

Datum: 17.05.2018, Münster
Jonathan Max Sigrist <441760>

Einführung in das wissenschaftliche Programmieren - Physik
Do, 14:00-16:00; Raum ACP W410

Übung 5 - Programmieren in Fortran (Teil 5): Arrays, Subroutinen, Funktionen

Aufgabe 1

- a) Das Programm ,aufgabe1a.f90' liest die Datei ,au13.xyz' und berechnet den Schwerpunkt aller Atome. Dabei werden zuerst die Daten eingelesen und später miteinander verrechnet. Beim Einlesen wurde die IOSTAT-Methode verwendet und eine Laufvariable wird immer dann hochgezählt, wenn kein Error während des Lesens aufgetreten ist, also ein gültiges Wertepaar vorliegt. Die Werte werden in einem 3x13-Array gespeichert. Ebenso wird der Name in einem separaten 13-Array gespeichert.
Die Berechnung des Schwerpunktes ist gleich der Bildung des arithmetischen Mittels über die Spalten des 2-dimensionalen Arrays.
- b) Das Programm ,aufgabe1b.f90' liest vor dem Auslesen der Daten noch die erste Zeile aus und allokiert mit dieser Zahl die Größe der Arrays. Falls die zuvor eingelesene Anzahl an Atomen nicht mit der eingelesenen Anzahl übereinstimmt wird eine Warnung ausgegeben und das Programm gestoppt. Am Ende werden die allokierten Bereiche wieder befreit. Für andere Testdateien kann die Variable ,fileName' angepasst werden
- c) Im Programm ,aufgabe1c.f90' wird die Berechnung des Schwerpunktes in eine eigene Subroutine ausgelagert. Im Hauptprogramm wird diese dann ausgeführt. Sie nimmt das Array der Positionen, die Länge dieses und den resultierenden Schwerpunkt als Parameter und überschreibt letzten.
- d) Als letztes wird im Programm ,aufgabe1d.f90' eine Funktion bereitgestellt, die den Abstand zweier Atome zurückgibt. Dazu wird der Nutzer nach zwei Indices der Atome gebeten, welche zuerst einmal auf ihren Gültigkeitsbereich. Dann werden die Positionen der beiden ausgewählten Atome an die Funktion übergeben und der Rückgabewert als Entfernung ausgegeben.
Die Funktion berechnet den Abstand mithilfe des Satzes von Pythagoras.