

計算物理学II (第10回)

今回の内容

- C言語
 - 多次元配列の割付
 - 構造体
- Fortran
 - Namelist
 - ポインタ
 - 派生型(構造体)
 - その他の話題

多重間接参照(ダブルポインタ) (C)

ポインタ変数もメモリ上に格納されており、アドレスがある
ポインタ変数を指すポインタを用いることができる(多重間接参照)

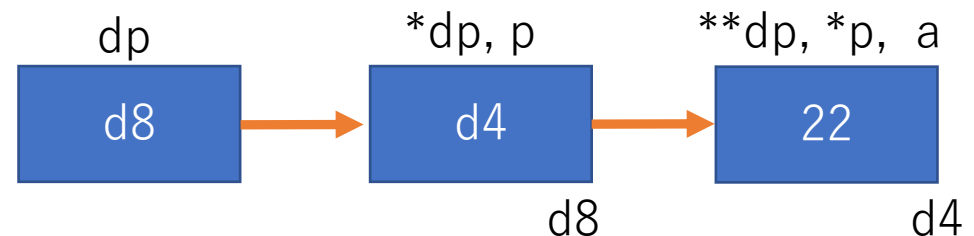
```
#include<stdio.h>

int main(){
    int **dp; // ポインタのポインタ変数
    int *p;
    int a=22;

    printf("a = %d, &a = %p\n", a,&a); //変数aのアドレス
    p=&a;
    printf("*p = %d, p = %p\n", *p, p); // pはaを指す
    printf("&p = %p\n", &p); //ポインタ変数pのアドレス
    dp=&p; //dpはポインタpを指す
    printf("**dp= %d, *dp = %p, dp = %p\n",**dp, *dp, dp);
}
```

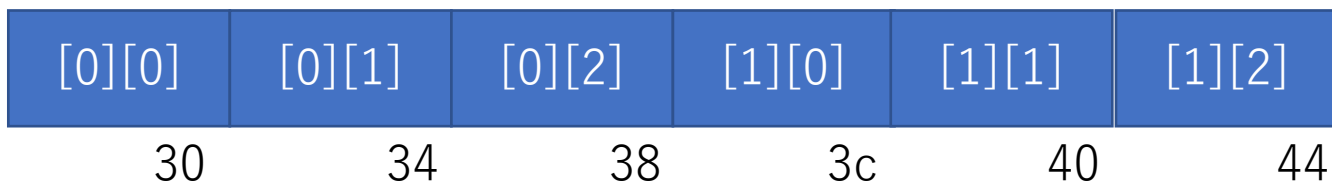
```
a = 22, &a = 0x7ffc117b80d4
*p = 22, p = 0x7ffc117b80d4
&p = 0x7ffc117b80d8
**dp= 22, *dp = 0x7ffc117b80d4, dp = 0x7ffc117b80d8
```

dpはポインタpのアドレス(&p)を格納
*dpでpに格納されている値(aのアドレスを表示)
**dpでpに格納されている値が指している値(a)を表示



二次元配列(C)

array[2][3]は



の順にメモリ上に配置される

```
#include<stdio.h>
#include<stdlib.h>

int main(){
    int array[2][3];
    int i,j;

    for(i=0;i<2;i++){
        for(j=0;j<3;j++){
            printf("&array[%d][%d]= %p\n", i,j,&array[i][j]);
            // array[i][j]要素のアドレスを表示
        }
    }
    printf("\n");
    for(i=0;i<2;i++){
        for(j=0;j<3;j++){
            printf("array[%d]+%d= %p\n", i,j, array[i]+j );
            // array[i]+jと&array[i][j]は同じ
        }
    }
    printf("\n");
    for(i=0;i<2;i++){
        printf("array[%d] = %p\n", i, array[i]);
        // array[i]には行ごとの先頭のアドレスが入っている
    }
    printf("\n");
    printf("array = %p\n", array);
    // arrayには配列の先頭のアドレスが入っている
}
```

```
&array[0][0]= 0x7ffd1822c930
&array[0][1]= 0x7ffd1822c934
&array[0][2]= 0x7ffd1822c938
&array[1][0]= 0x7ffd1822c93c
&array[1][1]= 0x7ffd1822c940
&array[1][2]= 0x7ffd1822c944

array[0]+0= 0x7ffd1822c930
array[0]+1= 0x7ffd1822c934
array[0]+2= 0x7ffd1822c938
array[1]+0= 0x7ffd1822c93c
array[1]+1= 0x7ffd1822c940
array[1]+2= 0x7ffd1822c944

array[0] = 0x7ffd1822c930
array[1] = 0x7ffd1822c93c

array = 0x7ffd1822c930
```

配列要素の前に&をつけると
要素のアドレス

[i] はアドレスをiすすめる演算

array[0]は二次元配列の
先頭アドレス
array[1]は [1][0]要素のアドレス

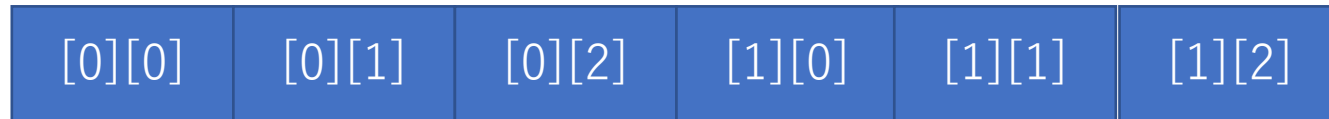
配列名arrayは先頭のアドレス

二次元配列の動的割付(C)

Cの2次元配列はメモリ上に1次元に配置される

→2次元配列を使わず1次元配列としてプログラム上で宣言して扱うのが一番簡単

array[2][3]



別の配列array1D[6]とみなす



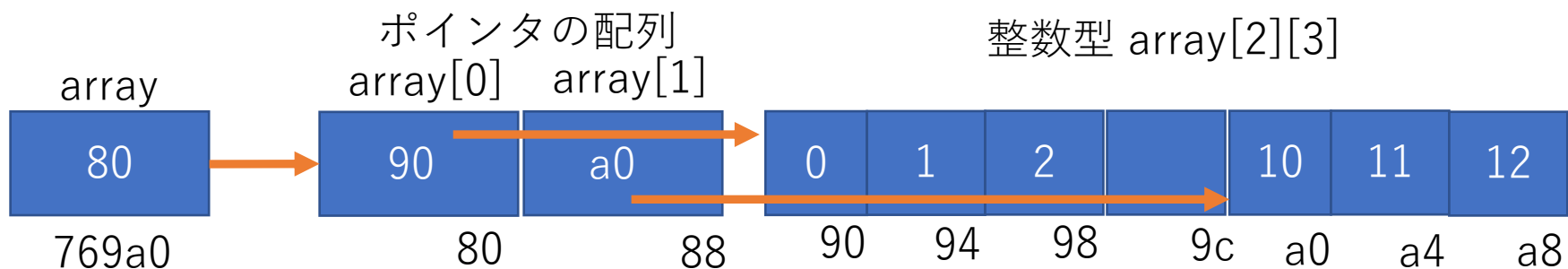
配列array[n][m]の要素array[i][j]は1次元配列ではarray1D[m*i+j]

二次元配列の動的割付(C)

```
#include<stdio.h>
#include<stdlib.h>
int main(){
    int n, m, i, j;
    int **array; //ポインタ変数へのポインタ
    //配列の次元を標準入力より読み込む
    scanf("%d %d", &n, &m);
    //ポインタの配列を割付
    array = (int **)malloc(n*sizeof(int*));
    //ポインタの配列要素のアドレスそれぞれに整数型を割り当て
    for(i=0; i<n; i++){
        array[i] = (int *)malloc(m*sizeof(int));
        // array[i]の値(アドレス)
        printf("array[%d] = %p\n", i, array[i]);
        // array[i]のアドレス
        printf("&array[%d] = %p\n", i, &array[i]);
    }
    // array自身のアドレス
    printf("&array = %p \n", &array);
    // arrayに格納されているアドレス
    printf("array = %p \n", array);
    // arrayが指すアドレスが格納しているアドレス
    printf("*array = %p \n", *array);
    for(i=0; i<n; i++){ // 値の代入、アドレスの表示など
        for(j=0; j<m; j++){
            array[i][j] = i*10+j;
            printf("array[%d][%d]=%d, &array[%d][%d]=%p\n", i, j, array[i][j], i, j, &array[i][j]);
        }
    }
    for(i=0; i<n; i++){
        free(array[i]); // 領域の解放は割付と逆順に行う
    }
    free(array);
}
```

```
2 3
array[0] = 0x7fe9bb504090
&array[0] = 0x7fe9bb504080
array[1] = 0x7fe9bb5040a0
&array[1] = 0x7fe9bb504088
&array = 0x7ffeece769a0
array = 0x7fe9bb504080
*array = 0x7fe9bb504090
array[0][0]=0, &array[0][0]=0x7fe9bb504090
array[0][1]=1, &array[0][1]=0x7fe9bb504094
array[0][2]=2, &array[0][2]=0x7fe9bb504098
array[1][0]=10, &array[1][0]=0x7fe9bb5040a0
array[1][1]=11, &array[1][1]=0x7fe9bb5040a4
array[1][2]=12, &array[1][2]=0x7fe9bb5040a8
```

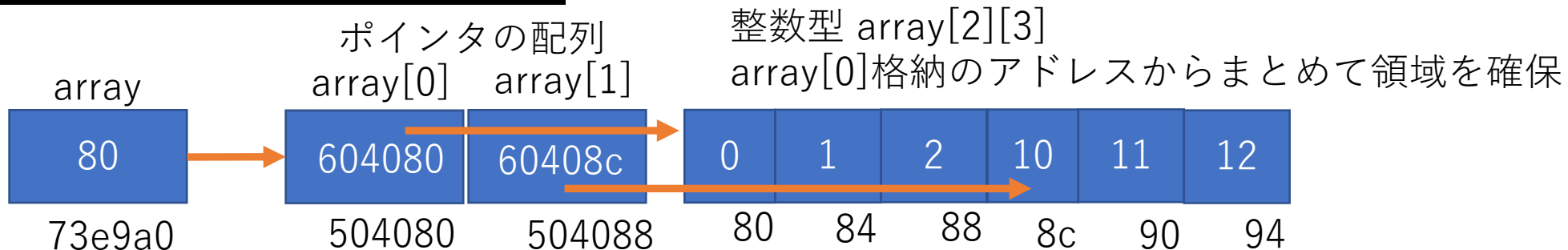
array[0][2]とarray[1][0]の間は連続にならないことがある



二次元配列の動的割付(C)

```
#include<stdio.h>
#include<stdlib.h>
int main(){
    int n, m,i,j;
    int **array; //ポインタ変数へのポインタ
    //配列の次元を標準入力より読み込む
    scanf("%d %d", &n, &m);
    // ポインタの配列を割付
    array = (int **)malloc(n*sizeof(int*));
    // すべてのメモリを割り当て
    array[0]=(int *)malloc(n*m*sizeof(int));
    printf("&array[0] = %p\n", &array[0]);
    // ポインタの配列要素にアドレスを代入
    for(i=1;i<n;i++){
        array[i] = array[0] + i*m;
        printf("array[%d] = %p\n", i, array[i]);
        // array[i]のアドレス
        printf("&array[%d] = %p\n", i, &array[i]);
    }
    // array自身のアドレス
    printf("&array = %p \n", &array);
    // arrayに格納されているアドレス
    printf("array = %p \n", array);
    // arrayが指すアドレスが格納しているアドレス
    printf("*array = %p \n", *array);
    for(i=0;i<n;i++){ // 値の代入、アドレスの表示など
        for(j=0;j<m;j++){
            array[i][j] = i*10+j;
            printf("array[%d][%d]=%d, &array[%d][%d]=%p\n", i,j,array[i][j],i,j,&array[i][j]);
        }
    }
    free(array[0]);
    free(array);
}
```

```
2 3
&array[0] = 0x7ff465504080
array[1] = 0x7ff46560408c
&array[1] = 0x7ff465504088
&array = 0x7ffeeb73e9a0
array = 0x7ff465504080
*array = 0x7ff465604080
array[0][0]=0, &array[0][0]=0x7ff465604080
array[0][1]=1, &array[0][1]=0x7ff465604084
array[0][2]=2, &array[0][2]=0x7ff465604088
array[1][0]=10, &array[1][0]=0x7ff46560408c
array[1][1]=11, &array[1][1]=0x7ff465604090
array[1][2]=12, &array[1][2]=0x7ff465604094
```



構造体(C)

- 構造体とは：複数の種類の変数をまとめて一つにしたもの

```
#include<stdio.h>
#include<stdlib.h>
int main(){
    struct xline{
        int n; // 分割点
        double xmin, xmax, length;
        double *x;
    };

    struct xline x1, x2;
    int i;

    x1.xmin = 0.0; x1.xmax = 1.0;
    x1.length = (x1.xmax-x1.xmin);
    x1.n = 5;
    x1.x = (double *)malloc(x1.n*sizeof(double));
    x1.x[0] = x1.xmin;
    printf("x1.x[0]=%f \n", x1.x[0]);
    for(i=1; i<x1.n-1; i++){
        x1.x[i] = x1.xmin+(x1.xmax-x1.xmin)/(x1.n-1)*i;
        printf("x1.x[%d]=%f \n", i, x1.x[i]);
    }
    x1.x[x1.n-1] = x1.xmax;
    printf("x1.x[%d]=%f \n", x1.n-1, x1.x[x1.n-1]);
    x2=x1;
    printf("x2.x[%d]=%f \n", 2, x2.x[2]);
    free(x1.x);
}
```

一つの構造体xlineの中に
整数、倍精度実数、倍精度実数へのポインタなどまとめられる

xline型の構造体としてx1とx2を宣言 (struct 構造体名 変数名;)

構造体のメンバには.でアクセスできる

構造体の中のポインタに1次元配列を割当

minからxmaxまでの間をn-1分割した座標点の値を代入

実行結果

```
x1.x[0]=0.000000
x1.x[1]=0.250000
x1.x[2]=0.500000
x1.x[3]=0.750000
x1.x[4]=1.000000
x2.x[2]=0.500000
```

同じ型の構造体はコピー(代入)できる

x2.xはポインタでx1.xと同じアドレスなのでfreeはx1.xだけでよい

構造体(C)

```
#include<stdio.h>
#include<stdlib.h>
int main(){
    typedef struct xline_{
        int n; // 分割点
        double xmin, xmax, length;
        double *x;
    } xline;

    xline x1;
    int i;

    x1.xmin = 0.0; x1.xmax = 1.0;
    x1.length = (x1.xmax-x1.xmin);
    x1.n = 5;
    x1.x = (double *)malloc(x1.n*sizeof(double));
    x1.x[0] = x1.xmin;
    printf("x1.x[0]=%f \n", x1.x[0]);
    for(i=1; i<x1.n-1; i++){
        x1.x[i] = x1.xmin+(x1.xmax-x1.xmin)/(x1.n-1)*i;
        printf("x1.x[%d]=%f \n", i, x1.x[i]);
    }
    x1.x[x1.n-1] = x1.xmax;
    printf("x1.x[%d]=%f \n", x1.n-1,x1.x[x1.n-1]);
    free(x1.x);
}
```

typedef struct 構造体名 {構造体のメンバの宣言} 別名;

とすると

別名 構造体変数名;

だけで構造体変数の宣言ができる

構造体のアドレス(C)

```
#include<stdio.h>
#include<stdlib.h>
int main(){
    typedef struct xline_{
        int n; // 分割点
        double xmin, xmax, length;
        double *x;
    } xline;

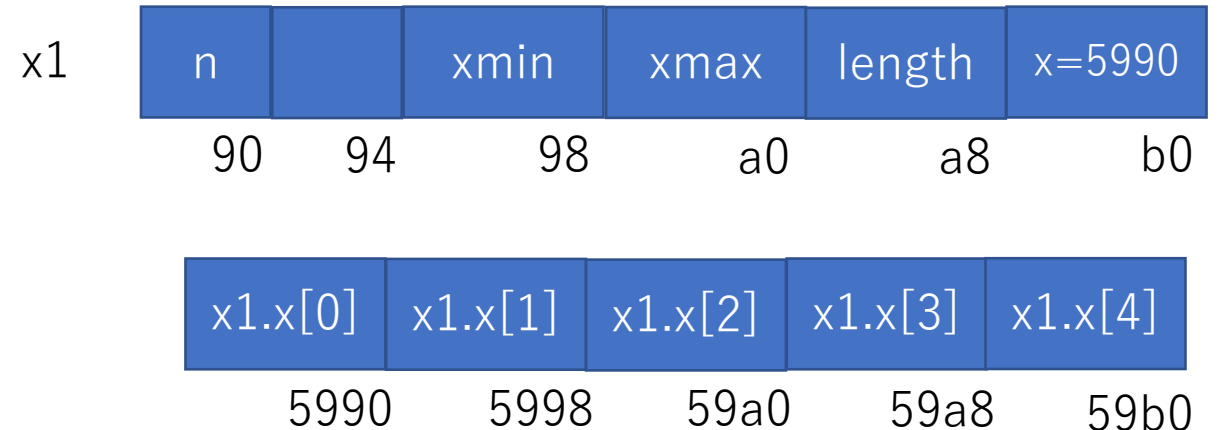
    xline x1;
    int i;

    printf("&x1      = %p\n", &x1);
    x1.n = 5;
    printf("&x1.n      = %p\n", &x1.n);
    printf("&x1.xmin     = %p\n", &x1.xmin);
    printf("&x1.xmax     = %p\n", &x1.xmax);
    printf("&x1.length   = %p\n", &x1.length);
    x1.x = (double *)malloc(x1.n*sizeof(double));
    printf("&x1.x      = %p \n", &x1.x);
    printf("x1.x      = %p \n", x1.x);
    printf("&x1.x[0]    = %p \n", &x1.x[0]);
    for(i=1; i<x1.n-1; i++){
        printf("&x1.x[%d]  = %p \n", i, &x1.x[i]);
    }
    printf("x1.&x[%d]  = %p \n", x1.n-1,&x1.x[x1.n-1]);
    free(x1.x);
}
```

実行結果

```
&x1      = 0x7ffedfe3c990
&x1.n    = 0x7ffedfe3c990
&x1.xmin = 0x7ffedfe3c998
&x1.xmax = 0x7ffedfe3c9a0
&x1.length = 0x7ffedfe3c9a8
&x1.x    = 0x7ffedfe3c9b0
x1.x     = 0x7fb716405990
&x1.x[0] = 0x7fb716405990
&x1.x[1] = 0x7fb716405998
&x1.x[2] = 0x7fb7164059a0
&x1.x[3] = 0x7fb7164059a8
x1.&x[4] = 0x7fb7164059b0
```

構造体変数のアドレス=構造体の先頭の変数のアドレス



構造体へのポインタ(C)

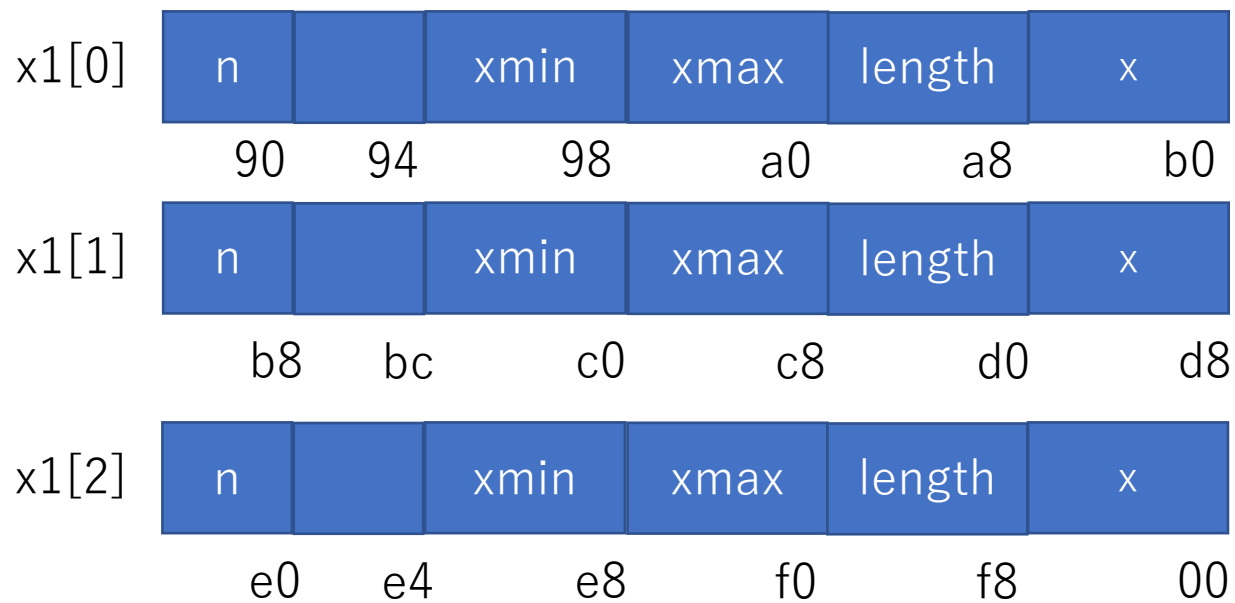
```
#include<stdio.h>
#include<stdlib.h>
int main(){
    typedef struct xline_{
        int n; // 分割点
        double xmin, xmax, length;
        double *x;
    } xline;

    xline *x1; xline型へのポインタ変数
    int i;
    // 5つのxline型の領域を確保
    x1 = malloc(5*sizeof(xline));
    for(i=0;i<5;i++){
        printf("&x1[%d] = %p\n", i,&x1[i]);
    }
    x1[0].n=5; x1[1].n=10;

    free(x1);
}
```

実行結果

```
&x1[0] = 0x7fcfc1c05990
&x1[1] = 0x7fcfc1c059b8
&x1[2] = 0x7fcfc1c059e0
&x1[3] = 0x7fcfc1c05a08
&x1[4] = 0x7fcfc1c05a30
```



構造体のポインタ(C)

```
#include<stdio.h>
#include<stdlib.h>
int main(){
    typedef struct xline_{
        int n; // 分割点
        double xmin, xmax, length;
        double *x;
    } xline;

    xline *x1, x2;
    int i;

    x1 = &x2;
    x1->n=5;

    printf("x2.n = %d\n", x2.n);
    printf("x1->n = %d\n", x1->n);
}
```

x1は構造体へのポインタ、x2は構造体

x1にx2のアドレスを代入

x1が指している構造体のメンバの値を更新(x2.nに5が代入される)

構造体のポインタが他の構造体を指している場合
メンバには -> (アロー演算子) でアクセスする

実行結果

```
x2.n = 5
x1->n = 5
```

Namelist(Fortran)

ファイルからの初期パラメータの読み込み

```
program main
  implicit none

  integer :: a, b
  real*8 :: c

  open(10,file="input.txt", action="read")
  read(10,*) a, b, c

  close(10)

end program main
```

input.txtにはreadと同じ順番で数値を書いておく

```
10 10 2.0
```

入力パラメータの数が増えると分かりづらい

```
program main
  implicit none
  integer :: a, b
  real*8 :: c
  namelist /input/a,b,c
  open(10,file="input.txt", action="read")
  read(10,nml=input)
  close(10)
  print *, "a = ", a, "b = ", b, "c = ", c
end program main
```

a,b,cをnamelist "input"としてまとめる

input.txtにはnamelist形式で記述する。記述の順番は任意

```
&input
c = 2.0,
a = 10,
b = 10,
/
```

複数のnamelistを定義することもできる。

一つのファイルに複数のnamelistを書いておいてもよい(namelistの数だけreadする)

ポインタ (Fortran)

ポインタは変数を指すことができる

```
program main
implicit none

integer, pointer :: ptr      ! 整数型へのポインタ
real*8, pointer :: ptr2(:) ! 倍精度実数型の1次元配列へのポインタ

integer, target :: j=2     ! ポインタの指示先にはtarget属性をつけて宣言する
real*8, target :: a(5)

integer :: i
do i = 1, 5
  a(i) = i/2.0d0
end do
ptr=>j ! ptrは整数型jを指す
print *, "ptr = ", ptr
ptr = ptr + 1 !ポインタの指す変数の値も変更できる
print *, "ptr = ", ptr
print *, "j   = ", j
ptr2=>a ! ptr2は配列aを指す
print *, "ptr2(3) = ", ptr2(3)

end program main
```

ポインタはpointer属性をつけて宣言
ポインタの指示先はtarget属性をつけて宣言
配列へのポインタはサイズを指定しない

ポインタの指示先を設定するには
ポインタ代入 => を使う

実行結果

```
ptr =          2
ptr =          3
j   =          3
ptr2(3) =      1.5000000000000000
```

ポインタ (Fortran)

```
program main
  implicit none

  integer, pointer :: ptr      ! 整数型へのポインタ
  real*8, pointer :: ptr2(:) ! 倍精度実数型の1次元配列へのポインタ

  integer, target :: j=2 ! ポインタの指示先にはtarget属性をつけて宣言する
  real*8, target :: a(5)

  ptr=>null() ! ポインタを初期化
  nullify(ptr,ptr2) ! nullifyでまとめて初期化してもよい
  print *, "ptr = ", ptr !初期化されているとゼロを返す
  ! 初期化されて指示先が設定されていないポインタは.False.を返す
  print *, "associated(ptr) = ", associated(ptr)

  ptr=>j ! ptrに指示先を設定
  ! 指示先が設定されると.True.を返す
  print *, "associated(ptr) = ", associated(ptr)
  print *, "ptr = ", ptr

end program main
```

ポインタの初期化には
null()を指示先に設定するか、
nullify関数を用いる

associated関数でポインタの
指示先が設定されているかどうかを
調べることができる

実行結果

```
ptr = 0
associated(ptr) = F
associated(ptr) = T
ptr = 2
```

ポインタ (Fortran)

```
program main
  implicit none

  integer, pointer :: ptr      ! 整数型へのポインタ
  real*8, pointer :: ptr2(:) ! 倍精度実数型の1次元配列へのポインタ
  integer :: i
  allocate(ptr, ptr2(5)) ! 指示先にメモリ領域を割り当てることができる

  ptr = 2
  print *, "ptr = ", ptr

  do i = 1, 5
    ptr2(i) = i/2.0d0
  end do
  print *, "ptr2(3) = ", ptr2(3)

  deallocate(ptr, ptr2) ! 割り当てた領域を解放
end program main
```

ポインタはallocateで指示先に領域を割り当てることができる

割り当てたあとは通常の変数として使用できる

使い終わったらdeallocateで割り当てた領域を解放する

実行結果

```
ptr =          2
ptr2(3) =    1.5000000000000000
```


派生型(構造体) (Fortran)

- 構造体とは：複数の種類の変数をまとめて一つにしたもの

```
program main
  implicit none

  type xline
    integer :: n
    real*8 :: xmin, xmax, length
    real*8, allocatable :: x(:)
  end type xline

  type(xline) :: x1, x2 ! xline型の変数の宣言
  integer :: i
  x1%xmin = 0.0d0; x1%xmax = 1.0d0
  x1%length = x1%xmax - x1%xmin
  x1%n = 5
  allocate(x1%x(5))
  x1%x(1) = x1%xmin
  print *, "x1%x(1) = ", x1%x(1)
  do i = 2, x1%n-1
    x1%x(i) = x1%xmin + x1%length/(x1%n-1)*(i-1)
    print *, "x1%x(",i,")= ", x1%x(i)
  end do
  x1%x(x1%n) = x1%xmax
  print *, "x1%x(",x1%n,")= ", x1%x(x1%n)
  print *, "sizeof(x2%x) = ", sizeof(x2%x)
  x2 = x1 ! 構造体のコピーを他の構造体変数に代入
  print *, "sizeof(x2%x) = ", sizeof(x2%x) !5要素=40バイト
  print *, "x2%x(",x2%n,")= ", x2%x(x2%n)

  deallocate(x1%x)
  deallocate(x2%x)

end program main
```

type 派生型名
派生型のメンバの宣言
end type 派生型名

派生型変数の宣言は type(派生型名) :: 変数名

派生型のメンバには 派生型名%変数名 でアクセスできる

同じ型の他の派生型変数に代入してコピーを作成できる
allocatableな配列もx1と同じサイズにallocateされる

実行結果

```
x1%x(1) = 0.0000000000000000
x1%x( 2 )= 0.2500000000000000
x1%x( 3 )= 0.5000000000000000
x1%x( 4 )= 0.7500000000000000
x1%x( 5 )= 1.0000000000000000
sizeof(x2%x) = 8
sizeof(x2%x) = 40
x2%x( 5 )= 1.0000000000000000
```

変数の初期化(Fortran)

宣言時の変数の初期化は初回しか行われない(save属性)

```
program main
  implicit none
  call func
  call func
  call func
contains
  subroutine func
    implicit none
    integer :: i = 0
    i = i + 1
    print *, "i = ", i
    return
  end subroutine func
end program main
```

実行結果。2回目にサブルーチンが呼ばれたとき内部変数*i*の値は前回の値が保持されている

```
i = 1
i = 2
i = 3
```

```
program main
  implicit none
  call func
  call func
  call func
contains
  subroutine func
    implicit none
    integer :: i
    i = 0
    i = i + 1
    print *, "i = ", i
    return
  end subroutine func
end program main
```

実行結果。サブルーチンが呼ばれるごとに*i*=0, *i*=*i*+1が実行されている

```
i = 1
i = 1
i = 1
```

引数のoptional属性(Fortran)

```
program main
  implicit none
  real*8 :: a=1.0d0, b=2.0d0, c=4.0d0
  print *, add(a,b,c)
  print *, add(a,b)
contains
  function add(x,y,z)
    real*8, intent(in) :: x,y
    real*8, intent(in), optional :: z
    real*8 :: add
    if(present(z)) then !zが引数として渡されている場合
      add = x + y + z
    else ! zが引数にない場合
      add = x + y
    end if
    return
  end function add
end program main
```

optional属性をつけた変数は引数になくてもよい

present関数は引数として渡されていれば.True.
渡されていなければ.False.を返す

実行結果

```
7.0000000000000000
3.0000000000000000
```

a+b+cが実行される
a+ b が実行される

変数のキーワード引数(Fortran)

通常は関数・サブルーチンの引数の順番は定義と合わせる必要があり、optional変数は最後にまとめる。
キーワード引数を使うと呼び出すときに任意の順番で変数を記述できる

```
program main
  implicit none
  real*8 :: a=1.0d0, b=2.0d0, c=4.0d0

  print *, subtract(x=a,y=b) ! 1.0-2.0が実行される
  print *, subtract(y=a,x=b) ! 2.0-1.0が実行される
  print *, subtract(z=c,x=a,y=b) ! 1.0-2.0-4.0が実行される

contains
  function subtract(x,y,z)
    real*8, intent(in) :: x, y
    real*8, intent(in), optional :: z
    real*8 :: subtract
    if(present(z))then
      subtract = x - y - z
    else
      subtract = x - y
    end if
    return
  end function subtract
end program main
```

実行結果

```
-1.0000000000000000
 1.0000000000000000
-5.0000000000000000
```

モジュールへのアクセス制限(Fortran)

```
module var
  implicit none
  private ! デフォルトをprivate(モジュール外から参照不可能)にする
  integer, public :: a, b !モジュール外から参照可能
  integer, private :: c, d !モジュール外から参照不可能
  public :: set_cd ! 関数、サブルーチンなどもprivate/publicの指定ができる
contains
  subroutine set_cd
    implicit none
    a = a + 1; b = b + 1
    c = 4; d = 5
    !モジュール内のサブルーチンからはprivate属性の変数の値を更新できる
    print *, "set_cd: a = ", a, "b = ", b
    print *, "set_cd: c = ", c, "d = ", d
  end subroutine set_cd
end module var
program main
  use var, only: a,e=>b,set_cd
  ! only以下にリストした変数、関数、サブルーチン等だけが参照可能
  ! e=>bでモジュールのbという変数をeという名前を使用する
  implicit none
  integer :: c=0, d=0 !モジュールのc,dとは別の変数
  a=1; e=2 !モジュールの変数の値の更新ができる
  print *, "main: a = ", a, "b = ", e
  call set_cd !モジュール内のset_cdサブルーチン呼び出す
  print *, "main: a = ", a, "b = ", e !set_cdで値が変更されている
  print *, "main: c = ", c, "d = ", d
end program main
```

モジュールの変数

public属性をつけるとモジュール外から参照可能、
private属性のものはモジュール内の関数、
サブルーチン副プログラムからのみ参照可能

use モジュール名, only: ...とすることで
module内の特定の変数、関数などのみを参照可能とできる

実行結果

```
main: a = 1 b = 2
set_cd: a = 2 b = 3
set_cd: c = 4 d = 5
main: a = 2 b = 3
main: c = 0 d = 0
```