

Fortran90/95入門と演習 後半

担当： 臼井英之、三宅洋平
(神戸大学大学院システム情報学研究科)

目標

- 本スクール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 講義資料、神戸大院システム情報学専攻・陰山聡

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

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

予定

1. イン트로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 1~10まで出力したい

```

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

例2

```

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
×

1以外の増分値を使う場合

```

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

```

結果

```

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 i, j の値を出力している

```
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

```

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

```

結果

```

1
2
4
5
6
7
8
9
10

```

例1

```

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

```

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
                     足し込んで行く
  end do
  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

```

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

```

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
1.000000      2.000000      3.000000

```

二次元配列

例

```

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

```

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「**単精度実数型**」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_140522_1.txt)にまとめ、臼井(usui)までメールで送ってください。

mail -s “メールアドレス_140522_1” usui < result_140522_1.txt

配列演算のための組込み関数

例

```

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

```

結果

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

 $\Sigma a(i,j)$
 $size(a,1)$

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)

$size(a,2)$

便利な配列演算法

例

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

要素を全部書いて和(A + B)を
計算するための古いやり方

C = A + B

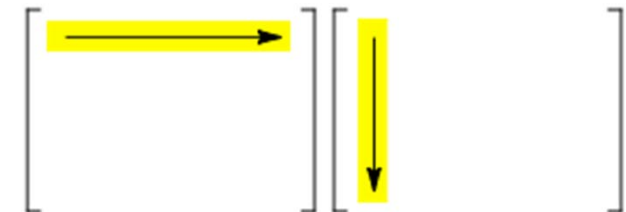
同じ計算するための簡潔な書き方

```
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 = tAB の計算をするための古い書き方

C = matmul(transpose(A),B)

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

```
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

課題3

① 前ページのプログラムを作成し、動作を確認せよ。
ただし、そのときループ数`nterms`を標準入力から指定できるようにプログラムを修正すること。
数種類の`nterms`に対する計算結果を調べてみよ。

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_140522_2.txt`)にまとめ、
臼井(usui)までメールで送ってください。

```
mail -s “メールアドレス_140522_2” usui < result_140522_2.txt
```

配列の動的な割り付け

例

```

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

配列要素の初期値の設定

例

```

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1

```

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) = array02d(i,j)
  end do
end do

```

これまではこう書いていたが、
こう書ける。

```
array03d(:, :, 1) = array02d(:, :)
```

例2

```

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

```

program sample_subroutine
  implicit none
  #JISSU#
  real(SP) :: x, y
  write(6,*) "x?"
  read(5,*) x
  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

関数

例

```
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

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 useによってモジュールの使用を宣言
  implicit none
  write(6,*) pi
  write(6,*) planck
end program sample_module1
```

結果

```
3.141592653589793
6.6260689599999996E-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

```

1.0000000000000000
10.0000000000000000

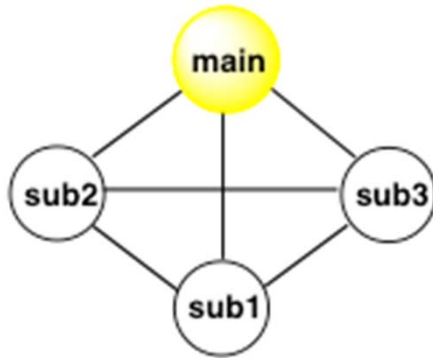
```

- 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)

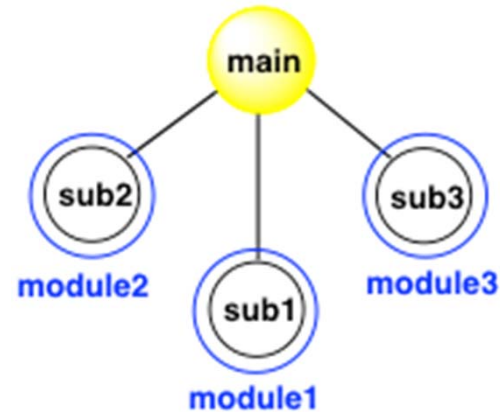
複数のプログラム単位間で変数を共有

モジュール:カプセル化

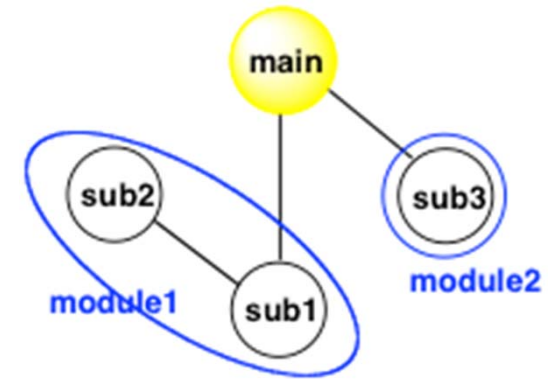
1



2



3



- 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**

つなぎ方は操作できる

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

モジュール内のサブルーチンや関数の直前に置く

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

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

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

Privateのサブルーチン(実際に作業を行うルーチン。

```
end module module_kinou
```

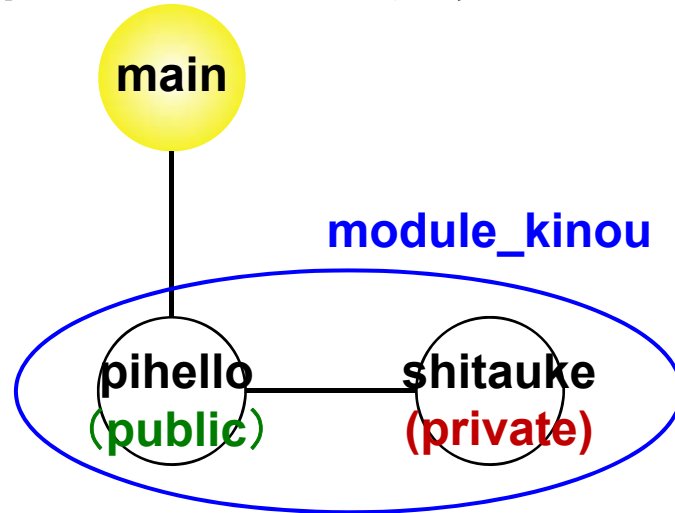
```
3.1415926535897931
hello
```

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

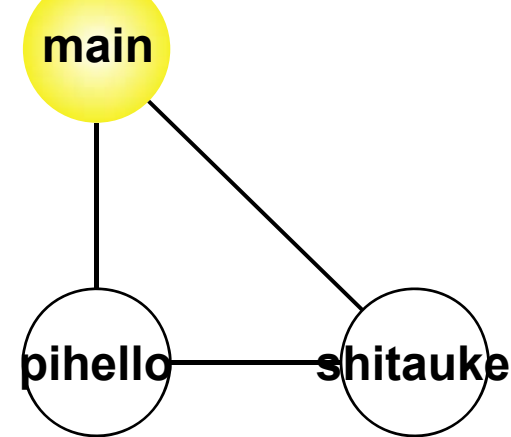
演習: /home/cs/usui/pub/sample_module6.f95を自分の作業ディレクトリにコピーし、動作確認。また、shitaukeをmainからcallして動作確認

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shिताuke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

```

0:02.60 (s) 遅い

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

```

0:00.41 (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出ることがある

配列要素のメインメモリ上での配置

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
```

アクセス順:

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

→ 不連続メモリアクセス

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(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

h-usui@port.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
          10          4

```

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 = i + 1      増分
  end do
!-----
end program sample_dowhile

```

結果

```

1
2
3
4
5
6
7
8
9
10

```

「do i=...」のできる作業

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,*) ...

```
1.0
2.0
3.0
...
...
...
```

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(1)
```

Closeした場合、
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."
end program sample_output
```

標準出力

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
```

標準入力
標準出力

“input”

```
100 200
```

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
<code>dot_product(a,b)</code>	ベクトルの内積
<code>matmul(a,b)</code>	行列a,bの積
<code>transpose(a)</code>	行列aの転置行列
<code>maxval(a)</code>	配列要素の最大値
<code>minval(a)</code>	配列要素の最小値
<code>sum(a)</code>	配列要素の和
<code>lbound(a,dim=N)</code>	配列の下限の大きさ
<code>ubound(a,dim=N)</code>	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
```

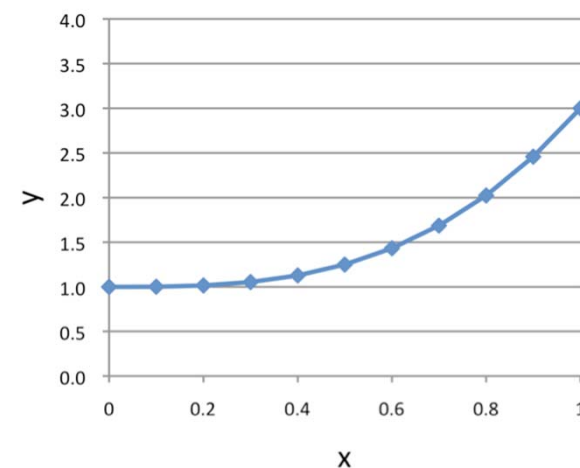
$$y = 2x^3 + 1 \quad (0 \leq x \leq 1)$$

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 module_constants.f95
  implicit none
  #JISSU#
  double precision, parameter :: pi = 3.141592653589793238_DP
  double precision, parameter :: planck = 6.62606896e-34_DP
end module module_constants
```

```
program sample_module sample_module.f95
  use module_constants moduleの利用
  implicit none
  write(6,*) pi
  write(6,'(e20.15)') planck
  write(6,*) 1.0_DP
end program sample_module
```

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      module_constant.oができる  
% frtpx -c sample_module.f95      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}
.f95.o:
${F95} -c $<
clean:
rm -f *.o *.mod *.exe
```

SpaceではなくTABにすること

依存関係

.f95から.oの作成方法を記述

cleanの方法

実行

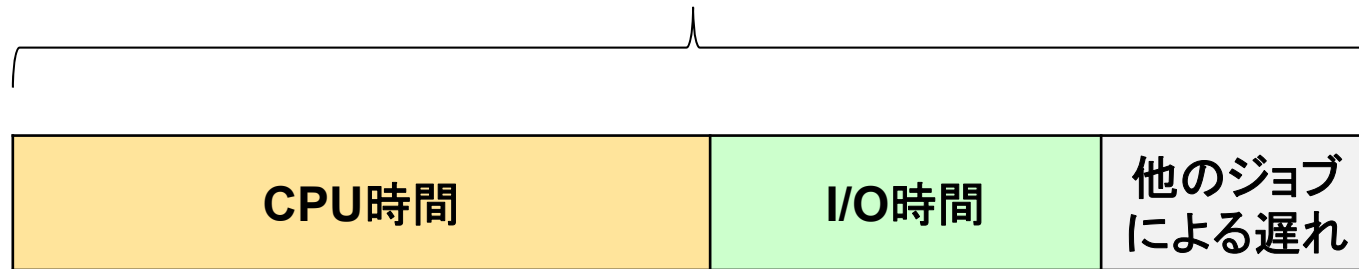
```
% ls
Makefile  module_constants.f95  sample_module.f95
% make
frtpx -c module_constants.f95
frtpx -c sample_module.f95
frtpx -o sample_module.exe module_constants.o sample_module.o
```

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

数值計算の効率化

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
!*****

```

} 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

実行

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

やりすぎるとプログラムが見にくくなるので注意