
Fortran90

テキスト紹介

- 1) ザ・Fortran90/95 NSライブラリ(12) 戸川隼人 (著)
- 2) Fortran90/95プログラミング 富田博之, 齋藤泰洋 (著)
- 3) 数値計算のためのFortran90/95プログラミング入門 牛島省 (著) やや難

Webサイト紹介

- 1) Fortran ResQ <http://fortran.hiroshism.com/>
初級者向け, ただし, Fortran90でなく, FORTRAN77が解説されている
f90 <http://ccl.scc.kyushu-u.ac.jp/~nakano/f90/>
- 2) フォートランの部屋 <http://www3.plala.or.jp/hkyoji/fortran.htm>
初級者向け, 同じく, FORTRAN77
- 3) Fortran入門 <http://www.nag-j.co.jp/fortran/>
初中級者向け (Fortran90)
- 4) Fortran90 言語マニュアル <http://www.rs.kagu.sut.ac.jp/~yama/f90/f90-lang.html>
中級者向け (おもに参照用)

化学情報処理概論ホームページ

1月31日(木)(※未確定)に行われる試験について

注意事項

- 1) 単位認定は、課題1～5までを期日（課題1～3は11/26(木)、課題4,5は1/21(木))までに提出・完了し、かつ、試験を受け合格した人に対して行います。なお、特別な事情（※ 疾病、事故等やむを得ないものに限り）により、これに間に合わない場合には申し出て下さい。
- 2) 試験は1月31日(木)(仮)に教場試験として行います。試験日程表には載らない可能性がありますので注意して下さい。
- 3) 試験は化学の講義室で行います。
- 4) 問題用紙と解答用紙による紙の試験です。コンピュータを用いた試験ではありません。
- 5) テキスト及びノートの持ち込みは、禁止します。
※その他の事項は定期試験が近づいたら記載します。

試験の内容について

- 1) 次のようなタイプの問題が含まれます。ただし、これらがすべてではありません。
 - ・アルゴリズムに関する問題
 - ・コマンドの意味を問う問題
 - ・計算に必要なコマンドを問う問題
 - ・短いプログラムを作成する問題たとえば、二つの数を読み込み、最大公約数を計算し、それを印刷するプログラムなど。

大まかな流れ

- 1) 「レポート課題と締め切り」を読む。
学生番号、氏名、メールアドレス、パスワードを登録する。
- 2) 課題を行う。
HTMLファイルやプログラムのソースファイル、また、プログラム実行時に必要な入力ファイルは、端末上のテキストエディタなどを利用して作成する。
プログラムのコンパイルと実行は「レポート作成/提出」で行う。
- 3) 完成したレポートは「レポート作成/提出」から提出する。
- 4) 「レポート提出状況」で、提出したレポートの可否を確認する。
- 5) 不合格の場合、再提出の指示がある。合格するまで、レポートをやり直して再提出する。
- 6) 2.～5.の操作を繰り返し、各々の締め切りまでに各課題をクリアする。
- 7) 全ての課題を期日までに提出・完了し、期末試験を受ける。

レポート課題と締め切り

課題の進め方

- 1) まず<http://ccl.scc.kyushu-u.ac.jp/jouhou/2018/touroku.php> のページから学生番号, 氏名, メールアドレス, パスワードを登録してください。
- 2) レポートの提出は, すべて<http://ccl.scc.kyushu-u.ac.jp/jouhou/2018/work.php> こちらから行ってください。課題のやり方については(<http://www.scc.kyushu-u.ac.jp/BioChemPhys/thu2018/Run.html>参照)
- 3) レポート提出状況は, <http://ccl.scc.kyushu-u.ac.jp/jouhou/2018/> こちらで確認できます。
提出された課題は, 内容をチェックし,
その結果を<http://ccl.scc.kyushu-u.ac.jp/jouhou/2018/> レポート提出状況に表示します。
再提出が必要な場合はメールで連絡します。
課題を提出しても 表示または連絡がない場合は,
担当教員, または, TAに問い合わせてください。
※ 問い合わせ先E-mail : jouhout@ccl.scc.kyushu-u.ac.jp

注意事項

登録するメールアドレスには, (<http://www.m.kyushu-u.ac.jp/s/>)
学生基本メール (〇〇〇〇@s.kyushu-u.ac.jp) のみ受け付けます。
課題2から課題4では, プログラム上必要で用いた
{DO文,IF文,配列} のみカウントします。(不要と判定されたものはノーカウント)
プログラムの最初で確保する配列の大きさが定められない演習問題については,
100まで適用できればよい事とします。

レポート提出の締め切り

第一回締め (課題1~3) : 2018年11月11日 (木) {完成締め : 11月18日 (木) }
最終締め (課題4~5) : 2018年 1月17日 (木) {完成締め : 1月24日 (木) }

課題 1

WWW の様々なページをながめる。

気に入ったページの紹介や感想などを書いたファイルを、

下記の方法を参考にして作成し、そのファイルを提出する。（↓報告のファイルの作り方）

<http://www.scc.kyushu-u.ac.jp/BioChemPhys/thu2018/www.html>

もし、余裕があれば、上の課題の代わりに、Googleなどの検索エンジンを利用し、
空はなぜ青いか？（易）

液体酸素はなぜ青い（非常に薄い青）か？（やや難）

海はなぜ青いか？（難）

のいずれかについて書いてあるページ（日本語のものとは限らない）をみつけ

その紹介と科学的な説明を上の課題と同じように書き、そのファイルを提出する。

なお、WWW上の情報は数多くあり、全てが正しいものとは限らない、

科学的に正しいと自分で判断したものを提出すること。

（易～難は科学的な内容の難易度）

課題 2

ここ <http://www.scc.kyushu-u.ac.jp/BioChemPhys/thu2018/Prob.pdf>

に示した演習問題の問題1から問題4の中から1問を選び、

Fortran90 のプログラムを作成する。

ただし、**DO文**、**IF文**、**配列**のうち少なくとも一つが使われていることを条件とする。

課題3

ここ <http://www.scc.kyushu-u.ac.jp/BioChemPhys/thu2018/Prob.pdf>

に示した演習問題の問題5から問題10の中から1問を選び、

Fortran90 のプログラムを作成する。

ただし、**DO文**、**IF文**、**配列**のうち二つ以上が使われていることを条件とする。

課題 4

ここ <http://www.scc.kyushu-u.ac.jp/BioChemPhys/thu2018/Prob.pdf>

に示した演習問題の問題11から問題14の中から1問を選び、

Fortran90 のプログラムを作成する。

ただし、**DO文**、**IF文**、**配列**のすべてが使われていることを条件とする。

課題 5

ここ <http://www.scc.kyushu-u.ac.jp/BioChemPhys/thu2018/Prob.pdf>

に示した演習問題の問題15から問題20の中から1問を選び、

Fortran90 のプログラムを作成する。

（この課題には、使用ステートメントについての条件はありません）

課題のやり方

大まかな流れ

- 1) プログラムのソースファイルを作る。
 - 2) プログラムをコンパイルする。
 - 3) 必要に応じて、入力ファイルを作る。
 - 4) プログラムを実行する。
 - 5) 問題なければ、レポートとして提出する。
- ※ プログラミング上での諸注意はこちら
-

1. プログラムのソースファイルを作る

- a) 端末上のテキストエディタを起動する。
- b) プログラムを入力する。

(例)

```
PROGRAM TEST
IMPLICIT NONE
REAL :: A,B,WA
WRITE(*,*) 'A,B='
READ(*,*) A,B
WA=A+B
WRITE(*,*) 'A+B=', WA
STOP
END PROGRAM TEST
```

- c) 適当なファイル名をつけて保存する。
- d) テキストエディタを終了する。

※テキストエディタ

各OSの標準テキストエディタ

Mac OS X: テキストエディット

※はじめに、「フォーマット」→「標準テキストにする」選ぶこと。

Windows: メモ帳 または ワードパッド

より便利なテキストエディタがフリーソフトであります。

探してみると良いでしょう。

MAC OSでは、mi が便利です。

1 A. プログラムのソースファイルを修正する

- a) テキストエディタを起動する。
 - b) 「ファイルを開く」からソースファイルを開く。
 - c) 修正する。
 - d) 「保存」や「上書き保存」からソースファイルを保存する。
 - e) テキストエディタを終了する。
-

2. プログラムをコンパイルする

- a) レポート作成/提出ページを開く。
 - b) 登録した「学生番号」と「パスワード」を入力し、『ログイン』を押す。
 - c) 「ソースファイル」の『参照』を押し、**1.c**で保存したプログラムファイルを選択する。
※ 課題1の場合、HTMLファイルを選択する。
 - d) 『コンパイル』を押す。
※ 課題1の場合、『提出』を押す。 → 課題1の提出終了
 - e) コンパイルに成功した場合、入力ファイルを問うページが表示されます。
※ コンパイルに失敗した場合は、1 A. でプログラムの修正を行い、ブラウザの戻るボタンを押し、再度d.から行う。
-

3. 入力ファイルを作る

プログラム実行時、データの入力が必要な場合、以下の手続きで入力ファイルを作る。

- a) 端末上のテキストエディタを起動する。
 - b) 入力用データを入力する。
(例：上記のプログラムでは2個の数値を入力する)
25, 38
 - c) 適当なファイル名をつけて保存する。
 - d) テキストエディタを終了する。
-

4. プログラムを実行する

2.eから以下の手順でプログラムを実行する。

- a) 入力ファイルがある場合、「入力ファイル」の『参照』を押し、
3.cで保存した入力ファイルを選択する。
入力ファイルがない場合、「入力なし」のチェックボックスにチェックを入れる。
(入力ファイルの選択は不要)
 - b) 『実行』を押す。
 - c) 「プログラムは正常に終了しました。」と表示された場合、プログラム実行に成功。
エラーが表示された場合は、そのエラーに従って修正を行う。
-

5. レポートを提出する

4.cで出力された結果を検討し、課題をクリアしたと判断したら、以下の手順でレポートを提出する。

なお、出力された結果は『ダウンロード』を押すとファイルに保存できます。

(例：上記のプログラムと入力の場合)

```
A+B= 63.0000000
```

- a) 「課題番号」を選択する。
- b) 「選択問題」を選択する。
- c) 必要であれば「連絡事項」を入力する。
- d) 『提出』を押す。 → 課題の提出終了

※ <http://ccl.scc.kyushu-u.ac.jp/jouhou/2018/> レポート提出状況の該当欄に「提出」と表示されているか確認する。

プログラミング上での諸注意

課題を行う際に間違いやすい点、よく疑問に思われる点を以下に示す。

なお、以下の数字についての記述は、最近の汎用計算機を基準に述べている。環境や条件によっては異なることに注意。

数字の表現

コンピュータだからといって、数字を正確に扱っているとは限らない。

n桁の2進数によって整数や実数を表していて、形式によって表現範囲や有効桁数が異なっている。

たとえば、

```
integer :: i
```

のようにプログラム中で書くと変数iは整数として取り扱われるが、その整数の表現範囲は -2147483648 ~ +2147483647 となる。

実数の有効桁数

プログラム中で

```
real :: a
```

のように書くと変数aは実数として取り扱われる。

これを実数型の変数とよぶ。

実数型の有効桁数は7桁程度である。

たとえば、0.1を10個足し合わせても1にはならず、 $1 \pm 0.0000001\dots$ となる。

したがって、どの程度の誤差があるか意識してプログラムする必要がある。

もう少し詳しく述べると、実数型は単精度浮動小数点数とよばれる32桁の2進数で表現されている。より高い精度が必要な場合には倍精度浮動小数点数などを用いればよい。

倍精度を用いるには、

```
real(8) :: a
```

のように、realの代わりにreal(8)と書く。

倍精度は64桁の2進数で表現され、(10進数の)有効桁数は15桁程度である。

なお、授業の課題では倍精度を用いなくてよい。

変数の初期化

変数を宣言しただけでは、その変数にどのような値が保存されているかわからない。
使用する前に初期化(初期値を代入)して使うこと。

DO変数

DO文で使用するDO変数には、整数型変数を用いること。

実数型変数を用いた場合、

実数型の持つ誤差(有効桁数)を考慮しなければならない。

プログラマー(プログラミングする人)が意図していない動作になる場合がある。

全角文字など

プログラムを見直しても誤りが見つからない場合は、

文字(特に空白や記号)が全角文字になっていないかチェックする。

※ プログラムに全角文字を使ってはいけないという事ではない。

同様に、0(ゼロ)とO(オー)、1(イチ)とI(アイ)とl(エルの小文字)など

識別しにくい文字も注意。
