ΑΝΟΙΚΤΑ ακαδημαϊκά μαθήματα ΠΠ

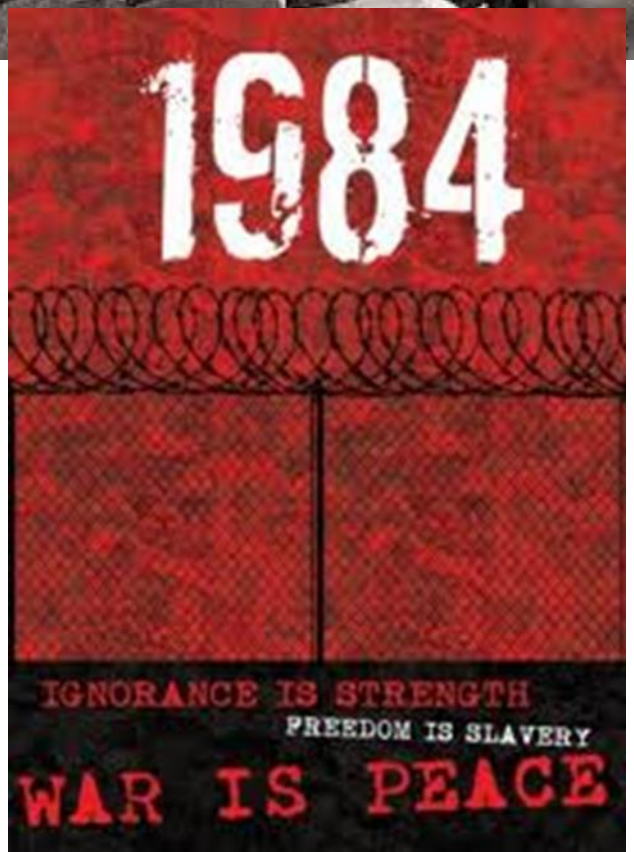
Εισαγωγή στον Προγραμματισμό Η/Υ για Χημικούς Μηχανικούς

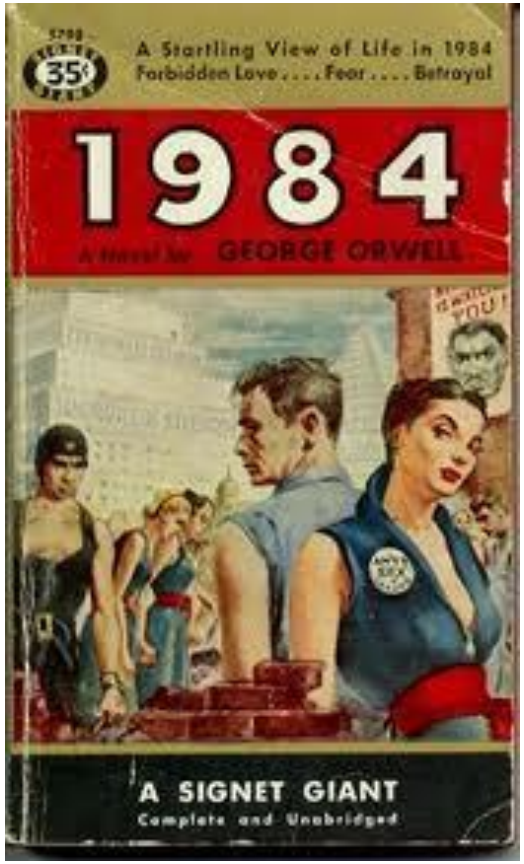
Παρουσίαση Διαλέξεων: 9. Διαδικασίες ΙΙ

Καθηγητής Δημήτρης Ματαράς

‘Γιατί, στο κάτω κάτω, πως το ξέρουμε ότι δύο και δύο κάνουν τέσσερα, ή ότι ισχύει ο νόμος της βαρύτητας, ή ότι το παρελθόν είναι αμετάβλητο; Αν το παρελθόν και ο εξωτερικός κόσμος υπάρχουν μόνο στο νου, κι' αν ο νους μπορεί να ελέγχεται και να καθοδηγείται, τότε τι γίνεται;’

‘*1984*’, Τζωρτζ Όργουελ





Δυναμικά δεδομένα

- Δεδομένα που μπορούν να αλλάζουν χαρακτηριστικά και τιμή κατά τη διάρκεια της εκτέλεσης του προγράμματος:
  1. Δυναμικοί Πίνακες **`allocatable`**
  2. Δυναμικοί Πίνακες Διαδικασιών:
     a. Εικονικοί Πίνακες Υποθετικής Μορφής
     b. Εικονικοί Πίνακες Υποθετικού Μεγέθους
     c. Αυτόματοι Πίνακες
     d. Functions που επιστρέφουν Πίνακα
     e. Εικονικοί **`allocatable`** Πίνακες **F03**
     f. Allocatable Functions **F03**
  3. Δείκτες (pointers):
     a. Πίνακες Δεικτών
     b. Λίστες Δεικτών
     c. Δυαδικά Δένδρα
     d. Διαδικασίες Δείκτες **F03**

1. Δυναμικοί Πίνακες allocatable

```
τύπος, ALLOCATABLE::όνομα πίνακα1(:[::..:]) &
                   [,όνομα πίνακα2(:[::..:]),..]

!στην παρένθεση χρησιμοποιούμε ένα ':'
!για κάθε διάσταση του πίνακα
    ....
ALLOCATE(όνομα πίνακα1(ενδείκτης1[,ενδείκτης2,..:]),&
          [STAT = όνομα ελέγχου])
! δίνουμε τις ακριβείς διαστάσεις του πίνακα
    ....
DEALLOCATE (όνομα πίνακα1)
```

```
integer, allocatable::a(:)
allocate (a(3));    print'(3i8)',a
   a = [1,2,3];     print'(3i8)',a
deallocate (a)
allocate (a(5));    print'(5i8)',a
  a = [2,4,6,8,10]; print'(5i
end
```

```
3616360 3604672       0
      1       2       3
3620048 3615952       0       0       0
      2       4       6       8      10
```

Αυτόματη δέσμευση στην F03

```
program autoallocation
   implicit none
   integer              :: i
   real,allocatable:: a(:)
   real                 :: c(5) = [(i, i = 1,5)]
   real                 :: d(2,3) = reshape([(i, i = 1,6)],[2,3])

  !allocation F03
   a = c; print'(5f5.2)', a
   print'(a15,i2,a9)',' the array has',size(a),'elements'
   a = d(1,:); print'(3f5.2)',a
   print'(a15,i2,a9)',' the array has',size(a),'elements'

end program autoallocation
```

```
 1.00 2.00 3.00 4.00 5.00
the array has 5 elements
1.00 3.00 5.00
the array has 3 elements
```

Η fortran 2003 επιτρέπει την αυτόματη δέσμευση και επαναδέσμευση **allocatable** πινάκων με εκφράσεις ανάθεσης αρκεί να πρόκειται για πίνακες της ίδιας τάξης.

Γεννήτρια n τυχαίων στο διάστημα [a,b]...σωστά


```
program randomizer !n τυχαίοι αριθμοί στο διάστημα [a,b]
   implicit none
! δηλώσεις:
   integer              :: n
   real                 :: a, b
   real,allocatable:: harvest(:)

! αρχή:
   print*,'how many numbers'
   read *, n; allocate(harvest(n))!allocation (δέσμευση μνήμης)
   print*, 'give the range of numbers: [a,b]'
   read *, a, b

   call init_random_seed()  !αρχικοποίηση της γεννήτριας
   call random_number(harvest)
   harvest = a + harvest * (b - a) !ανάπτυξη στο [a,b]
   print '(4g15.8)',harvest !τυπώνει 4 τιμές σε κάθε σειρά

contains
```

Γεννήτρια n τυχαίων στο διάστημα [a,b]...σωστά


```
subroutine init_random_seed !αρχικοποίηση γεννήτριας
  integer                    :: i, n, clock
  integer, allocatable :: seed(:)

  call random_seed(size = n)!προσδιορισμός μεγέθους σπόρου

  allocate(seed(n))  !allocation (δέσμευση μνήμης)

     call system_clock(count = clock)

     seed = clock + 37 * [(i-1, i = 1, n)]

     call random_seed(put = seed)  !χρήση τυχαίου σπόρου

  deallocate(seed)   !αποδέσμευση μνήμης

end subroutine init_random_seed

end program randomizer
```

Πίνακες & Διαδικασίες

1. Εικονικοί Πίνακες Ρητής Μορφής
2. Δυναμικοί Πίνακες Διαδικασιών
   a. Εικονικοί Πίνακες Υποθετικής Μορφής
   b. Εικονικοί Πίνακες Υποθετικού Μεγέθους **F77**
   c. Αυτόματοι Πίνακες
   d. Συναρτήσεις με αποτέλεσμα πίνακα
   e. Εικονικοί `allocatable` πίνακες **F03**
   f. `allocatable` functions **F03**

1. Εικονικοί Πίνακες Ρητής Μορφής

```
program explicit_shape_arrays
   implicit none
   integer :: i
   real    :: y(-4:5) = [(i, i = 1, 10)]
   print '(5f5.2)', f(y, size(y))
contains
   pure real function f(x,n)
      integer,   intent(in) :: n
      real,      intent(in) :: x(n)
      integer               :: i

      f = 0.0
      do i = 1, size(x), 2
         f = f + x(i)
      end do
   end function f

end program explicit_shape_arrays
!τυπώνει: 25.00
```

Δήλωση εικονικού πίνακα ρητής μορφής

2.a. Εικονικοί Πίνακες Υποθετικής Μορφής

```
program assumed_shape_arrays
   implicit none
   integer ::i
   real    ::y(10) = [(i, i = 1, 10)]
   print '(5f5.2)', f(y)
contains
   pure real function f(x)
      real,intent(in) :: x(:)
      integer         :: i

      f = 0.0
      do i = 1, size(x), 2
         f = f + x(i)
      end do

   end function f

end program assumed_shape_arrays
!τυπώνει: 25.00
```

Δήλωση εικονικού πίνακα υποθετικής μορφής

2.c. Τοπικοί Αυτόματοι Πίνακες

```
program automatic_arrays
   implicit none
   integer                 :: i, n
   real, allocatable       :: y(:)
   print*,'how many';read *, n
   allocate(y(n)); y = [(i, i = 1, n)]
   print '(5f5.2)', f(y)
contains
   pure real function f(x)
      real, intent(in)::x(:)
      real                 ::z(size(x)/2)

      z = x(::2)
      f = sum(z)
   end function f

end program automatic_arrays
!για n=10 τυπώνει: 25.00
```

Δήλωση τοπικού αυτόματου πίνακα

2.d. Function με αποτέλεσμα Πίνακα

```
program array_valued_function
   implicit none
   integer, allocatable, dimension(:):: x, y
   integer                            :: i, n

   call execute_command_line('chcp 1253')
   print *,'πλήθος ακεραίων;'; read *, n

   x = [(i, i = 1, n)]   !allocation F03
   y = f(x)              !allocation F03
   print '(a35)', 'Υπάρχουν οι εξής πρώτοι αριθμοί:'

   do i = 2, n
      if(y(i) /= 0) print *, y(i)
   end do

contains
```

2.d. Functions με αποτέλεσμα Πίνακα

```
  pure function f(x)
     integer, intent(in) :: x(:)          !υποθετικός
     integer             :: f(size(x))    !αυτόματος
     integer             :: i

     f    = x
     f(1) = 0
     do i = 2, size(f)
        if(f(i) /= 0) then      ! Αν ο i είναι πρώτος...
           f(2*i:size(f):i) = 0 ! μηδενίζω τα πολλαπλάσιά του
        endif
     enddo
  end function f

end program array_valued_f
```

```
 πλήθος ακεραίων;
10
   Υπάρχουν οι εξής πρώτοι αριθμοί:
           2
           3
           5
           7
```

2.e. Εικονικοί Allocatable πίνακες F03

```
program Eratosthenes
   implicit none
! δηλώσεις:
   integer                  :: i, n
   integer, allocatable :: x(:), y(:)

! αρχή:
   call execute_command_line('chcp 1253')
   print *, 'πλήθος ακεραίων;'; read *, n

   allocate(x(n)); x = [(i, i = 1, n)]
   print '(a35)', 'Υπάρχουν οι εξής πρώτοι αριθμοί:'
   call primes(x, y); print '(5i7)', y

contains
```

2.e. Εικονικοί Allocatable πίνακες F03

```
pure subroutine primes(x, y)
   integer, intent(in)                  :: x(:)  !υποθετικός
   integer, allocatable, intent(out) :: y(:)  !allocatable
   integer::i, nr_primes

   y = x                                !first allocation F03
   y(1) = 0
   do i = 2, size(y)
      if(y(i) /= 0) y(2*i:size(y):i) = 0
   enddo

   nr_primes = count(y /= 0)
   y(1:nr_primes) = pack(y, y /= 0)
   y = y(1:nr_primes)                   !second allocation F03

end subroutine primes

end program Eratosthenes
```

```
 πλήθος ακεραίων;
10
   Υπάρχουν οι εξής πρώτοι αριθμοί:
      2       3       5       7
```

2.f. Allocatable Functions F03

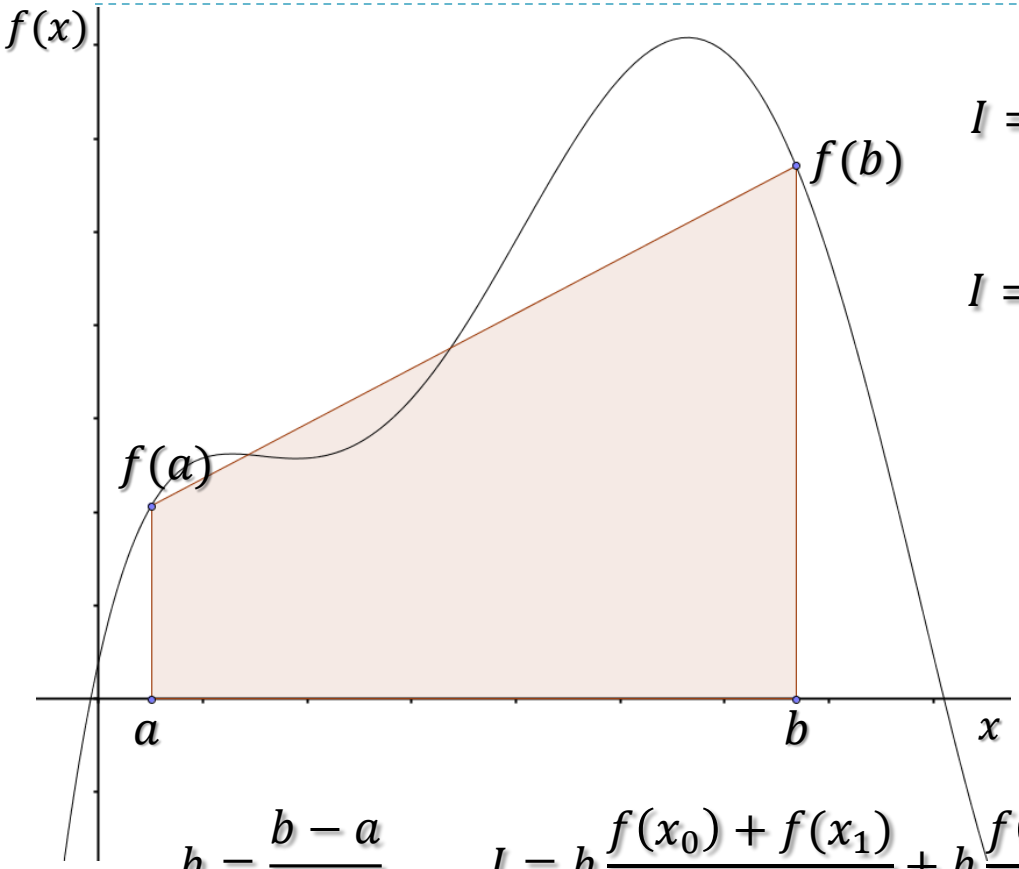
```
program Eratosthenes
   implicit none
   integer                  :: i, n
   integer,allocatable      :: y(:)

   call execute_command_line('chcp 1253')
   print *,'πλήθος ακεραίων;'; read *,n

   y = [(i, i = 1, n)]
   print '(a35)', 'Υπάρχουν οι εξής πρώτοι αριθμοί:'
   print '(5i7)', f(y)

contains
   pure function f(x)
      integer, intent(in)   :: x(:) !υποθετικός
      integer, allocatable  :: f(:) !allocatable
      integer               :: i, primes
```

2.f. Allocatable Functions F03

```
      f = x ! first allocation F03; f(1) = 0
      do i = 2, size(f)
         if(f(i) /= 0) then !Αν ο i είναι πρώτος
            f(2*i:size(f):i) = 0
         end if
      end do
      primes = count(f /= 0);
      f(1:primes) = pack(f, f /= 0)
      f = f(1:primes) !second allocation F03
                      !ή αλλιώς allocate(f(primes))
                      !f = z(1:primes)
   end function f
end program Eratosthenes
```

```
 πλήθος ακεραίων;
100
   Υπάρχουν οι εξής πρώτοι αριθμοί:
      2       3       5       7      11
     13      17      19      23      29
     31      37      41      43      47
     53      59      61      67      71
     73      79      83      89      97
```

Η μέθοδος του τραπεζίου



$$I = \int_a^b \left[f(a) + \frac{f(b) - f(a)}{b - a}(x - a) \right] dx$$

$$I = (b - a)\frac{f(a) + f(b)}{2}$$

$$h = \frac{b - a}{n} \qquad I = h\frac{f(x_0) + f(x_1)}{2} + h\frac{f(x_1) + f(x_2)}{2} + \cdots + h\frac{f(x_{n-1}) + f(x_n)}{2}$$

$$I = \frac{h}{2}\left[f(x_0) + 2\sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + f(x_n) \right]$$

Η μέθοδος του τραπεζίου

```
program integrator
  implicit none
  interface
    real(kind=8)function f(x)
       real(kind=8),intent(in)::x
    end function f
  end interface
  real(kind=8)::area

  area = integrate(f, a = 1.0_8, b = 5.0_8, n = 10000_8)
  print '(a35,f10.6)', 'the integral of the function is:', area

contains

  real(kind=8)function integrate(f, a, b, n)
    interface
       real(kind=8) function f(x)
          real(kind=8),intent(in)::x
       end function f
    end interface
```

Ρητή Διεπιφάνεια Εξωτερικής Διαδικασίας

Ο όρος του ορίσματος είναι διαδικασία!!

Ρητή Διεπιφάνεια Εξωτερικής Διαδικασίας

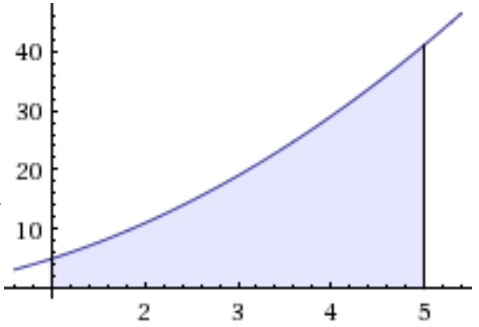
Η μέθοδος του τραπεζίου

```
    real(kind=8),    intent(in) :: a, b
    integer(kind=8),intent(in) :: n
    real(kind=8)                :: h, s
    integer(kind=8)             :: i
    h = (b - a)/real(n, kind=8)
    s = (f(a) + f(b)) / 2
    do i = 1, n-1
       s = s + f(a + i * h)
    end do
    integrate = h * s
  end function integrate
end program integrator
```

```
real(kind=8) function f(x)
  real(kind=8),intent(in)::x
  !f=exp(-x)
   f = x**2 + 3 * x + 1
  !f=cos(x)/x
end function f
```

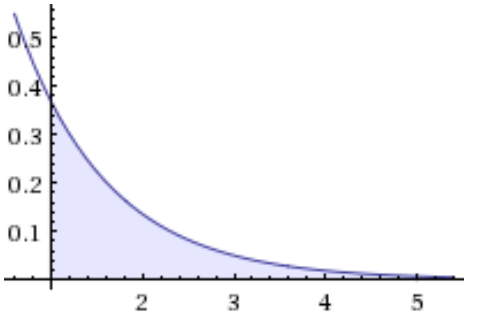
Εξωτερική Διαδικασία

Η μέθοδος του τραπεζίου



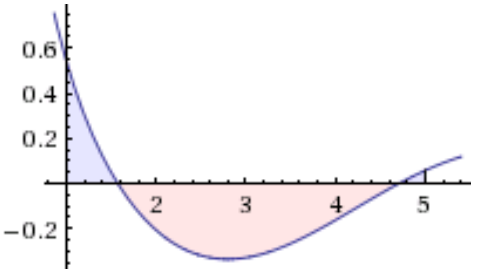

```
the integral of the function is: 81.333333
```

$$\int_1^5 (x^2 + 3x + 1)\,dx = \frac{244}{3}$$




```
the integral of the function is:  0.361141
```

$$\int_1^5 e^{-x}\,dx = \frac{e^4 - 1}{e^5} \approx 0.361141$$




```
the integral of the function is: -0.527434
```

$$\int_1^5 \frac{\cos(x)}{x}\,dx = \mathrm{Ci}(5) - \mathrm{Ci}(1) \approx -0.527434$$

Συνοψίζουμε τα είδη πινάκων

```
  integer, parameter  ::n = 10
  real                ::a(n)   !στατικός πίνακας
  real, allocatable   ::b(:)   !δυναμικός πίνακας (allocatable)

  a = f(a, b, n)

contains

  function f(x, y, m) !allocatable array valued function
    integer :: m                !εικονική μεταβλητή
    real    :: x(m)             !ρητός εικονικός
    real    :: y(:)             !υποθετικός εικονικός
    real    :: z(m)             !αυτόματος
    real, allocatable ::f(:)    !allocatable

    y = sqrt(x)
    z = x * y
    f = z                       !allocation F03
  end function f
```

Αναδρομικές Διαδικασίες

α) το παραγοντικό

$$n! = \begin{cases} n(n-1)! & \forall\, n \geq 1 \\ 1 & n = 0 \end{cases}$$

```
program factorial
   implicit none

! δηλώσεις:
   integer(8):: f, n, i

! αρχή:

   !επικεφαλίδα
   print '(t3,a1,t32,a2)', 'n', 'n!'
   write (*,'(t2,32a1)')('=', i = 1, 32)

   do n = 1, 20
      f = fact(n)      !  με function
      call fn(n,f)     !ή με subroutine
      print '(x,i2,i30)', n, f
   enddo

contains
```

Αναδρομικές Διαδικασίες

α_1) το παραγοντικό με function

```
recursive function fact(n) result(factor)
   integer(8),intent(in)::n
   integer(8)            ::factor

   if(n >= 1) then
      factor = n * fact(n-1)!αναδρομική κλήση
   else
      factor = 1
   end if

end function fact
```

Αναδρομικές Διαδικασίες

```
recursive function fact(n
   integer(8),intent(in):
   integer(8)            :

   if(n >= 1) then
      factor = n * fact(n-
   else
      factor = 1
   end if

end function fact
```

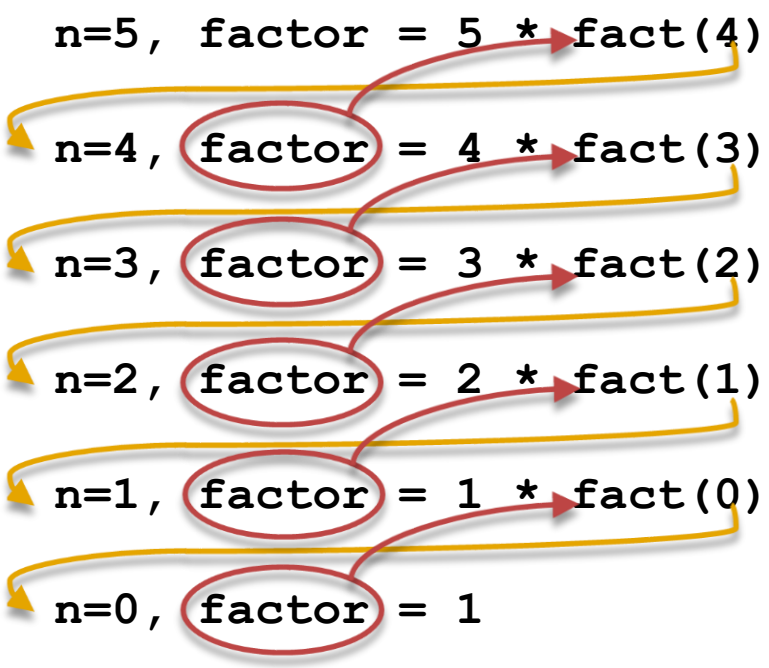
n	n!
1	1
2	2
3	6
4	24
5	120
6	720
7	5040
8	40320
9	362880
10	3628800
11	39916800
12	479001600
13	6227020800
14	87178291200
15	1307674368000
16	20922789888000
17	355687428096000
18	6402373705728000
19	121645100408832000
20	2432902008176640000

Αναδρομικές Διαδικασίες

α_1) το παραγοντικό με function

- Π.χ. Το παραγοντικό του 5:

```
if(n >= 1) then
   factor = n * fact(n-1)
else
   factor = 1
end if
```



Αναδρομικές Διαδικασίες

α_2) το παραγοντικό με subroutine

```
recursive subroutine fn(n, factor)
   integer(8),intent(in) :: n
   integer(8),intent(out):: factor
   integer(8)            :: temp

   if(n >= 1) then
      call fn(n-1, temp)!αναδρομική κλήση
      factor = temp * n
   else
      factor = 1
   end if

end subroutine fn

end program factorial
```

Αναδρομικές Διαδικασίες

β) Η ακολουθία Fibonacci

```
program fibonacci
    implicit none
! δηλώσεις:
   integer :: f, n
   real    :: ratio

! αρχή:

   !επικεφαλίδα
   print '(t3,a1,t8,a1,t13,a5)', 'n', 'f', 'ratio'
   print '(a19)', ' ==================='

   do n = 1, 20
      call fibs(n, f, ratio)
      print '(x,i2,i5,2x,f9.7)', n,  f,  ratio
   end do

contains
```

$$F(n) = \begin{cases} F(n-1) + F(n-2) & \forall\, n > 2 \\ 1 & n = 1 \\ 1 & n = 2 \end{cases}$$

$a \quad b$

$$\frac{a+b}{a} = \frac{a}{b} = \varphi \qquad \varphi = \frac{1+\sqrt{5}}{2}$$

Αναδρομικές Διαδικασίες

β) Η ακολουθία Fibonacci

```
recursive subroutine fibs(n,f,r)
   integer,intent(in)    :: n
   integer,intent(out)   :: f
   real,intent(out)      :: r
   integer               :: t1, t2

   if(n>2) then
      call fibs(n-1, t1, r)    !αναδρομική κλήση
      call fibs(n-2, t2, r)    !αναδρομική κλήση
      f = t1 + t2
      r = real(f) / real(t1)
   else
      f = 1
      r = 1.
   end if
end subroutine fibs

end program fibonacci
```

Αναδρομικές Διαδικασίες

γ) αναδρομικός Ευκλείδης

```
program recursive_gcd
   implicit none
   integer :: a, b, c
   call execute_command_line('chcp 1253')
   do
      print *, 'Δώσε δύο ακέραιους'; read *, a , b
      if(a == 0 .or. b == 0) exit
      print '(a18,i4)','Ο ΜΚΔ τους είναι=', gcd(abs(a),abs(b))
   end do
contains
   recursive function gcd(x, y) result(z)
      integer:: x, y, z
      if(y == 0)then
         z = x
      else
         z = gcd(y, mod(x,y))
      end if
   end function gcd
end program recursive_gcd
```

Αναδρομικές Διαδικασίες

δ) αναδρομική ολοκλήρωση

```
program integrator
    implicit none
    interface
        real(8) function f(x)
            real(8),intent(in)::x
        end function f
    end interface
    real(8)::area
    area = integrate(f, a = 1.0_8, b = 5.0_8, tol = 1e-7_8)
    print'(a35,f10.6)','the integral of the function is:',area

contains
    recursive function integrate(f, a, b, tol)result(area)
        interface
            real(8) function f(x)
                real(8),intent(in)::x
            end function f
        end interface
```

Αναδρομικές Διαδικασίες

δ) αναδρομική ολοκλήρωση

```
      real(8),intent(in)::a, b, tol
      real(8):: area, h, mid, one_trap, two_traps, &
                left_area, right_area
      h = b - a; mid = (a + b) / 2
      one_trap  = h * (f(a) + f(b)) / 2
      two_traps = h * ((f(a) + f(mid)) + (f(mid) + f(b))) / 4
      if (abs(one_trap - two_traps) < 3 * tol) then
         area = two_traps
      else
         left_area  = integrate(f, a, mid, tol / 2)
         right_area = integrate(f, mid, b, tol / 2)
         area       = left_area + right_area
      end if
   end function integrate
end program integrator
   real(8) function f(x)
      real(8),intent(in)::x
      f = x**2 + 3 * x + 1
   end function f
```

Χρονομετρώντας


```
program matrix_timer
    implicit none
    integer, parameter                :: n = 1000
    real, dimension(n,n)              :: a, b, c
    character(len=8)                  :: cdate, ctime
    real                              :: start_time, stop_time
    integer                           :: i, j, k
    character(len=*), parameter :: form = "(t2, a, f0.3, a)"

! Αρχή:
    call execute_command_line('chcp 1253')
    call date_and_time(date = cdate, time = ctime)

    print *, "Ημερομηνία: " // &
    &cdate(7:) // "-" // cdate(5:6) // "-" // cdate(:4),&
    &", Ώρα: " // &
    &ctime(:2) // ":" // ctime(3:4) // ":" // ctime(5:)
```

Χρονομετρώντας


```
call random_seed()
call random_number(a)
call random_number(b)

call cpu_time(start_time)
    c = 0
    do k = 1, n
        do j = 1, n
            do i = 1, n
                c(i, j) = c(i, j) + a(i, k) * b(k, j)
    end do; end do; end do
call cpu_time(stop_time)

print *
print form, "Time of 1st DO loop version is: ", &
            &stop_time - start_time, " seconds."
```

Χρονομετρώντας


```
call cpu_time(start_time)
    c = 0
    do i=1,size(c,1)
        do j=1,size(c,2)
            c(i,j)=sum(a(i,:)*b(:,j))
    enddo; enddo

call cpu_time(stop_time)

print *
print form, "Time of 2nd DO loop version is: ", &
            &stop_time - start_time, " seconds."
```

Χρονομετρώντας


```
call cpu_time(start_time)
    c = 0
    forall (i = 1:size(c,1), j = 1:size(c,2))
        c(i,j) = sum(a(i,:) * b(:,j))
    end forall
call cpu_time(stop_time)
print *
print form, "Time of 3rd DO loop version is: ", &
            &stop_time - start_time, " seconds."

call cpu_time(start_time)
    c = matmul(a, b)
call cpu_time(stop_time)

print *
print form, "     Time of matmul version is: ", &
            &stop_time - start_time, " seconds."

end program matrix_timer
```

Χρονομετρώντας

DEBUG

```
Ημερομηνία: 10-12-2013, Ώρα: 19:10:26.8

Time of 1st DO loop version is: 3.000 seconds.

Time of 2nd DO loop version is: 6.406 seconds.

Time of 3rd DO loop version is: 6.469 seconds.

     Time of matmul version is:  .609 seconds.
```

RELEASE

```
Ημερομηνία: 10-12-2013, Ώρα: 19:10:26.8

Time of 1st DO loop version is:  .234 seconds.

Time of 2nd DO loop version is: 6.578 seconds.

Time of 3rd DO loop version is:  .812 seconds.

     Time of matmul version is:  .641 seconds.
```

Σημείωμα Αναφοράς

Χρηματοδότηση

- Το παρόν εκπαιδευτικό υλικό έχει αναπτυχθεί στο πλαίσιο του εκπαιδευτικού έργου του διδάσκοντα.
- Το έργο «**Ανοικτά Ακαδημαϊκά Μαθήματα στο Πανεπιστήμιο Αθηνών**» έχει χρηματοδοτήσει μόνο την αναδιαμόρφωση του εκπαιδευτικού υλικού.
- Το έργο υλοποιείται στο πλαίσιο του Επιχειρησιακού Προγράμματος «Εκπαίδευση και Δια Βίου Μάθηση» και συγχρηματοδοτείται από την Ευρωπαϊκή Ένωση (Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο) και από εθνικούς πόρους.

Σημείωμα Αδειοδότησης