程式與科學計算

Basic Elements of FORTRAN

- What does a FORTRAN program look like (basic structure)
- How to use a FORTRAN program (compile, execute)
- Variable types
- Simple calculation, intrinsic functions
- Simple input (from keyboard)/output (to screen)

預習問題一準備工作

- 請登入study主機,在你的work目錄下新增子目錄fortran
- 複製/home/teachers/weitingc/lecture_ex/first.f95到你的work/fortran/下
- 將first.f95更改名稱為product.f95

Section

官告區

Section

Section

終止區

```
product.f95
           PROGRAM product
           IMPLICIT NONE
           ! This is our first example of a FORTRAN program.
           ! It asks the user to input two numbers, then the product of
           ! the two numbers is calculated, and output on the screen.
Declaration |
           ! (weitingc, 2012/09/04)
           ! Declare the variables used in this program
           REAL :: i, j, k ! i, j are input numbers, k is result
           ! Start read in i and j
           WRITE(*,*) 'Please input two numbers:'
Execution
           READ(*,*) i, j
           ! Calculate the product (k) of i and j, and output on screen
           k = i*i
           WRITE(*,*) 'The product of these two numbers is:', k
Termination
           END PROGRAM product
```

每一支Fortran主程式都必須具備 宣告區、執行區、終止區 三個段落

• 宣告區:

PROGRAM代表程式的<u>第一行</u>,宣告程式的名稱, 之後宣告變數種類(real, integer...)

```
product.f95
PROGRAM product ← 程式的名稱是 product
IMPLICIT NONE
! This is our first example of a FORTRAN program.
! It asks the user to input two numbers, then the product of
! the two numbers is calculated, and output on the screen.
! (weitingc, 2012/09/04)
! (edited 2013/09/16)
! Declare the variables used in this program
REAL :: i, j, k ! i, j are input numbers, k is result
        宣告三個實數變數 i, j, k
```

Declaration Section 宣告區

執行區:(必須在所有變數宣告完成後)
 執行程式主要的功能,例如:
 設定變數數值、代數運算(加減乘除)、
 迴圈(重複執行某些段落)、邏輯判斷(選擇執行某些段落)、輸入(read)、輸出(write)等

```
product.f95
         ! Start read in i and j
Execution
         WRITE(*,*) 'Please input two numbers:'
         READ(*,*) ⅰ, ϳ ← 讀入 ( 使用者鍵入 ) 變數的數值
Section
執行區
          Calculate the product (k) of i and j, and output on screen
                ▶ 代數運算
         WRITE(*,*) 'The product of these two numbers is:', k
                            輸出(螢幕顯示)文字與變數的數值
```

• 終止區:

END標示程式的<u>最後一行</u>,通常會加上與程式名稱相符的標籤



product.f95

註解 (!之後的 文字)

```
PROGRAM product
          IMPLICIT NONE
Comments ! This is our first example of a FORTRAN program.
          ! It asks the user to input two numbers, then the product of
          ! the two numbers is calculated, and output on the screen.
          ! (weitingc, 2012/09/04)
          ! (edited 2013/09/16)
          ! Declare the variables used in this program
          REAL :: i, j, k ! i, j are input numbers, k is result
          ! Start read in i and j
          WRITE(*,*) 'Please input two numbers:'
          READ(*,*) i, j
          ! Calculate the product (k) of i and j, and output on screen
          k = i*i
          WRITE(*,*) 'The product of these two numbers is:', k
          END PROGRAM product
```

Comments 註解的重要

• 每一行!符號之後的文字,compiler解讀為<u>註解</u>,不會當 作程式編碼處理

• 寫註解的目的:

- 在寫程式的時候先掌握基本架構(程式的草稿)
- 讓寫程式的人可以對程式內容進行<u>口語化</u>的說明、提醒,幫助自己或他人日後使用、修改時方便參考、回憶
- 可以考慮寫成註解的事項
 - 在程式開頭,解釋整個程式的<u>用處、基本架構、版本</u>、更新日期
 - 在變數宣告區,列出各變數代表的<u>意義</u>,與相對應的<u>單位</u>
 - 在執行區,解釋每一段程式要執行的<u>功能</u>、計算相對應的<u>原始方</u> 程式、迴圈或邏輯判斷的<u>文字解釋</u>等等
 - 其他對自己或程式讀者重要的提醒

How to run a FORTRAN program

- 寫好的FORTRAN程式(通常取名為*.f95)本質上仍然是個文字檔,可以用nano等文字編輯軟體開啟,進行修改。
- 文字檔沒有辦法直接「執行」,必須經過「編譯」(compile)的步驟,將程式碼轉換成「執行檔」,使用執行檔才能指揮電腦進行運算

(可以把.f95程式碼想成把指令寫在word檔裡,執行檔想成是手機上的APP,編譯的過程是把word檔變成APP的icon)

執行檔通常取名為*.exe,但編譯器預設產生的執行檔檔名是a.out,為了避免混淆、檔案被覆蓋,建議編譯時要自行指定執行檔的檔名。

How to compile and run a FORTRAN program?

FORTRAN Compiler (e.g., f95) (linking) (edit) (compile) (execute) **FORTRAN** Object File **Executable File** (a.out/xxx.exe) (xxx.o)Program (xxx.f95) 編譯product.f95程式,產生的執 行檔是預設名稱 a.out Example 1: >f95 product.f95 執行a.out這個執行檔 >./a.out Example 2: >f95 product.f95 -o product.exe 用 -o (小寫) 自訂執行檔名稱 >./product.exe Example 3: >f95 product.f95 用 mv 更改執行檔名稱 >mv a.out product.exe (建議使用) >./product.exe

預習問題一第一部分

請編譯(compile)product.f95程式,用Is看會出現什麼 新檔案

>f95 product.f95

請執行編譯好的執行檔(不要省略".")

>./a.out

```
weitingc@study1:~/work
[weitingc@study1 work] $ ls
product.f95
[weitingc@study1 work] $ (f95) product.f95
[weitingc@study1 work] $ ls
a.out product.f95
[weitingc@study1 work]$ ./a.out
Please input two numbers:
3.1
The product of these two numbers is: 6.820000
[weitingc@study1 work]$
```

預習問題一第二部分

請編譯product.f95,在指令中用-o讓產生的執行檔為 product.exe

>f95 product.f95 -o product.exe

請執行編譯好的執行檔,應該要與前面執行a.out相同:

>./product.exe

每年都發生的悲劇...(尤其在期中考)

• 悲劇一:編譯指令錯誤,將程式碼(xxx.f95)覆蓋 (無法挽救,只能重寫程式!)

>f95 product.f95 -o product.f95

product.f95變成執行檔,無法再做任何編輯, 也看不到程式碼!

• 悲劇二:修改程式(xxx.f95)後忘記編譯,反覆執行 舊版的執行檔(a.out或xxx.exe),鬼打牆debug...



宣告變數

product.f95 加上這行 PROGRAM product 就會關閉 → IMPLICIT NONE 預設變數 ! This is our first example of a FORTRAN program. 類型的功 ! It asks the user to input two numbers, then the product of ! the two numbers is calculated, and output on the screen. 能 ! (weitingc, 2012/09/04) ! (edited 2013/09/16) ! Declare the variables used in this program 宣告三個 REAL :: i, j, k ! i, j are input numbers, k is result 實數(real) 變數:i,j, ! Start read in i and j WRITE(*,*) 'Please input two numbers:' READ(*,*) i, j ! Calculate the product (k) of i and j, and output on screen k = i*jWRITE(*,*) 'The product of these two numbers is:', k

END PROGRAM product

Fortran Constant and Variable types

- 可宣告的類型(該變數/常數可被賦予「數值」類別)
 - 整數 Integer (沒有小數點)
 - 實數 Real (必有小數點)
 - 字串 Character (文字,用單引號'(或雙引號""夾起)
 - 其他:邏輯 Logical, 複數 Complex, 自訂種類 Derived data type
- Variable (變數) vs. Constant (常數)
 - 常數與變數均可宣告為整數、實數、字串
 - 變數:在程式執行過程中,其值可能會因運算改變
 - 常數:在程式執行過程中,其值不可改變
- 取名規則:變數名字最多**31**個字元(只能是字母、數字、_的組合,首字元必須是字母)

Air-RH_700hPa X Air_RH@700hPa X

Declaration of Variables and Constants

• 宣告變數類型

```
INTEGER :: a
```

REAL :: b, c, d

CHARACTER (len=3) :: name1

CHARACTER(5) :: name2

宣告字串變數時,需設定 變數要儲存的長度有幾個 字元(len=??),與變數 名稱長度無關

• 宣告常數類型

```
INTEGER, PARAMETER :: k=3
```

REAL, PARAMETER :: PI=3.1416, Q=1.2E+6

(常數在宣告時就要「賦值」,其值之後不可更動)

Default Typing and IMPLICIT NONE

- 預設變數類型:如果一個變數沒有被宣告, FORTRAN會依照<u>變數名稱的第一個字母</u>,預設此 變數的類型,規則如下
 - 開頭是 i, j, k, L, M, N (大小寫都包括):預設為<u>整數</u> Integer
 - 其他開頭:預設為實數 REAL
 - 預設類型不包括字串、邏輯、複數變數
- 在宣告變數前加上IMPLICIT NONE,可關閉預設 變數類型的功能:compiler如果檢查到未被宣告的 變數,會出現錯誤訊息提醒。

預習問題一第三部分

用nano或其他編輯器瀏覽product.f95。

(1) 請問變數i是什麼類型?你是怎麼判斷的?

(如果移除程式中IMPLICIT NONE與REAL::i, j, k 這兩行, 會發生什麼事?)

設定變數數值(賦值)、數學運算

```
product.f95
           PROGRAM product
           IMPLICIT NONE
           ! This is our first example of a FORTRAN program.
           ! It asks the user to input two numbers, then the product of
           ! the two numbers is calculated, and output on the screen.
           ! (weitingc, 2012/09/04)
           ! (edited 2013/09/16)
           ! Declare the variables used in this program
           REAL :: i, j, k ! i, j are input numbers, k is result
從鍵盤接收
           ! Start read in i and j
數值,為變
           WRITE(*,*) 'Please input two numbers:'
數i,j賦值 → READ(*,*) i, j
           ! Calculate the product (k) of i and j, and output on screen
對變數k賦 → k = i*j
值,其值是
          WRITE(*,*) 'The product of these two numbers is:', k
變數i與j的
          END PROGRAM product
```

乘積

Assign a value to a variable (賦值)

(在fortran程式中,用等號(=)來賦予變數數值或字串內容,例如 C=-100.這行程式,口語化的意思就是「令實數變數C為-100.」)

```
INTEGER :: a=10 整數變數,不含小數點
```

REAL :: b, c, d

CHARACTER (len=3) :: name1

CHARACTER (5) :: name2

```
b = +1.234 → 實數變數,含一個小數點,+號可省略
```

```
name1 = 'PTT' →字串變數由一對單引號或雙引號夾起 name2 ="' @$!'" →字串變數內容可帶有空白、符號
```

對變數與常數賦值

• 對變數賦值(可在宣告區或執行區)

```
INTEGER :: a = 10

REAL :: b, c, d

...
b = 1.234
```

• 對常數賦值(只能在宣告區)

```
INTEGER, PARAMETER :: k=3

REAL, PARAMETER :: PI=3.1416, Q=1.2E+6

(常數在宣告之後,其值不可更動)
```

賦值:常犯的錯誤或潛在問題

INTEGER :: a

REAL :: b, c, d

CHARACTER (len=3) :: name1

CHARACTER (5) :: name2

$$\Delta a = 10.23$$

→整數變數,小數點後自動無條件捨去 (程式) 仍可執行,但可能造成計算錯誤!)

- \times b = +1.234.
- $\Delta C = 1/3$
- $\times d = 1.23E+4$.

- →

 實數變數只可含一個小數點
- >實數數值用整數運算取得,會有精確度問題
- →

 實數變數若用科學記號表示,指數需是整數
- × name1 = 'PTT →字串變數需由一對單引號或雙引號夾起

常數、變數類型宣告-秘訣

- 永遠使用IMPLICIT NONE,避免使用預設變數類型 (i.e.所有的變數都要宣告),以免造成錯誤混淆
- 取名字盡量符合變數代表的意義,方便瞭解(例如:year, Tair, distance, name...)
- 自己決定變數名稱大小寫的使用習慣(例如常數一律首字母大寫,整數一律全大寫...等),確實遵守
- 在宣告區,利用註解說明各變數、常數代表的意義、單位、功用,例如:

REAL :: Tair

! Tair = air temperature from input file (K)

Simple Arithmetic Calculation (代數運算)

```
INTEGER :: a
REAL :: b, c, d

a = 10 →等

b = a+1.234 →等
```

→等號右邊可以是數字

b = a+1.234 →等號右邊也可以是代數運算式

$$C = (a-4.)*b$$

$$d = (a**b)/c$$

```
Write(*,*) a, b, c, d
```

基本運算符號

- + 加 - 減 * 乘 /
- ** 次方

輸出結果:10 11.23400 67.40400 2.5428137E+09

Simple Arithmetic Calculation – 運算規則

• 等號左邊只能有一個變數

$$A = 3 + B$$
 O

$$A-B = 3$$
 X

• 等號右邊可以是數字或代數式,但運算符號(+,-,*, /,**)不可連用,要適當用括號分開

$$A = 3*(-B)$$
 O

$$A = 3*-B$$
 X

$$x = u^*(y+z)$$
 O

$$x = u(y+z) X$$

• 負數取次方時,次方部份必須為整數

$$q = (-3.0)**2$$

$$q = (-3.0)**2$$
 $Q = (-3.0)**(2.0)$ X

(理由:電腦會用exlny來計算yx,而負數的自然對數無法定義)

(提醒:等號(=)是用來賦予變數數值,例如 A=3+B這行程式, 口語化的意思就是「令變數A為3加上變數B」)

Simple Arithmetic Calculation – 運算規則

- 運算符號的優先順序
 - () 裡的優先
 - **先算(由右到左), 再來是*,/,+,-(由左到右)
 - 為避免錯誤、混淆,適當使用(),或是&換行

```
x = 3.*(2. + 5.)*4. + 10./2.**3
= 3.*7.*4. + 10./2.**3
= 3.*7.*4. + 10./8.
= 84. + 1.25
= 85.25
```

字串變數的長度

CHARACTER (5) :: name='R='

REAL :: x=8.314

如果字串變數被賦值的內容比宣告時的長度短, 不足的部分會自動補上空格,

WRITE(*,*) name,x

輸出結果 R= 8.314

• 可以利用內建函數TRIM()去除字串尾端的空格:

WRITE(*,*) TRIM(name),x

輸出結果 R=8.314

字串的連接

- 用雙斜線 // 可以連接字串
- 可作用於字串變數,也可以用於字串內容
- 連接後的結果可直接輸出,也可以用來對新的字串賦值

```
CHARACTER(5) :: name1='abc'//'de'
CHARACTER(5) :: name2='ghijk'

WRITE(*,*) '123'//'45' 輸出結果
WRITE(*,*) name1//name2

WRITE(*,*) name1//'gh'

abcdegh
```

Intrinsic Functions (內建函數)

- Fortran內建常用的數學函數(大小寫均可)
 - 平方根: SQRT(x) (三次方根要用 x**(1./3.)求得)
 - 絕對值:ABS(x)
 - 指數函數: EXP(x)
 - 對數函數:自然對數 LOG(x), 十為底的對數 LOG10(x)
 - 三角函數:SIN(x), COS(x), TAN(x) (x的單位是radian)
 - 反三角函數(sin⁻¹(x)等):ASIN(x), ACOS(x), ATAN(x)
 - 餘數:MOD(x,y)
 - 較大值、較小值: MAX(x,y), MIN(x,y)
- Fortran 沒有內建圓周率常數pi,要自己使用三角函數計算得出,如 pi = 4.*ATAN(1.)。

Intrinsic Functions

$$a = SQRT(10)$$

→函數括號內可以是數字

$$G = LOG10(b)$$

→函數括號內可以是變數

$$Temp = SIN(x*y)$$

→函數括號內可以是運算式

$$K = EXP(X) **MAX(x,y)$$
 →函數之間也可以運算

$$Log_a = LOG(ABS(x))$$

→函數括號內可以是另一個函數 (注意括號的數目與位置)

$$X X X COS(X) = 10. X X X$$

→函數不可以出現在等號左邊!!

從鍵盤輸入變數數值、由螢幕輸出變數數值

收變數i,i

榮幕輸出

文字與變

數k的數值

END PROGRAM product

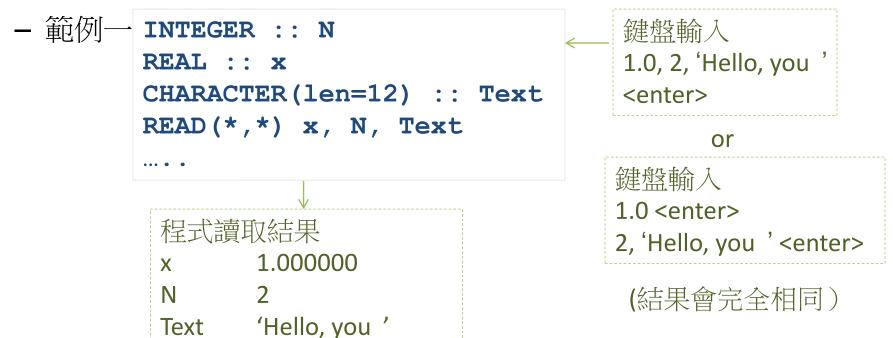
的數值

product.f95 PROGRAM product IMPLICIT NONE ! This is our first example of a FORTRAN program. ! It asks the user to input two numbers, then the product of ! the two numbers is calculated, and output on the screen. ! (weitingc, 2012/09/04) ! Declare the variables used in this program REAL :: i, j, k ! i, j are input numbers, k is result 榮幕輸出文字! Start read in i and j WRITE(*,*) 'Please input two numbers:' 從鍵盤接 → READ(*,*) i, j ! Calculate the product (k) of i and j, and output on screen k = i*j→ WRITE(*,*) 'The product of these two numbers is:', k

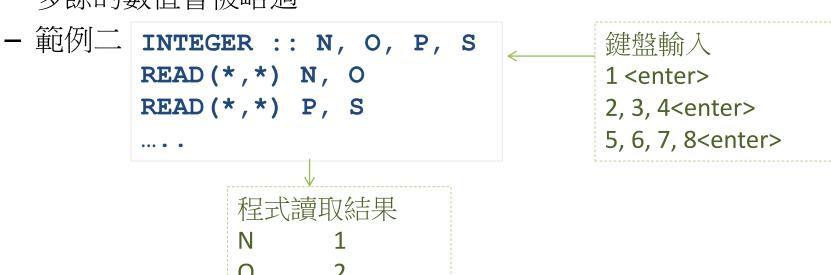
- READ(*,*) 讀入鍵盤輸入的數值或字串內容
 - 依序讀入變數,讀取格式由compiler按照變數類型設定 (之後會教如何在程式裡設定想要讀取的格式)



- READ(*,*) 讀入鍵盤輸入的數值或字串內容
 - 輸入時可以一個變數一行(按一次enter),或數個變數一行(中間用空格或逗號隔開)。輸入的字串如果含有空格要用"夾起。
 - 輸入的值要符合變數類型(若變數宣告為整數,輸入實數或字串會產生執行錯誤;若變數宣告為實數,輸入整數可以被接受,會自動補上小數點)



- READ(*,*) 讀入鍵盤輸入的數值或字串內容
 - 每一個READ,程式會換新的一行(<enter>)讀取。
 - 如果READ要讀取好幾個變數,輸入的數值會一個一個依序被 讀入(無論有沒有換行),直到每個要讀取的變數都被讀入 為止
 - 如果輸入的數值太多,超過READ需要讀入的變數數目,後面 多餘的數值會被略過



- WRITE(*,*) 將數值或字串顯示在螢幕上
 - 每一個WRITE指令輸出一行,要輸出多個變數時,程式中用逗號隔開(執行時,逗號不會顯示在畫面上)
 - 可輸出變數、算式、函式。輸出格式由compiler預設(之後會教如何在程式裡設定想要輸出的格式)
 - 範例

```
INTEGER :: N
REAL :: x
CHARACTER(len=12) :: Text
x=1.
N=2
Text='Bye!'
WRITE(*,*) x, N, x/N, Text
....
```

預習問題-第三部分

用nano或其他編輯器瀏覽product.f95檔案。

(2) 請問READ(*,*) i, j這行,會讓程式執行時發生什麼事情?

```
product.f95
  PROGRAM product
  IMPLICIT NONE
  ! Start read in i and j
  WRITE(*,*) 'Please input two numbers:'
\rightarrow READ(*,*) i, j
                 接收鍵盤輸入的兩個數值,為實數變數i與j賦值
  ! Calculate the product (k) of i and j, and output on screen
  k = i*j
→ WRITE(*,*) 'The product of these two numbers is:', k
  END PROGRAM product
```

(如果將第二個WRITE改成WRITE(*,*) i, 'x', j, '=', k , 會發生什麼事?)

簡單輸出指令

• 若是單純螢幕輸出, write(*,*)和 print*, (逗號不能省)的結果是相同的。

The Free Format of F90

- 幾個FORTRAN90程式的規則
 - 用!標記之後的文字為註解
 - 每行最多不可超過132個字元
 - 一行的<u>最後</u>若出現 & 符號,代表這一行與下一行要連在一起,成為完整的一行程式

F90 Format -- example

一行最多132字元(超過的直接省略)

```
PROGRAM square
                                    整行都是註解
IMPLICIT NONE
!This program calculates the square of integers
Integer :: a=2
WRITE (*,*) \1^2, 2^2,...6^2=' ! Starting
                                   此行後半為註解
WRITE (*,*) 1**a, &
           2**a, &
                    此行與下一行連結
           3**a, &
                   (適當的分行可以讓程式整齊清爽)
           4**a, &
           5**a, &
           6**a
END PROGRAM square
```

Mixed-Mode Arithmetic 混型計算

- 當運算式裡同時有實數和整數,要注意最後的結果是否為 你預期的。
 - 整數與整數運算→結果為整數,小數點下無條件捨去3/4 → 0
 - 實數與實數運算→結果為實數 3./4. → 0.75
 - 整數與實數運算→結果為**實數** 3./4 → 0.75
- 問題通常發生在算式裡同時有 + * /的時候,按照運算規則, * / 會先算,再算 + -

```
1 + 3/4 (整數 + 整數) → 1 + 0 → 1
```

1. + 3./4 (實數 + 實數) → 1. + 0.75 → 1.75

Mixed-Mode Arithmetic 混型計算

· 為了避免預期外的混型運算結果,可以利用 INT(X), NINT(X), REAL(I)轉換變數類型

- INT(X) :實數轉換成整數,小數點下無條件捨去

- NINT(X): 實數轉換成整數,小數點下四捨五入

- **REAL(I)**:整數轉換成實數

```
1 + INT(3./4.) \rightarrow 1 + 0 \rightarrow 1

1 + NINT(3./4.) \rightarrow 1 + 1 \rightarrow 2

1. + REAL(3)/REAL(4) \rightarrow 1. + 0.75 \rightarrow 1.75

1. + REAL(3/4) \rightarrow 1. + 0. \rightarrow 1.
```

本日小結

- FORTRAN程式基本結構
 - 宣告區、執行區、終止區
- 編譯、執行程式
- 變數類型、宣告方式、數值設定
 - 整數、實數、字串
- 基本代數運算、內建函數與規則
 - a+b, a-b, a*b, a/b, a**b
 - $-\operatorname{sqrt}(x)$, $\operatorname{abs}(x)$, $\operatorname{cos}(y)$, $\operatorname{exp}(y)$, $\operatorname{log}(z)$, $\operatorname{max}(z)$...
- 基本變數數值讀寫 (鍵盤輸入、螢幕輸出)
 - read(*,*), write(*,*)

本日小結

- 要設定一個變數/常數的值,有幾種方法:
 - 變數,可在宣告時賦值

INTEGER :: time = 0

- 變數,可在程式執行區利用 = 賦值

A = 5

x = a*exp(b)

- 變數,可由使用者輸入賦值(在執行區用read)

READ(*,*) a, b

一常數:只能在宣告時賦值,在執行區更動常數數值, 編譯程式會出現做錯誤訊息

REAL, PARAMETER :: PI=3.1416, Q=1.2E+6

秘訣:養成宣告並設定每個變數<u>初始數值</u>的習慣(歸零、給定數值、讀入數值...),避免compiler給的「驚喜」...