计算程序与数学算法在化学中的应用
学习笔记

何尹铭

2025 年 8 月 3 日

简介

本笔记在课程教学 PPT 的基础上，结合个人的学习经验，适当调整了一些顺序，整合了较分散的内容，每部分内容都形成了“总结”部分。在此基础上，稍微拓展了一些有用的功能。同时，笔记里面包含了大量的代码示例，可以跟着笔记进行实践操作，加深记忆、理解。

水平所限，难免疏漏，如有错误，恳请指正。

目录

0 写在前面

0.1 章节结构

本笔记层级为章节、小节、小小节，例如 1、1.1、1.1.1 等。

笔记中代码块以小节为基础，向下编号，与小小节并行，与小小节编号无关。如：

代码 0.1.1 text
```
这是第 0 节第 1 小节第 1 个代码块。
```

代码 0.1.2 text
```
这是第 0 节第 1 小节第 2 个代码块。
```

笔记中总结以章节为基础，向下编号，与小节并行，与小节编号无关。如：

总结 0.1 这是第 0 节第 1 小节第 1 个总结。

总结 0.2 这是第 0 节第 1 小节第 2 个总结。

0.2 字体

本笔记正文中文字体为宋体，英文字体为 Times New Roman。

标题字体为思源宋体，页眉中文为楷体，页眉英文为 Times New Roman。

代码块中字体为 Maple 字体。Maple 字体中，字符等宽、显示清晰，需要注意的是 `@` 为“@”符号。

自己需要在 PPT 或 Word 等软件中展示代码时，推荐使用电脑自带的 Consolas 字体，是英文等宽字体。本笔记为了实现中英文均等宽（一个中文字符严格占两个英文字符空间），使用了 Maple 字体。

代码 0.2.1 text
```
一二三四五六七八九十百千万
AbCdEfGhIjKlMnOpQrStUvWxYz
```

0.3 内容

本笔记基于课堂 PPT 内容整理。对于超出课程范围的内容，笔记中会标出，并且可能会有错误或不准确之处。

课程范围内的内容，笔记中力求准确、清晰、易懂，但水平所限，难免有疏漏或错误之处，注意甄别，并请不吝指出。

1 Linux 入门

1.1 Linux 简介

1.1.1 Linux 的起源

1965 年，美国麻省理工学院（MIT），通用电气公司（GE）以及 AT&T 的贝尔实验室联合开发 Multics 工程计划。

1969 年，贝尔实验室的肯 • 汤姆森（Kennneth Thompson）在小型机上开发出了 UNIX 系统，1970 年发布。

1971 年，丹尼斯 • 里奇（Dennis Ritchie）发明了 C 语言，

1973 年，UNIX 系统的绝大部分源代码用 C 语言重写，提高了 UNIX 系统的可移植性。

1991 年，李纳斯 • 托尔德（Linus Torvalds）开发了 Linux。

目前，Linux 内核已经发展到 6.13.1 版本（主版本号. 次版本号. 末版本号），是 Linux 操作系统的核心。负责管理系统的进程、内存、设备驱动程序、文件和网络系统。

仅内核和工具链对普通用户来说难以安装和使用。为了解决这个问题，发行版 (Distributions) 开始出现。

最早的发行版包括：Softlanding Linux System (SLS)、Slackware (1993)；基于 SLS，至今仍在维护的最古老发行版之一。Debian (1993)：以其严格的自由软件原则、社区治理和庞大的软件仓库而闻名。

1994 年 3 月，Linux 1.0 内核发布，标志着它被认为足够稳定和功能完备。

目前常用的发行版有 Ubuntu、Debian、Fedora、CentOS、Red Hat Enterprise Linux (RHEL)、Arch Linux 等。这份笔记全部基于 Ubuntu24.04.2 LTS 版本。

1.2 Linux 的特点

1.2.1 Linux 优点

Linux 的分层权限体系是其核心优势之一，显著提升了系统安全性与管理效率。

系统用户明确分为两类：

root 用户：拥有最高权限，可执行所有系统操作和管理任务。

普通用户：权限受限，默认仅能访问自身文件，有效防止误操作或恶意软件破坏系统关键部分（需 sudo 授权提升权限）。

此外，用户组机制提供了便捷的文件协作方式。管理员可将用户加入特定组，并设置组权限，实现组内成员对共享资源的稳定访问，简化了团队协作中的权限管理。

这种严谨的权限隔离机制，是 Linux 系统高稳定性和安全性的重要基石。

1.2.2 Linux 操作特点

Linux 秉承“一切皆文件”的核心设计理念。整个系统的操作实质上是对文件的管理，例如：硬件设备抽象为/dev 目录下的设备文件；用户空间映射为/home 下的个人目录。这种统一通过文件接口管理软硬件资源的机制，是 Linux 操作的基础特点和强大优势。

1.3 Linux 的安装

现在我们常用的是 Windows 操作系统或 MacOS 操作系统，这时要使用 Linux 的相关功能，就要安装 Linux 操作系统。安装方式有三种：双系统、虚拟机、子系统，其中双系统操作复杂、稳定性差，这里不作介绍。

1.3.1 虚拟机

虚拟机软件是一种特殊的软件，可以模拟具有完整硬件系统功能的、运行在一个完全隔离环境中的完整计算机系统，可使用其所在物理机（即主机系统）的物理资源。

在 Windows 和 MacOS 系统中，我们常用 VMware Workstation Pro / VMware Fusion。这原本是收费软件，被博通收购后逐步开放，到现在已经完全免费了，在官网可下载安装。现在任何收费的都是盗版软件。下载安装流程比较复杂，可以参考**这篇知乎文章**。

另外，要下载系统的镜像文件，在虚拟机软件 VMware 中创建虚拟机时需要用到。镜像软件可在发行版官网或者开源镜像网站找到，比如 Ubuntu24.04.2 LTS 版本，可以在**清华大学开源软件镜像站**下载，打开后选择“ubuntu-24.04.2-desktop-amd64.iso”下载即可。

都下载完成后，虚拟机具体安装流程可参考**这一篇知乎文章**。以上两篇文章建议先通读一遍，了解整体流程，再逐步安装。上面提到的 VMware Workstation Pro 和 VMware Fusion 还有 Ubuntu24.04.2 LTS 镜像文件，我打包了一个压缩包，放在了**学习通网盘**，可以直接下载解压后使用。

安装之后，右击桌面，选择“在终端中打开”。运行如下指令（需要输入的是 $ 之后的部分）：

代码 1.3.1 Bash

```
user@host:~$ sudo passwd root
```

首先输入当前用户的密码，然后输入两次要为 root 用户设置的密码，即可设置 root 用户的密码。如果密码过于简单，系统会提示密码不安全，此时不用管它，原样再输入一遍，就能设置成功。

1.3.2 子系统

子系统是指在 Windows 操作系统中运行的 Linux 环境，通常通过 Windows Subsystem for Linux (WSL) 的终端来实现，通常没有桌面环境，只提供命令行界面，如需桌面环境，需要额外配置。

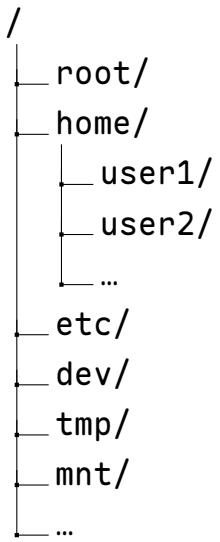
在 Windows 自带的 Microsoft Store 中搜索“Ubuntu”，可以找到多个版本的 Ubuntu 子系统，如 Ubuntu 24.04 LTS 等，选择合适的版本进行安装即可。

具体安装细节可参考**这一篇知乎文章**。安装相较于虚拟机简单很多。

1.4 Linux 的文件结构与目录相关操作

1.4.1 Linux 文件系统结构

Linux 的文件系统采用树形结构，所有文件和目录都从根目录（/）开始，根目录下有多个子目录。每个目录下可以包含文件和其他子目录，形成一个层次分明的目录结构。以下是较重要的目录。



其中：

`/`：根目录，与开机、还原、系统修复等操作有关；

`/root`：管理员的主目录；

`/home`：系统默认的用户主目录；

`/bin`：二进制可执行文件，常用命令；

`/sbin`：管理员才能使用的目录，存放系统执行文件；

`/usr`：用户级别目录，存放用户自己的指令，与软件安装执行有关；

`/var`：存放经常变动、与系统运作过程有关的文件，如日志、网页、缓存等；

`/etc`：系统管理所需要的配置文件和子目录；

`/dev`：外部设备文件；

`/lib` 和 `/lib64`：32 位和 64 位软件安装位置，函数库；

`/boot`：启动 Linux 时使用的文件；

`/opt`：放置第三方软件，是默认的软件安装目录

`/tmp`：临时文件目录；

`/mnt`：临时挂载的文件系统，挂载光盘、U 盘等；

我们可以使用 `pwd` 命令（print working directory）查看当前所在目录，如：

代码 1.4.1 Bash

```
user1@host:~$ pwd
/home/user1
```

运行 `pwd` 给出的结果就是当前所在目录的绝对路径 `/home/user1` 。

与绝对路径相对的还有相对路径，绝对路径是从根目录开始的完整路径，而相对路径是相对于当前目录的路径。例如，如果当前目录是 `/home` ，则相对路径 `user1` 或 `./user1` 表示 `/home/user1` ，其中 `.` 表示当前目录。而绝对路径则是 `/home/user1/test` 。

1.4.2 切换、创建、删除目录

如果现在登陆的用户是 user1，则主文件夹就是/home/user1，可以通过如下指令进入:

代码 1.4.2 Bash

```
user1@host:~$ cd /home/user1
```

或

代码 1.4.3 Bash

```
user1@host:~$ cd ~
```

其中 `cd` 就是“change directory”的缩写，表示切换目录； `~` 表示当前用户主文件夹。

创建文件夹用 `mkdir` 命令（make directory），如在当前目录下创建一个名为 `test` 的文件夹，则可以执行：

代码 1.4.4 Bash

```
user1@host:~$ mkdir test
```

在 test 文件夹中创建一个名为 `test1` 的子目录，在 `test1` 中创建 `test2` 、 `test3` 目录，则可以执行 (可同时创建多个)：

代码 1.4.5 Bash

```
user1@host:~$ mkdir ~/test/test1
user1@host:~$ mkdir ~/test/test1/test2 ~/test/test1/test3
```

或直接执行：

代码 1.4.6 Bash

```
user1@host:~$ mkdir -p ~/test/test1/test2
```

其中 `-p` 表示递归创建多层级目录。

可以用 `rmdir` 命令（remove directory）删除空目录。

代码 1.4.7 Bash

```
user1@host:~$ rmdir ~/test/test1/test3
```

此时 user1 目录下有一个名为 `test` 的子目录，其下又有 `test1` 的目录，则可以通过如下指令进入:

代码 1.4.8 Bash

```
user1@host:~$ cd ~/test/test1
```

我们采用 touch 命令创建文件，如在当前目录下创建一个名为 `1.txt` 的文件，则可以执行：

代码 1.4.9 Bash

```
user1@host:~/test/test1$ touch 1.txt
```

也可以直接创建多个文件，如在当前目录下创建 `1.txt` 和 `2.txt` 两个文件，则可以执行：

代码 1.4.10 Bash

```
user1@host:~/test/test1$ touch 1.txt 2.txt
```

此时这个文件夹中有 `1.txt` `2.txt` 文件以及 `test2` 目录，进入此文件夹后，则可以通过如下指令查看当前目录下的文件：

代码 1.4.11 Bash

```
user1@host:~/test/test1$ ls
1.txt  2.txt  test2
```

其中 `ls` 就是“list”的缩写，表示列出当前目录下的文件和子目录；运行结果就是当前目录下的文件和子目录列表，在这里就显示为 `1.txt 2.txt test2` 。

目录中， `.` 表示当前目录， `..` 表示上一级目录。如目前的状态，要进入 `test2` 目录，可执行：

代码 1.4.12 Bash

```
user1@host:~/test/test1$ cd ./test2
```

其中 `.` 即当前目录。如果要返回上一级目录，则可以执行：

代码 1.4.13 Bash

```
user1@host:~/test/test1/test2$ cd ..
```

1.4.3 文件和目录的复制、移动、重命名以及列出目录里的文件

我们可以用 `cp` 命令（copy）复制文件，或用 `mv` 命令（move）移动文件或重命名文件。如将 `1.txt` 复制到 `test2` 目录下，则可以执行：

代码 1.4.14 Bash

```
user1@host:~/test/test1$ cp 1.txt test2/
```

如把 `1.txt` 复制到 `test2` 目录下，并重命名为 `3.txt` ，则可以执行：

代码 1.4.15 Bash

```
user1@host:~/test/test1$ cp 1.txt test2/3.txt
```

如给 `1.txt` 重命名为 `.4.txt` ，则可以执行：

代码 1.4.16 Bash

```
user1@host:~/test/test1$ mv test2/1.txt test2/.4.txt
```

其中 `.4.txt` 是一个隐藏文件，前面有 `.` ，在 Linux 中，前面带 `.` 的文件或目录都是隐藏的。

`cp` 命令有 `-r` 选项（recursive），与 `mkdir -r` 类似，表示递归复制目录及其内容。 `cp` 命令和 `mv` 命令都可以使用 `-i` 选项（interactive），表示在覆盖文件时进行提示。 `cp` 命令和 `mv`

命令也可以复制、移动多个文件，基本结构为：

代码 1.4.17 Bash

```
cp [选项] 源文件 1 源文件 2 ... 目标目录
mv [选项] 源文件 1 源文件 2 ... 目标目录
```

上文提到，`ls` 命令可以列出当前目录下的文件和子目录，但如果要查看更详细的信息，则可以使用 `ls -l` 命令。其中 `-l` 表示“long”，即长格式，显示更详细的信息，如文件权限、所有者、大小和修改时间等。

查看隐藏文件或文件夹，可用“ls -a” 命令（all）。展示子文件夹下文件和目录，可用”ls -R” 命令（注意大写）。

`ls` 除了可以查看当前目录下的文件和子目录，还可以查看其他目录下的文件和子目录。

总结而言，`ls` 命令的基本结构为：

代码 1.4.18 Bash

```
ls [选项] [目录]
```

以上命令可用组合使用，例子如下：

代码 1.4.19 Bash

```
user1@host:~/test/test1$ ls -a ~/test
.  ..  1.txt  2.txt  test2

user1@host:~/test/test1$ ls -l
总计 4
-rw-rw-r-- 1 user1 user1    0  7 月  1 12:48 1.txt
-rw-rw-r-- 1 user1 user1    0  7 月  1 12:48 2.txt
drwxrwxr-x 2 user1 user1 4096  7 月  1 12:47 test2

user1@host:~/test/test1$ ls -a
.  ..  1.txt  2.txt  test2

user1@host:~/test/test1$ ls -R
.:
```

```
1.txt  2.txt  test2

./test2:
1.txt

user1@host:~/test/test1$ ls -aR
.:
.  ..  1.txt  2.txt  test2

./test2:
.  ..  1.txt  .4.txt

user1@host:~/test/test1$ ls -alR
.:
总计 12
drwxrwxr-x 3 user1 user1 4096  7 月  1 12:48 .
drwxrwxr-x 3 user1 user1 4096  7 月  1 12:47 ..
-rw-rw-r-- 1 user1 user1    0  7 月  1 12:48 1.txt
-rw-rw-r-- 1 user1 user1    0  7 月  1 12:48 2.txt
drwxrwxr-x 2 user1 user1 4096  7 月  1 12:53 test2

./test2:
总计 8
drwxrwxr-x 2 user1 user1 4096  7 月  1 12:53 .
drwxrwxr-x 3 user1 user1 4096  7 月  1 12:48 ..
-rw-rw-r-- 1 user1 user1    0  7 月  1 12:53 1.txt
-rw-rw-r-- 1 user1 user1    0  7 月  1 12:53 .4.txt
```

其中长格式显示的内容包括：

- 第一列：文件类型和权限，第一个字符为类型（如 `-` 为一般文件、 `d` 为目录），之后三个字符为一组，分别为所有者、用户组、所有用户的权限， `r` 表示可读、 `w` 表示可写、 `x` 表示可执行。如 `-rwxrw-r--` 表示一般文件，所有者可读可写可执行，用户组内用户可读可写，所有人可读；

- 第二列：硬链接数（指向该文件的链接数量）；

- 第三列：文件所有者（如 `user1` ）；

- 第四列：文件所属组（如 `user1` ）；

- 第五列：文件大小（以字节为单位）；

- 第六列：最后修改时间（如 `7 月 1 12:48` ）；

- 第七列：文件名（如 `1.txt` ）。

最后，我们可用使用 `rm` 命令（remove）删除文件或目录，也可以同时删除多个文件或目录。如果要删除 `1.txt` 文件，则可以执行：

代码 1.4.20 Bash

```
user1@host:~/test/test1$ rm 1.txt
```

`rm` 命令也有一些可选项，如 `-i` 表示在删除前进行确认， `-r` 表示递归删除目录及其内容，`-f` 表示强制删除，忽略不存在的文件。

如果要删除 `test1` 目录及其内容，则可以执行：

代码 1.4.21 Bash

```
user1@host:~/test/test1$ cd ..
user1@host:~/test$ rm -r test1
```

总结 1.1 目录和文件相关命令用法

绝对路径是从根目录开始的完整路径，而相对路径是相对于当前目录的路径。

`pwd` 命令用于显示当前工作目录的绝对路径。

`/home/username` 为当前用户的主文件夹，可以用 `~` 表示。

`cd` 命令用于切换目录； `.` 表示当前目录； `..` 表示上一级目录。

`mkdir` 命令用于创建目录；`rmdir` 命令用于删除空目录；`touch` 命令用于创建文件，这三个命令都可以同时操作多个文件或目录。 `mkdir` 命令有可选项 `-p` ，表示递归创建多层级目录。其命令结构为：

代码 1.4.22 Bash

```
mkdir [-p] 目录 1 目录 2 ...
rmdir 目录 1 目录 2 ...
touch 文件 1 文件 2 ...
```

`cp` 命令用于复制文件或目录；`mv` 命令用于移动文件或目录或重命名文件或目录，这两个命令都可以同时操作多个文件或目录。`cp` 命令有可选项 `-r`，表示递归复制目录及其内容；`cp` 命令和 `mv` 命令有可选项 `-i`，表示在覆盖文件时进行提示。其命令结构为：

代码 1.4.23 Bash

```
cp [-r,-i] 源文件 1 源文件 2 ... 目标目录
mv [-i] 源文件 1 源文件 2 ... 目标目录
```

`ls` 命令用于列出当前目录下的文件和子目录；`-l` 用于列出当前目录下的文件和子目录的详细信息；`-a` 用于列出当前目录下的所有文件和子目录，包括隐藏文件和目录；`-R` 命令用于递归列出当前目录下的所有文件和子目录。其命令结构为：

代码 1.4.24 Bash

```
ls [-l,-a,-R] [目录]
```

`rm` 命令用于删除文件或目录；`-i` 表示在删除前进行确认，`-r` 表示递归删除目录及其内容，`-f` 表示强制删除，忽略不存在的文件。其命令结构为：

代码 1.4.25 Bash

```
rm [-i,-r,-f] 文件 1 文件 2 ... 目录 1 目录 2 ...
```

以上命令的选项可组合使用。

注意 1.1 重点

Linux 对大小写敏感，不可混用。

1.5 文件操作命令

前面我们已经用到了 touch 命令创建文件，接下来我们介绍一些常用的文件操作命令。

1.5.1 输入和输出、输出重定向

前面我们使用的 `pwd` 命令和 `ls` 命令都是直接输出到终端的，而有时我们希望将输出结果保存到文件中，这时就可以使用输出重定向。

在 Linux 中，可以使用 `>` 符号将命令的输出重定向到文件中，例如：

代码 1.5.1 Bash

```
user1@host:~$ ls > list.txt
```

上述命令会将当前目录下的文件和子目录列表保存到 `list.txt` 文件中。如果 `list.txt` 文件已存在，则会被覆盖。

如果希望将输出追加到文件末尾而不是覆盖，可以使用 `>>` 符号，例如：

代码 1.5.2 Bash

```
user1@host:~$ ls >> list.txt
```

此外，还可以使用 `2>` 将错误输出重定向到文件，例如：

代码 1.5.3 Bash

```
user1@host:~$ ls non_existing_file 2> error.log
```

上述命令会将错误信息保存到 `error.log` 文件中。

通过输出重定向，我们可以方便地将命令的输出结果保存到文件中，以便后续查看和处理。

`echo` 命令能够将文本输出到终端中，可以使用输出重定向将文本保存到文件中，例如：

代码 1.5.4 Bash

```
user1@host:~$ echo "Hello, World!"
Hello, World!
user1@host:~$ echo "Hello, World!" > test/hello.txt
```

如第一条命令会将 `Hello, World!` 输出到终端，而第二条命令会将 `Hello, World!` 保存到 `test/hello.txt` 文件中。如果 `test/hello.txt` 文件不存在，它会被创建；如果 `test/hello.txt` 文件已存在，则会被覆盖。

代码 1.5.5 Bash

```
user1@host:~$ echo "I'm Linux." >> test/hello.txt
user1@host:~$ echo "I'm also Ubuntu." >> test/hello.txt
```

上述命令会将 `I'm Linux.`、`I'm also Ubuntu.` 追加到 `test/hello.txt` 文件的末尾。此时 `test` 目录下的 `hello.txt` 文件内容为：

代码 1.5.6 Text

```
Hello, World!
I'm Linux.
I'm also Ubuntu.
```

管道符 `|` 用于将一个命令的输出作为另一个命令的输入，这样可以将多个命令组合起来，实现更复杂的操作。一个简单的例子：`pwd` 能给出当前的目录，而 `ls` 能列出当前目录下的文件和子目录，我们可以将这两个命令组合起来，查看当前目录下的文件和子目录列表：

代码 1.5.7 Bash

```
user1@host:~$ pwd | ls
```

上述命令会将 `pwd` 的输出作为 `ls` 的输入，列出当前目录下的文件和子目录列表。事实上，上面的命令与直接使用 `ls` 没有区别，因为 `ls` 默认列出当前目录下的文件和子目录，这里只是借此介绍管道符的用法。之后会给出一些实用的例子。

除此之外，还有 `<` `<<` 符号用于将文件或文本内容作为命令的输入。例子在之后给出。

通配符是 Linux 中用于匹配文件名或目录名的特殊字符，可以用来简化命令输入。常用的通配符包括：

`*`：匹配零个或多个字符。例如，`*.txt` 匹配所有以 `.txt` 结尾的文件。

`?`：匹配一个字符。例如，`file?.txt` 匹配 `file1.txt`、`file2.txt` 等。

`[ ]`：匹配括号内的任意一个字符。例如，`file[1-3].txt` 匹配 `file1.txt`、`file2.txt` 等。

`{ }`：匹配多个选项。例如，`file{1,2,3}.txt` 匹配 `file1.txt`、`file2.txt`、`file3.txt` 。

`[! ]`：匹配不在括号内的字符。例如，`file[!1-3].txt` 匹配 `file4.txt`、`file5.txt` 等。

如：

代码 1.5.8 Bash

```
user1@host:~$ rm *.txt
```

上述命令会删除当前目录下所有以 `.txt` 结尾的文件。

1.5.2 查看文件内容

查看文件内容我们可以使用 `cat` 命令（concatenate），它可以将文件内容输出到终端。cat 命令有 `-n` 选项，可显示行号。例如：

代码 1.5.9 Bash

```
user1@host:~$ cat test/hello.txt
Hello, World!
I'm Linux.
I'm also Ubuntu.
user1@host:~$ cat -n test/hello.txt
1  Hello, World!
2  I'm Linux.
3  I'm also Ubuntu.
```

我们使用随机数命令 `shuf` 生成随机数，这是课外内容，但在之后非常有用，可以快速生成测试用的数据。

代码 1.5.10 Bash

```
user1@host:~$ shuf -r -n 300 -i 1-100 > test/numbers.txt
```

其中 `-r` 表示允许重复，`-n 300` 表示生成 300 个随机数，`-i 1-100` 表示随机数范围在 1 到 100 之间。上述命令会生成 300 个 1 到 100 之间的随机数，并将结果保存到 `test/numbers.txt` 文件中。

可以预见，这个文件中会有 300 行，此时使用 `cat` 命令输出到终端查看会非常不方便，我们可以使用 `less` 命令（或 `more` 命令）分页查看文件内容。

代码 1.5.11 Bash

```
user1@host:~$ less test/numbers.txt
```

上述命令会打开 `test/numbers.txt` 文件，并在终端分页显示内容。可以使用空格键或 PageDown 向下翻页，用 PageUp 向上翻页（more 命令不行）。

还可以使用以下命令查询里面的内容：

/字符串：向下查询字符串

? 字符串：向上查询字符串

n 重复前一个查询

q 退出

如 `/5` 表示向下查询数字 5，会查询到包含 `5` 的数字，如 15、51、45 等，查询到一个后，可以按 n 重复查询。

我们还可以使用 `head` 命令和 `tail` 命令查看文件的前几行或后几行内容，默认为 10 行。例如：

代码 1.5.12 Bash

```
user1@host:~$ head test/numbers.txt
```

上述命令会显示 `test/numbers.txt` 文件的前 10 行内容。如果要显示前 20 行内容，可以使用 `-n` 选项：

代码 1.5.13 Bash

```
user1@host:~$ head -n 20 test/numbers.txt
```

类似地，使用 `tail` 命令可以查看文件的后几行内容：

另外，这两个命令可以利用管道符 `|` 、输出重定向等组合使用，查看文件特定的几行内容。例如：

代码 1.5.14 Bash

```
user1@host:~$ head -n 20 test/numbers.txt | tail -n 10
user1@host:~$ head -n 20 test/numbers.txt | tail -n 5 >
    ↪ test/numbers16-20.txt
```

第一条命令会显示 `test/numbers.txt` 文件的第 11 到 20 行内容；第二条命令会将 `test/numbers.txt` 文件的第 16 到 20 行内容保存到 `test/numbers16-20.txt` 文件中。

1.5.3 查找文件

查找文件可以使用 `find` 命令，它可以在指定目录下查找符合条件的文件或目录。例如，要在 `test` 目录下查找所有以 `.txt` 结尾的文件，可以使用以下命令：

代码 1.5.15 Bash

```
user1@host:~$ find ./test -name "*.txt"
./test/numbers.txt
./test/hello.txt
```

上述命令会在 `test` 目录下查找所有以 `.txt` 结尾的文件，并输出其相对路径。

还可以使用 `-user` 选项查找指定用户的文件，例如：

代码 1.5.16 Bash

```
user1@host:~$ find ./test -user user1
./test/numbers.txt
./test/hello.txt
```

上述命令会查找 `test` 目录下所有属于用户 `user1` 的文件。

还有其它选项不一一介绍。

查找可执行文件可以使用 `which` 命令，它会显示指定命令的绝对路径。例如：

代码 1.5.17 Bash

```
user1@host:~$ which ls
/bin/ls
user1@host:~$ which find
/usr/bin/find
```

`ls` 和 `find` 命令实际上都是程序，即可执行文件，上述命令会显示 `ls` 和 `find` 命令的绝对路径。

查找命令的二进制可执行文件、源代码和手册页位置，可以使用 whereis 命令。它会显示

指定命令的二进制程序路径、源代码文件路径（如果存在）和帮助手册页路径。

代码 1.5.18 Bash

```
user1@host:~$ whereis ls
ls: /bin/ls /usr/share/man/man1/ls.1.gz
user1@host:~$ whereis find
find: /usr/bin/find /usr/share/man/man1/find.1.gz
    ↪ /usr/share/info/find.info.gz
```

whereis 命令不仅会显示它们的绝对路径，还会一并显示关联的手册页和源代码（若有安装）的路径。

总结 1.2 文件操作命令

`>` 符号用于将命令的输出重定向到文件中，覆盖原有内容；`>>` 符号用于将命令的输出追加到文件末尾。`2>` 用于将错误输出重定向到文件中。`|` 管道符用于将一个命令的输出作为另一个命令的输入。`<` 符号用于将文件内容作为命令的输入；`<<` 符号用于将多行文本作为命令的输入。

`*`、`?`、`[ ]`、`{ }`、`[! ]` 等符号用于匹配文件名或目录名的特殊字符，称为通配符。`*` 可以匹配零个或多个字符；`?` 可以匹配一个字符；`[ ]` 可以匹配括号内的任意一个字符；`{ }` 可以匹配多个选项；`[! ]` 可以匹配不在括号内的字符。

`cat` 命令用于查看文件内容；`cat -n` 用于显示行号。`less` 命令用于分页查看文件内容；`more` 命令也可以分页查看文件内容，不能向前翻页。/字符串用于向下查询字符串；? 字符串用于向上查询字符串；n 重复前一个查询；q 退出。

`head -n` 用于查看文件的前 n 行内容；`tail -n` 用于查看文件的后 n 行内容。只用 `head` 或 `tail` 则默认查看前 10 行或后 10 行内容。可以使用管道符 `|` 和输出重定向等组合使用。

`find` 命令用于查找指定目录下符合条件的文件或目录；`-name` 选项用于按名称查找文件或目录；`-user` 选项用于按所有者查找文件或目录。

`which` 命令用于查找命令的绝对路径；`whereis` 命令用于查找命令的二进制可执行文件、源代码和手册页位置。

1.6 用户与文件权限管理

1.6.1 用户和用户组

Linux 系统中的用户和用户组是管理系统资源和权限的基本单位。每个用户都有一个唯一的用户名和用户 ID（UID），用户组则是由多个用户组成的集合，每个用户组也有一个唯一的组名和组 ID（GID）。

涉及到用户和用户组的管理，通常需要使用 root 用户或具有 sudo 权限的用户来执行相关操作。root 用户是系统的超级用户，拥有最高权限，可以执行所有操作。以下是相关命令：

`su`：切换用户。例如 `su user2` 切换到 user2 用户，只运行 `su` 命令则切换到 root 用户。

`sudo`：以超级用户权限执行命令。注意，使用 `sudo` 命令需要输入当前用户的密码，而不是 root 用户的密码。

用户和用户组的管理可以通过命令行工具来完成，常用的命令包括：

`useradd`：添加新用户；

`userdel`：删除用户；`userdel -r` 表示删除用户及其主目录；

`groupadd`：添加新用户组；

`groupdel`：删除用户组；

`id`：查看当前用户的 UID 和 GID；

`groups`：查看当前用户所属的用户组。

`passwd`：修改用户密码。例如 `passwd user2` 修改 user2 用户的密码。

`gpasswd`：修改用户组密码。例如 `gpasswd group1` 修改 group1 用户组的密码。`-a` 表示把用户加入该组；`-d` 表示把用户从该组删除

这些命令通常都需要管理员权限才能执行，但我们一般不直接使用 root 用户，而是使用普通用户并通过 `sudo` 命令来执行需要管理员权限的操作。直接在 root 用户下操作不当可能会给系统带来致命错误。

> **注意 1.2** sudo 命令相关
>
> 在安装并初始化系统时，你会跟据指引创建一个用户，这个用户会被赋予 sudo 权限。sudo 命令允许普通用户以超级用户权限执行命令。
>
> 而用 useradd 命令添加用户时，默认情况下新用户不会被赋予 sudo 权限。

要给新用户赋予 sudo 权限，可以将该用户添加到 sudo 用户组中。在有 sudo 权限的用户下执行以下命令：

代码 1.6.1 Bash

```
user1@host:~$ sudo usermod -aG sudo user2
```

上述命令会将 user2 用户添加到 sudo 用户组中，从而赋予其 sudo 权限。

`sudo` 命令例如：

代码 1.6.2 Bash

```
user1@host:~$ sudo useradd user2
user1@host:~$ sudo passwd user2
```

输入命令后的操作很简单，跟据提示操作即可。

1.6.2 文件权限管理

Linux 系统中的文件权限管理是通过用户、用户组和其他用户的权限来控制对文件和目录的访问。

在 `ls -l` 命令的输出中，第一列显示了文件或目录的权限信息，这里详细介绍一下。

每个文件和目录都有三种权限：读（r）、写（w）和执行（x），分别对应数字权限的 4、2、1。权限的组合可以用数字相加表示，如 7 表示读、写、执行（rwx），6 表示读、写（rw-），5 表示读、执行（r-x），4 表示读（r–），3 表示写、执行（-wx），2 表示写（-w-），1 表示执行（–x），0 表示无权限（—）。

对于目录而言，执行权限表示可以进入该目录，读权限表示可以列出该目录下的文件和子目录，写权限表示可以在该目录下创建、删除或重命名文件和子目录。

`chown` 命令用于修改文件或目录的所有者，`-R` 表示递归修改子目录和文件的所有者。例如：

代码 1.6.3 Bash

```
user1@host:~$ sudo chown user2 test/numbers.txt
user1@host:~$ sudo chown -R user2 test/
```

上述命令会将 `test/numbers.txt` 文件的所有者修改为 user2 用户，第二条命令会将 `test` 目录及其子目录和文件的所有者修改为 user2 用户。

`chgrp` 命令用于修改文件或目录的所属组，`-R` 表示递归修改子目录和文件的所属组。例如：

代码 1.6.4 Bash

```
user1@host:~$ sudo chgrp group1 test/numbers.txt
user1@host:~$ sudo chgrp -R group1 test/
```

上述命令会将 `test/numbers.txt` 文件的所属组修改为 group1，第二条命令会将 `test` 目录及其子目录和文件的所属组修改为 group1。

`chmod` 命令用于修改文件或目录的权限，可以使用数字表示法或符号表示法来设置权限，`-R` 表示递归修改子目录和文件的权限。数字表示法是将权限用数字表示，如 `chmod 755 file.txt` 表示设置文件 `file.txt` 的权限为 rwxr-xr-x（所有者可读、写、执行，用户组和其他用户可读、执行）。符号表示法是使用字母表示权限，如 `chmod u=rwx file.txt` 表示设置文件 `file.txt` 的所有者权限为 rwx（可读、写、执行），用户组和其他用户的权限不变。例如以下两条命令等价：

代码 1.6.5 Bash

```
user1@host:~$ sudo chmod 755 test/numbers.txt
user1@host:~$ sudo chmod u=rwx,g=rx,o=rx test/numbers.txt
```

此外，还能使用 `+` 和 `-` 符号来添加或删除权限，如 `chmod u+x file.txt` 表示给文件 `file.txt` 的所有者添加执行权限，`chmod g-w file.txt` 表示给文件 `file.txt` 的用户组删除写权限。例如：

代码 1.6.6 Bash

```
user1@host:~$ sudo chmod u+x test/numbers.txt
user1@host:~$ sudo chmod g-w test/numbers.txt
```

总结 1.3 用户与文件权限管理

用户和用户组：每个用户有唯一的用户名和 UID，用户组有唯一的组名和 GID。root 用户拥有最高权限。

`su` 命令用于切换用户； `sudo` 命令以超级用户权限执行命令（需要输入当前用户密码）。

用户管理命令： `useradd` 添加用户； `userdel` 删除用户（ `-r` 同时删除主目录）； `passwd` 修改用户密码。

用户组管理命令： `groupadd` 添加用户组； `groupdel` 删除用户组； `gpasswd` 修改用户组密码（ `-a` 添加用户到组， `-d` 从组中删除用户）。

`id` 查看当前用户的 UID 和 GID； `groups` 查看当前用户所属组。

给用户添加 sudo 权限：使用 `sudo usermod -aG sudo 用户名` 。

文件权限管理：文件权限分为读（r）、写（w）、执行（x），对应数字 4、2、1，分为所有者、用户组、其他用户三组。

目录权限：执行权限（进入目录）、读权限（列出内容）、写权限（创建/删除/重命名）。

`chown` 命令修改文件所有者（ `-R` 递归修改）； `chgrp` 命令修改文件所属组（ `-R` 递归修改）。

`chmod` 命令修改文件权限（ `-R` 递归修改），支持数字表示法（如 `chmod 755 file` ）和符号表示法（如 `chmod u=rwx,g=rx,o=rx file` ），以及使用 `+` 、 `-` 添加或删除权限（如 `chmod u+x file` ）。

1.7 为系统安装软件

1.7.1 软件包管理器与软件源

在 Linux 系统中，软件包管理器是用于安装、升级和删除软件包的工具。常见的软件包管理器有：

- APT（Advanced Package Tool）：用于 Debian 及其衍生版（如 Ubuntu）的软件包管理。
- YUM（Yellowdog Updater Modified）：用于 Red Hat 及其衍生版（如 CentOS）的软件包管理。
- DNF（Dandified YUM）：YUM 的下一代版本，提供更好的性能和依赖关系管理。
- Zypper：用于 openSUSE 的命令行软件包管理器。
- Pacman：用于 Arch Linux 的包管理器。

APT 是 Debian 及其衍生版（如 Ubuntu）中最常用的软件包管理器，它使用“.deb”格式的软件包。APT 提供了简单易用的命令行工具，如 `apt-get` 和 `apt` 命令，用于安装、升级和删除

软件包。YUM 是 Red Hat 及其衍生版（如 CentOS）中最常用的软件包管理器，它使用“.rpm”格式的软件包。

我们在使用的 Ubuntu 系统中，APT 是默认的软件包管理器。其软件仓库在国外，速度较慢，但可以通过修改软件源来加快下载速度，新手不建议修改软件源，若版本有误，会带来致命错误。有需要修改软件源的可以参考附录**??**。

1.7.2 安装软件

首先运行以下命令更新软件源：

代码 1.7.1 Bash

```
1 user1@host:~$ sudo apt-get update
```

我们可以尝试安装一个小工具“fortune”，它会随机显示一段有趣的文字。安装命令如下：

代码 1.7.2 Bash

```
1 user1@host:~$ sudo apt-get install fortune
```

按照提示输入当前用户密码，输入 y 确认后，安装完成，可以运行 `fortune` 命令来查看随机的有趣文字：

代码 1.7.3 Bash

```
1 user1@host:~$ fortune
```

若正常安装，则会显示一段随机的有趣文字。

你还可以安装 `sl` （Steam Locomotive），它会在终端中显示一辆火车，运行命令如下：

代码 1.7.4 Bash

```
1 user1@host:~$ sudo apt-get install sl
```

安装完成后，可以运行 `sl` 命令：

代码 1.7.5 Bash

```
1 user1@host:~$ sl
```

若终端上跑过一辆火车，则表示安装成功。

1.7.3 卸载软件

如果要卸载软件，可以使用 `apt-get remove` 命令，例如：

代码 1.7.6 Bash

```
user1@host:~$ sudo apt-get remove fortune
```

1.7.4 课程所需软件

本课程中，我们会用到 Vim 编辑器、Python 编程语言和 Fortran 编程语言。Vim 和 Python3 通常在 Ubuntu 系统中预装，但 Fortran 编译器需要手动安装。

安装 Fortran 编译器可以使用以下命令：

代码 1.7.7 Bash

```
user1@host:~$ sudo apt-get install gfortran
```

安装完成后，可以使用 `gfortran --version` 命令查看 Fortran 编译器的版本信息：

代码 1.7.8 Bash

```
user1@host:~$ gfortran --version
GNU Fortran (Ubuntu 13.3.0-6ubuntu2~24.04) 13.3.0
Copyright (C) 2023 Free Software Foundation, Inc.
This is free software; see the source for copying conditions.
    ↪ There is NO
warranty; not even for MERCHANTABILITY or FITNESS FOR A PARTICULAR
    ↪ PURPOSE.
```

出现以上输出则表示 Fortran 编译器安装成功。

1.8 文本处理工具

这里介绍三个命令：`grep` 、`awk` 和 `sed` ，它们是 Linux 中文本处理工具。此部分要求不高，看见命令能明白意思、会写简单的 `grep` 命令即可。

1.8.1 grep 命令

`grep` 命令用于在文件中查找匹配指定模式的行，并输出这些行。它的基本语法为：

代码 1.8.1 Bash

```
grep [选项] PATTERN [FILE...]
```

其中，PATTERN 是要匹配的模式，可以是字符串或正则表达式，FILE 是要搜索的文件名。常用选项包括：

- -i：忽略大小写
- -v：反向匹配，输出不匹配的行
- -w：匹配整个单词
- -n：显示匹配行的行号
- -An：显示匹配行及其后 n 行
- -Bn：显示匹配行及其前 n 行
- -Cn：显示匹配行及其前后各 n 行
- -G：使用基本正则表达式
- -E：使用扩展正则表达式

例如，要在 `test/numbers.txt` 文件中查找包含数字 `5` 的行，并显示行号，可以使用以下命令：

代码 1.8.2 Bash

```
user1@host:~$ grep -n 5 test/numbers.txt
```

上述命令会输出所有包含数字 `5` 的行及其行号。如果只想找到数字 `55`，可以使用以下命令：

代码 1.8.3 Bash

```
user1@host:~$ grep -nw 15 test/numbers.txt
```

上述命令会输出所有包含数字 `15` 的行及其行号。不包括包含 `15` 的其他数字，如 `155`、`515` 等。

这里通配符的使用与之前匹配文件的通配符类似:

- ^：匹配行的开头
- $：匹配行的结尾
- .：匹配任意单个字符
- *：匹配零个或多个任意字符
- [ ]：匹配括号内的任意单个字符
- [!]：匹配不在括号内的任意单个字符
- {n,m}：匹配前一个字符或表达式至少 n 次，至多 m 次
- \：转义字符，用于匹配特殊字符
- |：逻辑或，用于匹配多个模式

组合使用如：

- ^$：匹配空行
- .*：匹配非空行
- ^.*：匹配以任意字符开头的行
- .*$：匹配以任意字符结尾的行
- [0-9]：匹配数字
- [A-Za-z]：匹配字母

例如我想找到所有三位数的数字，可以使用以下命令：

代码 1.8.4 Bash

```
user1@host:~$ grep -G '^[0-9]\{3\}$' test/numbers.txt
```

1.8.2 awk 命令

我们先准备一个文本文件 `test/grades.txt` 以供操作使用，按如下步骤生成：

代码 1.8.5 Bash

```
user1@host:~$ sudo apt-get install rs
user1@host:~$ seq 1 100 > test/numbers-2.txt
```

```
user1@host:~$ shuf -r -n 300 -i 60-100 >> test/numbers-2.txt
user1@host:~$ rs 4 100 < test/numbers-2.txt | rs -T >
    ↪ test/grades.txt
```

我们安装了 `rs` 命令（reformat），它可以格式化文本文件。上述命令会生成一个名为 `test/grades.txt` 的文件，共 400 个数字，每行 4 个数字，共 100 行，第一列为序号（seq 生成的顺序序列），第二至第四列为随机生成的 60 到 100 之间的数字（shuf 生成的随机数），可认为是 100 个人三次考试的成绩。

我们现在用 `awk` 命令来处理这个文件。

例如我们可以计算每个人的平均成绩，并输出到终端：

代码 1.8.6 Bash

```
user1@host:~$ awk '{print $1, ($2 + $3 + $4) / 3}' test/grades.txt
```

或可将结果保存到文件中：

代码 1.8.7 Bash

```
user1@host:~$ awk '{print $1, $2, $3, $4, ($2 + $3 + $4) / 3}'
    ↪ test/grades.txt > test/grades-averages.txt
```

上述命令会将每个人的序号、三次成绩和平均成绩输出到 `test/grades-averages.txt` 文件中。其中 `$n` 表示第 n 列的内容。另外， `$NF` 表示最后一列的内容， `$0` 表示整行内容。

同时，还有一些可选参数，如 `-F` ：指定字段分隔符，默认为空格或制表符（tab），可以使用 `-F,` 指定逗号为分隔符。

1.8.3 sed 命令

`sed` 命令用于对文本进行流编辑，可以对输入的文本进行替换、删除、插入等操作。它的基本语法为：

代码 1.8.8 Bash

```
sed [选项] '命令' [文件...]
```

常用选项包括：

- `-n`：只输出被“命令”处理过的行
- `-i`：直接修改文件

常用命令有：

- `s/匹配的文本/替换文本/g`：替换匹配模式的文本为替换文本，`g` 表示全局替换
- `d/匹配的文本/`：删除匹配模式的行
- `a/匹配的文本/`：在匹配模式的行后添加文本
- `i/匹配的文本/`：在匹配模式的行前添加文本

例如，要将 `test/grades.txt` 文件中的所有 `60` 替换为 `70`，可以使用以下命令：

代码 1.8.9 Bash

```
user1@host:~$ sed 's/60/70/g' test/grades.txt
```

上述命令会输出替换后的内容，但不会修改原文件。如果要直接修改原文件，可以使用 `-i` 选项：

代码 1.8.10 Bash

```
user1@host:~$ sed -i 's/60/70/g' test/grades.txt
```

1.9 Vim 文本编辑器

1.9.1 Vim 简介与三个模式

在 Windows 中，我们用 Word 或记事本编辑文本文件，而在 Linux 中，我们通常使用 Vim 编辑器，相比于 Word 或记事本，支持多种编程语言的语法高亮、自动缩进等功能。

使用命令 vim 打开文件：

代码 1.9.1 Bash

```
user1@host:~$ vim test/grades.txt
```

Vim 编辑器有三种模式：一般模式、编辑模式和命令、查找模式。进入 Vim 编辑器后，默认处于一般模式。

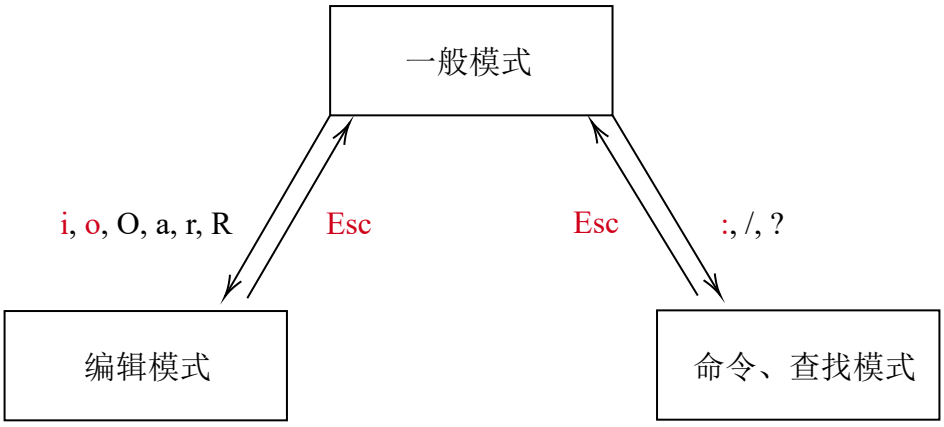


图 1: Vim 文本编辑器的三种模式

在一般模式下，我们可以使用键盘上的方向键或 hjkl 键（h 左、j 下、k 上、l 右）移动光标。用“i, o, O, a, r, R”进入编辑模式；用“:, /, ?”进入命令模式。在非一般模式下，按“Esc”键可以返回一般模式。

按 `:` 进入命令模式，输入 `wq` 并回车即可保存并退出 Vim 编辑器。

下面详细介绍编辑模式和命令、查找模式。

1.9.2 编辑模式

在编辑模式下，我们可以直接编辑文本，输入文本、删除文本、复制粘贴文本等。常用的进入编辑模式命令有：

- i：在光标前插入文本
- I：在行首插入文本
- a：在光标后插入文本
- A：在行尾插入文本
- o：在光标下方新建一行并插入文本
- O：在光标上方新建一行并插入文本
- r：替换光标所在字符
- R：进入替换模式，替换光标所在位置及后续字符
- x：删除光标所在字符
- dd：删除光标所在行

- yy：复制光标所在行
- p：粘贴复制的行到光标后。

其中主要掌握 `i` 的用法即可

注意 1.3 提示

在 Ubuntu 终端中，包括终端里进入的 Vim 编辑器，按 `Ctrl+Shift+V` 可以粘贴文本。

1.9.3 命令、查找模式

在命令、查找模式下，我们可以执行各种命令和查找操作。常用的命令有：

- :w：保存文件
- :q：退出 Vim 编辑器
- :wq：保存并退出 Vim 编辑器
- :q!：强制退出 Vim 编辑器，不保存修改

比如在一般模式下按 `:` 进入命令模式，输入 `wq` 并回车即可保存并退出 Vim 编辑器。

查找操作有：

- /字符串：向下查找字符串
- ? 字符串：向上查找字符串
- n：重复前一个查找

这里不再举例，自行体会即可。

1.10 与 window 宿主机共享文件

这在后面的课程中会用到，但不是考察内容，本笔记正文中也不多介绍。

在 Linux 系统中，我们可以通过 Samba 服务或 FTP 与 Windows 宿主机共享文件。主要原理是通过网络协议实现文件的共享和传输。有需要可自行搜索教程。

这里介绍另一种方法，设置完成后比 Samba 服务或 FTP 方便，具体方法参见附录**??**。

2 Fortran 语言简介

2.1 编程语言与 Fortran 的发展

计算机只认识机器语言，机器语言是由二进制数（0 和 1）组成的指令序列。

机器语言难以理解和编写，因此需要更高级的编程语言来简化编程过程。其它语言需要经过编译器翻译成机器语言才能被计算机执行。

为了方便编写程序，发展出了汇编语言，汇编语言只是特定功能的二进制数的助记符，而汇编语言的编译器实际上更像“文本替换器”，只是把特定字母和符号替换成机器语言指令。

随后便发展出了更高级的编程语言，如 Fortran、C、C++、Java 等，这些语言更接近人类的自然语言，使得编程更加直观和易于理解。

Fortran 是最古老的高级编程语言之一，最初设计用于科学计算和数值分析。目前看来有些过时，但出于其对硬件的高效利用和对数值计算的优化，以及多年积累的丰富代码库，Fortran 仍然在科学计算领域广泛使用。

早期的 Fortran 版本主要有 Fortran 77、Fortran 90。Fortran 也在不断发展，新版本的 Fortran 语言增加很多功能，如动态数组等，Fortran 2003、Fortran 2008 等版本引入了面向对象编程和并行计算等新特性, Fortran modern 是对 Fortran 90 及其后续版本的统称。

出于稳定性以及兼容性考虑，我们课程主要使用 Fortran 77，会用到一些 Fortran 90 的特性。文件扩展名统一用.f（即文件名为“*.f”），避免出现语言版本与文件扩展名不一致的情况。

2.2 Fortran 与打孔卡片

Fortran 语言创始的时候，计算机还没有现代计算机键盘、屏幕等输入输出设备，主要通过打孔卡片输入程序以及输出结果。

打孔卡片格式统一，共 12 行（0-9 共 10 行，上面空白处 2 行），80 列，每一列表示一个字符，每一张打孔卡片可以表示一行语句。

如

代码 2.2.1 Text

```
1  0123456789ABCDEFGHIJKLMNOPQRSTUVWXYZ,.:;'"-+=!@#$%^&*()_/<>
```

在打孔卡片上就如图**??**显示，注意，打孔卡片不分大小写。

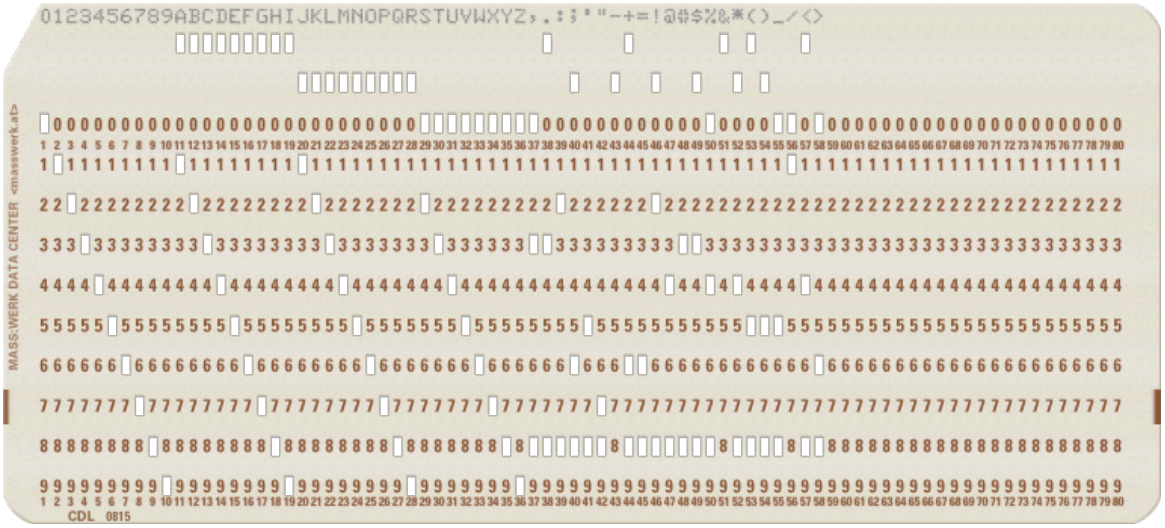


图 2: 打孔卡片

对于 Fortran 语言，打孔卡片的格式有一些特殊要求，称为 Fortran 的固定格式，每一行的要求如下：

第 1 个字符	如果是字母 C 或 *，这一行就是注释，不会被编译
第 1~5 个字符	如果是数字，就是给这一行代码取一个代号，不然只能是空格
第 6 个字符	如果是“0”以外的任何字符，表示这一行程序接上一行
第 7~72 个字符	Fortran 程序代码的编写区域
第 73 个字符及之后	保留区域，留空

例如如下代码片段：

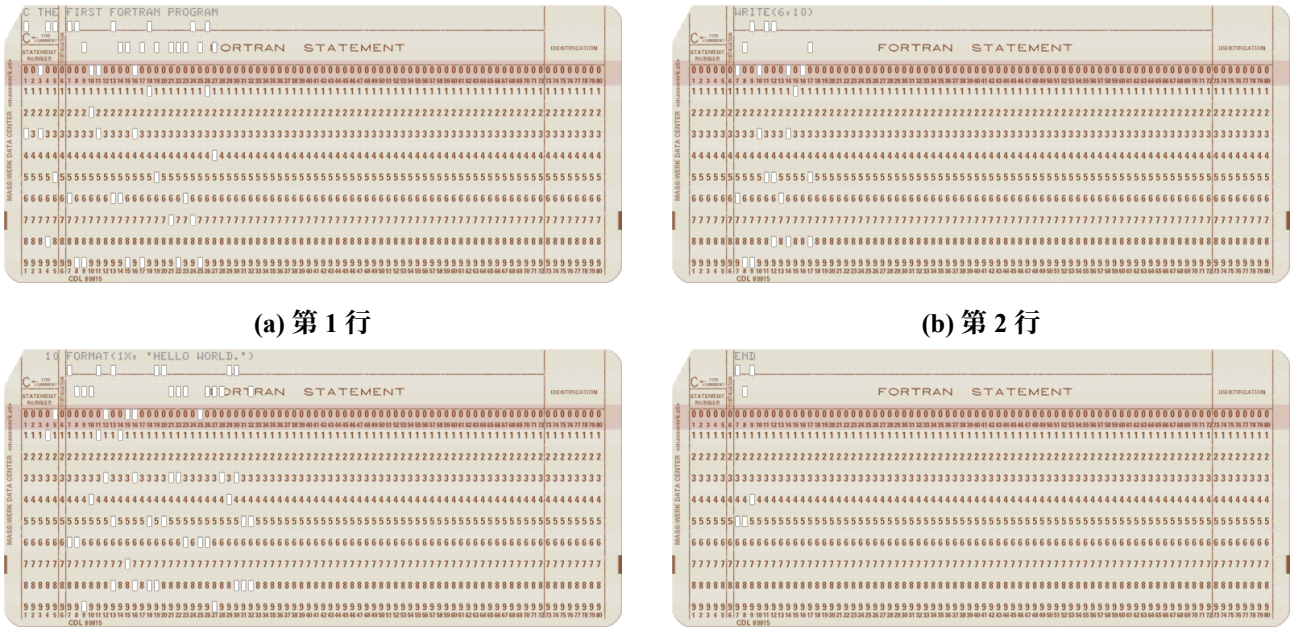
代码 2.2.2 Fortran

```
1  C THE FIRST FORTRAN PROGRAM
2        WRITE(6,10)
3     10 FORMAT(1X, 'HELLO, WORLD.')
4        END
```

每一行在打孔卡片上就如图**??**所示，每一行占一张卡片，共 4 张卡片。（现在还不需要知道代码各个部分是什么意思，这里只是为了说明 Fortran 的固定格式和打孔卡片的概念。）

在向机器输入程序时，依次读取四张卡片即可。

整个程序编译后运行的输出结果为：



(a) 第 1 行 (b) 第 2 行

(c) 第 3 行 (d) 第 4 行

图 3: The first Fortran program

代码 2.2.3 Text

```
1   HELLO, WORLD.
```

在打孔卡片上如图所示：

图 4: 程序输出结果

当然，现在已经没有人使用打孔卡片了，Fortran 程序的编写和运行都可以在现代计算机上完成。但是，Fortran 的固定格式仍然保留了下来，Fortran 程序的编写仍然需要遵循固定格

式。

同时卡片的概念在 Fortran 中也保留了下来，Fortran 程序的每一行代码都可以看作是一张卡片，读取的每一行数据也可以看作是一张卡片。

另外，打孔卡片是不区分大小写的，Fortran 程序的代码也不区分大小写。

2.3 Fortran 语言的编译

Fortran 程序需要经过编译器编译成机器语言才能被计算机执行。

在本笔记 Linux 部分已经提到了“gfortran”编译器的安装，如果还没有安装，可以使用以下命令安装：

代码 2.3.1 Bash

```bash
user1@host:~$ sudo apt-get install gfortran
```

以上面的例子为例，假设我们将代码保存在 `learn` 文件夹的 `hello.f`：

代码 2.3.2 Bash

```bash
user1@host:~$ mkdir learn
user1@host:~$ cd learn
user1@host:~/learn$ vim hello.f
```

vim 编辑器用法不再重复，在文件中写入上面例子的代码，注意按照固定格式确认好空格数：

代码 2.3.3 Fortran

```fortran
C THE FIRST FORTRAN PROGRAM
      WRITE(6,10)
   10 FORMAT(1X, 'HELLO, WORLD.')
      END
```

保存并退出编辑器后，使用以下命令编译程序：

代码 2.3.4 Bash

```bash
user1@host:~/learn$ gfortran -c hello.f
```

```
user1@host:~/learn$ gfortran -o hello hello.o
user1@host:~/learn$ ls
hello  hello.f  hello.o
```

第一条命令会生成一个目标文件 `hello.o`，第二条命令会将目标文件链接成可执行文件 `hello`。运行程序使用以下命令：

代码 2.3.5 Bash

```
user1@host:~/learn$ ./hello
 HELLO, WORLD.
```

如果是像这样只有一个代码文件的简单程序，或者不想生成目标文件，可以直接使用以下命令编译并运行程序：

代码 2.3.6 Bash

```
user1@host:~/learn$ gfortran -o hello hello.f
user1@host:~/learn$ ./hello
 HELLO, WORLD.
```

这样不会生成目标文件 `hello.o`，直接生成可执行文件 `hello`。

3 Fortran 基础

3.1 Fortran 变量类型声明与转化

3.1.1 Fortran 变量类型声明

Fortran 语言中，变量的类型和声明是非常重要的概念。Fortran 支持多种数据类型，包括整数、实数（与数学上的实数定义不同）、字符等。

变量名可以包含字母、数字和下划线，但要以字母开头，同时不超过 6 个字符。

Fortran 有隐式声明和显式声明两种方式。

隐式声明是指在使用变量之前不需要显式地声明变量的类型，Fortran 会根据变量名的首字母自动推断类型，例如以 `I、J、K、L、M、N` 开头的变量默认为整数类型，其它变量默认为实数类型。

显式声明是指在使用变量之前需要显式地声明变量的类型，使用类型声明语句，例如：

代码 3.1.1 Fortran

```fortran
INTEGER :: I
REAL :: X
DOUBLE PRECISION :: Y
```

上面第一行声明了一个整数类型的变量 `I`，第二行声明了一个单精度实数类型的变量 `X`，第三行声明了一个双精度实数类型的变量 `Y`。

一般我们遵循隐式声明的规则，除非有特殊需要，否则不使用显式声明。

3.1.2 Fortran 变量类型转化

Fortran 语言中，变量类型的转化是一个重要的概念。Fortran 提供了多种方式来进行变量类型的转化。

使用类型转换函数，例如：

代码 3.1.2 Fortran

```fortran
M = INT(A)
N = IFIX(B)
```

```
3       I = IDINT(C)
```

前两个语句将实数 A 和 B 转换为整数类型，第三个语句将双精度实数 C 转换为整数类型。可统一使用 INT 函数进行转换。

代码 3.1.3 Fortran

```
1       X = REAL(I)
2       Y = FLOAT(J)
3       Z = DBLE(K)
```

前两个语句作用相同，将整数 I 和 J 转换为单精度实数类型，第三个语句将整数 K 转换为双精度实数类型。

以上可统一记为 INT 转化为整数， REAL 转化为单精度实数， DBLE 转化为双精度实数，其它的都能用这三个代替。

3.2 Fortran 程序的输入与输出

Fortran 程序的输入与输出主要通过以下几个语句实现：

- READ：用于从标准输入设备（通常是键盘）读取数据。
- WRITE：用于向标准输出设备（通常是屏幕）输出数据。
- PRINT：用于向标准输出设备写入数据，语法更简单。

我们主要使用 READ 和 WRITE 语句来进行输入和输出。

3.2.1 输入语句

Fortran 中的输入语句主要有两种形式： READ 和 READ(*,*) 。

READ 语句的基本形式为：

代码 3.2.1 Fortran

```
1       READ, 变量
2       READ(单位, 格式) 变量1 变量2 ...
```

其中，单位表示输入设备，其中 `5` 表示读卡器（在现代的电脑上就是用键盘输入），格式表示数据的格式，变量列表表示要读取的变量。

`READ(5,*)` 表示从标准输入设备读取数据，格式由编译器自动推断，适用于简单的输入场景。

3.2.2 输出语句

Fortran 中的输出语句主要有两种形式： `WRITE` 和 `PRINT` 。

WRITE 语句的基本形式为：

代码 3.2.2 Fortran

```
WRITE(单位, 格式) 变量1 变量2 ...
```

其中，单位表示输出设备，其中 `6` 表示行式打印机（在现代的电脑上就是用屏幕输出），格式表示数据的格式，变量列表表示要输出的变量。

`PRINT` 语句的基本形式为：

代码 3.2.3 Fortran

```
PRINT(格式) 变量1 变量2 ...
```

其中，格式表示数据的格式，变量列表表示要输出的变量。

3.3 格式化输出

Fortran 支持格式化输入输出，可以通过格式字符串来控制输出的格式。一般情况下，输入数据来源复杂，格式多样，我们会使用 `*` 表示自动推断格式；输出时为了获取整齐美观的结果，可以指定格式。下面只介绍输出的格式化，输入格式化类似，不再赘述。

3.3.1 格式化输出语句

上节命令如 `READ` 和 `WRITE` 中都有“格式”参数，一般读取时我们用 `*` 表示自动推断格式，输出时我们可以指定格式。

指定格式有两种方式：

第一种是使用格式字符串，例如：

代码 3.3.1 Fortran

```fortran
      WRITE(6, '(A, I5, F10.2, E10.2)') '结果是: ', I, X
```

其中，`'(A, I5, F10.2, E10.2)'` 表示输出一个字符串（A），一个整数（I5，宽度为 5），一个单精度实数（F10.2，宽度为 10，小数点后保留 2 位），一个双精度实数（E10.2，宽度为 10，小数点后保留 2 位）。

第二种是使用格式标签，例如：

代码 3.3.2 Fortran

```fortran
      WRITE(6, 100) I, X
  100 FORMAT('结果是: ', I5, F10.2, E10.2)
```

其中，`100` 是标签，其指定的行中的 `FORMAT` 语句定义了格式。如果格式字符串较长，可以使用标签来分割，避免超出固定格式行长度限制。

3.3.2 I 型

I 型格式用于输出整数，格式为 `Iw`，其中 `w` 表示输出的宽度，可以理解为给这个数据 5 个字符的空间，例如：

代码 3.3.3 Fortran

```fortran
      M=12345
      N=123
      K=123456
      WRITE(6, '(I5)') M
      WRITE(6, '(I5)') N
      WRITE(6, '(I5)') K
      END
```

编译后运行输出结果为：

代码 3.3.4 Text

```
12345
  123
```

```
3  *****
```

其中， `*****` 表示输出的整数超过了指定的宽度，Fortran 会用星号填充。

3.3.3 F 型

F 型格式用于输出单精度实数，格式为 `Fw.d` ，其中 `w` 表示输出的宽度， `d` 表示小数点后保留的位数，例如：

代码 3.3.5 Fortran

```fortran
      K=1234567890
      X=123.456
      WRITE(6, '(I10)') K
      WRITE(6, '(F10.2)') X
      END
```

编译后运行输出结果为：

代码 3.3.6 Text

```
1  1234567890
2      123.46
```

（这里第一行的整数用来标记位置，便于直观观察 F 型所占空间）其中， `123.46` 表示输出的单精度实数，Fortran 会根据指定的格式进行填充和舍入。

3.3.4 E 型

E 型格式用于输出双精度实数，格式为 `Ew.d` ，其中 `w` 表示输出的宽度， `d` 表示小数点后保留的位数，例如：

代码 3.3.7 Fortran

```fortran
      K=1234567890
      Y=-123.456
      Z=123.456
      WRITE(6, '(I10)') K
```

```
5         WRITE(6, '(E10.3)') Y
6         WRITE(6, '(E10.3)') Z
7         END
```

编译运行后输出结果为：

代码 3.3.8 Text

```
1  1234567890
2  -0.123E+03
3   0.123E+03
```

（这里第一行的整数用来标记位置，便于直观观察 E 型所占空间）其中，`0.123E+03` 表示输出的双精度实数。

Fortran 中标准的 E 型格式需要注意，一个数用科学计数法表示为 `A*10^N`，表示为 E 型为 `AEN`，标准化 E 型中，A 的整数部分为 `0`。如 `123.456`，则表示为 `0.123456E+03` 而不是 `1.23456E+02`，再根据格式进行填充和舍入。

以上内容可见，E 型占用的空间较大，使用时注意前后留足空间，如使用 `E20.5`。

3.4 数学语句

3.4.1 数字与运算符

在编写 Fortran 程序时，我们需要使用数字和运算符来进行计算。整数如 `123`、`-456` 等，直接表示即可。

实数如 `3.14`、`-2.718` 等，直接表示即可；`0.123`、`456.0`，可以省略 0，直接写为 `.123`、`456.`。

Fortran 常用的运算符有加（`+`）、减（`-`）、乘（`*`）、除（`/`）和幂（`**`）等。可直接对数字或变量进行运算。运算优先级从高到低依次为：幂、乘除、加减。如果有括号，则括号内的运算优先级最高。

3.4.2 数学函数

Fortran 提供了多种数学函数，用于对数字进行处理和计算。例如：

代码 3.4.1 Fortran

```fortran
      A = ABS(X)        ! 绝对值
      B = SQRT(Y)       ! 平方根
      C = EXP(Z)        ! 指数函数
      D = LOG(W)        ! 自然对数
      E = LOG10(V)      ! 常用对数
      F = SIN(T)        ! 正弦函数
      G = COS(U)        ! 余弦函数
      M = MAX(A, B)     ! 最大值
      N = MIN(C, D)     ! 最小值
      O = MOD(P, Q)     ! 取模
```

其中自然对数函数在课堂上介绍的是 `ALOG`，这是 Fortran 77 的函数，用于处理单精度实数；另外还有 `DLOG` 用于处理双精度实数、`CLOG` 用于处理复数，比较复杂。

在 Fortran 90 中，增加了 `LOG` 函数，包括了上面三种用法，兼容性强，推荐使用。

3.4.3 赋值语句

赋值语句用于将一个值赋给一个变量，例如：

代码 3.4.2 Fortran

```fortran
      I = 5
      X = 3.14
      Y = 2.718281828459045
```

3.4.4 算术运算

Fortran 支持基本的算术运算，包括加法、减法、乘法、除法等，例如：

代码 3.4.3 Fortran

```fortran
      Z = X + Y
      A = B - C
      D = E * F
      G = H / I
      J = K ** L
```

3.4.5 大型算术表达式

Fortran 支持大型算术表达式，可通过嵌套多层括号、合理利用运算符的优先级来实现复杂的计算。例如：

$$z = \frac{\mathrm{e}^{x+y} + \sin x + s^t}{|x| + \sqrt{y} - \lg(w)}$$

用 Fortran 的数学语句表示为：

代码 3.4.4 Fortran

```
1       Z = (EXP(X+Y) + SIN(X) + S**T) / (ABS(X) + SQRT(Y) -
          ↪ LOG10(W))
```

为了防止语句过长违反固定格式，可拆开表示：

代码 3.4.5 Fortran

```
1       P = EXP(X+Y) + SIN(X) + S**T
2       Q = ABS(X) + SQRT(Y) - LOG10(W)
3       Z = P / Q
```

3.5 Fortran 程序构成

Fortran 程序一般由以下几个部分构成：

- 程序头：包括程序名、变量声明等。
- 主程序：包含程序的主要逻辑和计算部分。
- 子程序：可选部分，用于实现特定功能的代码块。
- 结束语句：标志程序的结束。

例如：

代码 3.5.1 Fortran

```
1       PROGRAM HelloWorld
2       INTEGER :: I
3       REAL :: X, Y
4
5       WRITE(6, '(A)') 'Hello, World!'
```

```
 6
 7        I = 5
 8        X = 3.14
 9        Y = 2.718281828459045
10
11        WRITE(6, '(I5, F10.2, E10.3)') I, X, Y
12
13        END PROGRAM HelloWorld
```

其中第一行 `PROGRAM HelloWorld` 表示程序名为 `HelloWorld`，非必须，可以不写。

接下来是变量声明部分，使用 `INTEGER` 和 `REAL` 声明了整数和实数类型的变量，这里的内容实际上包含在隐式声明内了，可以不再显式声明。

`END` 语句标志程序的结束，后面的 `PROGRAM HelloWorld` 表示程序名的结束，可以直接写 `END`。

A 更换软件源为清华大学镜像站

A.1 Ubuntu 24.04.2 LTS 软件源配置

如果是按照文章开始的方式安装的 Ubuntu 系统，安装的版本应当是 24.04.2 LTS（长期支持版），请确保版本是 24.04.2。可以通过以下命令查看当前系统版本：

代码 A.1.1 Bash

```
user1@host:~$ lsb_release -a
No LSB modules are available.
Distributor ID: Ubuntu
Description:    Ubuntu 24.04.2 LTS
Release:        24.04
Codename:       noble
```

运行如下命令，打开软件源配置文件：

代码 A.1.2 Bash

```
user1@host:~$ sudo vim /etc/apt/sources.list.d/ubuntu.sources
```

不断按“dd”删除原有内容，直到清空文件。

然后按“i”进入插入模式，粘贴以下内容：

代码 A.1.3 Text

```
Types: deb
URIs: https://mirrors.tuna.tsinghua.edu.cn/ubuntu
Suites: noble noble-updates noble-backports
Components: main restricted universe multiverse
Signed-By: /usr/share/keyrings/ubuntu-archive-keyring.gpg

# 默认注释了源码镜像以提高 apt update 速度，如有需要可自行取消注释
# Types: deb-src
# URIs: https://mirrors.tuna.tsinghua.edu.cn/ubuntu
# Suites: noble noble-updates noble-backports
```

```
# Components: main restricted universe multiverse
# Signed-By: /usr/share/keyrings/ubuntu-archive-keyring.gpg

# 以下安全更新软件源包含了官方源与镜像站配置，如有需要可自行修改注释切换
Types: deb
URIs: http://security.ubuntu.com/ubuntu/
Suites: noble-security
Components: main restricted universe multiverse
Signed-By: /usr/share/keyrings/ubuntu-archive-keyring.gpg

# Types: deb-src
# URIs: http://security.ubuntu.com/ubuntu/
# Suites: noble-security
# Components: main restricted universe multiverse
# Signed-By: /usr/share/keyrings/ubuntu-archive-keyring.gpg

# 预发布软件源，不建议启用

# Types: deb
# URIs: https://mirrors.tuna.tsinghua.edu.cn/ubuntu
# Suites: noble-proposed
# Components: main restricted universe multiverse
# Signed-By: /usr/share/keyrings/ubuntu-archive-keyring.gpg

# # Types: deb-src
# # URIs: https://mirrors.tuna.tsinghua.edu.cn/ubuntu
# # Suites: noble-proposed
# # Components: main restricted universe multiverse
# # Signed-By: /usr/share/keyrings/ubuntu-archive-keyring.gpg
```

按“Esc”键退出插入模式，然后输入“:wq”后回车保存并退出。

接下来，运行以下命令更新软件源列表：

代码 A.1.4 Bash

```
user1@host:~$ sudo apt-get update
```

A.2 更早或更新版本软件源配置

清华大学开源软件镜像站一般只有 LTS 版本的 Ubuntu 软件源，首先请确保自己系统为 LTS 版本。

访问**清华大学开源软件镜像站**，仔细阅读网页指导内容，仿照上例更改软件源配置。或自行查找相关教程，这里不作介绍。

B 与 Window 宿主机共享文件夹

B.1 WSL 子系统

作为 Windows 下的子系统，WSL（Windows Subsystem for Linux）可以直接访问 Windows 宿主机的文件系统。

在 WSL 中，Windows 的文件系统通常挂载在 ‘/mnt/c‘目录下。你可以通过以下命令访问 Windows 的 C 盘、D 盘：

代码 B.1.1 Bash

```
user1@host:~$ cd /mnt/c
user1@host:/mnt/c$ ls
Users  Program Files  Program Files (x86)  Windows ...
user1@host:~$ cd /mnt/d
```

注意大小写。

复制、移动操作方式与 Linux 系统相同，可以使用 ‘cp‘、‘mv‘等命令。

B.2 虚拟机

如果按照文章开始的方法，正确配置虚拟机 VMware，可以通过虚拟机的共享文件夹功能来实现与宿主机的文件共享。

按照下图所示，在虚拟机设置中启用共享文件夹功能，并添加想要共享的文件夹：

在“添加共享文件夹向导”的这一步时，点击“浏览”选择需要共享的文件夹，名称可不填：

以上设置完成后，打开终端，运行以下命令：

代码 B.2.1 Bash

```
user1@host:~$ vmware-hgfsclient
```

若列出了所有共享的文件夹名称，则表示共享文件夹设置成功。

继续运行以下命令：

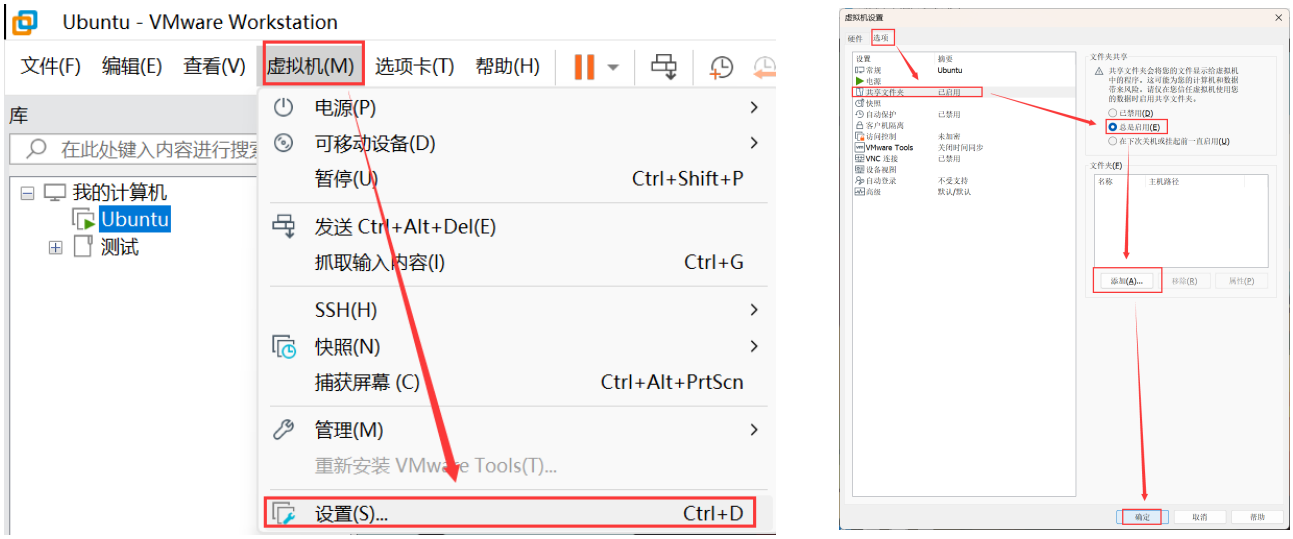


图 5: 设置共享文件夹

代码 B.2.2 Bash

```
1 user1@host:~$ sudo /usr/bin/vmhgfs-fuse .host:/ /mnt/hgfs -o
    ↪ allow_other -o uid=1000 -o gid=1000 -o umask=022
```

这将把共享文件夹挂载到 ‘/mnt/hgfs‘目录下。

现在，你可以通过以下命令访问共享文件夹：

代码 B.2.3 Bash

```
1 user1@host:~$ cd /mnt/hgfs
2 user1@host:/mnt/hgfs$ ls
3 SharedFolder1  SharedFolder2  ...
```

若显示了共享文件夹，则表示共享文件夹设置成功。

接下来设置开机自动挂载，编辑 ‘/etc/fstab‘文件：

代码 B.2.4 Bash

```
1 user1@host:~$ sudo vim /etc/fstab
```

按“i”进入插入模式，移动光标到最后一行，在文件末尾新建一行添加以下内容：

图 6: 共享文件夹向导

代码 B.2.5 Text

```
1  .host:/ /mnt/hgfs fuse.vmhgfs-fuse
     ↪  allow_other,uid=1000,gid=1000,umask=022 0 0
```

按“Esc”键退出插入模式，然后输入“:wq”后回车保存并退出。

重启虚拟机，进入/mnt/hgfs 目录，如果可以看到共享的文件夹，则说明开机自动挂载设置成功。

如果需要访问共享文件夹，只需进入‘/mnt/hgfs‘目录即可。

如果之后需要添加新的共享文件夹，重复第一步，添加新的共享文件夹即可，不必重复设置开机自动挂载。