作业一: Fortran 编程练习

英才 1701 赵鹏威 U201710152

2019年9月12日

目录

1	引言		2		
2	CTC. 1. 64.104 X 4.104 CT				
	2.1	任务描述	2		
	2.2	程序实现	2		
	2.3	运行时结果	2		
3	矩阵乘法				
	3.1	任务描述	3		
	3.2	程序实现	5		
	3.3	运行时结果	6		
4	排列数和组合数计算				
	4.1	任务描述	6		
	4.2	程序实现	7		
	4.3	运行时结果	7		

1 引言

Fortran 是最早面世的高级编程语言,名字的来源是 Formula Translator,在科学计算方面有很广泛的运用. 虽然 Fortran 十分古老,但是早期许多优秀的数值计算程序都是基于 Fortran 代码编写的,因此熟悉 Fortran 语言是十分有帮助的. 另外,Fortran 语言具有高效率的优势,这一点与 C/C++ 相似,但是 Fortran 中内置了许多数学函数,使用 Fortran 编写的数值计算程序要相对简洁不少. 本次作业的目的就是熟悉 Fortran 语言的基础语法,包括基本的输入输出、文件读写、数组运算等内容.

2 基本的输入输出

2.1 任务描述

任务 1. 编写 Fortran 程序实现以下功能:

- 程序能读取用户输入的矩阵;
- 输入矩阵后,程序可以将矩阵保存到一个文本文件中;
- 程序能从文本文件中读取矩阵;
- 程序能按照固定的格式打印矩阵到屏幕上.

一个好的程序要有适当的泛化能力.考虑到用户输入的矩阵大小不确定,因此编写的程序需要适应各种大小的矩阵.在输入矩阵时,用户需要先输入矩阵的大小,也就是有多少行和多少列.

2.2 程序实现

程序需要四个功能:输入矩阵、写入文件、读取文件、打印矩阵."输入矩阵"使用一个 function 实现,这个调用这个 function 后,程序会要求用户输入矩阵的大小,然后按行输入矩阵. 这个 function 返回一个二位数组,其保存着用户输入的矩阵. 让用户输入矩阵大小的功能可以用动态数组实现,也可以预先定义一个大小较大的二维数组来实现,这里采用后一种方法,也就是预先定义一个 100 × 100 的二位数组,这样用户可以输入比这个大小小的任意矩阵. "写入矩阵"和"读取文件"矩阵分别使用一个 subroutine 实现. 写入、读取和打印矩阵时使用格式输出,程序先获取矩阵的大小,然后按照固定的格式写入、读取和打印矩阵. 由于,输入矩阵的 function 需要返回一个数组,因此将实现上面三个功能的 function 和 subroutine 封装在同一个 module 中. 程序代码见附录 Listing 2. 整个程序的工作流程图见图 1.

2.3 运行时结果

运行附录 Listing 2 所示代码,运行时结果如图 2. 确保程序确实正确地将矩阵写入了 matrix.txt 文件,打开看到确实正常写入,见图 3.

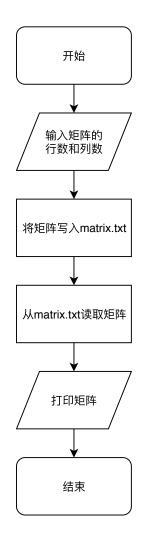


图 1: 任务 1 程序的流程图

3 矩阵乘法

3.1 任务描述

任务 2. 给定矩阵 A 和列向量 b, 使用 subroutine 计算 Ab 和 b^TAb . 其中

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 4 & 2 & 2 & 5 & 8 \\ 2 & 5 & 1 & 3 & 4 \\ 2 & 1 & 6 & 2 & 6 \\ 5 & 3 & 2 & 1 & 3 \\ 8 & 4 & 6 & 3 & 3 \end{bmatrix} \quad \mathbf{b} = \begin{bmatrix} 2 \\ 4 \\ 5 \\ 2 \\ 1 \end{bmatrix}$$

```
zipwin@WorldGate: ~/WorkPlace/fortran/computational_physics/assignment1/task1
文件(F) 编辑(E) 查看(V) 搜索(S) 终端(T) 帮助(H)
    task1 gfortran io.f90 -o io
   task1 ./io
 lease input the 1th row:
 2 2 5 8
 lease input the 5 1 3 4
 lease input the 1 6 2 6
  3 2 1 3
 4 6 3 3
he input matrix is:
4.000 2.000 2
2.000 5.000 1
2.000 1.000 6
                                         5.000
3.000
2.000
1.000
                            2.000
1.000
6.000
                                                      8.000
4.000
6.000
                                         3.000
   8.000
                4.000
                            6.000
                                                      3.000
ead matrix from
                                         5.000
3.000
2.000
1.000
                                                      8.000
4.000
6.000
3.000
3.000
                            2.000
1.000
6.000
                2.000
5.000
1.000
   2.000
5.000
                            2.000
6.000
   task1
```

图 2: 任务 1 运行时结果

图 3: 任务 1 写入 matrix.txt 的内容

3.2 程序实现

Fortran 自带矩阵乘法函数 matmul(matrix1, matrix2),和转置 transpose(matrix). 列向量可以看做是 $n \times 1$ 维的矩阵,因此需要定义两个二维数组来完成这一程序. 由于 subroutine 没有返回值,需要输出的变量都是要在主程序定义好再作为参数传递给 subroutine 的,因此为了便于区分输入参数和输出参数,将输出参数写在输入参数后面. 程序的流程图如图 4 所示. 代码见附录 Listing 3.

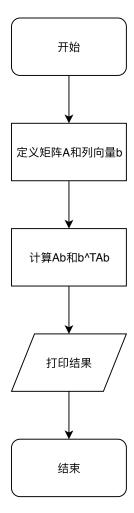


图 4: 任务 2 程序流程图

3.3 运行时结果

为了检验程序计算结果的正确性, 手动计算得到解析结果如下

$$\mathbf{A}\mathbf{b} = \begin{bmatrix} 44 \\ 39 \\ 48 \\ 37 \\ 71 \end{bmatrix} \quad \mathbf{b}^T \mathbf{A}\mathbf{b} = 629$$

程序运行时结果如图 4 所示. 可见程序计算结果正确.

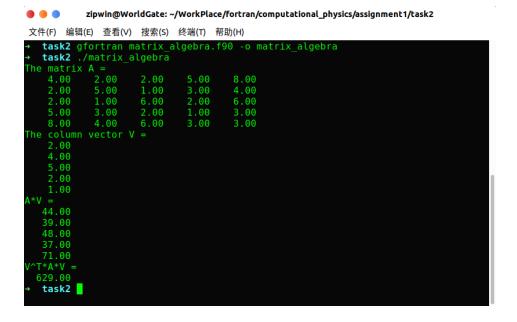


图 5: 任务 2 运行时结果

4 排列数和组合数计算

4.1 任务描述

任务 3. 给定 n=12, m=8, 编写 subroutine 计算排列数 P_n^m 和组合数 C_n^m

$$P_n^m = \frac{n!}{(n-m)!}$$
 $C_n^m = \frac{n!}{m!(n-m)!}$

如果直接计算阶乘,会遇到溢出的错误. 4 字节整数最大能储存 $2^15-1=32767$, 8 字节整数最大能储存 $2^31-1=2.1475e+09$. 而 8!=4032 已经超过了 4 字节整数的容量,并且 13!=6.2270e+09 也超过了 8 字节整数的容量. 可见不能直接计算阶乘,而应该在计算之前尽可能约分.

4.2 程序实现

为了方便与简洁,先写了一个名为 mul2 的函数,这个函数可以计算 n, m 之间所有整数的积 (包括 n, m). 这个子程序使用递归实现,代码如下 (Listing 1)

Listing 1: mul2

```
recursive function mul2(n, m) result(r)
  implicit none
  real(8), intent(in) :: n, m
  real(8) :: r

  if (n < m) then
      r = 1.0
  else
      r = n * mul2(n-1, m)
  end if

  return
  end function</pre>
```

这个函数在 n 的值比 m 小时输出 1.

按照上面所分析的,在计算排列数和组合数之前先约分的方法,可以把排列数的公式改写成

$$P_n^m = \text{mul2}(n, n - m + 1)$$

同样组合数也可以改写为

$$C_n^m = \begin{cases} &\frac{\operatorname{mul2}(n,m+1)}{\operatorname{mul2}(n-m,1)} \quad m \geq \frac{n}{2} \\ &\frac{\operatorname{mul2}(n,n-m+1)}{\operatorname{mul2}(m,1)} \quad m < \frac{n}{2} \end{cases}$$

这样就可以尽可能地防止内存溢出. 另外,计算排列数和组合数的子程序在输入不合法时 (m < 0) 或 n < m) 会输出错误信息. 整个程序的流程图如图 6 所示,代码见附录 Listing 4.

4.3 运行时结果

输入 n=12, m=8,程序计算得到的结果如图 7 所示. 得到的结果是,排列数为 19958400,组合数为 495. 利用 Octave 计算的值也分别是 19958400 和 495,可见程序的计算结果是正确的.

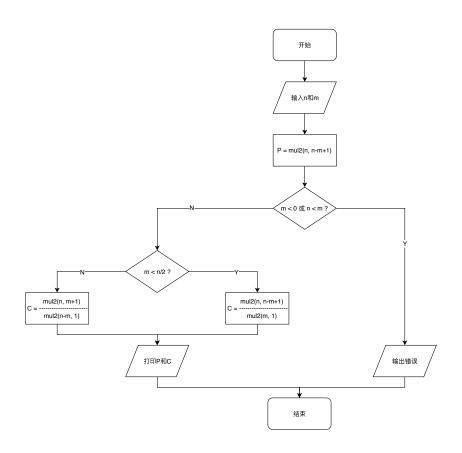


图 6: 任务 3 程序流程图

zipwin@WorldGate: -/WorkPlace/fortran/computational_physics/assignment1/task3 文件(F) 编辑(E) 查看(V) 搜索(S) 终端(T) 帮助(H) → task3 gfortran perm_and_comb.f90 -o perm_and_comb → task3 ./perm_and_comb n = 12.0 m = 8.0 Permutation: 19958400.0 Combination: 495.0 → task3 ...

图 7: 任务 3 运行时结果

Listing 2: 任务 1 基本输入输出 io.f90

```
module basic_io
   contains
   function input_matrix(ndim1, ndim2) result(matrix)
       ! Input matrix manually
       implicit none
       integer, intent(in) :: ndim1, ndim2
       integer, parameter :: ndim = 100
       integer :: i
       real*8, dimension(ndim, ndim) :: matrix
       do i = 1, ndim1
           print "(a17,i2,a8)", "Please input the ", i, 'th row: '
          read *, matrix(i, :ndim2)
       end do
       return
   end function input_matrix
   subroutine write_matrix(matrix, file_name)
       ! Save matrix to file
       implicit none
       real*8, intent(in) :: matrix(:, :)
       character(10), intent(in) :: file_name
       integer :: i
       character(10) :: row_len
       open(file=file_name, unit=10, action="write")
       write(row_len, "(i10)") size(matrix, dim=2)
       do i = 1, size(matrix, dim=1)
           write(unit=10, fmt="("//row_len//"f8.3)") matrix(i, :)
       end do
       close(unit=10)
       return
   end subroutine write_matrix
   subroutine read_matrix(matrix, file_name)
       ! Read matrix from file
```

```
implicit none
       real*8, intent(out) :: matrix(:, :)
       character(10), intent(in) :: file_name
       integer :: i
       character(10) :: row_len
       open(file=file_name, unit=10, action="read")
       write(row_len, "(i10)") size(matrix, dim=2)
       do i = 1, size(matrix, dim=1)
          read(unit=10, fmt="("//row_len//"f8.3)") matrix(i, :)
       close(unit=10)
       return
   end subroutine read_matrix
end module basic_io
program io
   use basic_io
   implicit none
   integer :: ndim1, ndim2
   integer, parameter :: ndim = 100
   real*8, dimension(ndim, ndim) :: matrix, matrix2
   integer :: i
   character(10), parameter :: file_name = "matrix.txt"
   ! Save the size of the 2nd dimension of matrix for format print
   character(10) :: row_len
   print "(a37)", "Please input the size of the matrix: "
   read *, ndim1, ndim2
   matrix = input_matrix(ndim1, ndim2)
   print "(15a)", "The input matrix is: "
   ! Translate the size of 2nd dimension to string
   write(row_len, "(i10)") size(matrix(:ndim1, :ndim2), dim=2)
   do i = 1, size(matrix(:ndim1, :ndim2), dim=1)
       print "("//row_len//"f8.3)", matrix(i, :ndim2)
   end do
   call write_matrix(matrix(:ndim1, :ndim2), file_name)
```

Listing 3: 任务 2 矩阵乘法 matrix_algebra.f90

```
program matrix_algebra
   implicit none
   real(8), dimension(5, 5) :: matrix
   real(8), dimension(5, 1) :: vector
   real(8), dimension(5, 1) :: vector_result
   real(8) :: scalar_result
   integer :: i
   integer :: ndim = 5
   matrix = reshape((/ 4, 2, 2, 5, 8, &
                     2, 5, 1, 3, 4, &
                     2, 1, 6, 2, 6, &
                     5, 3, 2, 1, 3, &
                     8, 4, 6, 3, 3 /), (/ 5, 5 /))
   vector = reshape((/ 2, 4, 5, 2, 1 /), (/ 5, 1 /))
   call calculate(matrix, vector, ndim, vector_result, scalar_result)
   print "(a14)", "The matrix A ="
   print "(5f8.2)", (matrix(i, :), i=1,5)
   print "(a21)", "The column vector V ="
   print "(f8.2)", (vector(i, 1), i=1,5)
   print "(a5)", "A*V ="
   print "(f8.2)", (vector_result(i, 1), i=1,5)
   print "(a9)", "V^T*A*V ="
   print "(f8.2)", scalar_result
end program
subroutine calculate(matrix, vector, ndim, vector_result, scalar_result)
! Given a matrix A and a vector V, this routine compute A*V and
! V^T*A*V, where * is the matrix multiplication.
! Arguments:
          matrix: a square matrix with shape (ndim, ndim)
         vector: a column vector with shape (ndim, 1)
          ndim: the size of matrix and vector
          vector_result: a column vector with shape (ndin, 1) to save the result A*V
          scalar_result: a scalar to save the result V^T*A*V
   implicit none
   integer, intent(in) :: ndim
```

```
real(8), dimension(ndim, ndim), intent(in) :: matrix
real(8), dimension(ndim, 1), intent(in) :: vector
real(8), dimension(ndim, 1), intent(out) :: vector_result
real(8), dimension(1, 1) :: fs
real(8), intent(out) :: scalar_result

vector_result = matmul(matrix, vector)
fs = matmul(transpose(vector), vector_result)
scalar_result = fs(1, 1)

return
end subroutine
```

Listing 4: 任务 3 排列数和组合数 perm_and_comb.f90

```
program perm_and_comb
   implicit none
   real(8) :: n, m, P, C
   n = 12.0
   m = 8.0
   call permutation(n, m, P)
   call combination(n, m, C)
   print "(a4, f4.1, a6, f4.1)", "n = ", n, " m = ", m
   print "(a12, f16.1)", "Permutation:", P
   print "(a12, f16.1)", "Combination:", C
end program
subroutine permutation(n, m, P)
   implicit none
   real(8), intent(in) :: n, m
   real(8), intent(out) :: P
   real(8), external :: mul2
   if (m < 0 .or. n < m) then
       print "(a)", "Illegal input!"
       return
   else
       P = mul2(n, n - m + 1)
   end if
   return
end subroutine
subroutine combination(n, m, C)
   implicit none
   real(8), intent(in) :: n, m
   real(8) :: P
   real(8), intent(out) :: C
   real(8), external :: mul2
   if (m < 0 .or. n < m) then
       print "(a)", "Illegal input!"
       return
```

```
else
       if (m \ge n/2) then
           C = mul2(n, m+1) / mul2(n-m, 1.0d0)
           C = mul2(n, n-m+1) / mul2(m, 1.0d0)
       end if
   end if
   return
end subroutine
recursive function mul2(n, m) result(r)
   implicit none
   real(8), intent(in) :: n, m
   real(8) :: r
   if (n < m) then
       r = 1.0
       r = n * mul2(n-1, m)
   end if
   return
end function
```