Introducción al Fortran

Bruno Juliá-Díaz (brunojulia@ub.edu)

Dpto. Física Quàntica i Astrofísica

Facultat de Física

Universitat de Barcelona

Curso 2019/2020

Sources: Mètodes Numèrics per a la Física, Guardiola, Higón y Ros (U. Valencia)

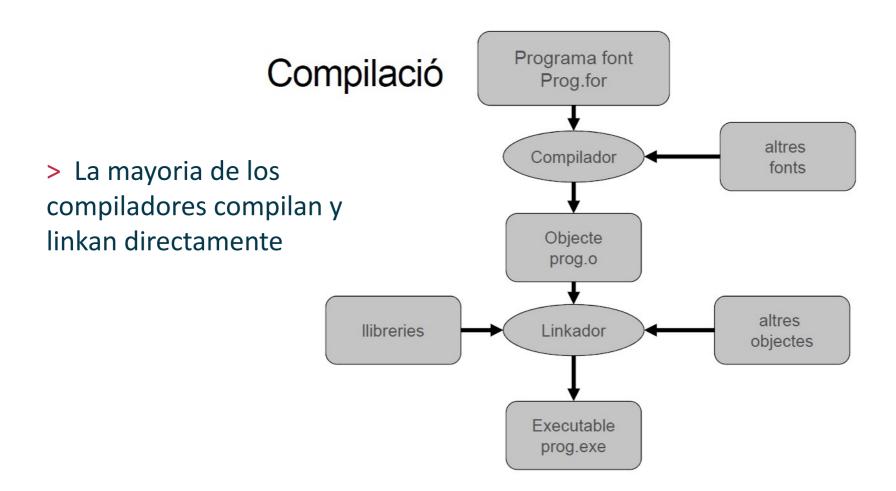
http://www.chem.ox.ac.uk/fortran

http://www.math.hawaii.edu/~hile/fortran/fortmain.htm

Fortran

- > Lenguaje muy utilizado en física computacional:
 - + Primer lenguaje completo
 - + Todas las revisiones han mantenido la compatibilidad con las versiones previas
 - + Fue desarrollado para trabajar con expresiones matemáticas
 - + Permite un gran control de la precisión de los números utilizados
 - + Existen multitud de subroutinas bien testadas disponibles
 - + Permite trabajar con caracteres
- > Limitaciones, no está particularmente adaptado a trabajar con:
 - bases de datos
 - programas a través de WWW
 - integración de gráficos

Requiere compilación



Programa

- > El programa lo componen uno o varios ficheros ascii.
 - Program.f, program.for, program.f90, rutinas1.f, etc
- > Cada fichero contiene una serie de lineas con las instrucciones Fortran
- > Fortran **no distingue** mayúsculas de minúsculas
- > Utilizaremos formato "clásico", 72 columnas útiles:
 - + columna 1, si tiene una "C" o "*" es una linea de comentario
- + columnas 1-5, se utilizan para poner etiquetas a las líneas y poder volver a ellas
- + columna 6, un carácter en esta columna indica que es continuación de la anterior
 - + columna 7-72, instrucciones normales de Fortran

Hello World

```
(fichero hello.f)
```

end

```
print*,"Hello World"
```

Compilación:

gfortran hello.f -o hello.exe

Ejecución:

hello.exe

Hello World

Programa

```
C23456789012345678901234567890123456789012345678901234567890123456789012
      PROGRAM PRUEBA 1
  PRUEBA 1
  PROGRAMA QUE ESCRIBE EL CUADRADO DE UN NÚMERO
  BJULIA SEP 2015
      IMPLICIT NONE
      REAL A,A2
C LEE EL NÚMERO DEL TECLADO
      PRINT*, "ESCRIBA UN NUMERO"
      READ*,A
C CALCULA EL CUADRADO
      A2 = A * * 2
C ESCRIBE EL CUADRADO
      WRITE(*,111) A2
111 FORMAT ('EL CUADRADO DEL NUMERO ES: ',F9.6)
      END
```

Programa

```
PROGRAM MEDIA1
C
C
Programa que lee 3 números y calcula su valor medio
C
C
INPUT
C
x1, x2, x3: numeros reales
C
C
OUTPUT
C
xm : valor medio
C
```

> Encabezado:

- + Nombre del programa
- + Descripción de lo que hace
- + Explicación de las variables

IMPLICIT NONE

REAL X1,X2,X3 REAL xm

- > Línea que indica que todas las variables tendrán que definirse explícitamente
- > Especificación de las variables

```
WRITE(*,*) 'Introduce 3 numeros'
READ(*,ie) X1,X2,X3
print*,ie
XM= (X1+X2+X3)/3.
WRITE(*,*) 'El valor medio es:',xm
END
```

> Cuerpo del programa

Modulos

> PROGRAM

+ Indica el programa principal, solo puede haber uno

> SUBROUTINE

+ Realiza una tarea específica.

> FUNCTION

+ Devuelve un valor como función de una serie de parámetros

> BLOCK DATA

- + variables compartidas entre diversas partes del programa
- > El programa principal, las subrutinas y funciones pueden estar definidas en distintos ficheros.

```
PROGRAM PRUEBA 2
C
       PRUEBA 2
       PROGRAMA QUE ESCRIBE EL CUADRADO DE UN NÚMERO
C
       BJULIA SEP 2015
C
\mathbf{C}
       IMPLICIT NONE
       REAL A,A2
C LEE EL NÚMERO DEL TECLADO
       PRINT*, "ESCRIBA UN NUMERO"
       READ*,A
C CALCULA EL CUADRADO
       call cuadrado(A,A2)
C ESCRIBE EL CUADRADO
       WRITE(*,111) A2
       FORMAT('EL CUADRADO DEL NUMERO ES:', F9.6)
 111
       END
       SUBROUTINE CUADRADO(X,X2)
C
C
       input: X
       output: X2, cuadrado de X
       x2=x*x
       END
```

Tipos de variables

```
> INTEGER*2 (2 bytes=16 bits, un bit para el signo, 15 para el numero)
      + Desde -2^{15} a 2^{15}-1 = 32767
> INTFGFR*4
      + Desde -2^{31} a 2^{31}-1 = 2147483647
> RFAL O RFAL*4
      + 0.42, 4.31E-10, 0.3141592E+1
      + precisión de una parte en 10<sup>7</sup>, entre 10<sup>-38</sup> a 10<sup>38</sup>
> DOUBLE PRECISION O REAL*8
      + 0.42d0, 4.31D-10, 0.3141592d+1
      + precisión de una parte en 10<sup>15</sup>, entre 10<sup>-308</sup> a 10<sup>308</sup>
> COMPLEX
      +(0.1,0.42)
      + real y imag
> LOGICAL
      + true o false
> CHARACTER
      + CARACTER*3 PATATA
      PATATA="abc"
> DECLARACIONES POR DEFECTO
      IMPLICIT REAL (A-H,O-Z), INTEGER (I-N)
```

MUY RECOMENDABLE IMPLICIT NONE

Fuerza a definir explícitamente todas las variables utilizadas

Matrices y vectores

C DECLARACIÓN

REAL A,B INTEGER C CHARACTER*3 PALABRA

DIMENSION A(40) DIMENSION B(20,30) DIMENSION C(100)

C USO

A(3)=4.0A(39)=3.2

B(10,20)=4.

A(5) = B(10,20) + A(39)C(4)=3

C DEFINICION COMPACTA

REAL A(40),B(20,30) INTEGER C(100) Índice del 1 al numero, ej, de 1 a 40 2 indices, 1 a 20 y 1 a 30

C INDICES PERSONALIZADOS

REAL EQUIS(-30:30), Y(0:10) REAL TIEMPOS(0:100)

Operaciones y expresiones relacionales

C OPERACIONES

A*B

A+B

A/B

A**B

A-B

C EXPRESIONES RELACIONALES

(A.EQ.B)

.GE. Greater equal GT. Greater than Lower equal Lower than NE. not equal

.AND. y .OR. o .NOT. not

.EQV. Equivalente (lógico)
.NEQV. No Equivalente (lógico)

Las operaciones relacionales van entre paréntesis Si se combinan varias, la expresión completa también ha de ir entre paréntesis.

EJEMPLOS:

IF (A.EQ.B) THEN ENDIF

IF ((A.EQ.B).OR.(C.EQ.D)) THEN ENDIF

.NOT. SE USA COMO NEGADOR IF (.NOT.(A.GE.B)) THEN

Operaciones y expresiones relacionales

C FUNCIONES INTRINSECAS

```
SQRT(X),DSQRT(X)
SIN(X),DSIN(X)
COS(X)
TAN(X)
ASIN(X)
ATAN(X)
SINH(X)
COSH(X)
EXP(X)
LOG(X)
```

C

ABS(X)
DBLE(X)
INT(X)
NINT(X)
REAL(X)

.... (HAY UNAS 40)

Valor absoluto

Pasa a doble precisión

Parte entera de X

Entero más cercano

Pasa a real

Prioridad en las operaciones

```
Las expresiones aritméticas se evalúan (En este orden)
    1 De dentro a fuera, primero los paréntesis
    2 De derecha a izquierda, exponenciación **
    3 De izquierda a derecha, multiplicación, división
    4 De izquierda a derecha, suma, resta
Ejemplos:
         -A**N+B*C-D/E
Se evalúa:
1> A**N
2> B*C
3> D/E
4> el – frente a A**N
5> el + entre A**N y B*C
6> el – entre B*C y D/E
         A+((B^{**}M)^{**}N)/(C-D)
1> B**M
2> B**M a la N
3> la division /
4> el +
```

Aritmética (*)

Si se utilizan reales en toda la expresión no habrá problema y la aritmética real funciona correctamente

```
REAL A,B,C
A=3.
B=4.
C=10.
Por ejemplo:
A*B*C valdrá 120.
```

Si todos los números son enteros, la suma, resta y multiplicación funcionan como se espera.

La división no, en lugar de dar el real correcto, truncará los decimales dejando sólo la parte entera, por ejemplo,

```
1/3 da como resultado 04/3 da como resultado 15/2 da como resultado 2
```

Aritmética mixta y asignación

Si alguno de los operandos es real, el resultado será real. Aun así, hay que tener mucho cuidado porque el orden sigue importando

```
5/2*3.0= 6.00000000 primero realiza 5/2=2, y después 2*3.0=6.0
3.0*5/2= 7.50000000 primero realiza 3.0*5=15.0 y después 15.0/2.=7.5
```

Es recomendable utilizar comandos como

```
xnn=real(nn)
```

que convierten el entero nn en el real xnn antes de operar

Para asignar un valor a una variable se utiliza:

Variable= expresion

Ejemplos. X=X+1

Y = 2.35

pi=atan(1.0)

cosa=x*y

Se pueden definir constantes, cuyo valor no se puede modificar:

Real pi

Integer ndim

Parameter (pi=3.141592)

Parameter (ndim=40)

Control de flujo

```
Para controlar el flujo dentro del programa existe el comando

IF

Se puede utilizar:

IF (npasos.eq.40) mensaje=1

IF (b.eq.c) c=3.

IF ( expresión condicional) THEN

ENDIF

IF ( expresión condicional) THEN
```

Es bueno indentar el contenido del IF. Ayuda a entender el flujo del programa

```
IF ( expresión condicional) THEN
......

ELSE IF (otra expresion condicional) THEN
.....

ELSE IF (otra expresion condicional) THEN
.....

ELSE
ENDIF
```

Tests de igualdad en números reales

Imaginemos que queremos incluir una determinada condición del tipo "Calcula la trayectoria de un móvil, cuando su velocidad sea 5 m/s escribe su posición"

La primera opción (algo drástica) sería añadir una línea de código tipo:

REAL VELOCIDAD

IF (VELOCIDAD.EQ.5.) THEN

PRINT*,POSICION

ENDIF

Esto presenta el **GRAVE** inconveniente de que, trabajando con precisión fija, es prácticamente imposible que la condición se cumpla exactamente y el código nunca cumplirá su cometido.

Lo más apropiado es comparar los números dentro de la precisión deseada, algo como

```
IF (abs(VELOCIDAD-5.).LT.1.e-7) THEN PRINT*,POSICION ENDIF
```

Bucles

GOTO 40
.... COSAS

40 CONTINUE

ESTE CÓDIGO NO PASARÁ POR "COSAS"

No se recomienda el uso de GOTO porque dificulta considerablemente entender el flujo del programa.

EJEMPLOS (el paso por defecto es 1):

DO 40 ITIEMPOS=1,40
PRINT*,ITIEMPOS
40 CONTINUE

DO NCOSAS=1,1000,10
NC=NCOSAS**2
ENDDO

EJEMPLO (sumatorio)
INTEGER NDIM
REAL SUMA, FUNCI(NDIM)
SUMA=0.
DO I=1,NDIM
SUMA=SUMA+ FUNCI(I)
ENDDO

valor
Antiguo
valor

Nuevo

Subroutine

Utilizan una o varias variables, cuyo valor pueden modificar y devolver.

```
INTEGER SEC, X, HOUR, MIN
```

```
HOUR=4
MIN=3
SEC=40
Call TSECS(x, HOUR,MIN,SEC)
PRINT*,X
FND
```

```
SUBROUTINE TSECS(TS,HH,MM,SS)
INTEGER HH,MM,SS,TS

TS=((HH*60)+MM)*60+SS
RETURN
FND
```

No hay una diferencia formal entre entrada (input) y salida (output). Se recomienda no cambiar el valor de las variables de entrada

El orden de las variables en la llamada y en la definición ha de ser el mismo.

Acaba con RETURN FND

Function

Devuelven un sólo valor de un tipo determinado (real, integer, etc) a partir de una serie de variables.

El orden de las variables ha de ser el mismo en la llamada a la function que en su definición. Veamos un ejemplo:

```
INTEGER SEC, X, HOUR, MIN
INTEGER TSECS
  HOUR=4
  MIN=3
  SFC=40
  X=TSECS(HOUR, MIN, SEC)
  PRINT*,X
 FND
INTEGER FUNCTION TSECS(HH,MM,SS)
INTEGER HH, MM, SS
    TSECS=((HH*60)+MM)*60+SS
RFTURN
FND
```

Hay que definir el tipo de la propia función, en el ejemplo, integer

El nombre interno de las variables no tiene que coincidir con el externo. El orden es lo importante. Esta función espera un hora, minuto y segundo, en ese orden.

La función tiene que tener un valor asignado al finalizar.

Acaba con RETURN END

Function, external

Permiten utilizar nombres de funciones como argumento en subroutinas REAL X1,X2,AREA **EXTERNAL FCN** CALL INTEGRA(FCN, X1, X2, AREA) **END** FUNCTION FCN(X) FCN = **RETURN END** SUBROUTINE INTEGRA (F, XO, X1, A) **RETURN END**

Common blocks

Las variables definidas en el programa principal, y las diversas **subroutines** o **functions** son locales. Esto es, sólo están definidas dentro de cada estructura.

```
Se pueden compartir datos utilizando COMMON BLOCKS
```

PROGRAM COSA1

INTEGER A,B,C

REAL D,P,Q

COMMON/NUMEROS/D,A,B,C

D=3.

A=1

B=2

C=4

CALL SUBRUT(P,Q)

END

SUBRUT(P,Q)

REAL P,Q, POSI

INTEGER HORA, MINU, SEGU

COMMON/NUMEROS/POSI,HORA,MINU,SEGU

PRINT*,POSI

RETURN

END

B. Juliá-Díaz, Física Computacional 2019/2020

Cada COMMON BLOCK debe llevar un nombre.

Se pueden hacer varios.

El orden vuelve a ser fundamental.

Escritura en fichero

```
El comando es WRITE (UNIT=, FMT=) A
UNIT es el lugar donde se escribe.
     + En pantalla (o estandar output), *
     + en un fichero abierto anteriormente
          OPEN(14,FILE="DATOS.DAT")
          WRITE(14,*) X,Y
          CLOSE(14)
El formato (FMT) es importante, puede ser
     + estandar, *
     + con un control de los decimales que
          tenemos en el numero
          X = 3.0
          Y = 4.0
          WRITE(*,100) X,Y
          WRITE(*,200) X,Y
100
          FORMAT(F12.6,2X,F12.4)
200
          FORMAT(E12.3,2X,E3.2)
Salida:
  3.000000
               4.0000
 0.300E+01 ***
```

PRINT*, "el valor es:", A
PRODUCE ALGO PARECIDO A
WRITE(*,*) "el valor es",A

Formatos:	Ejemplo	
f coma flotante	f9.3	4.000
E precision simple	e12.4	0.4000E+01
D doble precisión	d12.6	0.400000E+01
I entero	14	4
A carácter	A4	abcd
X espacio en blanco		
/ espacio vertical, rotura de linea		
T tabulador		

```
Ejemplos:

Frase completa con resultados intercalados

300 FORMAT('la parte entera de x=',F12.6,' multiplicado',1x,
    1 'por y=',F12.4,2x,'es igual a',2x,i4)

10 columnas de números en precisíon simple

400 format(10(e12.6,2x))
```

Lectura de datos a partir de un fichero

El comando es READ (UNIT=, FMT=) A

>UNIT es el lugar de donde se lee

- + desde pantalla/teclado (o estandar input), *
- + de un fichero abierto anteriormente

```
OPEN(14,FILE="DATOS.DAT")
READ(14,*) X,Y
CLOSE(14)
```

De esta manera leeríamos dos números x e y de la primera línea del fichero DATOS.DAT

Si no hubiera dos números, retornaría un error.

- > formato (FMT) Normalmente es preferible leer sin formato, entendiendo que los números en el fichero han de estar separados por tabulador o espacios para que fortran los lea como distintos.
- > **Read** lee números en una línea, si hay más números para leer seguirá en la siguiente línea.
- > Si no conocemos cuántas líneas tiene el fichero, podemos decirle que cuando llegue al final salte a una etiqueta del código (en lugar de dar error).

Salta a la línea 400 si llega al final del fichero.

Lectura de datos a partir de un fichero

```
program lectura
c ilustra el uso de RFAD
c el fichero datos dat contiene
  2. 4. 5.
  3. 6. 8.
  4. 8. 11.
     5, 10, 14,
c variables que leemos, x,y,z
     real x,y,z
c abre el fichero datos en la unidad 15
     open(15,file="datos.dat")
     lee los dos primeros numeros
     y escribe su valor
     read(15,*) x,y
     write(*,100) x,y
100
        format('los dos primeros números son:',f8.3,2x,f8.3)
c si ahora volvemos a leer leeremos la segunda linea
     read(15,*) x,y
     write(*,200) x,y
       format('los dos números siguientes son:',f8.3,2x,f8.3)
200
     end
```

Salida

los dos primeros números son: 2.000 4.000 los dos números siguientes son: 3.000 6.000

Lectura de datos a partir de un fichero

```
READ (UNIT=, FMT=)
```

Si queremos realizar entradas desde el teclado:

```
READ(*,*) X,Y
```

> El programa en ejecución esperará a que el usuario introduzca dos números de dos formas:

```
+ 3.,4. (enter)
```

+ 3.(enter), 4.(enter)

Errores y problemas habituales

Problemas en el uso de número reales

Errores de:

- >Redondeo
- >Overflow/Underflow
- >Perdida de dígitos significativos

Redondeo

Redondeo

Proceden del hecho de utilizar un número de dígitos significativos fijo.

```
X1=2.0E30

X2=2.0E8

X3=X1+X2

WRITE(*,*) ' Redondeo'

WRITE(*,*) ' NUMEROS ',x1,x2

WRITE(*,*) ' X3-X1=X2=',X3-X1

WRITE(*,*) ' X2=',X2

END
```

```
Redondeo
```

NUMEROS 2.00000003E+30 200000000.

X3-X1=X2= 0.00000000

X2= 200000000.

Guardiola et al, Mètodes numèrics per a la física, p. 21-25

Overflow

Overflow

En real, tendremos problemas si el número supera 10³⁸

El compilador dará un "infinity" al correr o "arithmetic overflow" al compilar

Overflow flotant

Nombres 2.00000003E+30 2.00000003E+30

1/(x1*x2) 0.00000000

x1*x2 Infinity

Infinity

Ex0104.for (Guardiola et al)

C OVERFLOW FLOTANT

x1=2.0E30

x2=x1+2.0E20

WRITE(*,*) ' Overflow flotant'

WRITE(*,*) 'Nombres ',x1,x2

WRITE(*,*) ' 1/(x1*x2)',(1.0/x1)*(1.0/x2)

WRITE(*,*) ' x1*x2 ',x1*x2

X3=X1*X2

PRINT*,X3+1

END



El error de redondeo es mayor que la diferencia entre los números!

Overflow flotant

Nombres 2.00000000000000E+030 2.0000000002000001E+030

1/(x1*x2) 2.499999997499994E-061

x1*x2 4.0000000004000002E+060

4.0000000004000002E+060

Guardiola et al, Mètodes numèrics per a la física, p. 21-25

Mejora si utilizamos doble precisión



Perdida de dígitos significativos

Suele aparecer al restar números próximos.

 $X1=4.100111\pm0.000001$

 $X2=4.100222 \pm 0.000001$

Si los restamos tenemos,

 $x3=x2-x1=0.000111\pm0.000002$

Con lo que tenemos al final un número conocido con un 1% de precisión aunque partíamos de números con mucha más precisión

Guardiola et al, Mètodes numèrics per a la física, p.25

NaN (Not a Number)

PRINT*,SQRT(-3.0) END

AA=-3.0 PRINT*,SQRT(AA) PRINT*,"Hola" END Dependiendo del compilador determinadas operaciones pueden dar lugar a NaN.

En este caso el compilador detecta el problema y devuelve al compilar un **Error**

a.f:1.25:

print*,sqrt(-3.0)
1

Error: Argument of SQRT at (1) has a negative value

En este caso el compilador no da ningun error, pero al ejecutar obtenemos:

NaN

Hola

Guardiola et al, Mètodes numèrics per a la física, p.25

Errors y Warnings

Para compilar el programa haremos:

Linux/MacOS>

gfortran programa1.f -o ejecutable.out

Windows>

gfortran programa1.f -o ejecutable.exe

Si la compilación ha funcionado satisfactoriamente el sistema no dirá nada. Habrá generado un fichero ejecutable.

Comprobad siempre que se ha generado un NUEVO ejecutable (mirando la hora de creación)

El proceso de compilación puede producir:

- > Warnings (avisos)
 - + El compilador avisa de posibles problemas

Warning: line ...

- + Los problemas no son tan graves (aparentemente) como para detener la compilación
 - + Es bueno que el compilador no de Warnings
- > Errors (Errores)
- + El compilador detiene el proceso y no genera ningun ejecutable
 - + Escribe:

Error: Descripción del error y posible localización

Errors y Warnings

Mirad siempre los mensajes del compilador en orden

+ En muchos casos basta resolver el primer error detectado

```
implicit none
  intege i
  do i=1,30
    print*,i
  enddo
  end
```

+ El compilador dice:

```
codig.f:3:8:
        intege i
        1
Error: Unclassifiable statement at (1)
codig.f:4:12:
        do i=1,30
        1
Error: Symbol 'i' at (1) has no IMPLICIT type
```

Errores típicos (0)

```
program err0
c ilustramos algunos errores tipicos
c el numero y tipo de argumentos con
c los que se llama (CALL) a una
c subroutina o funcion
c ha de ser el correcto
c bjd Sep 2015
     implicit none
     integer i,j,k
     i=2
     call suma2(i,j)
     print*,i,j
     end
     subroutine suma2(x)
     implicit none
     integer x,xp2
          xp2=x+2
     return
     end
```

```
program err0b
        implicit none
        integer i,j,k
        i=2
         call suma2(i)
        print*,i,j
        end
        subroutine suma2(x,xp2)
        implicit none
        integer x,xp2
              xp2=x+2
        return
        end
   call suma2(i)
Warning: Missing actual argument for argument 'xp2' at (1)
err0.f:11.72:
   call suma2(i,j)
Warning: More actual than formal arguments in procedure call at (1)
```

Errores típicos (1)

```
program err1
c ilustramos algunos errores tipicos
c el tipo de argumentos con
c los que se llama (CALL) a una
c subroutina o funcion ha de ser el
c correcto
c bjd Sep 2015
    implicit none
    integer i,j,k
    real p
    i=2
     call suma2(i,p)
    print*,"i=",i," p=",p
    end
    subroutine suma2(x,xp2)
    implicit none
    integer x,xp2
         xp2=x+2
     return
```

end

Compilación

```
call suma2(i,p)

1

Warning: Type mismatch in argument 'xp2' at (1); passed REAL(4) to INTEGER(4)
```

Salida

Errores típicos (2)

```
program err2
c ilustramos algunos errores tipicos
c no podemos pasar como argumento
c a una subrutina una variable que
c ya estamos pasando por un common
c bjd Sep 2015
    implicit none
    integer i,j,k
    common/equis/i
    i=2
     call suma2(i,j)
    print*,i,j
    end
    subroutine suma2(x,xp2)
    implicit none
    integer x,xp2
    common/equis/x
        xp2=x+2
    return
    end
```

```
err1.f:18.20:

common/equis/x

1
Error: COMMON attribute conflicts with DUMMY attribute in 'x' at (1)
```

Errores típicos (3), durante la ejecución

```
Si no utilizamos

IMPLICIT NONE

El compilador supone que las variables que comienzan por

(a-h)-(o-z) son REAL y las
```

INTEGER

(i-h)

```
Fuente:
```

http://www.physics.usyd.edu.au/guides/f77errors.html http://kb.mit.edu/confluence/display/istcontrib/Common+Fortran+Error+messages

```
Errores de segmentación (al intentar asignar una posición no definida)

IMPLICIT NONE

INTEGER I(10),J

DO J=1,20

I(J)=J

ENDDO
```

Program received signal SIGSEGV: Segmentation fault - invalid memory reference.

Backtrace for this error: #0 0x7FB79AE24777 #1 0x7FB79AE24D7E #2 0x7FB79AA7CD3F

Segmentation fault (core dumped)

```
Divide by zero

IMPLICIT NONE

INTEGER I,J,K

I=3

J=0

K=I/J

FND
```

FND

Program received signal SIGFPE: Floating-point exception - erroneous arithmetic operation.

Backtrace for this error:

#0 0x7F5B98A8E777

#1 0x7F5B98A8ED7E

#2 0x7F5B986E6D3F

#3 0x400683 in MAIN__ at err4.f:?

Floating point exception (core dumped)

B. Juliá-Díaz, Física Computacional 2019/2020

Errores típicos (4)

```
Recordemos: (hay muchos formatos diferentes)
```

```
4000. = 4E+03 = 0.4E+04
0.0005 = 0.5E-03
```

```
Un número escrito como:
```

4. o 4.E0 o 4.0000

Es **REAL**

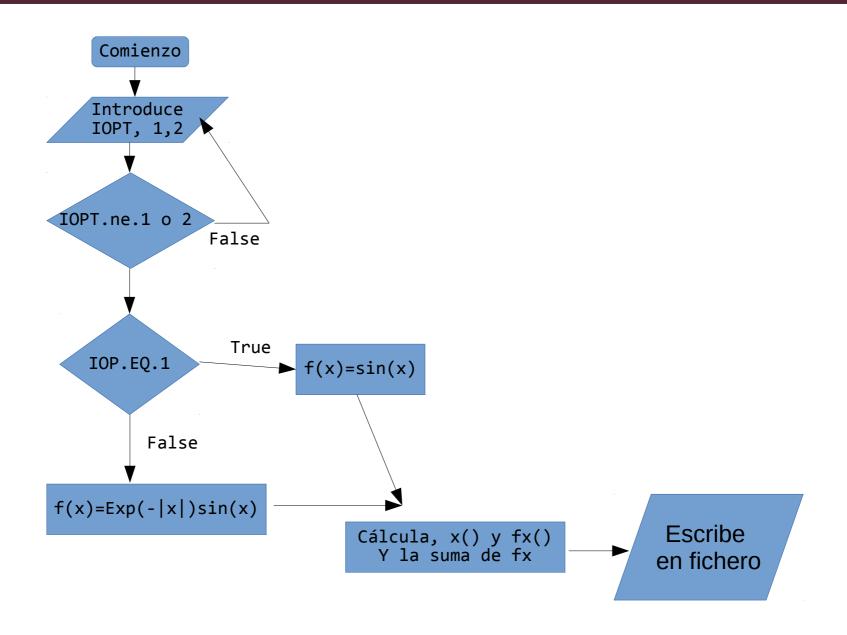
Un número escrito como:

4.D0

ES DOUBLE PRECISION

Ejemplo de programa sencillo

Ejemplo (programa1.f), diagrama flujo



B. Juliá-Díaz, Física Computacional 2019/2020

Ejemplo (programa1.f), encabezado

```
C PROGRAMA SENCILLO PARA PROBAR EL COMPILADOR
C REALIZA ALGO DE LECTURA Y ESCRITURA
C CONTIENE: IF
C CONTTENE: DO
C CONSTRUYE UNA TABLA DE POSICIONES (ENTRE -5 Y 5) Y VALORES DE DOS
FUNCTONES.
C CALCULA LA SUMA DE LOS VALORES DE LA FUNCION
  LAS FUNCIONES SON SIN(X), EXP(-|X|) * COS(X)
C BJD SEP 2015
C LAST MODIFIED: 21 SEP 2015
```

Ejemplo (programa 1.f), declaración variables

CODTGO

TMPLTCTT NONE

C NUMERO DE POSICIONES

INTEGER NDIM
PARAMETER (NDIM=100)

REAL XX(NDIM), FUNCI(NDIM), SUMA INTEGER IOPT, ERR, IESTADO INTEGER I

C INICIALIZA IOPT, SERVIRA PARA ESCOGER IOPT=0

Comentarios

Todas las variables necesitaran declararse explícitamente

Un entero, el número de puntos No podremos modificarlo

X, funci, vectores de posiciones y valores de f(x) Enteros, para controlar el flujo y gestionar errores de lectura

Entero usado como contador en un loop

Ejemplo (programa1.f), entrada datos

Busca que el usuario introduzca una opción controlando los posibles errores. Por ejemplo, si en lugar de 1 o 2 escribe un carácter u otro número.

```
WRITE(*,*) 'QUE FUNCION QUIERES ESCRIBIR:
1 (1) SIN(X), (2) EXP(-X)*SIN(X)'
READ(*,*,ERR=20,IOSTAT=IESTADO) IOPT

IF ((IESTADO.NE.0).OR.(IOPT.NE.1.AND.IOPT.NE.2)) THEN
    WRITE(*,*) 'OPCION INCORRECTA, ESCRIBA 1 o 2'
    GOTO 10
ENDIF
```

Ejemplo (programa1.f), cálculos

```
C CALCULA LOS VALORES DE LA FUNCION
    DO I=1, NDIM
C POSICIONES DE -5 A 5, CON PASO CONSTANTE
            XX(I) = -5. + REAL(I)/NDIM*10.
                IF (IOPT.EQ.1) THEN
                  FUNCI(I) = SIN(XX(I))
                ELSE
                     FUNCI(I)=EXP(-ABS(XX(I)))*SIN(XX(I))
            ENDIF
    ENDDO
C CALCULA LA SUMA DE LOS VALORES DE LA FUNCION
        SUMA=0.
         DO I=1,NDIM
            SUMA=SUMA+FUNCI(I)
         ENDDO
```

Bucle principal, para calcular los valores de "x" y f(x) en un conjunto finito de puntos

Ejemplo (programa1.f), escritura

```
C ESCRIBE LOS DATOS EN UN FICHERO

OPEN(14,FILE='salida.dat')

DO I=1,NDIM

WRITE(14,100) XX(I),FUNCI(I)

FORMAT(F9.3,2X,F12.6)

ENDDO

CLOSE(14)

C ESCRIBE EL VALOR DE LA SUMA EN PANTALLA

WRITE(*,*) ' LA SUMA VALE ',SUMA

WRITE(*,*) ' POR QUE NO VALE ZERO LA SUMA?'

END
```

Loop para escribir los datos en un fichero

END, finaliza el programa

Algunas instrucciones de fortran>77 (fortran90, etc)

Cambios y comandos útiles

Si quereis utilizar fortran 90:

- > extension del fichero .90, e.g. programa.f90
- > No hace falta respectar la columna 7, etc.

```
C BUCLE DO WHILE
DO WHILE (condicion)
COSAS
ENDDO
```

```
C Allocate / deallocate

    Real, allocatable :: matriu(:,:)
    integer ix,iy

    read (*,*) ix,iy
    allocate(matriu(ix,iy))

....

deallocate(matriu)
```

Modules

Una alternativa elegante a los common blocks, que a veces puede ser mas complicado de debuggear es el uso de modules. Ejemplo (de

http://fortranwiki.org/fortran/show/Compiling+and+linking+modules)

```
C!> \file testModule.f
module mathModule

implicit none
private
real, public, parameter :: &
   pi = 3.1415 , &
   e = 2.7183 , &
   gamma = 0.57722

end module mathModule
```

```
!> \file mainProg.f
program testing
use mathModule
implicit none

print *, "pi:", pi, "e:", e, "gamma:", gamma
end program testing
```

Sobre common vs modules, http://iprc.soest.hawaii.edu/users/furue/improve-fortran.html