

计算物理教学中基于 FORTRAN 的结果可视化方法

王圣军 金 涛

(陕西师范大学物理学与信息技术学院 陕西 西安 710062)

(收稿日期:2016-11-24)

摘 要:介绍在计算物理教学中配合 Fortran 语言进行可视化输出的一种高效的方法. 以利萨如图形的模拟和可视化输出作为例子介绍了这种可视化方法. 这种方法结合了 Fortran 的系统函数功能和 gnuplot 的脚本功能, 可以自动地把数据文件以图形的方式显示出来或者保存为图片文件. 整个可视化过程需要的绘图代码少, 操作简洁, 并且所用软件都是在科学研究中常用的免费软件. 通过这种方法能够低成本高效地实现计算结果的可视化.

关键词:计算物理学 可视化 Fortran Gnuplot

随着计算机在物理学中被广泛地应用, 计算物理已经成为一门重要的课程. 在计算物理中将数据转换为图像进行可视化输出, 可以使结果直观、易于理解, 是使用计算机处理数据的一大优势. 所以计算结果的可视化输出是计算物理教学中的一个重要环

节^[1]. 对于计算物理中常用的编程语言来说, 图形化输出是一件麻烦的事情. 比如 Fortran 语言和 C 语言标准本身没有图形输出功能.

为了可视化输出结果, 有些教材采用了 BASIC 或者 Java 等有图形功能的计算机语言, 在程序中编

态演示, 进一步探讨质点运动轨迹中的规律. 在物理教学中应用 Matlab 来辅助教学, 通过形象的图形将抽象问题直观化, 有助于增加学习的趣味性, 让学生更容易理解和掌握物理规律, 领会其中的奥妙.

参 考 文 献

- 1 张志涌, 杨祖樱. MATLAB 教程. 北京: 北京航空航天大学出版社, 2010
- 2 周小奋. Matlab 在中学物理教学中的应用初探. 物理通报, 2011, 40(10): 68 ~ 71
- 3 魏丽霞, 劳家盛, 黎雪, 等. Matlab 在电磁学最值问题中

的应用. 物理通报, 2016, 35(9): 62 ~ 64

- 4 程稼夫. 中学奥林匹克竞赛物理教程. 合肥: 中国科学技术大学出版社, 2013. 79 ~ 81
- 5 江浩宁, 江博渊. 参数方程——“攻克”相对运动的“利器”. 物理教学, 2016, 38(1): 16 ~ 16
- 6 姜付锦. 月球绕太阳运动轨迹的研究. 2011 年中国教育学会物理教学专业委员会年会暨全国物理教学研讨会. http://www.pep.com.cn/gzwl/jszx/zts/2011hybd/2z/201202/t20120223_1102973.htm
- 7 漆安慎, 杜婵英. 普通物理学教程: 力学(第 3 版). 北京: 高等教育出版社, 2012. 12

Application on MATLAB in Particle Motion Trajectory

Li Jie Liang Dongmei Luo Zhirong

(College of Physics Science and Engineering, Yulin Normal University, Yulin, Guangxi 537000)

Abstract: Particle motion trajectory is a common problem in the physics teaching. This article in accordance with the motion equation of trajectory, by using the drawing function of Matlab, to draw the motion trajectory of particle, so that physics law can be understood and mastered more easily by the students, and then get the secret of it.

Key words: particle; motion trajectory; Matlab

写图形输出的代码. 例如文献[2]中采用的计算机语言是 BASIC. 在分子振动的半经典量子化的例子中, 作者提供的程序包含了可视化输出. 程序代码总长度是 302 行, 而其中与图形输出相关的代码子程序有 172 行. 其中有大量的代码被用来设定图形输出的环境和格式. 这种可视化方式花费的代价比较大. 在教学中解释这些代码需要花费比较多的时间.

在传统的编程语言之外, MatLab 是一个非常强大的工具, 在计算和数据可视化方面的功能都非常丰富并且使用方便输出美观^[3]. 但是传统的编程语言在科学计算中仍被广泛使用. 所以本文关注配合传统编程语言使用的绘图工具和可视化输出方法.

本文介绍了以 Fortran 语言作为教学语言的情况下计算结果可视化输出的方法. 我们选用的 Fortran 语言编译器是 Gfortran. 这是一个性能良好的免费软件, 它既支持 Fortran77 也支持最新的 Fortran 语言标准.

我们选用的绘图软件是 Gnuplot. 这是一种比较常用的免费科学绘图软件, 可以绘制函数和数据的 2 维以及 3 维图. 它常被用于科学出版物的绘图, 能在各种主流操作系统上运行, 包括 Windows, Linux 等. Gnuplot 可以把图形直接输出到屏幕上, 也可以保存为多种格式的图像文件, 包括 EPS, PDF, JPEG 等. 它可以通过命令行以交互的方式使用, 也可以通过脚本以批处理模式使用.

我们通过一个例子来说明使用这些软件进行可视化输出的方法. 这个例子是用 Fortran 语言写程序输出利萨如曲线. 我们以脚本方式使用 Gnuplot 进行绘图. 首先建立一个 Fortran 源程序 prog. f90. 具体内容如下:

```

program main
  implicit none
  real :: x,y,omx,omy,phix,t,h
  open(10,file = 'x - y. txt')
  t = 0;h = 0.01
  omx = 3.0;omy = 4.0;phix = 3.1415926/2
  do while(t < 100)
    x = sin(omx * t + phix)
    y = sin(omy * t)
    write(10, *) x,y
    t = t + h
  
```

```

enddo
close(10)
call system("gnuplot pl. txt")
endprogram

```

然后, 建立一个 Gnuplot 的脚本文件 pl. txt. 把这个文件和 Fortran 源程序文件 prog. f90 放在同一个文件夹里面. 这个脚本文件是一个纯文本文件. 文件的内容只有两行. 具体内容如下:

```

plot 'x - y. txt' with lines
pause - 1

```

在 Windows 的命令窗口中, 使用 Gfortran 编译源程序的命令为:

```
gfortran prog. f90
```

编译以后得到的可执行程序是 a. exe. 这个程序首先完成计算过程, 把数据保存到文件 "x - y. txt" 中. 然后当程序运行到 call system("gnuplot pl. txt") 的时候, 它调用 Gnuplot 软件. 此时弹出如图 1 所示的图形输出窗口.

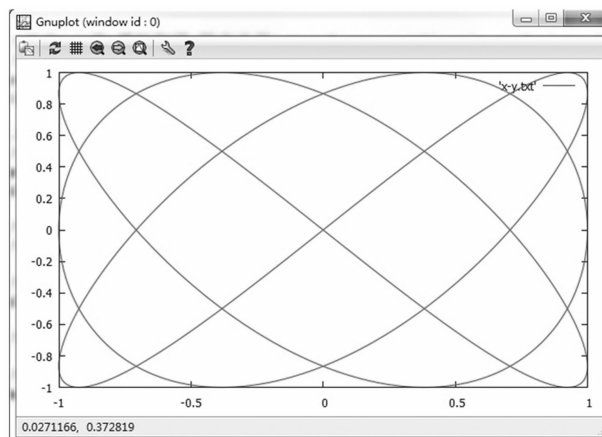


图 1 Gnuplot 的图形输出窗口

在程序 prog. f90 中, 关于绘图的代码只有一行:

```
call system("gnuplot pl. txt")
```

在这里, 我们使用了系统函数 system(), 括号中的字符串被传递给操作系统的命令窗口. 这一句的功能是在命令窗口中调用 Gnuplot 并且让它使用脚本 pl. txt 绘图.

这里的 Gnuplot 脚本文件只有两行. 第一行使用了绘制 2 维图的命令 plot. 在命令中写入了数据文件的名字 x - y. txt. Gnuplot 软件会去硬盘上读取这个文件, 用其中的数据进行绘图. plot 命令的选项

with lines 指定了使用线来绘图. 第二行 pause -1 指示 Gnuplot 在绘图之后不要退出, 而是等待输入. 这时在命令窗口中按 Enter 键就可以关闭图形输出窗口并退出 Gnuplot.

系统函数 system() 在早期的 Fortran 语言标准中不是内部函数, 但是多数编译器都支持这个函数. 在使用 Gfortran 进行编译的时候可以直接使用这个函数. 在使用 Visual Fortran 进行编译的时候要使用一个模块 use DFPORT. 在使用 ifort 编译的情况下, 要使用的模块是 use IFPORT. 在最新的 Fortran 语言标准中已经包含了此功能, 使用它的方法是调用标准的内部子程序:

```
call execute_command_line("gnuplot pl.txt")
```

在支持新标准的编译器中使用这种方法时不需要在源程序中包含特殊的模块.

这里介绍的做法实际等效于先保存数据文件, 然后使用独立的绘图软件导入数据, 进行绘图. 但是 Gnuplot 的脚本功能使我们不需要操作绘图软件. Fortran 语言的系统函数功能, 结合 Gnuplot 的脚本功能, 使得画图成为一个自动化的过程. 这种方式在课堂演示中非常快捷方便. 另外, 在科学计算的编程和模拟中, 快速地对结果进行图形化输出是检验程序是否存在错误或者寻找适当参数的快捷方法. 所以这个方式在科学计算中也具有实际的应用价值.

在 Gnuplot 的脚本中可以通过简单的命令进行更多的设置. 这里介绍几个常用的设置. 首先, 可以设定坐标轴上的标签. 例如使用命令:

```
set xlabel 'x'
set ylabel 'y'
```

把 x 轴和 y 轴的标签设定为 x 和 y . 其次, 还可以使用对数坐标. 设定坐标轴采用对数坐标的命令是:

```
set logscale x
set logscale y
```

也可以设定让 Gnuplot 不把结果输出到屏幕上, 而是把结果保存成一个图片文件. Gnuplot 支持多种图片格式. 例如, 可以把利萨如曲线输出一个 png 格式的图片. 在脚本中首先设定输出终端类型:

```
set terminal png
```

然后设定输出文件名称:

```
set output 'fig.png'
```

输出为图片文件时, 脚本中不写 pause -1. 一个

完整脚本的例子如下:

```
set terminal png
set output 'fig.png'
set xlabel 'x'
set ylabel 'y'
plot 'x-y.txt' with lines
```

使用这个脚本, 得到的图片如图 2 所示.

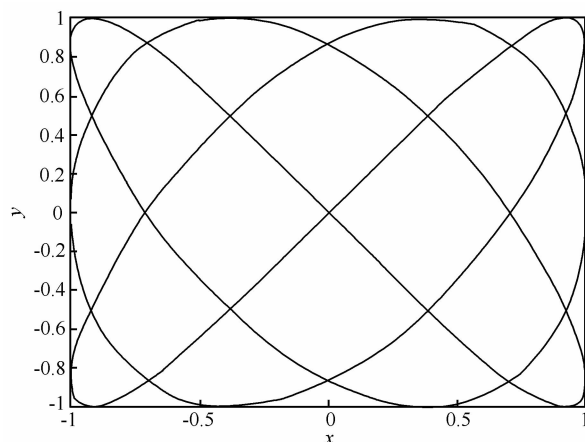


图 2 Gnuplot 输出的图片

Gnuplot 尽管是一个免费软件, 但是目前已经被广泛地应用到了科学研究的绘图任务中. 一些重要的免费版科学数据分析软件是以 Gnuplot 为绘图组件的. 在计算物理中学习 Gnuplot 的简单使用方法, 对于未来的学习和研究都有潜在的帮助. 此外, Gnuplot 的使用方式和 Matlab 等商业版软件比较接近, 对于学习 Matlab 也有帮助.

结论: 本文介绍了一种高效地把数值计算结果可视化输出的方法. 该方法结合了 Fortran 语言的系统函数功能和 Gnuplot 软件的脚本绘图功能, 能够自动化地把数据文件输出到屏幕或者图形文件, 不需要操作绘图软件的中间过程, 有利于实现高效的课堂演示. 这种方式需要的代码少, 使用方便, 容易掌握. 这里介绍的所有软件都是免费软件, 便于学生在个人计算机上使用, 从而有利于学生灵活地开展计算物理课程的上机实践.

参考文献

- 1 彭芳麟, 梁颖. 科学计算可视化与计算物理学. 大学物理, 2013, 32(7): 2 ~ 12
- 2 S. E. Koonin 著. 计算物理学. 秦克诚, 译. 北京: 高等教育出版社, 1992
- 3 彭芳麟. 计算物理基础. 北京: 高等教育出版社, 2010