FORTRAN en bref pour la programmation numérique

Patrick Amestoy, Philippe Berger, Ronan Guivarch, François-Henry Rouet

PLAN

- Introduction
- Éléments du langage
- Instructions usuelles
- Programme et sous-programmes
- Utilisation des pointeurs
- Autres instructions
- Modules
- Format F66/77
- Fonctions intrinsèques
- Entrées/Sorties

Fortran

- Fortran (FORmula TRANslator) existe depuis les années 50 et a subi de nombreuses évolutions (dernière norme : Fortran 2008).
- Utilisé dans d'innombrables applications scientifiques :
 - Code Aster (EDF): thermo-mécanique (>1M lignes de code).
 - NASTRAN (NASA & MSC Software): thermo-mécanique, mécanique des fluides, acoustique (>1M lignes de code).
 - Mercator Océan : prévisions océanographiques.
 - Bloomberg : calculs financiers (25M lignes de code).

• ...

Réferences

- "Fortran 95/2003 Explained", Michael Metcalf, John Reid, Malcolm Cohen. Oxford University Press, Aug 26, 2004
- "The Fortran 2003 Handbook: The Complete Syntax, Features and Procedures", J.C. Adams, W.S. Brainerd, R.A. Hendrickson, R.E. Maine, J.T. Martin, B.T. Smith. Springer

Fortran à l'ENSEEIHT

- 1ère année : « Calcul Scientifique » : Fortran utilisé pour de l'algèbre linéaire numérique.
- 2ème année : « Algèbre Linéaire Creuse », parcours HPC et Big Data
- 3ième année : « Calcul Répartie et Grid Computing » dans les parcours HPC et Big Data, Systèmes Logiciels et Infrastructure du Big Data pour l'IOT ainsi que le master recherche

Alphabet, identificateurs

Ident ::= lettre suivie d'un nombre quelconques de caractères alpha-numériques

Minuscule = Majuscule (ex : titi = TiTi)

Mots réservés, commentaires

Mot-clé ::= automatic, block data, byte, character, common, complex, data, dimension, double precision, equivalence, external, implicit, integer, intrinsic, logical, map, namelist, parameter, real, record, structure, union, program, function, subroutine, call, return, backspace, close, endfile, inquire, locking, open, read, rewind, write, case, case default, else, end if, end select, if, select case, continue, cycle, do, do while, end do, exit, allocate, deallocate

Commentaire ::= ! ceci est un commentaire

Types, variables, constantes

Langage ADA

Langage Fortran

Les types:

integer boolean character float

Les déclarations :

```
x : integer ;
z : float ;
u, t : integer ;
pi : constant float := 3.1416 ;
```

Les types:

integer
logical (booléen)
character
real (simple précision ieee)

double precision complex (2 réels simple précision)

Les déclarations :

integer x (F66/77)

double precision :: z (F90) integer :: u, t (F90)

real, parameter :: pi = 3.1416 (F90)

Littéraux

- Constante entière (standard 32 bits) -2147483648 ≤ n ≤ +2147483647
- Constante réelle simple précision (32 bits IEEE) :

$$1.18\ 10^{-38} \le |x| \le 1.79\ 10^{+38}$$

- Sous format virgule fixe : 3.1416
- Sous format virgule flottante : 0.31416E+1
- Constante réelle double précision (64 bits IEEE) :

$$2.23\ 10^{-308} \le |x| \le 1.79\ 10^{+308}$$

- Sous format flottant uniquement : 0.31416D+1
- Constante texte
 - Constante caractère : 'Y'
 - Constante chaîne de car. : 'BIEN L''BONJOUR' ou "Bonjour"
- Constante logique : .true. .false.

Tableau statique

- Seules structures F66 / 77 : dimensions connues à la compilation (au plus 7)
- Rangement : tableau une dimension avec indices variant de gauche à droite
 - matrice rangée colonne par colonne
 - accès plus rapide par colonne (incrémentation adresse) que par ligne (calcul d'adresse avec multiplication impliquant le nb. de lignes)
- Déclaration

```
real A(20),B(100,100),C(100,100) (F66/77)
real, dimension(20) :: A (F 90)
real, dimension(100,100) :: B,C
```

1^{er} indice = 1, ou avec contraintes

Tableau Dynamique

En F90, variables tabulées dynamiques :

- déclaration (nb. de dimensions mais sans leur valeur)
 real, allocatable, dimension(:,:) :: A
- instruction de réservation mémoire (au cours de l'exécution)
 allocate(A(n,m))
 - OU syntaxe étendue : **allocate(A(n,m), stat = retour) retour** type entier : **retour =** 0 allocation réussie, **retour >** 0 échec
- Après utilisation, mémoire libérée par instruction : deallocate(A)

Manipulation de tableau

 indice de 1 à la taille du tableau, sauf si spécifié au moment de la déclaration :

integer, dimension(-5:10):: E

- pas de vérification que l'indice est dans le bon intervalle (indication à la compilation avec certains compilateurs quand c'est possible)
- accès à un élément :

Pointeurs

Une variable de type pointeur (F90 uniquement) se déclare comme associé à un type d'objet :

integer, pointer :: p

integer, target :: n

p un pointeur sur variables entières, n entier susceptible d'être « pointé » (attribut target)

Enregistrements

Déclaration type non standard en F90 uniquement

déclaration du type : type point : 2 champs de type réel

type point

real :: abscisse

real:: ordonnee

end type point

déclaration de variables : x, y, z : 3 variables de type point

```
type (point) :: x, y, z
```

accès aux champs

x%abscisse pour accès au champ abscisse de x y%ordonnee pour accès au champ ordonnee de y

Les Expressions

Opérateurs Arithmétiques

- Par priorité décroissante :
 - (1) ** puissance
 - (2) * et /
 - (3) + et -
- minimum de parenthèsage :

$$ax^2 + bx + c \rightarrow a^*x^{**}2 + b^*x + c$$

• Expression mixte (avec ≠ types):

type résultat : → type le plus complexe : (réel + entier) → réel

- Conversion automatique source d'erreurs :
 - → emploi de fonctions intrinsèques de conversion

Expressions

- Opérateurs Arithmétiques : application
 - aux objets élémentaires,
 - aux variables tabulées prises dans leur globalité :

```
real, dimension(2,2) :: a, b, e e = a + b
```

et aux sections conformes de variables tabulées :

```
real, dimension(2,2) :: a
real, dimension(4,4) :: c, d
a = c(1:2, 1:2) + d(1:3:2, 1:3:2)
```

- Section (d'une matrice d): d(i₁:i₂:i₃, j₁:j₂:j₃) ≡ lignes de i₁ à i₂ avec pas i₃ (optionnel), colonnes de j₁ à j₂ avec pas j₃ (optionnel)
- <u>Sections conformes</u>: même nb. de dim., même nb. d'éléments par dim a(1,1)=c(1,1)+d(1,1); a(1,2)=c(1,2)+d(1,3);
 a(2,1)= c(2,1)+d(3,1); a(2,2) = c(2,2) + d(3,3)

Expressions

 Opérateurs relationnels : applicables aux objets élémentaires, variables tabulées, sections conformes de variables tabulées

Syntaxe F77	Syntaxe F90	Syntaxe F77	Syntaxe F90
a.gt.b	a>b	a.lt.b	a <b< td=""></b<>
a.ge.b	a>=b	a.le.b	a<=b
a.eq.b	a==b	a.ne.b	a/=b

- Opérateurs logiques : sur booléens élémentaires, tableaux de booléens, sections conformes de tableaux de booléens
 - par priorité décroissante :
 - (1) .not. (non logique)
 - (2) .and. (et logique)
 - (3) **.or.** (ou logique)
 - (4) **.eqv.** (équivalence), **.neqv.** (non équiv.)

Instruction : séquence

- F66/77: 1 instruction par ligne
 - si 2 (ou +) lignes nécessaires : ligne suite formaté
- F90: plusieurs instructions / ligne → séparateur;
 - si 2 (ou +) lignes nécessaires, caractère & comme symbole annonçant la ligne suivante

Langage ADA

L'affectation :=

Langage Fortran (F90)

L'affectation = conversion automatique peu fiable

Instruction: Si Alors Sinon

Langage ADA

```
-- x a une valeur

if (x >= 0) then
    y := x;

else
    y := -x;

end if;
-- y = |x|
```

Langage Fortran

```
! x a une valeur
if (x >= 0) then
    y = x
else
    y = -x
end if
! y = |x|
```

Autres formes du Si Alors Sinon

- test logique simple
 if (<exp logique>) <inst simple>
- forme simplifiée sans sinon
 if (<exp logique>) then
 <bloc d'inst>

end if

elseif existe

Instruction: Cas de

Langage ADA

Langage FORTRAN

case x is

```
when 0 => ...
when 1|4 => ...
when 5, 7 => ...
when others => ...
```

```
end case;
```

```
select case (x)
case (0)
...
case (1:4)
...
case (5,7)
...
case default
...
end select
```

Boucle Bornée Pour

end do [nom]

<pas> : incrément (1 si omis, possibilité de pas négatif)

Langage ADA

```
- - précondition
- - N et x ont une valeur
Res := 1;
for i in 1 .. N loop
Res := Res * x;
end loop;
- - Res contient x ** n
```

Langage Fortran

```
! précondition :
! N et x ont une valeur

Res = 1

b1 : do i = 1, N
    Res = Res * x
end do b1
! Res contient x ** n
```

Boucle non bornée Tant Que

Langage ADA

```
x := 1;
while (x< n) loop

x := x * 2;
end loop;

-- x vaut la première puissance
-- de 2 supérieure à N</pre>
```

Langage Fortran

```
x = 1
do while (x < n)
x = x * 2
end do
! x vaut la première puissance
! de 2 supérieure à N</pre>
```

Entrées/Sorties simples

En sortie: write(*,*) < liste de variables>

En entrée : read(*,*) < liste de variables>

(*,*): (périphériques par défaut (écran | clavier), format par défaut)

En sortie : print *, < liste de variables>

En entrée : read *, < liste de variables >

Langage ADA

compliqué!

Langage Fortran

```
read(*,*) v
read(*,*) v1, v2, ..., vn
```

write(*,*) 'indice = ', i, 'valeur =', v print *, 'indice = ', i, 'valeur =', v

Forme d'un programme

Langage algo

Langage Fortran

procedure SommeCarres is

déclarations de constantes déclarations de types déclarations de variables

begin

instructions

end SommeCarres ;

program SommeCarres

! déclarations de constantes

! déclarations de types

! déclarations de variables

! instructions

end program SommeCarres

Exemple de Programme : calcul du nombre d'or Exercice : le tri bulle

Procédure

définition
 subroutine <nom proc>(<p1>,...,<pn>)
 <déclaration type des paramètres>
 <décl. constantes, types, variables locales>
 liste instructions>
 end subroutine <nom proc>

- appel call <nom proc>(<vp1>,...,<vpn>)
- mode des paramètre au niveau de la déclaration des types des paramètres avec le mot clé intent : in, inout, out
- dernière instruction exécutée : celle qui précède le end subroutine

Un exemple de procédure

```
! procédure init tab
! initialise un vecteur de réels
! t : le vecteur (résultat)
! n : sa dimension (donnée)
! post-condition : t(1:n) initialisés
subroutine init tab(t, n)
 implicit none
 integer, intent(in) :: n
 real, intent(out), dimension(n) :: t
 integer :: i
 print *, "rentrez ", n, "réels"
 do i = 1. n
  print *, "indice ", i
  read(*,*) t(i)
 end do
 ! les dim valeurs sont initialisées
 return
end subroutine init_tab
```

```
! programme de test
program test
 implicit none
 integer :: n
 parameter(n=10)
 real, dimension(n) :: v, w
 integer :: taille
 ! choix de la taille réelle
 ! 0 < taille <= n
 ! initialisation des 2 vecteurs
 call init tab(v, taille)
 call init tab(w, taille)
 affichage des 2 vecteurs
! (taille réelle)
 print *, "v = ", v(1:taille)
 print *, "w = ", w(1:taille)
end program test
```

Exercice : transformer le tri bulle en procédure

Fonctions

définition

```
<type résultat> function <nom fonction>(<p1>,...,<pn>)
  <décl. type paramètres>
  <décl. constantes, types, variables locales>
  liste instructions>
```

end function < nom fonction>

- résultat :
 - l'identificateur <nom fonction> permet de manipuler le résultat comme une variable
 - liste instructions> comporte au moins une affectation de <nom fonction>
- appel
 - dans l'appelant, le type de la fonction doit être défini dans la partie déclarative
 - syntaxe de l'appel : <nom fonction>(<vp1>,...,<vpn>)

Un exemple de fonction

```
! fonction ps
! calcule le produit scalaire de 2 vecteurs
! v1, v2 : les 2 vecteurs (données)
! n : leur dimension commune (donnée)
! pré-conditions :
   v1(1:n) et v2(1:n) initialisés
real function ps (v1, v2, n)
 implicit none
 integer, intent(in) :: n
 real, intent(in), dimension(n) :: v1, v2
 integer :: i
 ! initialisation
 ps = 0.0
 ! calcul de v1.v2
 do i=1,n
  ps = ps + v1(i) * v2(i)
 end do
 ! ps contient v1(1:n).v2(1:n)
 return
end function ps
```

```
! test de la fonction
program test
 implicit none
 ! variable du programme
 integer :: n
 parameter(n=10)
 real, dimension(n) :: v, w
 integer :: taille
 ! fonction(s) utilisée(s)
 real :: ps
 ! choix de la taille réelle
 ! initialisation des 2 vecteurs
 ! affichage du produit scalaire
 print *, ps(v, w, taille)
end program test
```

Exercices:

 schéma de Hörner pour calculer la valeur d'un polynôme en un point (avec allocation dynamique)

Importance de la dimension principale d'un tableau :

- Exemple simple : initialisation d'une matrice
- Factorisation de Gauss

Fin TD1

Pointeurs

Mise en relation avec variable statique déjà en mémoire =>:

```
integer, target :: n
integer, pointer :: p
n = 5 ; p => n ! p pointe sur l'emplacement contenant n (= 5)
```

Création dynamique de la variable pointée : allocate

```
integer, pointer :: p
allocate(p, stat=retour)
réservation d'une zone pour un entier,
p contient l'adresse, retour le diagnostic de l'allocation
```

- Fonction associated(p) retourne .true. si p associé .false. sinon
- Instruction nullify(p):
 - affecte 0 au pointeur p (p n'est plus associé)
 - toute tentative d'accès à la zone pointée par p => échec du programme
- Libération de la zone créé dynamiquement : deallocate
 deallocate(p) ! zone libérée et p n'est plus associé

Pointeurs

Affectation = modification de la valeur de l'objet pointé

```
integer, target :: n,m
integer, pointer :: p, q
n = 5; m = 98; p => n; q => m
m = m + p ! m prend la valeur 103
p = 45 ! comme p pointe sur n, n prend la valeur 45
p = q ! l'objet pointé par p reçoit la valeur de l'objet pointé par q (n reçoit 103)
```

Affectation =>

```
integer, target :: n, m
integer, pointer :: p, q
n = 5; m = 98
p => n     ! p pointe sur n
q => m    ! q pointe sur m
```

p => q ! p et q pointent sur m

Pointeurs

- Si **p** et **q** pointeurs, il ne faut pas confondre :
 - p => q : p et q pointent sur le même objet (celui initialement pointé par q)
 - p = q : l'objet pointé par p reçoit la valeur de l'objet pointé par q
- pointeur associé à une structure (enregistrement) :

```
type point
  real :: abscisse
  real :: ordonnee
end type point
type (point), pointer :: p
allocate(p, stat=retour) ! crée un objet de type point, pointé par p
p%abscisse = 3.0 ! pour accéder à un des champs de la structure
```

Autres instructions FORTRAN

que vous pourrez rencontrer dans des codes existants

Arrêt d'un programme stop

Branchement inconditionnel goto <étiquette>
 (F77 pour écrire des boucles non bornées)

Suite en séquence continue

sortie de boucle exit

Exemple de **goto** pour traiter les cas d'erreur

```
program euclid
 implicit none
 integer :: a, b ! 2 entiers dont on cherche le pgcd
 integer :: erreur ! gestion des erreurs de saisie
 integer :: pacd ! fonction pacd
 print *, 'A?'
 read(*,*) a
 if (a \le 0) then
   erreur = 1
   qoto 100
 end if
 print *, 'B?'
 read(*,*) b
 if (b \le 0) then
   erreur = 2
   qoto 100
 end if
 print *, 'le pgcd de ', a, ' et', b, ' est', pgcd(a, b), '.'
 stop
```

```
! traitement des erreurs
100 continue
    select case (erreur)
     case(1)
       print *, 'a doit être strictement positif.'
     case(2)
       print *, 'b doit être strictement positif.'
     case default
       print *, 'on ne devrait jamais afficher cela'
    end select
   end program euclid
```

Modules

- rôle : partage de données, de types, de traitements entre plusieurs unités de compilation
- définition

```
module <nom module>
<partie déclarative>
```

contains

<suite de procédures et/ou fonctions>

end module < nom module>

 utilisation : l'unité qui fait référence à un module comporte en en-tête la directive :

use <nom module>

Un module associé à un objet

- Le module mat_tridiag comprend :
 - la définition du type tridiag (matrice tridiagonale)
 - tous les traitements manipulant ce type d'objet (par ex., somme et soustraction de 2 matrices)

```
module mat_tridiag
 type tridiag
  real,dimension(10):: diag,diagsup,diaginf
 end type tridiag
contains
     subroutine somme (a, b, c)
      type (tridiag), intent(in) :: a, b
      type (tridiag), intent(out):: c
      c%diag = a%diag + b%diag
      c%diagsup = a%diagsup + b%diagsup
      c%diaginf = a%diaginf + b%diaginf
     end subroutine somme
     subroutine soustraction (a, b, c)
      type (tridiag), intent(in) :: a, b
      type (tridiag), intent(out):: c
      c%diag = a%diag - b%diag
      c%diagsup = a%diagsup - b%diagsup
      c%diaginf = a%diaginf - b%diaginf
     end subroutine soustraction
end module mat tridiag
```

```
program validation
 use mat tridiag
 type (tridiag) :: m1, m2, m3
! Initialisation de m1 et de m2
 call somme(m1, m2, m3)
end program validation
```

Un module définissant des sousprogrammes génériques

- Ici module mat_tridiag comprend juste la définition du type tridiag
- addition_matrice :
 - comprend les procédures effectuant la somme de 2 matrices pour différentes topologies
 - ces procédures sont référées sous le même nom somme par une interface

```
program validation
use mat_tridiag
use addition_matrice
type (tridiag) :: m1, m2, m3
real, dimension(10,10) :: n1, n2, n3
! on suppose ces 6 matrices déjà initialisées
call somme(m1, m2, m3)
call somme(n1, n2, n3)
end program validation

module mat_tridiag
type tridiag
real,dimension(10):: diag,diagsup,diaginf
end type tridiag
end module mat_tridiag
```

```
module addition matrice
! ce module doit connaître le type tridiagonale
 use mat tridiag
! « interface » qui assure la généricité
 interface somme
  module procedure s pleine, s tridiag
 end interface somme
contains
 subroutine s tridiag (a, b, c)
  ! code : voir transpa précédent
 end subroutine s tridiag
 subroutine s pleine (a, b, c)
  ! somme de 2 matrices pleines : c = a + b
  real, dimension(10,10), intent(in) ::a, b
  real, dimension(10,10), intent(out):: c
   c = a + b
 end subroutine s pleine
end module addition matrice
```

Format Fortran 66 et 77

Unité de compilation (programme, procédure, fonction) ≡ lignes formatées de 72 caractères à 3 champs :

• Col 1 - 5 : zone étiquette

Etiquette = nombre d'au plus 5 chiffres qui identifie l'instruction qui suit sur la même ligne. Généralement utilisée avec une instruction de saut inconditionnel :

goto <étiquette>

L'exécution se poursuit par l'instruction marquée par l'étiquette

Col 6 : zone suite

Si caractère autre que ' ' et '0' ≡ ligne suite (utilisée lorsqu'une instruction ne peut être codée sur une seule ligne)

Col 7 - 72 : zone texte

Déclarations de données, instructions (une seule instruction par ligne)

Fonctions Intrinsèques

- F66 / 77 : nombreuses fonctions intrinsèques (incluse dans la norme du langage) essentiellement arithmétiques
- F90 : ajout d'opérateurs plus orientés vers manipulation de données
- Exemples de fonctions intrinsèques arithmétiques (F66 / 77)
 - En simple précision (opérande et résultat) : cos(x) (cosinus), exp(x) (exponentielle), abs(x) (valeur absolue), ...
 - En double précision, en général ajout de 'D' devant le nom de la fonction : DCOS, DEXP, DABS, ...
- Exemples de fonctions intrinsèques de conversion (F66 / 77)
 - DFLOAT(2.4) convertit 2.4, initialement simple précision, en double précision
 - INT(2.4) prend la partie entière de 2.4 (renvoie donc la valeur entière 2)

Fonctions Intrinsèques

- F90, fonctions arithmétiques ou de conversion peuvent s'appliquer à des opérandes type section de tableau : exp(a(4 :9)) génère un tableau de 6 éléments (exponentielle des coefficients de a de l'indice 4 à 9)
- Exemples de nouvelles fonctions intrinsèques incluses dans F90
 - epsilon(x): précision machine associée à une variable du même type que x
 - ishift(i,dec) décale l'entier i de dec bits vers la gauche (nouveaux bits =0)
 - dot_product(a,b): produit scalaire de 2 sections de vecteur conformes a et b
 - matmul(a,b): produit matriciel de 2 sections de matrice a et b
 - maxval(a): plus grande valeur de la section a
 - sum(a): somme des éléments de la section a
 - size(a,dim): nombre d'éléments de la section a suivant la dimension dim

Fonctions Intrinsèques (bonus)

- pack(a,masque) (compression)
 - a section de vecteur,
 - masque section d'un vecteur de booléens (même nb d'éléments que a)
 - Résultat : vecteur composé des éléments de a pour lesquels le booléen associé dans masque est vrai
 - exemple: **a**: [1 2 3 4 5]

masque: [.false. .false. .true. .false. .true.]

résultat : [3 5]

- merge(a, b, masque) (fusion)
 - a et b sections conformes composées d'éléments de même type, masque section d'un vecteur de booléens (même nb d'éléments que a ou b)
 - Résultat : section conforme à a ou b construite à partir d'éléments de a pour les indices où masque est vrai, de b pour les indices où masque est faux
 - exemple : merge (a, b, a>b)

a: [1 2 3 4 5 6 7 8 9]

b: [0 0 1 8 1 9 8 2 1]

résultat : [1 2 3 8 5 9 8 8 9]

Entrées/Sorties non standard

- de manière générale
 - sortie : write(<unité>,<format>)liste variables>
 - entrée : read(<unité>,<format>)liste variables>

avec

 <unité> : numéro logique associé à un périphérique physique (clavier (5), écran (6), imprimante, ...) ou logique (fichier).

Par défaut, caractère '*' (en entrée : clavier, sortie : écran)

 <format> : étiquette référençant un format sous lequel s'effectue l'E/S

```
write(6,100)i,A(i)
```

100 **format**('INDICE = ',I4,' VAL = ',E12.6)

- ! Variable entière i sur 4 caractères
- ! Variable réelle A(i) sur 12 caractères dont 6 décimales
- à l'écran (6) : INDICE = ##34 VAL = -.112425E+23

Entrées/Sorties non standard

Principaux formats

```
In entierEw.d réel simple précisionDw.d réel double précisionFw.d réel virgula fixe
```

Il existe des caractères spéciaux pour affiner un format : 'I' saut à la ligne suivante, 'nX' saut de n caractères sur une même ligne

• Entrées/Sorties sur fichier avec un exemple : construction et mise à jour d'un fichier séquentiel de nombres réels avec formatage par défaut :

```
open(10, file='vecteur.txt')
do i = 1, 100
    write(10,*) a(i)
end do
close(10)
```