情報処理　（第14回）　(2017/7/17・茂木)

本日のテーマ

- サブルーチン副プログラム，関数副プログラムの概要
- ループ，配列の演習

1　演習の解答例

Q1. 正規乱数の生成（ボックス・ミューラー法・boxmuller.f）

```
c23456
      program BoxMuller
      implicit none
      integer j, n
      real x, y, s, t, pi

      pi=3.14159265
      n=2500
      open(10,file='Gauss.csv')
      do j=1, n   ! 2500回繰り返す = 5000個の乱数を生成
         x = rand()  ! 0～1の一様乱数を２つ生成する
         y = rand()
         s=sqrt(-2.0*log(x))*sin(2.0*pi*y) ! ２つの正規乱数に変換
         t=sqrt(-2.0*log(x))*cos(2.0*pi*y)
         write(10,1000) s, t
      enddo
 1000 format(f12.7)
      close(10)
      end
```

Q2. 正規乱数の発生頻度 (probability.f)

```
c23456
      program Probability
      integer i, j, n
      integer ic(30)
      real x(5000)

      open(10,file='Gauss.csv')     ! 正規乱数の読込
      do j=1, 5000
         read(10,*) x(j)
      enddo
      close(10)

      do j=0, 30
         ic(j)=0
      enddo
      do j=1, 5000
         i=(x(j)-(-3.0))/0.2+1      ! 乱数の値から階級の番号を算定する.
         if(i.gt.0 .and. i.lt.31) then
            ic(i)=ic(i)+1
         endif
      enddo

      open(20,file='Probability.csv')
      do j=1, 30
         write(20,3000)-3.0+0.2*j-0.1, 1.0*ic(j)/5000
      enddo
 3000 format(f5.2,',', f12.7)
      close(20)

      end
```

Q3. 上三角行列の一次方程式の解法 (uppert.f)

```
c23456
      program uppert
      implicit none
      integer i, j, m, n
      parameter(m=10)
      real A(m,m), y(m), x(m), s

      read(5,*) n               ! 配列の大きさを読み込み，大きさをチェック
      if(n.gt.m) stop '入力した配列が大きすぎます．'
      do i=1, n                 ! 左辺行列 A，右辺ベクトル b を読み込む
         read(5,*)(A(i,j),j=1,n), y(i)
      enddo

      do i=n,1,-1
         s=0.0                  ! Σの計算（和の構文）
         do j=i+1,n
            s=s+A(i,j)*x(j)
         enddo

         x(i)=(y(i)-s)/A(i,i)   ! 解ベクトルの計算
      enddo

      do i=1, n
         write(6,5000) i,x(i)      ! 書式付き出力
      enddo
 5000 format('x(',i2,')=',f10.4)
      end
```

2　副プログラムの概要

大規模なプログラムでは，例えば，連立一次方程式の係数行列の作成，連立一次方程式を解く，などのいくつかの計算の部分に分割できるのが普通です．このような部分を手続きとしてカプセル化すると，プログラミングや保守が容易になります．Fortran ではこのための文として関数副プログラムとサブルーチン副プログラムが用意されています．詳細は教科書 9 章をみて下さい．Fortran のより実用的なプログラム例として，CDROM の中の `¥Suchikaiseki¥stat2.f` をみると，主プログラム (1〜30 行）はサブルーチン副プログラムを call しているだけです．

また，連立一次方程式を解くなど頻出するがプログラミングが難しい計算は，サブルーチン副プログラムとして公開されています．配付 CDROM のコンパイラでは LAPACK（フリーウェア）が使えるようになっています．CDROM の中の `¥lapack-sample` フォルダーを参照して下さい．

2.1　関数副プログラム

呼び出し側に数値を一つ返す場合関数副プログラムが便利です．以下は使用例です．

関数副プログラムを用いた階乗の計算（`kaijo.f`）

```
c23456
      program kaijo_no_keisan
      integer k, i, kaijo

      do i=1, 10
         k=kaijo(i)    ! 関数副プログラムを呼ぶ
         write(6,*) i, ':', k
      enddo
      end

      integer function kaijo(m) ! 関数副プログラムの定義
      integer j
      kaijo=1
      do j=1, m
         kaijo=kaijo*j
      enddo
      return
      end
```

2.2 サブルーチン副プログラム

計算のカプセル化にはサブルーチン副プログラムが良く用いられます．呼び出し側との値の受け渡しは引数を使います．以下は使用例です．

サブルーチン副プログラムを用いた階乗の計算（kaijo2.f）

```
c23456
      program kaijo_no_keisan
      integer k, i

      do i=1, 10
         call kaijo(i, k)    ! サブルーチン副プログラムを呼ぶ
         write(6,*) i, ':', k
      enddo
      end

      subroutine kaijo(m, kai) ! サブルーチン副プログラムの定義
      integer j
      kai=1
      do j=1, m
         kai=kai*j
      enddo
      return
      end
```

演習

Q1. 次の関数 $f(x)$ について $-1 \le x \le 1$ の範囲を 1000 等分に分割して数値積分するプログラムを作成し，得られた積分値を記せ．

$$f(x) = e^{-x^2/2}$$

Q2. 次の連立方程式を，行同士の演算によって上三角行列を係数行列とする連立一次方程式に書き直したい．左辺の係数行列と右辺ベクトルを書き直すプログラムを作成せよ（**前進消去・forward elimination** という）．なお，繰り返し計算には do ループを用いるものとする．

$$\begin{bmatrix} 2 & -1 & 3 \\ -1 & 2 & 0 \\ 3 & -5 & 2 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 3 \\ 1 \\ 1 \end{Bmatrix}$$

ヒント　手計算をして，何をやればよいか考えます．まず，1 行目を使って，(2,1) 要素，(3,1) 要素を消します．

$$2\,行目 - 1\,行目 \times (2,1)\,要素/(1,1)\,要素\ より$$

$$\begin{bmatrix} 2 & -1 & 3 \\ -1-2(-1)/2 & 2-(-1)(-1)/2 & 0-3(-1)/2 \\ 3 & -5 & 2 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 3 \\ 1-3(-1)/2 \\ 1 \end{Bmatrix}$$

$$\Rightarrow \begin{bmatrix} 2 & -1 & 3 \\ 0 & 1.5 & 1.5 \\ 3 & -5 & 2 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 3 \\ 2.5 \\ 1 \end{Bmatrix} \tag{1}$$

同様に

$$3\,行目 - 1\,行目 \times (3,1)\,要素/(1,1)\,要素\ より$$

$$\begin{bmatrix} 2 & -1 & 3 \\ 0 & 1.5 & 1.5 \\ 3-2\cdot 3/2 & -5-(-1)3/2 & 2-3\cdot 3/2 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 3 \\ 2.5 \\ 1-3\cdot 3/2 \end{Bmatrix}$$

$$\Rightarrow \begin{bmatrix} 2 & -1 & 3 \\ 0 & 1.5 & 1.5 \\ 0 & -3.5 & -2.5 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 3 \\ 2.5 \\ -3.5 \end{Bmatrix} \tag{2}$$

次に，式 (2) の 2 行目と 3 行目を使って (3,2) 成分を消去すると，上三角行列を係数行列とする連立方程式に書き直すことができます．

$$3\,行目 - 2\,行目 \times (3,2)\,要素/(2,2)\,要素\ より$$

$$\begin{bmatrix} 2 & -1 & 3 \\ 0 & 1.5 & 1.5 \\ 0 & -3.5-1.5(-3.5)/1.5 & -2.5-1.5(-3.5)/1.5 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 3 \\ 2.5 \\ -3.5-2.5(-3.5)/1.5 \end{Bmatrix}$$

$$\Rightarrow \begin{bmatrix} 2 & -1 & 3 \\ 0 & 1.5 & 1.5 \\ 0 & 0 & ? \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 3 \\ 2.5 \\ ? \end{Bmatrix} \tag{3}$$