Table des matières

Table des matières

| 1 | Préambule 3 | | | | | | |
|---|--|----|--|--|--|--|--|
| 2 | Compilation | 3 | | | | | |
| 3 | Transition fortran 77/fortran 90 | 3 | | | | | |
| | 3.1 Instructions obsolètes ou dépréciées | 3 | | | | | |
| | 3.2 Comparaison f77/f90 | 4 | | | | | |
| 4 | Les bases | 5 | | | | | |
| | 4.1 Éléments de syntaxe | 5 | | | | | |
| | 4.2 Déclaration de variables | 5 | | | | | |
| | 4.3 Afficher et lire des informations (entrée et sortie standard) | 6 | | | | | |
| | 4.4 Les expressions arithmétiques | 6 | | | | | |
| | 4.4.1 Cas de la division | 7 | | | | | |
| | | | | | | | |
| | 4.4.2 L'opérateur d'élévation à la puissance | 7 | | | | | |
| | 4.5 Les expressions logiques | 7 | | | | | |
| | 4.6 Les expressions constantes | 7 | | | | | |
| | 4.7 Les instructions de contrôle | 8 | | | | | |
| | 4.7.1 L'instruction if structuré | 8 | | | | | |
| | 4.7.2 L'instruction select case | 9 | | | | | |
| | 4.7.3 La boucle for | 10 | | | | | |
| | 4.7.4 La boucle tant que | 10 | | | | | |
| | 4.7.5 Les instructions exit et cycle | 10 | | | | | |
| 5 | Les tableaux | 11 | | | | | |
| | 5.1 Déclaration des tableaux | 11 | | | | | |
| | 5.2 Les opérations relatives aux tableaux | 11 | | | | | |
| | 5.2.1 Affectation collective | 11 | | | | | |
| | 5.2.2 Les expressions tableaux | 12 | | | | | |
| | 5.2.3 Initialisation des tableaux à une dimension | 13 | | | | | |
| | | | | | | | |
| | 5.2.4 Les sections de tableau | 13 | | | | | |
| | 5.2.5 Les fonctions portant sur des tableaux | 15 | | | | | |
| | 5.3 L'instruction where | 15 | | | | | |
| | 5.4 Les tableaux dynamiques | 15 | | | | | |
| 6 | Les Modules | 16 | | | | | |
| | 6.1 Struture générale | 17 | | | | | |
| | 6.2 Appel des modules depuis un programme principal | 17 | | | | | |
| | 6.3 Accès à tout ou partie d'un module | 18 | | | | | |
| | 6.3.1 Protection interne | 18 | | | | | |
| | 6.3.2 Protection externe | 19 | | | | | |
| | 6.4 Partage de données et variables | 19 | | | | | |
| 7 | Les Procédures (fonction et subroutine) | 19 | | | | | |
| | 7.1 fonctions | 21 | | | | | |
| | 7.2 Subroutine | 21 | | | | | |
| | 7.3 transmission d'une procédure en argument | 22 | | | | | |
| 8 | Vers les objets : les types dérivés | 23 | | | | | |
| 9 | Astuces et petits bouts de code | 24 | | | | | |
| J | 9.1 Lire un fichier de longueur inconnue | 24 | | | | | |
| | gar ibiro um monto do longuour moonnuo a a a a a a a a a a a a a a a a a a a | 44 | | | | | |

Table des matières 2

| 10 | 10 Optimisation 24 | | | | | | | |
|-----------|--------------------------|--|----|--|--|--|--|--|
| | 10.1 Comparaison f77/f90 | | | | | | | |
| | | Profiling | 24 | | | | | |
| | | 10.2.1 flat profile | 25 | | | | | |
| | | 10.2.2 call graph | 26 | | | | | |
| | 10.3 | Equivalent Operations Don't Necessarily Run in Equivalent Time | 26 | | | | | |
| | 10.4 | Use Lookup Tables for Common Calculations | 27 | | | | | |
| 11 | Ava | ncé | 28 | | | | | |
| | 11.1 | Les pointeurs | 28 | | | | | |
| | 11.2 | Attributs des variables lors de leur déclaration | 29 | | | | | |
| | | 11.2.1 Une constante : parameter | 29 | | | | | |
| | | 11.2.2 Entrée ou sortie : intent | 29 | | | | | |
| | 11.3 | Débuger des programmes fortran avec gdb | 30 | | | | | |
| | | 11.3.1 Savoir où on se trouve dans le programme | 31 | | | | | |
| | | 11.3.2 Afficher le contenu d'une variable fortran avec gdb | 31 | | | | | |
| | | 11.3.3 Mettre le programme en pause à un endroit particulier | 31 | | | | | |
| | | 11.3.4 Débuggage avancé | 31 | | | | | |
| | 11.4 | Erreurs de compilation | 32 | | | | | |
| | | 11.4.1 Utilisation de fonctions internes à un module | 32 | | | | | |
| | | 11.4.2 Utilisation de fonctions d'un module | 32 | | | | | |
| | | 11.4.3 Utilisation de subroutine en paramètre d'autres subroutines | 32 | | | | | |
| | | 11.4.4 Function has no implicit type | 32 | | | | | |

1 Préambule

Ceci est un tutoriel fortran 90, il a pour but de donner des astuces de programmations, des bonnes pratiques, présenter ce qui se faisait en fortran 77 et qu'il ne faut plus faire.

Dans la suite on considèrera le format libre, c'est à dire que les lignes peuvent avoir jusqu'à 132 caractères.

2 Compilation

Le compilateur traduit les instructions qui ont été tapées par le programmeur et produit, si aucune erreur n'a été faite, en langage machine. La traduction est placée dans un fichier objet dont le nom est identique à celui du fichier source, mais dont l'extension est cette fois .o sous UNIX. Ceci est schématisé sur [Figure 1]

 \triangle

🔼 Dans certains cas, l'éditeur de liens est automatiquement appelé et rend le programme exécutable.

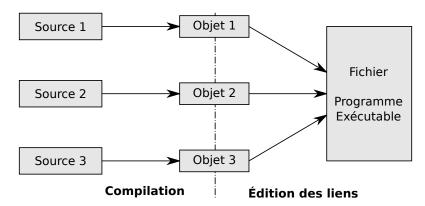


FIGURE 1 – La compilation de tous les fichiers source doit se faire avant l'édition des liens pour créer le fichier exécutable.

L'application complète comportera tous les modules liés. Tout d'abord, il conviendra de compiler séparément sans édition des liens chaque module. À l'issue de cette opération, on obtiendra des modules objets, c'est à dire en langage machine, mais sans adresse d'implantation en mémoire. On les reliera tout en fixant les adresses à l'aide de l'éditeur de liens. Le fichier obtenu sera le programme exécutable. Ceci est schématisé sur [FIGURE 2]

La compilation d'un fichier source doit se faire *après* la compilation de tous les modules dont il dépend.

3 Transition fortran 77/fortran 90

3.1 Instructions obsolètes ou dépréciées

Obsolètes Déprécié
IF arithmétique format fixe
GO TO assigné COMMON

RETURN multiple DATA au milieu des inst.

FORMAT assigné

DO sur une même instruc.

Index réel de boucle DO

branchement sur END IF

BLOCK DATA

EQUIVALENCE

GO TO calculé

INCLUDE

PAUSE ENTRY

descripteur H DOUBLE PRECISION Instructions Fonction

SEQUENCE DO WHILE



FIGURE 2 – Dans le cas présent, on doit compiler le module point, puis compiler le module planète, puis compiler le module système, et enfin compiler le programme qui fait appel au module système. La compilation d'un fichier source doit se faire *après* la compilation de tous les modules dont il dépend.

12.905039000000002

4.985241999999995

3.2 Comparaison f77/f90

En fortran 77, voici les temps d'exécution :

```
arguin.cossou> gfortran -o timings timings.f
arguin.cossou> ./timings
 \nInteger powers tests:
 A**4 Duration=
                         1.3177989999999999
 A**N (N=4) Duration=
                         2.4546269999999994
 A*A*A*A Duration=
                         1.2278140000000004
 \nLook-up table tests:
 Lookup table created, duration=
                                       5.0052380000000003
 Repeated pi/4 & sine, duration=
                                       6.304040999999998
 Repeated sine, duration=
                              12.620081000000003
 All lookups, duration=
                              1.2658079999999998
 \nLarge array tests:
 X outer, Y inner, duration=
                                   14.05986199999995
 Y outer, X inner, duration=
                                   5.0562309999999968
  En fortran 90, en adaptant simplement le code :
arguin.cossou> gfortran -o timings timings.f90
arguin.cossou> ./timings
 \nInteger powers tests:
 A**4 Duration=
                         1.3827890000000000
 A**N (N=4) Duration=
                         2.9805470000000005
                              2.9005589999999994
 A**pN (pointer) Duration=
                         1.2208150000000009
 A*A*A*A Duration=
 \nLook-up table tests:
                                      9.9900000000194177E-004
 Lookup table created, duration=
 Repeated pi/4 & sine, duration=
                                       1.069837999999999
 Repeated sine, duration=
                            12.619081000000000
                              1.1228300000000004
 All lookups, duration=
 \nLarge array tests:
```

Ce que j'ai fait :

X outer, Y inner, duration=
Y outer, X inner, duration=

5 4 Les bases

- enlever les labels dans les boucles do
- rajouter un test de plus où je défini un pointeur vers l'exposant.

4 Les bases

4.1 Éléments de syntaxe

Une ligne ne peut dépasser 132 caractères. Il est possible cependant d'étendre une instruction de plus de 132 caractères sur plusieurs lignes.

Pour continuer une ligne, en cas de ligne trop longue :

Pour continuer une chaîne de caractère par contre, il faut impérativement utiliser deux caractères « & » :

Les commentaires commencent par le symbole «! »:

```
if (n < 100 .or. n > 199) ! Test cas d'erreur
! On lit l'exposant
read *,x
! On lit la base
read *,y
if (y <=0) then ! Test cas d'erreur
   print *, 'La_base_doit_etre_un_nombre_>_0'
else
   z = y**x ! On calcule la puissance
end if
```

Les identificateurs. On appelle identificateurs, les noms des variables, des fonctions, des sous-programmes... Ils obéissent aux règles suivantes :

- ils sont composés de lettres (les 26 lettres de l'alphabet) et de chiffres (de 0 à 9) dont la totalité ne peut dépasser 31 caractères.
- ils commencent obligatoirement par une lettre.
- le symbole « souligné » (_) est un caractère utilisable par les identificateurs (à ne pas confondre avec le signe moins : « - »).
- il n'y a pas de distinction entre les minuscules et les majuscules.

4.2 Déclaration de variables

Le premier bloc d'instructions d'un programme source est composé de la suite de déclaration des types des différentes variables utilisées dans le programme. En fait, Fortran ne rend pas obligatoire les déclarations de type. Si une variable commence par i, j, k, l, m ou n, Fortran 90 considère par défaut que cette variable est entière. Nous déconseillons cependant fortement d'utiliser un typage implicite qui est source de nombreuses erreurs de calcul. Il est donc conseillé de commencer chaque programme par l'instruction **implicit none** qui rend obligatoire la déclaration du type de toutes les variables. Si une ou plusieurs variables ne sont pas déclarées, le compilateur retournera un message d'erreur.

La syntaxe de déclaration des variables est la suivante :

```
type [, attribut] :: liste_variables
```

- type est le nom du type de variable (integer, real, double precision, complex, logical, character)
- attribut est une liste d'attributs optionnels (parameter, dimension, allocatable, intent,...)
- liste_variables est la liste des variables que l'on déclare comme ayant ce type.

```
Exemple:
program declaration
implicit none
integer ::
                     i, j=5
                                       ! type entier
                                      ! type reel simple precision
real ::
                     var, x=2.5
double precision :: plus_precis
                                      ! type reel double precision
logical ::
                     reussite
                                      ! type logique
                    _{
m mot}
character (10) ::
                                       ! type caractere
                     z = (1.2, 20)
complex ::
                                       ! type complexe
                            ! bloc d'instructions executables
[...]
end
```

Le type logical n'admet que deux valeurs .true. ou .false.

Remarque: Il est possible, voire recommande, d'écrire la déclaration des variables sur plusieurs lignes

4.3 Afficher et lire des informations (entrée et sortie standard)

! bloc d'instructions executables

Pour pouvoir écrire des informations à l'écran, c'est-à-dire des commentaires ou le contenu de certaines variables, on utilise l'instruction print. L'affectation d'une variable par l'intermédiaire du clavier se fait en utilisant l'instruction read. Si on ne veut pas imposer le format d'écriture (on laisse faire l'ordinateur), on utilise le format par défaut symbolisé par une * (voir l'exemple du programme ecriture-lecture). Tous les caractères compris entre ' ' (ou entre " ") sont écrits à l'écran.

4.4 Les expressions arithmétiques

. . . .

end

On retrouve les opérateurs arithmétiques usuels : * + *, * - *, * * et * / *. Ces opérandes ne sont définis à priori que lorsque les deux opérandes sont de même type. Le résultat est du même type que les opérandes.

7 4 Les bases

Le compilateur convertit le type de l'un des opérandes, lorsque ces derniers sont différents, pour effectuer l'opération. Les conversions se font suivant la hiérarchie suivante : entier \rightarrow réel \rightarrow double précision. En présence d'un opérande entier et d'un opérande réel, l'entier est transformé en réel.

4.4.1 Cas de la division

Ainsi le quotient de deux entiers et un entier :

$$\frac{5}{2} = 2 \frac{3}{5} = 0 (4.1)$$

En revanche:

$$\frac{5.0}{2.0} = 2.5 \frac{5.0}{2} = \frac{5}{2.0} = 2.5 \tag{4.2}$$

4.4.2 L'opérateur d'élévation à la puissance

L'opérateur d'élévation à la puissance se note "**". L'expression a**b correspond à la notation mathématique a^b .

Le résultat de l'expression a**b est entier si a et b sont entiers, sinon le résultat est réel. Soit b un entier positif,

$$a * *b = a * a * \dots * a (b \text{ fois})$$

$$(4.3)$$

$$a * *(-b) = 1/(a * *b) \tag{4.4}$$

Pour b réel quelconque et a positif,

$$a **b = exp(b * ln(a)) \tag{4.5}$$

4.5 Les expressions logiques

Pour comparer deux expressions, Fortran 90 dispose de 6 opérateurs de comparaison, $\ll >$ », $\ll > =$

- Lorsque les deux expressions à comparer ne sont pas du même type, Fortran convertit le résultat de l'une des expressions dans le type de l'autre suivant les règles décrites précédemment.
- Il faut éviter d'utiliser la comparaison entre expressions non entières : l'expression logique (a == 0.0) avec a réel n'a pas grande signification!

Fortran dispose aussi d'opérateurs logiques permettant de combiner des opérateurs de comparaison qui sont, par ordre de priorité décroissante : « .not. », « .and. », « .or. ». Ils ont une priorité inférieure aux opérateurs précédents.

Par exemple:

$$y = (.not.(a < b)) \equiv y = (a >= b)$$
 (4.6)

La variable y est de type logical. Les parenthèses ne sont pas obligatoires mais facilitent la lecture (notez les points obligatoires de part et d'autre de not, and et or).

4.6 Les expressions constantes

Lorsqu'une constante est utilisée plusieurs fois dans un programme (par exemple π), il est utile (et recommandé) de la définir une seule fois en début de programme pendant la déclaration des variables.

Deux syntaxes sont possibles:

integer :: nb = 5real :: PI = 3.141593

Dans ce cas les variable nb et PI peuvent être modifiées dans le programme.

integer, parameter :: nb = 5real, parameter :: PI = 3.141593 nb et PI sont alors des constantes symboliques dont les valeurs ne peuvent pas être modifiées durant le programme (le compilateur affiche un message d'erreur s'il trouve dans le corps du programme l'instruction nb = 12 par exemple).

Les déclarations de constante symbolique se font avant toute autre déclaration. On peut aussi utiliser une expression constante dans la mesure ou le compilateur peut la calculer.

implicit none

 \mathbf{end}

4.7 Les instructions de contrôle

4.7.1 L'instruction if structuré

La forme la plus générale du if structuré peut être schématisée comme suit :

```
if (exp_log1) then
    bloc1  ! bloc d'instructions
[else if (exp_log2) then
    bloc2  ! bloc d'instructions
]...
[else
    blocn  ! bloc d'instructions
]
end if
```

où exp_log est une expression quelconque de type logical (par exemple : if (a >= 0) then), bloc est un bloc d'instructions, [] signifie que le contenu est facultatif, []... signifie que le contenu peut apparaître plusieurs fois. Dans l'exemple ci-dessus, si l'expression exp_log1 est vraie alors la suite d'instructions bloc1 est exécutée.

Sinon, si l'expression exp_log2 est vraie alors c'est la suite d'instruction bloc2 qui est exécutée (et ainsi de suite). Enfin, si toutes les expressions précédentes $(exp_log1, exp_log2, ...)$ sont fausses et si l'instruction else est présente, la suite d'instructions blocn est exécutée. Si l'instruction else est absente, il est possible qu'aucune instruction ne soit exécutée par un bloc if.

Remarque : Il est recommandé d'indenter (décaler les blocs d'instructions vers la droite d'un certain nombre de caractères blancs) les différents if afin d'assurer cette lisibilité.

Un exemple d'utilisation du if structuré est donné dans l'exemple ci-après.

```
program nom_if
implicit none
integer :: i, j
read*, i, j
if (i < 0) then
   print*, 'i_est_negatif'
else if (i > 0) then
   print*, 'i_est_positif'
else
   if (j < 0) then</pre>
```

9 4 Les bases

```
print*, 'j_est_negatif'
else if (j > 0) then
    print*, 'j_est_positif'
else
    print*, 'i_et_j_sont_nuls'
end if
end if
```

4.7.2 L'instruction select case

La syntaxe générale est la suivante :

```
select case (exp_scal)
[case (selecteur1)
    bloc1   ! bloc d'instructions
[case (selecteur2)
    bloc2   ! bloc d'instructions
]...
end select [nom]
```

où exp_scal est une expression de type integer, logical ou character. selecteur est une valeur, un intervalle de valeurs ou une liste de valeurs de même type que exp_scal .

Cette instruction permet d'exécuter la suite d'instructions bloc1 lorsque la valeur de l'expression exp_scal est égale au selecteur (ou dans l'intervalle donné par le selecteur). Les intervalles sont de la forme suivante : [valeur1]:valeur2 ou valeur1:[valeur2] (par exemple case(1:) signifie que l'on s'intéresse aux valeurs entières comprises entre 1 et 2147483647. Les sélecteurs peuvent faire appel à des expressions constantes. Les valeurs figurant dans les différents sélecteurs d'une même instruction select case ne doivent pas se recouper (cela engendre une erreur à la compilation).

```
program case
```

end

```
implicit none
character(3) :: reponse

print*, 'Voulez-vous_continuer_le_programme_?'
read*, reponse

select case (reponse)
   case ('oui')
     print*, 'OK,_ca_roule...'
   case ('non')
     print*, 'Au_revoir_!'
     stop
   case default
     print*, 'Veuillez_repondre_par_"oui"_ou_par_"non"'
end select
```

Remarque : Pour écrire de bons programmes fortran, il faut :

- Que dans chaque case il y ait une seule valeur du paramètre
- case default est optionnel, mais il est conseillé de toujours en mettre un, comme ça on est sur que quelque chose sera exécuté.
- case default est optionnel mais il vaut mieux le placer à la fin du select case, c'est plus logique et naturel.

4.7.3 La boucle for

La syntaxe générale est la suivante :

```
do var = debut, fin, [pas]
  bloc ! bloc d'instructions
end do
```

La variable de contrôle var est de type integer ainsi que les expressions debut, fin et pas.

Cette instruction permet de répéter le bloc d'instructions bloc en donnant successivement à la variable var les valeurs debut, debut+pas, ..., fin. Si pas est absent, il est par défaut égal à 1. La valeur de pas peut être négative. Il faut alors que debut soit plus grand que fin sinon aucune instruction de bloc ne sera effectuée.

Il n'est pas possible de modifier, dans le bloc d'instructions de la boucle, la valeur de var (le compilateur envoie un message d'erreur) et les modifications éventuelles lors de l'exécution de la boucle de debut, fin et pas ne sont pas prises en compte.

Il est imprudent de chercher à exploiter la valeur de *var* après l'exécution de la boucle do. En effet, celle-ci ne prend pas nécessairement la valeur *fin* comme on pourrait le penser a priori.

4.7.4 La boucle tant que

La syntaxe générale est la suivante :

```
do while (exp_log)
    bloc ! bloc d'instructions
end do
```

Cette instruction permet de répéter le bloc d'instructions bloc tant que l'expression logique exp_log est vraie. Si exp_log est fausse dès le début, le bloc n'est pas exécuté. Sinon, le bloc d'instructions doit modifier exp_log pour que la boucle puisse s'arrêter.

4.7.5 Les instructions exit et cycle

L'instruction exit permet de sortir d'une boucle de façon anticipée. Dans l'exemple suivant, les blocs bloc1 et bloc2 sont exécutés pour var allant de debut à fin tant que l'expression logique exp_log est fausse.

La boucle est interrompue si var = fin ou si exp_log est vraie. Dans le premier cas on passe au bloc3. Dans le second cas, bloc1 est exécuté mais pas bloc2. Ensuite, on continue la boucle do while tant que .not.fini est vrai.

Comme on le voit sur cet exemple, lorsqu'une instruction exit apparaît dans une boucle qui est imbriquée dans une autre boucle, elle met fin à la boucle la plus interne.

Lorsque exp log est vraie, on sort de la boucle do var

Dans l'exemple suivant, l'instruction exit s'applique à la boucle do while grâce à l'utilisation de l'identificateur boucle_principale. Ainsi, si exp_log est vraie, ni bloc2, ni bloc3 ne sont exécutés et on sort de la boucle do while.

11 5 Les tableaux

```
bloc3 ! bloc d'instructions
```

end do

Lorsque exp log est vraie, on sort de la boucle principale do while

L'instruction cycle permet de modifier le déroulement normal d'une boucle. Dans l'exemple suivant, bloc1 et bloc2 sont exécutés pour var allant de debut à fin par pas de 1.

Si l'expression logique exp_log est vraie, on passe à la valeur suivante de var sans exécuter le bloc2. Si exp_log est toujours vraie, seul bloc1 est exécuté.

```
do var = debut, fin
  bloc1    ! bloc d'instructions
  if (exp_log) cycle
  bloc2    ! bloc d'instructions
end do
```

5 Les tableaux

5.1 Déclaration des tableaux

Un tableau est un ensemble ordonné d'éléments de même type. Chaque élément du tableau est repéré par un indice qui précise sa position au sein du tableau. Cet indice est entier. La déclaration des tableaux s'effectue comme suit :

implicit none

```
integer, parameter ::
                          \min = -5
integer, parameter ::
                          \max = 12
                          nb = 10
integer, parameter ::
integer, parameter ::
                          nb1 = 5, nb2 = 3
                                      vect 1
real, dimension (nb) ::
                                                 ! tableau de rang 1
integer , dimension (min:max) ::
                                      \operatorname{vect} 2
                                                 ! tableau de rang 1
real, dimension (50) ::
                                       \mathrm{vect}\_3
                                                 ! tableau de rang 1
integer , dimension (nb1 , nb2) ::
                                                 ! tableau de rang 2
                                                 ! tableau de rang 2
real, dimension (min: max, nb2) :: tab
              ! bloc d'instructions executables
[...]
```

 \mathbf{end}

Remarque: Quand les bornes ne sont pas spécifiées, la borne inférieure est égale à 1. Dans l'un des exemples précédents, seul nb est donné et les indices de $vect_1$ vont de 1 à nb.

On peut aussi écrire: real :: vect_1(nb).

- le nombre de dimensions est le **rang** du tableau (*vect_1* est de rang 1 et *tab* est de rang 2). Le nombre maximum de dimensions est égal à 7.
- le nombre de valeurs possibles pour l'indice d'une dimension donnée est l'étendue du tableau suivant cette dimension (vect_2 est d'étendue 18). L'indice est compris entre la borne inférieure (min dans le cas de vect_2) et la borne supérieure (max dans le cas de vect_2).
- le nombre d'éléments du tableau est la **taille** du tableau; c'est donc le produit des étendues de chaque dimension (*tab* est de taille 54).
- la liste des étendues est le **profil** du tableau (tab est de profil (18, 3)).

5.2 Les opérations relatives aux tableaux

5.2.1 Affectation collective

Soit le tableau mat de rang 3, si on désire affecter la valeur 1 à tous les éléments du tableau mat on effectue, dans les principaux langages de programmation (Pascal, C, Fortran), la suite d'instructions du programme suivant. En Fortran 90, il est possible d'obtenir le même résultat en écrivant l'instruction : mat = 1

```
implicit none
integer :: i, j, k
integer, dimension (5, -3:2, 10) ::
                                                   ! tableau de rang 3
                                         _{
m mat}
do i = 1, 5
  do j = -3, 2
    do k = 1, 10
      mat(i, j, k) = 1
    end do
  end do
end do
! \ est \ equivalent \ a
mat = 1
! ou mieux
mat(:,:,:) = 1
```

```
Remarque : Par soucis de lisibilité, il est souhaitable d'expliciter les opérations sur tableaux en utilisant  \max{(:\,,:\,,:\,)} \ = \ 1  au lieu de  \max{\ = \ 1}
```

afin de pouvoir distinguer les opérations sur tableaux des opérations sur variables simples. Ça permet d'ailleurs de voir directement le nombre de dimensions du tableau.

5.2.2 Les expressions tableaux

On peut affecter une expression à chaque élément d'un tableau. Par exemple, les deux blocs d'instructions du programme suivant sont équivalents.

implicit none

 \mathbf{end}

```
integer :: i
                                   \dim = 12
integer, parameter ::
! tableaux de rang 1
integer, dimension (dim) ::
                                   a,b
integer, dimension (dim) ::
                                   som, prod, racine
! tableaux de type logique
logical, dimension (dim) ::
                                   compare
\mathbf{do} i = 1, dim
  som(i) = a(i) + b(i)
  \operatorname{prod}(i) = a(i) * b(i)
  \operatorname{prod}(i) = 2*\operatorname{prod}(i) + 1
  racine(i) = sqrt(real(a(i)))
  if (som(i) < prod(i)) then
    compare(i) = .true.
  else
    compare(i) = .false.
  endif
end do
```

5 Les tableaux

```
! En Fortran 90, les instructions precedentes ! se simplifient de la manière suivante : 
! equivalent a : som = a + b som(:) = a(:) + b(:) prod(:) = a(:)*b(:) prod(:) = 2*prod(:) + 1
! Attention les elements de a sont entièrs racine(:) = sqrt(real(a(:))) compare(:) = (som(:) < prod(:))
```

5.2.3 Initialisation des tableaux à une dimension

L'initialisation d'un tableau de rang 1 à n éléments est possible en utilisant une liste de n éléments définie par $elem_1, \ldots, elem_n$. Le tableau correspondant s'écrit (/elem_1, \ldots, elem_n/).

Un tableau à plusieurs dimensions ne peut pas être initialisé directement. Il faut définir un tableau à une dimension et utiliser une fonction particulière qui n'est pas présentée dans ce cours : la fonction reshape.

```
program initialisation
```

```
implicit none
```

 \mathbf{end}

```
integer ::
integer, parameter ::
                             n = 5
integer, dimension(n) ::
                             tab1, tab2, t
                                                     ! tableaux de rang 1
integer , dimension(n) ::
                             tab3 = (/1,2,3,4,0/)
real, dimension (0:9) ::
                             angle
tab1(1) = 3; tab1(2) = 5; tab1(3) = -2; tab1(4) = 4; tab1(5) = 202
tab2 = (/3, 5, -2, 4, 202/)
{\it ! les affectations suivantes sont equivalentes}
\mathbf{do} \ i = 0, 90, 10
  angle(i/10) = i*0.5
end do
angle = (/(i*0.5, i=0, 90, 10)/)
                                                   ! boucle implicite
```

5.2.4 Les sections de tableau

 \mathbf{end}

Fortran 90 introduit une notion nouvelle par rapport aux langages tels que C ou Pascal qui est la section de tableau. L'écriture générale d'une section de tableau est la suivante :

```
tab(borne_inf : borne_sup : pas [,...])
```

- -tab est le nom d'un tableau,
- borne_inf est la borne inférieure de la section de tableau (c'est la borne inférieure de tab si elle est omise).
- borne_sup est la borne supérieure de la section de tableau (c'est la borne supérieure de tab si elle est omise),
- pas est le pas d'incrémentation (1 par défaut ; si le pas est négatif, la variation d'indice est rétrograde de borne sup à borne inf.

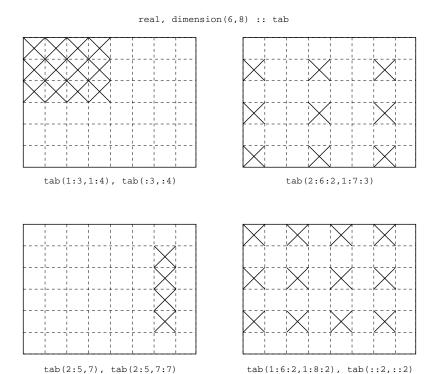


FIGURE 3 - Représentation de différentes sections de tableaux afin de montrer les possibilités de sélections.

Dans le programme suivant,

w(2:4) = v(7:9)

les valeurs v(7), v(8), v(9) du tableau v sont affectées respectivement aux éléments w(2), w(3) et w(4) du tableau w. Ainsi, la notation w(i:j) signifie que l'on s'intéresse aux éléments w(i), w(i+1), ..., w(j) (j > i).

```
Remarque : Si on écrit w(3:1) = 1, aucune affectation ne sera effectuée.
```

Dans le second exemple, on remarque qu'il y a un recoupement, c'est à dire que le même terme apparait à gauche et à droite du signe égal puisqu'on a les deux affectations « simultanées » :

$$v(2) = (v(1) + v(3))/2$$

 $v(3) = (v(2) + v(4))/2$

Que vaut v(2) dans la seconde affectation?!

La règle adoptée par $Fortran\ 90$ est la suivante : la valeur d'une expression de type tableau est entièrement évaluée avant d'être affectée.

```
integer, dimension (n) :: w integer, dimension (p) :: v, v1 v(2:9) = (v(1:8) + v(3:10))/2
```

5 Les tableaux

```
\begin{array}{lll} \textit{!} & \textit{est} & \textit{equivalent} & \textit{a} \\ \textbf{do} & \textit{i} & = 1 \,, & \textit{p} \\ & \textit{v1}\,(\,\textit{i}\,) & = \textit{v}\,(\,\textit{i}\,) \\ \textbf{end} & \textbf{do} \\ \textbf{do} & \textit{i} & = 2 \,, & 9 \\ & \textit{v}\,(\,\textit{i}\,) & = \,(\,\textit{v1}\,(\,\textit{i}\,-1) \,\,+\,\,\textit{v1}\,(\,\textit{i}\,+1))\,/2 \\ \textbf{end} & \textbf{do} \end{array}
```

Dans cet exemple, si on n'utilise pas les sections de tableau, on remarque qu'il est nécessaire d'utiliser un tableau tampon v1 pour effectuer les calculs intermédiaires.

5.2.5 Les fonctions portant sur des tableaux

Il existe en Fortran 90 des fonctions spécifiques aux tableaux. Les plus usuelles sont sum qui fournit la somme des éléments d'un tableau, maxval qui donne la valeur maximale d'un tableau, minval qui donne la valeur minimale et product qui donne le produits des éléments. Les fonctions dot_product et matmul permettent d'obtenir respectivement le produit scalaire et le produit matriciel de deux tableaux.

Exemple : Soit A un tableau à m ligne(s) et n colonne(s). On cherche la valeur maximale de l'ensemble formé par les éléments se trouvant à la ligne j pour les colonnes allant de i à n. Il suffira pour cela d'écrire l'instruction suivante :

```
\max \operatorname{val}(A(j,i:n))
Soit A une matrice de rang 2 à n colonnes. L'instruction \sup(A,\dim=1)
```

permet d'obtenir un tableau de rang 1 et d'étendue n dont chaque élément i est le résultat de la somme des éléments de la colonne i de A.

5.3 L'instruction where

Cette instruction permet de traiter les éléments d'un tableau vérifiant une certaine condition. La syntaxe est la suivante :

```
where (inst_log_tab)
  bloc1
[elsewhere
  bloc2
]
end where
```

 $inst_log_tab$ est une instruction logique portant sur les éléments d'un tableau. Lorsque cette condition est vérifiée, le bloc d'instructions bloc1 est exécuté, sinon le bloc d'instructions bloc2 est exécuté.

Lorsque bloc1 ne contient qu'une seule instruction et que bloc2 est absent, on peut utiliser une forme simplifiée identique au if logique.

Ainsi, dans l'exemple suivant, tous les éléments négatifs du tableau A sont mis à zéro :

```
where (A < 0) A = 0.0
```

5.4 Les tableaux dynamiques

Quand on ne connait pas à l'avance la taille des tableaux que l'on souhaite utiliser, on peut "surdimensionner" le tableaux en question au moment de la declaration mais la méthode la plus élégante consiste à utiliser les tableaux dynamiques (tableaux à allocation différée). L'allocation sera effectuée lorsque les étendues du tableau seront connues (après lecture dans un fichier, au clavier ou après des calculs).

La déclaration d'un tableau dynamique s'effectue en précisant le rang du tableau et en utilisant l'attribut allocatable (allouable).

```
! declaration d'un tableau dynamique d'entiers de rang 2 real, dimension(:,:), allocatable :: matrice
```

L'allocation d'un emplacement se fait en utilisant l'instruction allocate en précisant chaque étendue :

Remarque : Pour vérifier que l'allocation (ou la désallocation) s'est bien effectuée, on peut utiliser l'option stat.

```
allocate(matrice(n,m), stat = verif)
```

verif est une variable entière. Si verif = 0, l'allocation s'est bien effectuée, sinon une erreur s'est produite.

Lorsqu'un tableau dynamique devient inutile, il est recommandé de libérer la place allouée à ce tableau. Pour cela, on utilise l'instruction deallocate (désallouer).

```
deallocate (matrice) ! liberation
```

Il est possible de transmettre un tableau dynamique en argument d'une procédure sous certaines conditions :

- Le tableau dynamique devra être alloué et libéré dans le programme principal.
- Le programme principal doit contenir l'interface de la procédure. Cette condition n'est pas obligatoire si on utilise un module! (voir par exemple le programme tableau_dynamique).

6 Les Modules

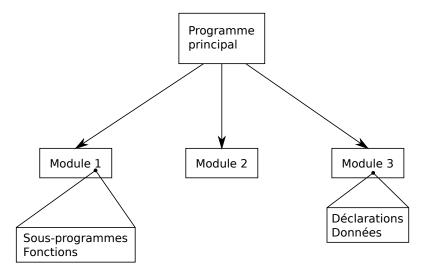


FIGURE 4 – Structure générale d'un programme Fortran 90

[FIGURE 4] présente la structure générale d'un programme Fortran 90. Nous allons voir qu'un programme principal peut aussi faire des appels à un ou plusieurs modules.

Définition 1

Le module se présente comme une unité de programme autonome permettant de mettre des informations en commun avec d'autres unités de programmes.

17 6 Les Modules

Ce programme est généralement écrit dans un fichier différent du fichier contenant le programme principal. Le module est compilé indépendamment des autres unités de programme mais ne peut pas être exécuté seul. Comme le montre [FIGURE 4], les modules peuvent contenir des procédures (sousprogrammes et fonctions), des blocs de déclarations et des données.

Le module permet de fiabiliser les programmes en évitant la duplication des déclarations et des affectations utilisées par plusieurs unités de programme puisqu'il donne l'accès de son contenu à toutes les unités de programme qui en font l'appel.

Ils permettent:

- Une écriture des sources plus simples : en particulier ils évitent d'avoir à écrire des blocs interface qui sont assez lourds quand ils doivent être souvent répétés
- de remplacer avantageusement la notion de COMMON
- D'accéder à toutes les ressources du Fortran 90 avec un maximum d'efficacité et de cohérence : gestion dynamique de la mémoire, pointeurs, généricité, surdéfinition des opérateurs, encapsulation...

Les unités module doivent être compilés avant de pouvoir être utilisées. Si le fichier source est unique, elles doivent être placées en tête.

6.1 Struture générale

Le module peut contenir un ensemble de déclarations et d'affectations et/ou une ou plusieurs procédure(s). Dans ce dernier cas, les procédures doivent être précédées par l'instruction contains. Un module commence par l'instruction module suivi du nom du module et se termine obligatoirement par end module.

module nom module

```
implicit none
[...] ! bloc de declarations

contains ! obligatoire si suivi de procedures
[...] ! suite de procedures
```

end module nom module

6.2 Appel des modules depuis un programme principal

L'utilisation des modules est très simple; depuis le programme principal, l'appel du module se fait par l'instruction use suivi du nom du module. Il faut noter que le nom du module doit être différent de celui du programme principal. L'instruction use doit précéder toute autre déclaration.

Remarque: Un module ne doit pas se référencer lui-même, même de manière indirecte. Par exemple, si le module *module1* contient use module2, ce dernier ne doit pas contenir l'instruction use module1.

6.3 Accès à tout ou partie d'un module

Une unité de programme qui appelle un module (via l'instruction use) à accès à toutes les entités de ce module (variables, procédures). Il est possible cependant de contrôler l'accès à ces entités pour empêcher les conflits entre différentes unités de programme.

Lorsqu'une unité de programme appelle un ou plusieurs modules, il peut y avoir un conflit entre les identificateurs (noms des variables et des procédures) de l'unité de programme et des modules. Si l'on ne souhaite pas modifier les identificateurs des modules (ce qui peut être laborieux si le module est long), il est possible de renommer ces identificateurs lors de l'appel des modules à partir de l'unité de programme.

```
use nom module, nom id local => nom id module
```

- nom module est le nom du module,
- nom_id_local est le nom attribué à l'identificateur dans l'unité de programme qui appelle le module.
- nom id module est le nom de l'identificateur public du module que l'on souhaite renommer.

Exemple:

```
use module constantes, k bol \Rightarrow k
```

va permettre d'utiliser la constante k du module $module_constantes$ sous le nom k_{bol} dans le programme, afin de ne pas rentrer en conflit avec une variable k qui existe aussi dans le programme.

6.3.1 Protection interne

La première méthode pour contrôler l'accès à un module consiste à protéger certaines entités. Pour cela on utilise les instructions private et public. Par défaut, l'option d'accès au module est public. Toutes les instructions du module se trouvant après l'instruction private seront d'accès privé (et donc inaccessible par le programme qui appelle le module). Il est possible aussi d'ajouter l'attribut private lors de la déclaration d'une variable pour protéger son accès.

contains

```
function pression(z)
```

end function pression

```
end module module_atmosphere
```

Et on accède au module de la façon suivante :

```
program acces
```

use module_atmosphere

implicit none

```
real :: p, & ! pression [Pa]
    z     ! altitude [km]

z = 10
p = pression(z)
print*, p, g, h
```

 $\quad \mathbf{end} \quad$

Les variables T, m, g et Po ne sont pas accessibles par le programme acces malgré l'appel du module $module_atmosphere$. Elles ont, en effet, l'attribut private dans $module_atmosphere$. La variable h de la fonction pression n'est pas en conflit avec la variable h de $module_constantes$ grâce à la restriction d'accès via l'instruction only.

6.3.2 Protection externe

La seconde méthode de contrôle d'accès entre le module et l'unité de programme qui l'appelle consiste à restreindre l'accès à certaines entités depuis l'unité de programme. Cette restriction s'effectue en utilisant l'attribut only lors de l'appel du module (voir le module module atmosphere).

```
use nom_module, only : liste_entites
```

où liste entites est la liste des variables et procédures auxquelles on autorise l'accès lors de cet appel.

6.4 Partage de données et variables

Les modules peuvent être utilisés pour déclarer des variables susceptibles d'être communes à de nombreux programmes. Par exemple, un physicien est amené à utiliser, dans l'ensemble de ses programmes, les différentes constantes de la Physique. Plutôt que de déclarer ces constantes dans chaque programme, il suffit d'utiliser un module approprié dans lequel elles seront affectées une fois pour toute.

```
module module_constantes
```

```
implicit none
```

 $\mathbf{end} \ \mathbf{module} \ \mathtt{module} _ \mathtt{constantes}$

7 Les Procédures (fonction et subroutine)

Il existe deux types de procédures : les sous-programmes et les fonctions (respectivement subroutine et function en anglais). Nous étudierons les fonctions plus loin dans le chapitre. Parmi les procédures, on distingue les procédures externes des procédures internes.

Définition 2

Fonction Une fonction, à l'instar de son homologue en informatique, est une application qui, à partir de variable d'entrée retourne *variable* de sortie qui peut être de n'importe quel type. La variable de retour est simplement une variable qui porte le même nom de la fonction et qui est retournée sans qu'on ait besoin de faire quelque chose en particulier.

Définition 3

Subroutine La subroutine, contrairement à la fonction, ne distingue pas, par défaut, les variables d'entrées et de sorties, une même variable peut à la fois être une entrée et une sortie (dans la pratique, avec l'attribut intent() lors de la déclaration des variables on peut faire des choses un peu plus propres).

De plus, on n'est pas limite à une variable de sortie. L'inconvénient est que, à part en regardant la déclaration ou le corps de la subroutine, on ne peut pas distinguer simplement les entrées et sorties qui sont simplement une suite de paramètres de la subroutine.

Les sous-programmes externes (subroutine ou fonction) sont des blocs de code en dehors du programme principal, soit après son instruction end, soit dans un fichier séparé qu'il faudra aussi compiler.

```
program nom_program
```

```
implicit none
[...]
               ! bloc de declaration
               ! bloc d'instructions executables
[...]
call nom(liste arguments)
                                     ! appel du sous-programme
               ! bloc d'instructions executables
[...]
end
subroutine nom(liste arguments)
implicit none
               {\it ! bloc de declaration (arguments et variables locales)}
| . . . |
[ \dots ]
               ! bloc d'instructions executables
```

end subroutine nom

Les sous-programmes internes (subroutine ou fonction) sont des blocs de code qui vont être dans le corps du programme, à la suite de l'instruction contains et avant l'instruction end.

```
program nom program
```

```
implicit none
                 ! bloc de declaration
[...]
                 {\it ! bloc d'instructions executables}
                                  ! \quad appel \quad du \quad sous-programme
call nom(liste_arguments)
                 {\it ! bloc d'instructions executables}
[...]
contains
subroutine nom1(liste arguments)
                ! bloc de declaration
                 ! bloc d'instructions executables
[...]
end subroutine nom1
\mathbf{subroutine} \ \operatorname{nom2} ( \operatorname{liste\_arguments} )
                ! bloc de declaration
. . . .
                 ! bloc d'instructions executables
end subroutine nom2
```

\mathbf{end}

Dans le cas des procédures externes, on est en présence de domaines indépendants qui ne peuvent communiquer que par le biais des arguments.

Dans le cas des procédures internes, la procédure a accès à toutes les variables définies par son hôte. Ces variables sont dites *globales* et n'ont plus besoin d'être transmises en arguments. En revanche, toutes les variables déclarées dans la procédure interne sont locales à la procédure.

Ainsi, la déclaration de deux variables, l'une dans le programme hôte et l'autre dans la procédure interne avec le même nom provoque la création de deux variables différentes (bien qu'ayant le même nom!). Bien que pouvant paraître attrayante, cette méthode d'utilisation des procédures est à utiliser avec circonspection. En effet, l'utilisation dans le programme principal et le sous-programme interne d'un même nom pour 2 variables a priori différentes, risque de provoquer des erreurs de programmation.

Il est important de noter que les procédures internes ne peuvent être utilisées que par l'hôte qui les contiennent.

7.1 fonctions

En Fortran 90, les fonctions peuvent retourner n'importe quel type valide (tableau, type dérivé), mais une seule variable, que l'on attribue via le nom de la fonction elle même. En définissant le type de la fonction, on définit le type de la variable que l'on va retourner.

function nom(liste arguments)

end function nom

Ainsi, la fonction **nom** retourne un réel. Ce dernier est stocké comme donnée de retour via une ligne d'attribution

```
nom = 3e43
```

où nom est le nom de la fonction.

Pour appeler la fonction dans le programme principal, il suffit de faire :

```
program nom_program
```

Remarque : La variable dans laquelle on stocke le résultat de la fonction doit bien évidemment avoir le même type que celui déclaré pour le nom de la fonction (et donc sa variable de retour).

7.2 Subroutine

end

En Fortran 90, une subroutine est un bloc de programme avec des entrées et des sorties. Une subroutine transfert s'appelle de la façon suivante :

```
call transfert (a, b)
```

où transfert est une subroutine qui permet d'échanger les variables a et b via une variable temporaire définie dans la subroutine :

```
subroutine transfert(a,b)
implicit none
real, intent(inout) :: a,b
real :: c

c=a
a=b
b=c
end subroutine transfert
```

Les attributs intent(in), intent(out) ou intent(inout) permettent de spécifier si un argument d'une subroutine est un paramètre d'entrée, une variable de sortie ou les deux. Ce n'est pas obligatoire, mais c'est fortement conseillé de s'en servir. Sans ça, il est beaucoup plus difficile de comprendre le code, et de le sécuriser (pour savoir si on a modifié une variable alors qu'on n'aurait pas dû par exemple).

7.3 transmission d'une procédure en argument

Supposons que nous ayons écrit un sous programme dont l'un des arguments représente une fonction (le sous-programme utilise la fonction passée en argument). On suppose que le sous-programme est inclu dans un module. Lors de l'apparl du sous-programme depuis le programme principale, le compilateur ne pourra pas détecter que l'un des arguments est une fonction s'il n'a pas été déclaré comme tel. Pour résoudre ce problème, on utilise une interface contenant l'en-tête de la fonction ainsi que les déclarations relatives aux arguments.

```
program integration
! Calcul numerique d'integrales a l'aide des methodes
! composites des trapezes et de simpson
use mod integrale
implicit none
real :: res1, res2, Pi
interface
                               ! interface obligatoire
  function f1 (x)
    real, intent(in) :: x
    real :: f1
  end function
  function f2 (x)
    real, intent(in) :: x
    real :: f2
  end function
end interface
Pi = 4.0*atan(1.0)
! Appels de la subroutine sans utiliser les noms cles
! l'ordre des arguments est important
print*, 'J'
call integrale (0.0, 1.0, 100, f1, res1, res2)
print*, 'Resultat_de_la_premiere_integrale_:_
print *, 'Methode_des_trapezes_:_', res1
print *, 'Methode_de_simpson_:_', res2
! Appels de la subroutine en utilisant les noms cles
! l'ordre des arguments n'est pas important
print *, ', '
```

```
\textbf{call} \  \, \texttt{integrale} \  \, (\texttt{fonction} \!=\! \! f2 \;, \; \, \texttt{trapeze} \!=\! \texttt{res1} \;, \; \, \texttt{simpson} \!=\! \texttt{res2} \;, \; \& \; \,
                  deb = -Pi/3.0, fin = Pi/3.0, nb_int = 200)
print*, 'Resultat_de_la_seconde_integrale_:_
print*, 'Methode_des_trapezes_:_', res1
print * , 'Methode_de_simpson_:_', res2
end program integration
function f1 (x)
                                     ! premiere fonction a integrer
  real, intent(in) :: x
  real :: f1
  f1 = x*x+1
end function
function f2 (x)
                                     ! seconde fonction a integrer
  real, intent(in) :: x
  real :: f2
  f2 = \sin(x) **2.
end function
  avec le module
module mod integrale
implicit none
contains
subroutine integrale (deb, fin, nb int, fonction, trapeze, simpson)
  implicit none
  real, intent(in) :: deb, fin
                                                   ! bornes d'integration
  real, intent(out) :: trapeze, simpson
                                                   ! methodes d'integration
  integer , intent(in) :: nb int
                                                   ! nb d'intervalles
  real :: fonction
  real :: pas
                                                   ! pas d'integration
  integer :: i
  pas = (fin - deb)/nb int
! methode des trapezes
  trapeze = pas * (0.5*(fonction(deb)+fonction(fin)) + &
             sum((/(fonction(deb+i*pas), i = 1, nb int-1)/)))
! methode de simpson
  simpson = pas/3.0 * (fonction(deb) + fonction(fin) + &
             2.0*sum((fonction(deb+i*pas), i = 2, nb_int-2, 2))) + &
             4.0*sum((/(fonction(deb+i*pas), i = 1, nb int-1, 2)/))
end subroutine integrale
end module mod integrale
```

8 Vers les objets : les types dérivés

On appelle type dérivé la définition d'un nouveau type de variable, sorte d'objet contenant un nombre et un type de variable arbitraire.

Pour utiliser des variables du type dérivé nom type précédemment défini, on déclare simplement :

```
type (nom type) [, liste attributs] :: nom var
```

Remarque: Pour accéder aux champs de l'objet que nous venons de définir, nous utiliserons le caractère pourcent « % » (équivalent du point pour Python par exemple). En supposant qu'un champ position existe dans un objet planete, on y fait appel via

```
egin{array}{lll} \mathbf{type} & 	ext{(planete)} & :: & 	ext{terre} \ & 	ext{terre} \% \mathbf{position} & = & 0.0 \end{array}
```

Exemple: Supposons qu'on veuille définir un nouveau type *animal* dans lequel seraient recensés la race, l'âge, la couleur et l'état de vaccination.

```
type animal
  character (len=20) :: race
  real :: age
  character (len=15) :: couleur
  logical, dimension(8) :: vaccination
end type animal
```

On peut ensuite manipuler globalement l'objet animal ou accéder à chacun de ses champs grâce à l'opérateur « % ».

9 Astuces et petits bouts de code

9.1 Lire un fichier de longueur inconnue

Pour lire un fichier dont on ne connait pas le nombre de lignes :

```
implicit none
```

```
integer , parameter :: NMAX = 200 ! max number of messages
integer :: error
integer , dimension(NMAX) :: length
character(len=80), dimension(NMAX) :: message

open(14, file='message.in', status=old)
do
    read (14,'(i3,1x,i2,1x,a80)', iostat=error) j, length(i), message(i)
    if (error /= 0) exit
end do
close(14)
```

Remarque : La fonction trim() permet de supprimer les espaces en trop, pratique pour affiche ou écrire du texte proprement.

10 Optimisation

10.1 Comparaison f77/f90

10.2 Profiling

Avant d'essayer de rendre le code plus rapide, il faut en premier lieu trouver quelles parties du code le ralentissent et dans lesquelles il va être rentable de passer le temps d'optimisation.

Profiler le temps d'exécution d'un code fortran peut être fait en ajoutant l'option de compilation -pg:

25 10 Optimisation

gfortran -g -pg -o myprog myprog.f90

Remarque: Certains compilateurs, en particulier les vieux, ne vont pas autoriser les options d'optimisation si l'option -g est présente, et même s'ils optimisent, ça pourrait donner des résultats de profiling flous et difficiles à interpréter.

Il vaut donc mieux éviter les options d'optimisation quand on compile pour profiler.

Ensuite, exécutez normalement votre programme

./myprog

mais il faut quand même faire attention à avoir les droits d'écriture dans le dossier d'exécution afin de pouvoir écrire le fichier de résultat du profiling, appelé **gmon.out**.

Vous pouvez maintenant avoir les information de profiling en utilisant **gprof**:

gprof myprog gmon.out

Remarque : Si vous voulez une analyse ligne par ligne plutôt que fonction par fonction, il vous suffit (tant que vous avez compilé le programme avec l'option -g), d'utiliser l'option -line :

gprof --line myprog gmon.out

L'exécution de **gprof** va produire deux parties d'output, un flat profile et un call graph.

10.2.1 flat profile

Le flat profile ressemble à ça :

Flat profile:

Each sample counts as 0.01 seconds.

| % с | umulative | self | | self | total | |
|-------|-----------|---------|-------|-----------------|-----------------|--|
| time | seconds | seconds | calls | ${\tt ms/call}$ | ${\tt ms/call}$ | name |
| 32.08 | 0.17 | 0.17 | 1488 | 0.11 | 0.14 | algo_mvs_MOD_mdt_mvs |
| 28.30 | 0.32 | 0.15 | 1 | 150.01 | 530.02 | MAIN |
| 16.98 | 0.41 | 0.09 | 477 | 0.19 | 0.34 | algo_radau_MOD_mdt_ra15 |
| 13.21 | 0.48 | 0.07 | 7254 | 0.01 | 0.01 | forces_MOD_mfo_grav |
| 7.55 | 0.52 | 0.04 | 1634 | 0.02 | 0.02 | algo_mvs_MOD_mfo_mvs |
| 1.89 | 0.53 | 0.01 | 1428 | 0.01 | 0.01 | ${\tt _drift_MOD_drift_kepu_lag}$ |
| 0.00 | 0.53 | 0.00 | 61641 | 0.00 | 0.00 | $__drift_MOD_drift_kepu_stumpff$ |

Ce dernier liste les sections du programme (que ce soit les fonctions ou les lignes, selon que vous utilisez ou non l'option -line) par ordre du temps CPU utilisé, le premier étant celui qui en utilise le plus. Chaque ligne vous donne :

- 1. le pourcentage de CPU utilisé par cette section
- 2. le temps cumulé utilisé par cette section et toutes celles qui sont en dessous dans la liste
- 3. le nombre de seconde passés dans cette section

si cette section est une fonction:

- (a) le nombre d'appel de cette fonction dans le programme
- (b) le temps moyen passé dans la fonction, par appel
- (c) le temps moyen passé dans la fonction, ou une des fonctions qu'elle appelle, par appel
- 4. le nom de la fonction.

Remarque : Si vous avez compilé avec l'option -g et l'option -line pour gprof, alors le nom de la fonction incluera aussi le nom du fichier source et le numéro de ligne.

Le flat profile est suivi d'une explication de ce que signifie chaque champ.

10.2.2 call graph

Le **call graph** fournit les mêmes informations que le **flat profile**, mais organisation de façon à ce qu'il reflète la structure du programme.

Call graph (explanation follows)

granularity: each sample hit covers 2 byte(s) for 1.89% of 0.53 seconds

| index | % time | self | children | called | name |
|-------|--------|------|----------|-------------|-------------------------------------|
| | | | | 2 | MAIN [1] |
| | | 0.15 | 0.38 | 1/1 | main [2] |
| [1] | 100.0 | 0.15 | 0.38 | 1+2 | MAIN [1] |
| | | 0.17 | 0.05 | 1488/1488 | algo_mvs_MOD_mdt_mvs [3] |
| | | 0.00 | 0.16 | 1/1 | mxx_sync.1545 [4] |
| | | 0.00 | 0.00 | 35/35 | algo_mvs_MOD_mco_mvs2h [13] |
| | | 0.00 | 0.00 | 1/1 | algo_mvs_MOD_mco_h2mvs [14] |
| | | 0.00 | 0.00 | 1488/1488 | dynamic_MOD_mce_cent [28] |
| | | 0.00 | 0.00 | 67/67 | mercury_outputs_MOD_mio_ce [35] |
| | | 0.00 | 0.00 | 54/54 | utilities_MOD_mio_spl [36] |
| | | 0.00 | 0.00 | 33/33 | mercury_outputs_MOD_mio_dump [37] |
| | | 0.00 | 0.00 | 32/32 | mercury_outputs_MOD_mio_out [38] |
| | | 0.00 | 0.00 | 14/15 | system_properties_MOD_mce_hill [41] |
| | | 0.00 | 0.00 | 14/14 | system_properties_MOD_mxx_ejec [42] |
| | | 0.00 | 0.00 | 6/6 | orbital_elements_MOD_mco_el2x [44] |
| | | 0.00 | 0.00 | 4/18 | system_properties_MOD_mxx_en [40] |
| | | 0.00 | 0.00 | 2/2 | mercury_outputs_MOD_mio_log [45] |
| | | 0.00 | 0.00 | 1/1 | system_properties_MOD_mce_init [47] |
| | | | | 2 | MAIN [1] |
| | | | | | <spontaneous></spontaneous> |
| [2] | 100.0 | 0.00 | 0.53 | | main [2] |
| [-] | 100.0 | 0.15 | 0.38 | 1/1 | MAIN [1] |
| | | | | -, - | |
| | | 0.17 | 0.05 | 1488/1488 | MAIN [1] |
| [3] | 40.6 | 0.17 | 0.05 | 1488 | algo_mvs_MOD_mdt_mvs [3] |
| | | 0.04 | 0.00 | 1490/1634 | algo_mvs_MOD_mfo_mvs [8] |
| | | 0.00 | 0.01 | 22320/25560 | drift_MOD_drift_one [10] |

10.3 Equivalent Operations Don't Necessarily Run in Equivalent Time

Dans l'exemple d'un programme qui fait X à la puissance Y, pour un entier Y, utilisons trois façons différentes de coder :

1. en utilisant la fonction power avec un Y constant

2. en utilisant la fonction power mais avec une variable comme exposant.

```
\begin{array}{c} A \!\!=\!\! PI \\ N \!\!=\!\! 4 \end{array}
```

A=PI

27 10 Optimisation

```
call CPU_TIME(start_time)
   do I = 1,MAXLOOPS
        B=A**N
   end do
    call CPU TIME(stop time)
    write (*,*) "A**N_(N=4)_Duration=_", stop_time - start_time
 3. en multipliant X par lui même Y fois.
   A=PI
    call CPU TIME(start time)
   do I = 1,MAXLOOPS
        B = A * A * A * A
   end do
    call CPU TIME(stop time)
    write (*,*) "A*A*A*A_Duration=____", stop_time - start_time
\nInteger powers tests:
                        1.3827890000000000
A**4 Duration=
A**N (N=4) Duration=
                       2.9805470000000005
A**pN (pointer) Duration=
                            2.9005589999999994
A*A*A*A Duration=
                        1.2208150000000009
```

$$A^n \Rightarrow \underbrace{A * \dots * A_{n \text{ fois}}}_{} \tag{10.1}$$

Il vaut donc mieux élever un nombre à une puissance entière par multiplication répétée (ou multiplication répétée suivie de division par 1.0 pour les puissances d'entiers négatifs.

Remarque: D'autres opérations pour lesquelles il y a de multiples façon de programmer auront le même comportement. Si on a un doute sur la technique à utiliser, on peut toujours modifier les sources fournis pour créer un set de tests pour un autre type d'opération.

10.4 Use Lookup Tables for Common Calculations

The second section of the example programs compares repeatedly using a calculated value of the sine of Pi over 4 within a loop, with getting a pre-calculated result from an array (a "lookup table").

You should find that whether or not you pre-calculate Pi over 4 makes very little difference, but avoiding repeated evaluation of the more computationally expensive sine function gives a 40 times speed-up in FORTRAN, and over 150 times in C.

In this example the time taken to construct the lookup table is considerably less than the amount of time saved through using it. In other cases the situation may not be as clear cut - however, you can always use another program to do all the calculations once and store the results in a file, which your main program can then read in as it starts. Where applicable you may also want to consider producing a lookup table for key points in a function, and interpolate (linearly, or otherwise) approximations to the intervening values. Minimise the Number of Large Jumps in Memory Address

The third section of the example programs illustrates how the way a computer is constructed can interact with how you program.

All modern computers have three types of memory:

on-die cache (typically 128KB to 8MB) main RAM (typically 128MB to 4GB) disk-based "swap" space (typically 2GB and up)

Each of these can be considered to be an order of magnitude slower to access than the one above it in the list, so ideally you want to be operating on data that's held in the on-die cache as much as possible, and getting data from the swap space as little as possible. Unfortunately you won't normally have any control over what data is held where - the computer's operating system will move chunks ("pages" -

typically 4KB on x86 Linux systems) of memory between the three depending on whether or not it thinks they are currently "in use".

Because of this behaviour you do not want to be continually jumping between, apparently, arbitrary memory locations as the computer will need to keep swapping pages around the system in order to get the one containing the memory address you want into the cache. This is illustrated by the two pairs of nested loops in the example programs stepping through a large two dimensional array.

Although C and FORTRAN allow us to have arrays with multi-dimensional indices, the computer's memory address space is only one dimensional. If we consider a simple 3x3 array in C (A[3][3]) then this is actually laid out in memory as:

A[0][0] A[0][1] A[0][2] A[1][0] A[1][1] A[1][2] A[2][0] A[2][1] A[2][2]

i.e. the rightmost index is the most rapidly varying.

Whereas in FORTRAN the 3x3 array A(3,3) is laid out in memory as:

A(1,1) A(2,1) A(3,1) A(1,2) A(2,2) A(3,2) A(1,3) A(2,3) A(3,3)

i.e. the leftmost index is the most rapidly varying.

If we have an array which is thousands of elements in each dimension then varying the first index by 1 in a C program, or the second index by 1 in a FORTRAN program, will take you into a different page which may not currently be readily accessible, thus causing a delay in processing. Consequently, it is important that loops are nested in the correct order to ensure that, wherever practical, you process all of the elements in the current page before going onto the next one, rather than continually processing a single element in a page and then jumping to a completely different one.

In practice this isn't quite so important with C programs, as you'll see from the example program since memory access is fast and nesting the loops either way round results in a similar execution time. With FORTRAN however, nesting the loops the "wrong" way round (with the second index on the inner, more quickly varying, loop) slows the program down by about a factor of 3. Use the Compiler's Optimization Flags

By far the simplest way of speeding up a program is to use the compiler's optimization flags (-O, -O2, or -O3). The higher the number used, the more optimization techniques carried out on the program and the faster the code should run (but there's no guarantee of this). N.B. the more optimization you turn on, the longer the program will take to compile, and the more the code that you execute will diverge from the code that you wrote, which may cause difficulties if you need to debug a problem.

Try compiling the two example programs using the various levels of optimization. You should find that for the C version using any level of optimization gives you about a 7% speed-up, but there's not much to choose between them. With the FORTRAN version there is also little to choose between the various optimization levels, but using any kind of compiler optimization speeds the program up by a factor of 7 to 10 times. The results for your own programs may well be different.

Another optimization option that you may derive some, possibly small, benefit from is -funroll-loops

11 Avancé

11.1 Les pointeurs

Un pointeur, ce n'est ni plus ni moins qu'une variable qui contient une adresse mémoire.

Ceci étant dit, on définit différents types de pointeurs, selon la nature des objets vers lesquels on pointe. L'utilité d'une telle chose est de pouvoir faire de l'arithmétique avec les pointeurs, vu que l'on connait la taille mémoire de chaque objet qu'on manipule.

On définit des pointeurs à l'aide d'attributs. Que ce soit pour définir les cibles que l'on pourra pointer

```
real, target :: a, b(1000), c(10,10)
```

ou pour définir les pointeurs eux mêmes (qui devront bien évidemment avoir le même type que les cibles auxquelles ils seront associés ultérieurement)

```
real, pointer :: pa, pb, pc
```

Pour attribuer une adresse au pointeur, il suffit ensuite de faire

```
pa => a
```

Après cette assignation, on peut alors faire

```
b(i) = pa * c(i,i)
```

29 11 Avancé

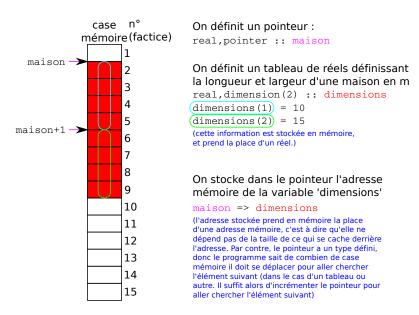


FIGURE 5 – Représentation schématique du fonctionnement d'un pointeur avec représentation de la mémoire. Les numéros pour les cases mémoires ne représentent pas la réalité, c'est juste pour montrer comment on fait référence à une case mémoire. L'idée est de montrer qu'en manipulant des adresses au lieu de manipuler les contenus, on peut faire des choses beaucoup plus puissantes.

qui est équivalent en terme de résultat avec

$$b(i) = a * c(i,i)$$

On peut aussi faire

```
pa = 1.23456
write(*,*) 'a = ',a
```

et avoir "1.23456" comme résultat affiché parce que changer pa change a

Le pointeur peut être ré-associé à n'importe quel moment. Il peut aussi être forcé à ne pointer sur rien en faisant :

nullify(pa)

11.2 Attributs des variables lors de leur déclaration

Lors de leur déclaration, il existe divers attributs que l'on peut donner aux variables et qui permettent de préciser à quoi elles vont servir notamment.

11.2.1 Une constante: parameter

On peut ainsi définir une variable comme étant un paramètre, c'est à dire que cette dernière ne pourra pas être modifiée dans le reste du programme. C'est pratique pour définir des constantes comme la valeur de π par exemple :

real, parameter :: pi = 3.14159

11.2.2 Entrée ou sortie : intent

Il est possible en Fortran 90 d'associer des attributs aux arguments des procédures pour fiabiliser les programmes. Les principaux attributs sont :

- intent(in). Cet attribut signifie que la variable à laquelle il se rapporte est un argument d'entrée de la procédure; sa valeur ne peut pas être modifiée par la procédure.
- intent(out). L'argument de la procédure a l'attribut sortie; la procédure ne peut pas utiliser sa valeur. Elle doit en revanche lui en attribuer une.

- intent(in/out). L'argument correspondant est à la fois un argument d'entrée (la procédure peut utiliser sa valeur) et un argument de sortie (la procédure doit lui en attribuer une nouvelle).

Si les conditions précédentes ne sont pas respectées, une erreur surviendra à la compilation. La syntaxe des attributs est la suivante :

end subroutine nom

11.3 Débuger des programmes fortran avec gdb

Afin d'utiliser un débugeur comme gdb pour suivre l'exécution d'un programme fortran, il est nécessaire de le compiler avec l'option -g, par exemple :

```
f77 -g foo.f -o foo
```

La commande suivante va créer un exécutable **foo** que vous pouvez exécuter normalement ou à travers **gdb** pour suivre ce qu'il fait au fur et à mesure.

Pour commencer l'exécution du programme foo avec gdb il faut :

1. faire précéder le nom du programme par gdb :

```
gdb foo
```

Vous aurez alors une ligne de commande de la forme

(gdb)

2. entrez ces commandes dans le prompt (gdb):

```
break main
```

Ceci lancera l'exécution du programme, puis cette dernière sera mise en pause juste avant la première commande exécutable.

Une chose intéressante à connaître est la séquence exacte d'exécution du programme, en particulier à travers les boucles et les tests conditionnels. Si le programme n'est pas trop gros, vous pouvez suivre facilement ce chemin en exécutant les lignes de code une à une.

Pour exécuter la ligne suivante, il faut entrer dans le prompt (gdb) :

step

À chaque fois que vous entrez la commande **step**, **gdb** va alors afficher la ligne qui est sur le point d'être exécuter, avec le numéro de ligne à gauche. Ceci permet de savoir ce qu'il va se passer, avant que ça ne se passe réellement.

Pour quitter \mathbf{gdb} , entrez la commande suivante dans le prompt :

quit

Vous aurez alors le message suivant :

```
The program is running. Quit anyway (and kill it)? (y or n)
```

Entrez 'y' pour confirmez que vous souhaitez quitter gdb.

31 11 Avancé

11.3.1 Savoir où on se trouve dans le programme

Pour savoir où on est, il suffit d'entrer dans le prompt (gdb) :

where

Cette commande affiche alors le numéro de ligne de la ligne courante. par exemple quelque chose du genre :

#0 foo () at foo.f:12

indique que l'exécution du programme est actuellement au niveau de la ligne 12 du code source du fichier foo.f

Vous pouvez afficher quelques lignes du code source autour de la position actuelle via

list

Il est aussi possible, via cette commande, de spécifier une liste de lignes à afficher. Par exemple pour lister les lignes 10 à 24 du programme courant, vous devez entrer dans le prompt (gdb) :

list 10,24

11.3.2 Afficher le contenu d'une variable fortran avec gdb

À n'importe quel moment de l'exécution pas à pas du programme, vous pouvez connaître les valeurs courantes de vos variables en utilisant la commande print. Par exemple, si vous avez une variable density, vous pouvez entrer la commande suivante afin de connaître la valeur stockée :

print density

Vous devez entrer les noms des variables en minuscules dans **gdb**, sans vous préoccuper de la casse de la variable dans votre code source.

11.3.3 Mettre le programme en pause à un endroit particulier

Au lieu d'entrer

break main

il faut entrer une commande du style

break [file:]function

où [file:] est un argument optionnel qui permet de spécifier dans quel fichier se trouve la fonction considérée (s'il y a plusieurs fichiers) et function est le nom de la fonction au début de laquelle on veut mettre l'exécution en pause.

11.3.4 Débuggage avancé

Pour exécuter le programme ligne à ligne, il existe next et step.

- 1. **step** permet d'exécuter la ligne suivante du programme tout en passant *au-dessus* de tout appel de fonction dans la ligne.
- 2. next permet d'exécuter la ligne suivante du programme, en exécutant aussi tous les appels de fonctions de la ligne.

Pour continuer l'exécution (jusqu'au prochain breakpoint je suppose) il faut utiliser la commande suivante dans le prompt (\mathbf{gdb}) :

11.4 Erreurs de compilation

11.4.1 Utilisation de fonctions internes à un module

```
kepler_equation.o: In function '__kepler_equation_MOD_orbel_fhybrid':
kepler_equation.f90:(.text+0x25f): undefined reference to 'orbel_flon_'
collect2: ld a retourné 1 code d'état d'exécution
```

Le problème vient de la fonction orbel_fhybrid du module kepler_equation. j'ai en effet pris des fonctions pour en faire un module, et avant, des variables étaient définies dans la fonction, puisque celle-ci faisait appel à d'autres fonctions. Toutes ces fonctions faisant maintenant partie du même module, on peut et on doit enlever ces définitions.

Pour résoudre le problème, j'ai donc supprimé la ligne :

```
real*8 orbel_flon
```

dans la définition de la fonction orbel_fhybrid.

11.4.2 Utilisation de fonctions d'un module

```
mercury.f90:1140.22:
```

Il faut supprimer cette ligne parce que le type de la fonction est déjà défini dans le module, pas besoin de redéfinir le type de la fonction dans la subroutine qui importe le module.

11.4.3 Utilisation de subroutine en paramètre d'autres subroutines

```
mercury.f90:137.19:
```

```
external mco_dh2h,mco_h2dh

1
Error: Cannot change attributes of USE-associated symbol at (1)
```

En mettant ces subroutines (celles qu'on appelle en argument) dans un module, pas besoin de les définir via un external. Il faut donc supprimer cette ligne.

11.4.4 Function has no implicit type

test_mfo_user.f90:35.12:

$$f_p = get_F(p)$$

Error: Function 'get_f' at (1) has no IMPLICIT type

J'ai eu cette erreur parce que je n'avais pas rajouté le module dans la ligne de compilation

```
gfortran -o test test_mfo_user.f90 user_module.o
```

J'ai eu aussi cette erreur parce que dans le module $user_module$, la fonction get_F était une fonction privée.