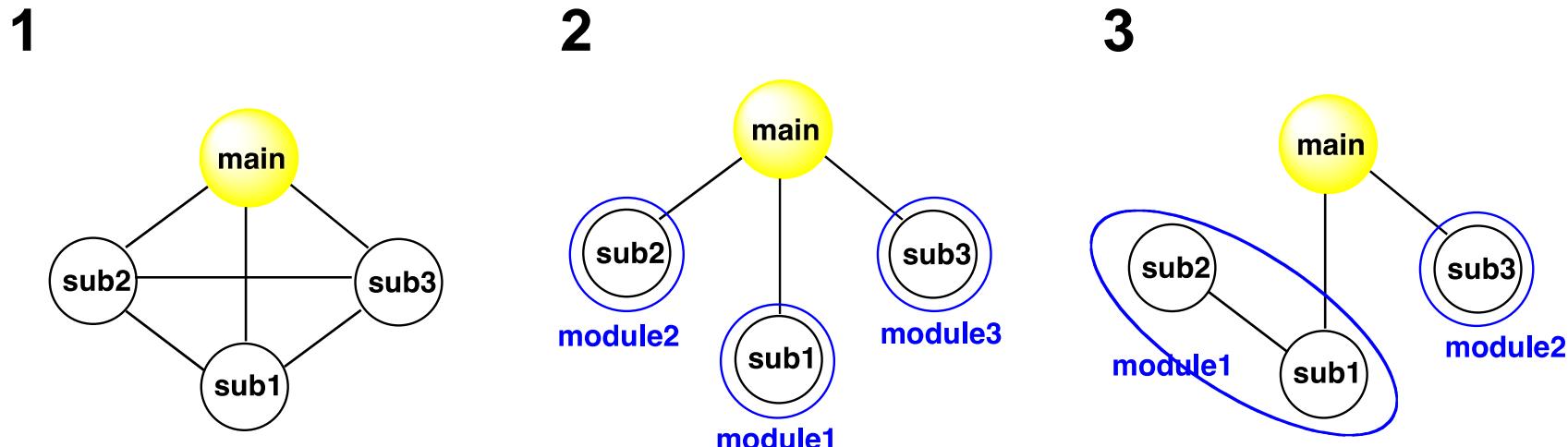
結果

1.000000000000000
10.000000000000000

- 引数・仮引数が不要
- ただしサブルーチンの再利用性を低めてしまうことに注意
(例ではshared_var専用のサブルーチンになっている)

複数のプログラム単位間で変数を共有

モジュール: カプセル化



1: あちこちと相互作用でき、例えばsub1を改良すると、いろんなところに影響が及ぶ可能性あり。

2: 1モジュールの中に1サブルーチンを入れ、サブルーチン間の相互作用を断ち切った(情報の隠蔽)。

3: 一つの「機能」をなすsub1, sub2をひとまとめにし、sub1の下請け的ルーチンであるsub2はsub1とのみ相互作用するようにした。

Moduleを機能単位でまとめ、相互作用を減らし、独立性を高める→プログラムの保守に有利

モジュール:モジュール内副プログラム

演習b4

例

```
module module_kinou
implicit none
private
public :: pihello
#JISSU#
```

型宣言はmoduleの最初でのみ行えばよい

デフォルトではprivate(module内でしか参照できない)。public宣言で外部からも参照できる

contains

```
subroutine pihello()
call shitauke()
end subroutine pihello
```

モジュール内のサブルーチンや関数の直前に置く

```
subroutine shitauke()
write(6,*) 4.0*atan(1.0_DP)
write(6,'(a)') "hello"
end subroutine shitauke
```

Publicの、「πを計算・出力しhelloと言う」機能の窓口的業務を担うルーチン

Privateのサブルーチン(実際に作業を行うルーチン。

```
3.1415926535897931
hello
```

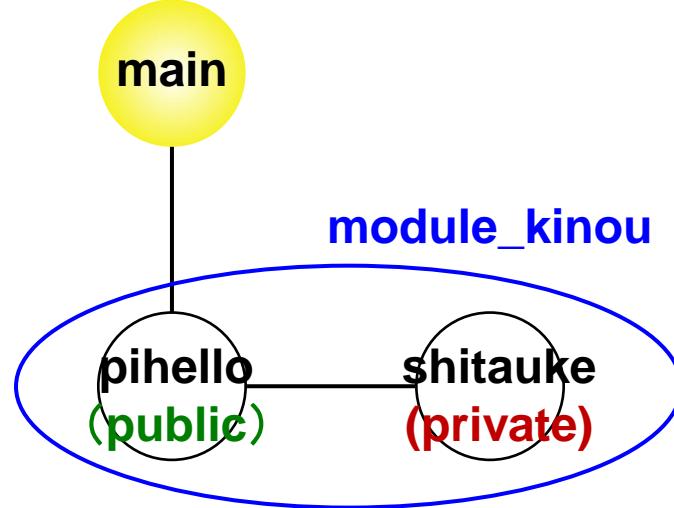
end module module_kinou

```
program sample_module6
use module_kinou
implicit none
call pihello()
! call shitauke()
end program sample_module6
```

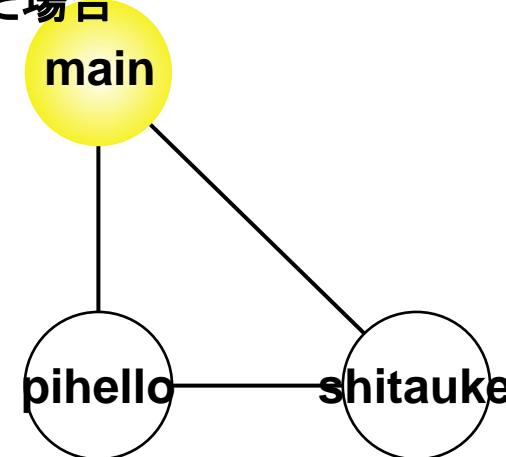
1. プログラムを作成し、動作を確認、理解してください
2. メインルーチンからshitaukeを呼び出すとどうなるでしょうか？

モジュール: モジュール内副プログラム

前ページのプログラム



参考:すべて外部副プログラムとして定義した場合



右の例: あちこちと相互作用でき、一つのプログラム単位を改良すると、いろんなところに影響が及ぶ可能性あり。

左の例: モジュールの中にサブルーチンを入れることにより、モジュールの使用を宣言した場合(use module_kinou)のみアクセス可能。

さらにpihelloの下請け的ルーチンであるshitaukeには**private**属性を指定し、モジュール内のpihelloのみ外から呼び出せるようにした。

数値計算に向けて

配列処理の効率

例1

```
program sample_time1
!-----
implicit none
integer, parameter :: nmax=10000
integer :: i, j
integer, dimension(nmax,nmax) :: a
!-----
do i=1,nmax
  do j=1,nmax
    a(i,j) = i + j
  enddo
enddo
!-----
end program sample_time1
```

例2

```
program sample_time2
!-----
implicit none
integer, parameter :: nmax=10000
integer :: i, j
integer, dimension(nmax,nmax) :: a
!-----
do j=1,nmax
  do i=1,nmax
    a(i,j) = i + j
  enddo
enddo
!-----
end program sample_time2
```

0:02.60 (s) 遅い

0:00.41 (s) 速い

timeコマンドによる計測

% time ./a.out
real 0m2.597s
user 0m2.523s
sys 0m0.074s

経過時間

同等の作業なのに処理時間に大きな差がある

配列要素のメインメモリ上の配置

Fortran: A(2,2)のとき A(1,1), A(2,1), A(1,2), A(2,2)

C: a[2,2]のとき a[0][0], a[0][1], a[1][0], a[1][1] Fortranとは逆

非効率的なプログラム: 0:02.60 (s)

```
do i=1,nmax
  do j=1,nmax
    a(i,j) = i + j
  enddo
enddo
```

効率的なプログラム: 0:00.41 (s)

```
do j=1,nmax
  do i=1,nmax
    a(i,j) = i + j
  enddo
enddo
```

アクセス順:

a(1,1), a(1,2), a(1,3), ...
→不連続メモリアクセス

アクセス順:

a(1,1), a(2,1), a(3,1), ...
→連続メモリアクセス

左側の添字を先に動かした方が**効率的**。
 「参照局所性」の向上により、「キャッシュメモリ」を有効利用。

おつかれさまでした

コメント、質問等は

tsubo@tiger.kobe-u.ac.jp

までお願いします

付録

基礎事項

文字列の処理

例

```

program sample_character3
    implicit none
    character(len=*), parameter :: moji1 = "hyogo"
    character(len=*), parameter :: moji2 = "kobe"
    character(len=10) :: moji3 = "nada"
    character(len=10) :: moji4 = "ku"
    write(6,'(a)') moji1(2:4)
    write(6,'(a)') moji1//"-"/moji2
    write(6,'(a)') moji3//"-"/moji4
    write(6,'(a)') trim(moji3)//"-"/trim(moji4)
    write(6,*) len(moji3), len_trim(moji3)
end program sample_character3

```

2-4文字目まで
//で文字列の連結
余白を削る
文字列の長さ

実行

```

yog
hyogo-kobe
nada      -ku
nada-ku

```

整数型から文字型への変換

例

```
program sample_transformSeMo
!-----
implicit none
integer :: i
character(len=*) , parameter :: base="file."
character(len=4) :: serial_num
!-----
do i=1,10
  write(serial_num,'(i4.4)') i
  open(i,file=base//serial_num)
  write(i,'(a,i4)') "File number = ", i
  close(i)
enddo
!-----
end program sample_transformSeMo
```

文字型定数の場合、
len=*とできる

文字型変数serial_numに、整数
iが文字列として入る

0	0	0	1
---	---	---	---

0	0	0	2
---	---	---	---

演習: 本プログラムをコンパイル・
実行し、何が起こるか観察せよ。

ファイル入力(2): rewind文

例

```
program sample_input4
    implicit none
    integer :: n1, n2
    open(10,file="input")
    read(10,*) n1, n2
    write(6,*) n1, n2
!    rewind(10)
    read(10,*) n1, n2
    write(6,*) n1, n2
    close(10)
end program sample_input4
```

実行(rewind無効の時)

	100	200
	300	400

実行(rewind有効の時)

	100	200
	100	200

“input”

100 200	①
300 400	②

開いているファイルの、先頭に戻る

Do While文

例1

```
program sample_dowhile
!-----
implicit none
integer :: i
!-----
i = 1          初期値
do while (i <= 10) 条件
  write(6,*)
  i = i + 1    増分
end do
!-----
end program sample_dowhile
```

結果

```
1
2
3
4
5
6
7
8
9
10
```

例2

```
program sample_dowhile2
!-----
implicit none
#JISSU#
real(DP) :: a = 1.0_DP
!-----
do while (a > 0.1_DP)
  a = a/2.0_DP
  write(6,'(f12.6)') a
end do
!-----
end program sample_dowhile2
```

結果

```
0.500000
0.250000
0.125000
0.062500
```

a>0.1である限り、a/2を
繰り返し行っている

増分値が規則的でない時に便利

Open文とClose文

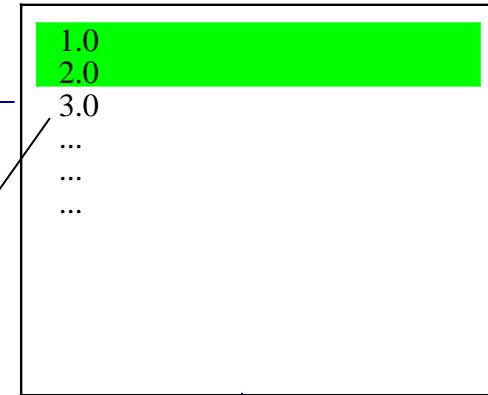
`open(番号, file=filename)`
`close(番号)`

ファイルを開ける
閉じる

例1

```
open(1, file="input")
read(1, *) ...
read(1, *) ...
```

プログラムの後半
`read(1, *) ...`



`close`しなかったら、前
回の続きになる

例2

```
open(1, file="input")
read(1, *) ...
read(1, *) ...
close(1)
```

プログラムの後半
`open(1, file="input")`
`read(1, *) ...` Closeした場合、
`close(1)` 再定義が必要

必要な処理が終わったらファイルをcloseするように心がける

その他の入出力操作:リダイレクション

例

```
program hello_world
    implicit none
    print *, "hello, world."      標準出力
end program sample_output
```

実行例

```
% ./hello_world > output
% ./hello_world >> output
% ./hello_world >& output
```

- ① すでにoutputに何か書かれていた場合、今回の出力で上書きされる
- ② 古い内容の下に追加する形で出力
- ③ エラー出力(コンパイルのエラーメッセージ等)をoutputへ

標準出力内容がファイルに書き出される

演習: すでに作成したhello_worldを使い、

1. ①→①の処理
2. ①→②の処理

を行ってそれぞれの場合のoutputの中身を確認せよ。

その他の入出力操作:リダイレクション(2)

例

```
program sample_input3
    implicit none
    integer :: n1, n2
    read(5,*) n1, n2
    write(6,*) n1, n2
end program sample_input3
```

“input”

```
100 200
```

標準入力
標準出力

実行例

```
% ./sample_input < input > output
```

標準出力内容をoutputへ
標準入力内容をinputから

配列用組込み関数のまとめ

組込み関数	機能
dot_product(a,b)	ベクトルの内積
matmul(a,b)	行列a,bの積
transpose(a)	行列aの転置行列
maxval(a)	配列要素の最大値
minval(a)	配列要素の最小値
sum(a)	配列要素の和
lbound(a,dim=N)	配列の下限の大きさ
ubound(a,dim=N)	配列の上限の大きさ

等価な計算でも所要時間が異なる例

例

```

program sample_kumikomi
!-----
implicit none
#JISSU#
integer, parameter :: nmax=10000000
integer :: i, j
integer, dimension(nmax,nmax) :: a
real(DP) :: t1, t2, t3, x, y
!-----
call cpu_time(t1)
do i=1,nmax
  x = 1.0_DP
  y = exp(x)*exp(x)
end do
call cpu_time(t2)
do i=1,nmax
  x = 1.0_DP
  y = exp(x+x)
end do
call cpu_time(t3)
write(6,'(2f12.6)') t2-t1, t3-t2
!-----
end program sample_kumikomi

```

処理A

処理B

実行

0.473538	0.232642
----------	----------

例

遅い	速い
$\exp(x) * \exp(y)$	$\exp(x+y)$
$\log(m) + \log(n)$	$\log(m*n)$
$\sin(\theta)\cos(\theta)$	$0.5 * \sin(2*\theta)$
x^{**3}	$x*x*x$
$x^{**3} + x^{**2} + 1$	$x*x*(x+1)+1$

組み込み関数やべき乗は、命令は単純だが
実際の演算量は少なくない（テーラー展開等）
ので時間がかかる

グラフ用入力ファイルの作成

例

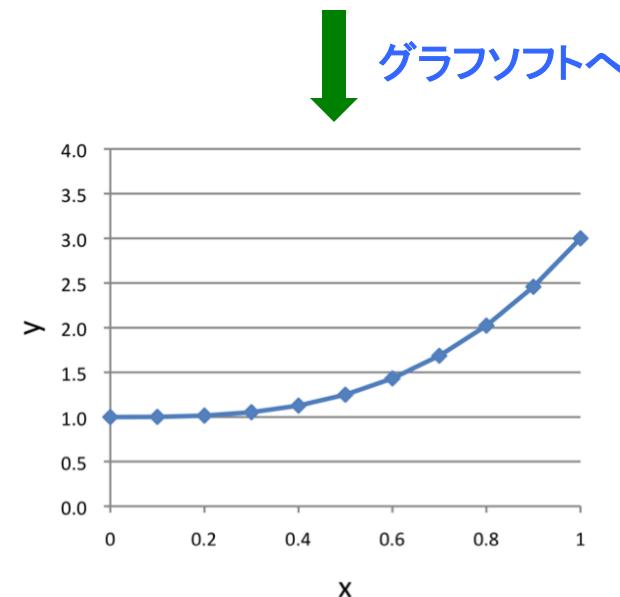
```
program sample_graph
!-----
implicit none
#JISSU#
integer :: i
real(DP) :: x, y
!-----
do i=1,10
  x = i*0.1_DP
  y = 2.0*x**3 + 1.0
  write(6,'(2f12.6)') x, y
end do
end program sample_graph
```

$$y = 2x^3 + 1 \quad (0 \leq x \leq 1)$$

実行

0.100000	1.002000
0.200000	1.016000
0.300000	1.054000
0.400000	1.128000
0.500000	1.250000
0.600000	1.432000
0.700000	1.686000
0.800000	2.024000
0.900000	2.458000
1.000000	3.000000

グラフソフトへ



リンク

複数のソースコードへ分割

例 二つのファイルに分けた

```
module module_constants
    implicit none
    #JISSU#
    double precision, parameter :: pi = 3.141592653589793238_DP
    double precision, parameter :: planck = 6.62606896e-34_DP
end module module_constants
```

module_constants.f95

```
program sample_module
    use module_constants
    implicit none
    write(6,*) pi
    write(6,'(e20.15)') planck
    write(6,*) 1.0_DP
end program sample_module
```

sample_module.f95

moduleの利用

ディレクトリの様子

```
% ls
module_constants.f95  sample_module.f95
```

機能毎にファイルを分けて整理整頓

オブジェクトファイルのリンク

(不完全な)各ソースコードをコンパイルする

```
% frtpx -c module_constant.f95  
% frtpx -c sample_module.f95
```

module_constant.oができる
sample_module.oができる

リンク

```
% frtpx -o sample_module.exe module_constant.o sample_module.o
```

sample_module.exeができる

各ソースコードをコンパイル→オブジェクトファイル
を作成→リンク

Make

例(Makefile)

```

F95 = frtpx
.SUFFIXES:
.SUFFIXES: .f95 .o
OBJS = module_constants.o \
        sample_module.o
sample_module.exe: ${OBJS}
        ${F95} -o sample_module.exe ${OBJS} 依存関係
.f95.o:
        ${F95} -c $<
clean:
        rm -f *.o *.mod *.exe  cleanの方法

```

SpaceではなくTABにすること

.f95から.oの作成方法を記述

cleanの方法

実行

```

% ls
Makefile module_constants.f95 sample_module.f95
% make
frtpx -c module_constants.f95
frtpx -c sample_module.f95
frtpx -o sample_module.exe module_constants.o sample_module.o

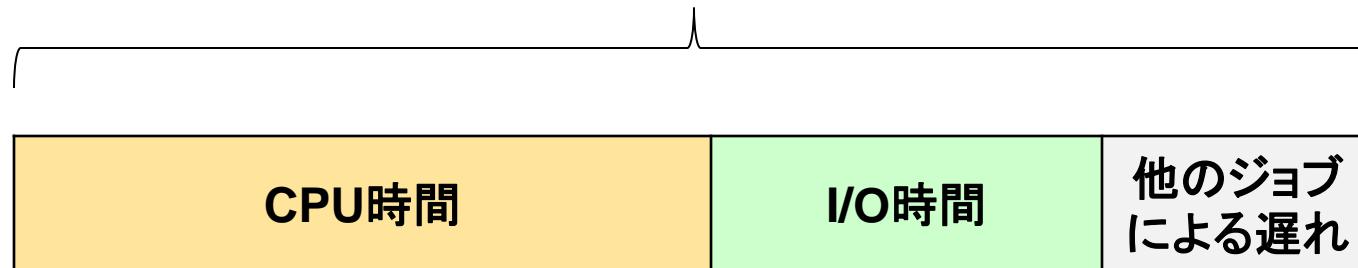
```

基本的には新たに編集したファイルだけを再コンパイル。多数のソースファイルがからなるプログラムのコンパイルを効率化

数値計算の効率化

処理にかかる時間

経過時間



CPU時間

- プログラムが消費する時間
- OSが消費する時間

I/O時間

- データの読み書きに使う時間

反復回数の少ないdoループの展開

例

```

program sample_doexpand
!-----
implicit none
#JISSU#
integer, parameter :: nmax=100000000
integer :: i, j
integer, dimension(3,nmax) :: a
real(DP) :: t1, t2, t3, x, y
!-----
call cpu_time(t1)
do i=1,nmax
    do j=1,3
        a(j,i) = a(j,i) + 1
    enddo
enddo
call cpu_time(t2)
do i=1,nmax
    a(1,i) = a(1,i) + 1
    a(2,i) = a(2,i) + 1
    a(3,i) = a(3,i) + 1
enddo
call cpu_time(t3)
write(6,'(2f12.6)') t2-t1, t3-t2
!-----
end program sample_doexpand

```

実行

1.872249	0.706740
----------	----------

何度もこのループに到達し、初期設定が行われて時間をロスする

展開してあらわに書いた → 速くなる

ループに到達すると、「ループカウンタの初期設定」が行われ、時間を費やす

インライン展開による高速化

例

```

program sample_inline
!-----
implicit none
#JISSU#
integer, parameter :: nmax=100000000
integer :: i
real(DP) :: t1, t2, t3, y
!-----
call cpu_time(t1)
do i=1,nmax
    call oneone(y)
end do
call cpu_time(t2)
do i=1,nmax
    y = 1.0_DP + 1.0_DP
end do
call cpu_time(t3)
write(6,'(2f12.6)') t2-t1, t3-t2
!-----
end program sample_inline

! ****
subroutine oneone(y)
implicit none
#JISSU#
real(DP), intent(out) :: y
y = 1.0_DP + 1.0_DP
end subroutine oneone
! ****

```

実行

0.444058	0.126826
----------	----------

} 単純作業をサブルーチンのコールで処理

} 同じことを直接行う

やりすぎるとプログラムが見にくくなるので注意