

C2115

Praktický úvod do superpočítání



VI. lekce

Petr Kulhánek, Tomáš Bouchal

kulhanek@chemi.muni.cz

Národní centrum pro výzkum biomolekul, Přírodovědecká fakulta,
Masarykova univerzita, Kotlářská 2, CZ-61137 Brno

➤ Úvod

historie jazyka Fortran, Hello world!, překladače, překládáme, volby překladače

➤ Syntaxe

program, rozdíly oproti F77, proměnné, řídicí struktury, I/O, pole, funkce, procedury

➤ Cvičení

jednoduché programy, výpočet určitého integrálu

➤ Literatura

Úvod

Historie

Fortran (zkratka slov FORmula a TRANslator) je v informatice imperativní programovací jazyk, který v 50. letech 20. století navrhla firma IBM pro **vědecké výpočty a numerické aplikace**.

Zdroj: wikipedia

Verze jazyka:

Fortran 77

Fortran 90

Fortran 95

Fortran 2003

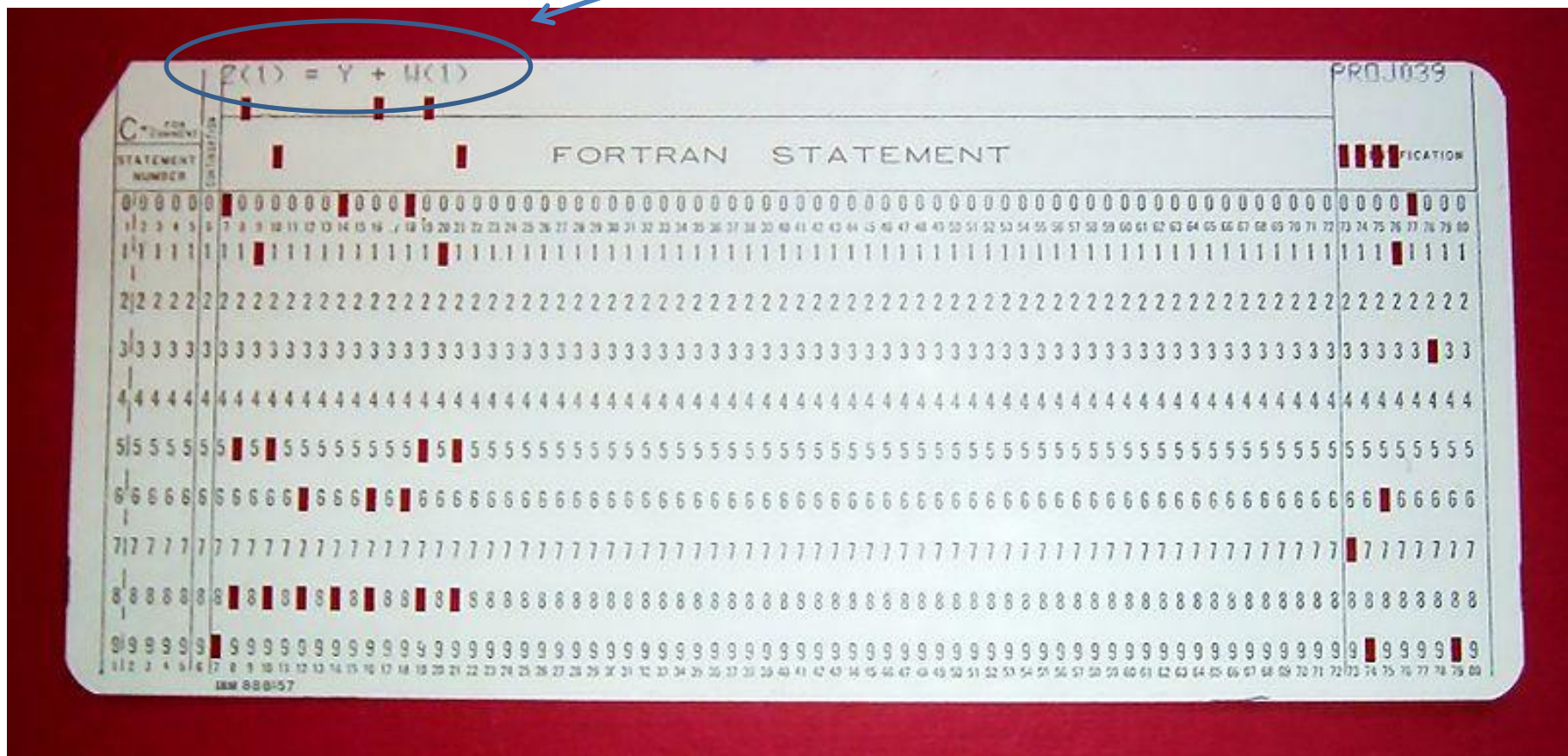
Fortran 2008

V tomto jazyce nebo pro tento jazyk je napsána **celá řada knihoven**. Kompilátory jsou schopny vytvářet **velmi optimalizovaný kód**.

Standardní matematické knihovny: BLAS, LAPACK a další na <http://www.netlib.org>

Historie

jeden zdrojový řádek



Zdroj: wikipedia

Hello world!

hello.f90

```
program Hello  
  
write(*,*) 'Hello world!'  
  
end program
```

Kompilace:

```
$ gfortran hello.f90 -o hello
```

Spuštění:

```
$ ./hello
```

Kompilace do assembleru:

```
$ gfortran hello.f90 -S  hello.s
```

Cvičení 1

1. Vytvořte soubor hello.f90. Zkompilujte jej překladačem gfortran. Ověřte funkci vytvořeného programu.

Překladače

GNU GCC

Překladač: **gfortran**

Typ licence: GNU GPL (volně dostupný)

URL: <http://gcc.gnu.org/wiki/GFortran>

Intel® Composer XE

Překladač: **ifort**

Typ licence: a) komerční (dostupný v MetaCentru, meta moduly: intelcdk)
b) zdarma k osobnímu použití proti registraci (linux)

URL: <http://software.intel.com/en-us/articles/intel-composer-xe/>

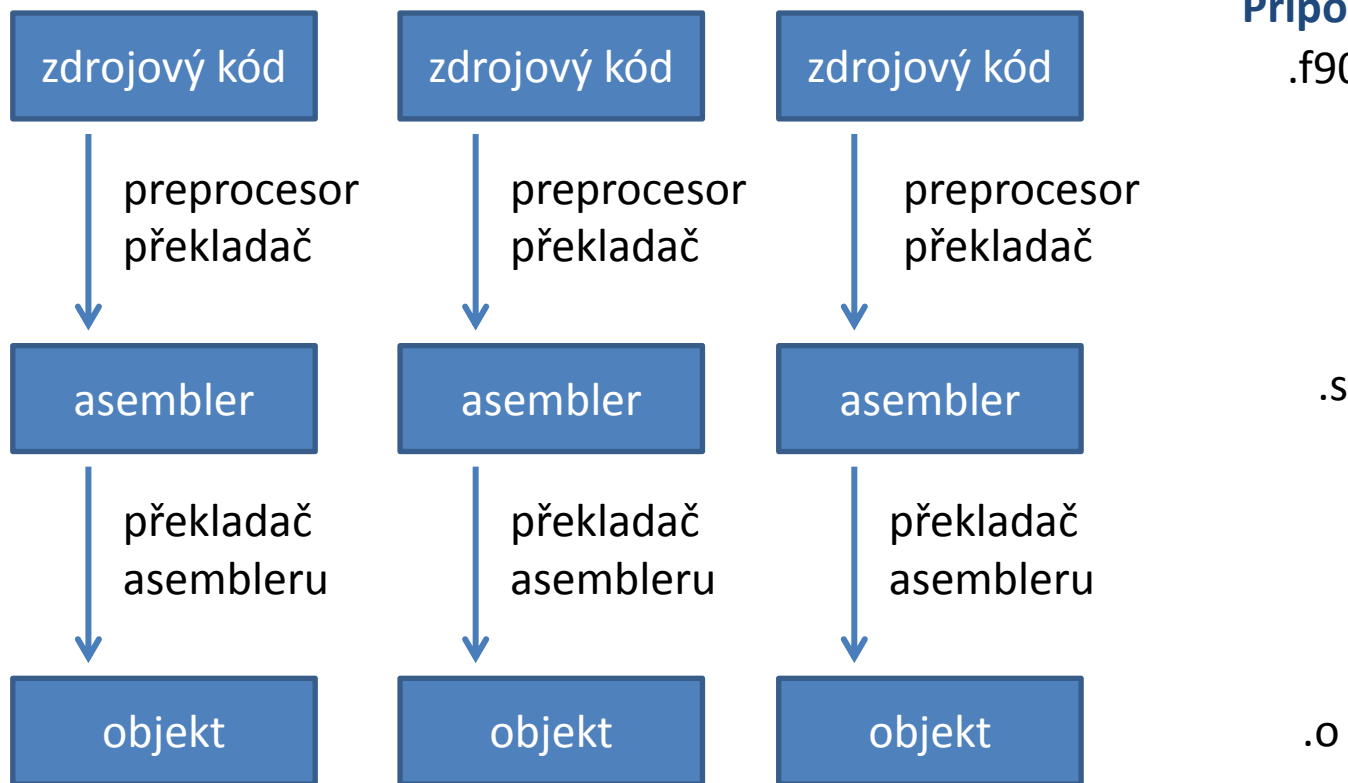
The Portland Group

Překladač: **pgf90, pgf77**

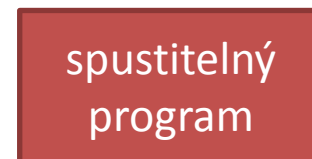
Typ licence: komerční (dostupný v MetaCentru, meta moduly: pgicdk)

URL: <http://www.pgroup.com/>

Překládáme ...



Přípona: .so, .a



Užitečné volby překladače

Volby překladače:

- o název výsledného programu
- c přeloží zdrojový kód do objektového kódu
- S přeloží zdrojový kód do assembleru
- Ox úroveň optimalizace výsledného programu, kde x=0 (žádná), 1, 2, 3 (nejvyšší)
- g vloží dodatečné informace a kód pro ladění běhu programu (zpomaluje běh programu)
- lname připojení (linkování) knihovny *name* k výslednému programu
- Lcesta cesta ke knihovnám, které nejsou ve standardních cestách

Volby překladače (ifort):

- trace all kontroluje meze polí, použití neinicializovaných proměnných, atd.

Programy napsané ve Fortranu

Gaussian

<http://www.gaussian.com/>

Komerční program určený pro kvantově chemické výpočty.

AMBER

<http://www.ambermd.org/>

Akademický software určený k molekulárním simulacím za použití molekulové mechaniky a hybridních QM/MM metod. Ve Fortranu jsou napsány programy **sander** a **pmemd**.

CPMD

<http://www.cpmd.org/>

Akademický software určený pro molekulární simulace za použití metod funkcionálu hustoty.

Další software: Turbomole, DALTON, CP2K, ABINIT a další ...

http://en.wikipedia.org/wiki/List_of_quantum_chemistry_and_solid_state_physics_software

Syntaxe

F77 dialekt

- fixní formát
- sloupec 1, pokud začíná písmenem C jedná se o komentář
- sloupec 1-6 je vyhražen pro návěští (pro I/O formáty, cykly)
- sloupec 6, pokud obsahuje znak * jedná se o pokračování předchozího řádku
- sloupec 7-72 obsahuje řádek programu

```
12345678901234567890123456789001234567891234567890123456789012345678900123456789
C toto je komentar
  implicit none
  real      f
  integer   a, b
C -----
C secti cisla a a b
  a = a + b
C dlouhy radek
  f = a*10.0 + 11.2*b
  *+ (a+b)**2
100  format(I10)
     write(*,100) a
```

Zdrojové soubory

- Fortran 90 a výše používá volnou syntaxi (příkazy již není nutné zarovnávat do sloupců jako tomu bylo u Fortran 77).
- Povolené zakončení názvů zdrojových souborů: .fpp, **.f90**, .f95, .f03, .f08
- Fortran není case-sensitive (tj. nerozlišuje se velikost písma)
- K odsazování není vhodné používat tabulátor.
- Komentáře mohou začínat kdekoliv, k uvození komentáře se používá vykřičník !.
- Maximální délka řádku je omezena (typicky 132 znaků). Pro zápis delších výrazů se používá znak ampersand &.

```
implicit none
real          :: f
integer       :: A, B
! -----
! secti cislo A a B
A = A + B
f = A*10.0 + 11.2*B &
    + (A+B)**2      ! dlouhy radek
```

Preprocesor

- Zdrojový soubor může obsahovat direktivy CPP preprocesoru (používaného jazyky C a C++)

#include <soubor>

#include "soubor"

#ifdef

#ifndef

#if

#else

#endif

#define

a další ...

- Zpracování souboru preprocesorem lze vynutit volbou kompilátoru, popř. změnou zakončení souboru na: .fpp, .FPP, F90, .F95, .F03, .F08

<http://gcc.gnu.org/onlinedocs/gfortran/Preprocessing-Options.html>

Sekce Program

```
program Hello  
! definice promennych  
  
! vlastni program  
write(*,*) ' Hello world! '  
  
! Konec programu  
end program
```



směr vykonávání programu

Program může být předčasně ukončen příkazem **stop**.

Proměnné

```
implicit none
```

```
logical      :: f
```

```
integer     :: a, g
```

```
real        :: c, d
```

```
double precision :: e
```

```
character(len=30) :: s
```

vypne automatickou deklaraci proměnných

reálné číslo v jednoduché přesnosti

reálné číslo v dvojnásobné přesnosti

řetězec (text)

maximální délka řetězce ve znacích

Alternativní zápisy:

```
real(4)      :: c, d
```

```
real(8)     :: e
```

Proměnné definujeme na začátku programu, funkce nebo procedury.

Proměnné

```
implicit none
logical          :: f
! -----
f = .TRUE.
write(*,*) f
f = .FALSE.
write(*,*) f
```

```
implicit none
real            :: a,b
! -----
a = 1.0
b = 2.0
b = a + b
write(*,*) a, b
```

```
implicit none
character(len=30) :: s
! -----
s = 'pokusny text'
write(*,*) trim(f)
```

Proměnné vždy inicializujeme
(tj. přiřadíme jim výchozí hodnotu).

funkce **trim** ořízne řetězec zprava (odstraní prázdné znaky)

Proměnné

```
implicit none
real      :: a = 1.0
real      :: b
! -----
b = 2.0
b = a + b
write(*,*) a, b
```

NIKDY neinicializujeme
proměnnou během její deklarace.

povolená konstrukce, která se překládá jako

```
real, save      :: a = 1.0
```

obdoba klíčového slova "**static**" z jazyka C a C++

Matematické operace

Operátory:

+	sčítání
-	odčítání
*	násobení
/	dělení
**	umocnění

Bez přímé podpory:

MOD(n,m) modulo ($n \% m$ z jazyka C)

```
real          :: a, b, c
```

```
! -----
```

```
a = 1.0
```

```
b = 2.0
```

```
c = 4.0
```

```
b = a + b
```

```
b = a * b / c
```

```
c = a ** 2 + b ** 2
```

Cykly I

```
do promenna = pocatecni_hodnota, koncova_hodnota [, krok]
    prikaz1
    prikaz2
    ...
end do
```

Proměnná může být pouze **celé číslo (integer)**.

```
integer          :: i
!-----
do i = 1, 10
    write(*,*) i
end do
```

Vypíše čísla: 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10

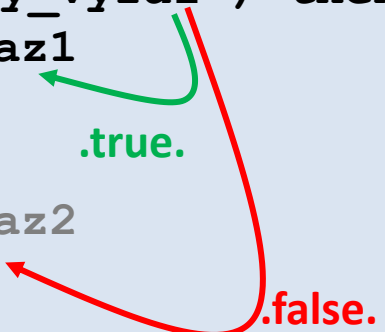
```
integer          :: i
!-----
do i = 1, 10, 2
    write(*,*) i
end do
```

Vypíše čísla: 1, 3, 5, 7, 9

Běh cyklů může být řízen příkazy **cycle** (obdoba continue z jazyka C) a **exit** (obdoba break).

Podmínky

```
if ( logicky_vyraz ) then
    prikaz1
    ...
else
    prikaz2
    ...
end if
```



```
integer          :: i = 7
!-----
if( i .gt. 5 ) then
    write(*,*) 'i je vetsi nez 5'
end if
```

Logické operátory:

.and. logické ano
.or. logické nebo
.not. negace

Porovnávací operátory (čísla):

.eq. rovná se
.ne. nerovná se
.lt. menší než
.le. menší než nebo rovno
.gt. větší než
.ge. větší než nebo rovno

Porovnávací operátory (logical):

.eqv. ekvivalence
.neqv. neekvivalence

Cykly II

```
do while ( logicky_vyraz )
    prikaz1
    prikaz2
    ...
end do
```

cyklus probíhá dokud
logicky_vyraz vraci **.true.**

```
double precision      :: a
!-----
a = 0.0
do while ( a .le. 5 )
    write(*,*) a
    a = a + 0.1
end do
```

Vypíše čísla od 0 do 5 s krokem 0.1

Běh cyklů může být řízen příkazy **cycle** (obdoba continue z jazyka C) a **exit** (obdoba break).

Funkce a procedury

Funkce je část programu, kterou je možné **opakovaně** volat z různých míst kódu. **Procedura** je podobná funkci, ale na rozdíl od funkce **nevrací hodnotu**. Vhodným použitím funkcí a procedur se zvyšuje čitelnost programu a snižuje se duplicitní kód.

```
program Hello
! definice promenných
...
! vlastní program
! volání funkce nebo procedury
...
! konec programu
...
contains

! definice funkce nebo procedur

end program
```

Funkce a procedury lze volat jak z vlastního programu, tak i samotných funkcí a procedur.

Argumenty funkcí a procedur se **předávají odkazem**.

Definice funkce

```
function moje_funkce(a,b,c) result(x)
implicit none
double precision :: a, b, c ! argumenty (parametry) funkce
double precision :: x      ! vysledek funkce
!-----
integer          :: j      ! lokalni promenna
!-----
! vlastni telo funkce
x = a + b + c
end function moje_funkce
```

Alternativní zápis:

```
double precision function moje_funkce(a,b,c)
...
moje_funkce = a + b + c
end function moje_funkce
```

Definice procedury

```
subroutine moje_procedura(a,b,c)
implicit none
double precision :: a, b, c ! argumenty (parametry) procedury
!-----
integer          :: j      ! lokalni promenna
!-----
! vlastni telo procedury
a = a + b + c
end subroutine moje_procedura
```

Přístupové vlastnosti argumentů funkcí a procedur lze měnit pomocí klíčového slova **intent**. Defaultní přístupovou vlastností je **intent(inout)**.

double precision, intent(in)	:: a	! argument lze pouze číst
double precision, intent(out)	:: b	! do argumentu lze pouze zapisovat
double precision, intent(inout)	:: c	! s argumentem lze pracovat libovolně

Volání funkcí a procedur

Volání funkcí:

```
double precision :: a
double precision :: d
!-----
a = 5.0
d = moje_funkce_2(a)
write(*,*) d
```

```
double precision :: a
double precision :: d
!-----
a = 5.0
moje_funkce_2(a)
```

Volání procedur:

```
double precision :: a
double precision :: d
!-----
a = 5.0
d = 2.0
call moje_procedura_3(a,d)
```

Výsledek funkce se **musí použít**.

Předávání argumentů odkazem

```
double precision :: a  
double precision :: d
```

```
!-----
```

```
a = 5.0
```

```
d = 2.0
```

```
write(*,*) d
```

```
call moje_procedura_3(a,d)
```

```
write(*,*) d
```

2

?

```
subroutine moje_procedura_3(a,b)
```

```
implicit none
```

```
double precision :: a, b    ! argumenty (parametry)
```

```
!-----
```

```
! vlastní telo procedury
```

```
b = a + b
```

```
end subroutine moje_procedura_3
```

Předávání argumentů odkazem

```
double precision :: a  
double precision :: d
```

```
!-----
```

```
a = 5.0
```

```
d = 2.0
```

```
write(*,*) d
```

```
call moje_procedura_3(a,d)
```

```
write(*,*) d
```

2

7

V jazyce C by byla
hodnota rovna 2.

```
subroutine moje_procedura_3(a,b)
```

```
implicit none
```

```
double precision :: a, b    ! argumenty (parametry)
```

```
!-----
```

```
! vlastní telo procedury
```

```
b = a + b
```

```
end subroutine moje_procedura_3
```

Některé standardní funkce a procedury

Matematické funkce:

<code>sin(x)</code>	
<code>cos(x)</code>	
<code>sqrt(x)</code>	druhá odmocnina
<code>exp(x)</code>	
<code>log(x)</code>	přirozený logaritmus
<code>log10(x)</code>	dekadický logaritmus

Náhodné čísla:

<code>call random_seed()</code>	inicializuje generátor náhodných čísel
<code>call random_number(number)</code>	nastaví proměnou number na náhodné číslo v intervalu <0.0;1.0)

Měření času:

<code>call cpu_time(time)</code>	nastaví hodnotu proměnné time na čas běhu programu v sekundách (s mikrosekundovým rozlišením)
---	--

Pole

Statically defined arrays:

```
double precision :: a(10)
double precision :: d(14,13)
```

Jednorozměrné pole o velikosti 10 prvků.

Dvourozměrné pole o velikosti 14x13 prvků.
(14 řádků a 13 sloupců)

Dynamically declared arrays:

```
double precision, allocatable :: a(:)
double precision, allocatable :: d(:, :)
! -----
! alocace pameti pro pole
allocate(a(10000), d(200,300))
! pouziti pole
! uvolneni pameti
deallocate(a,d)
```

Jednorozměrné pole-

Dvourozměrné pole.

Rozměry polí mohou být
definovány i pomocí
celočíslných proměnných.

Práce s polem

```
double precision :: a(10)
double precision :: d(14,13)
integer          :: i
!-----

a(:) = 0.0  ! lze zapsat i jako a = 0.0
do i=1, 10
    write(*,*) i, ' - ty prvek pole je ', a(i)
end do

a = d(:,1) ! zapiše první sloupec z
           ! matice d do vektoru a

a(5) = 2.3456
d(1,5) = 1.23
write(*,*) d(1,5)
```

Prvky pole se indexují od jedné.*

Velikost pole lze zjistit funkcí **size**.

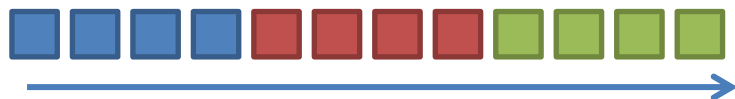
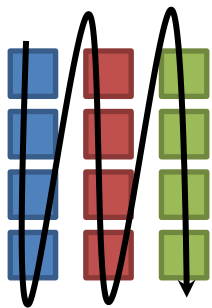
* rozsahy indexů pro jednotlivé rozměry lze však měnit

Pole – paměťový model

Fortran

$a(i,j)$

Prvky jsou za sebou ve sloupcích
(column based).

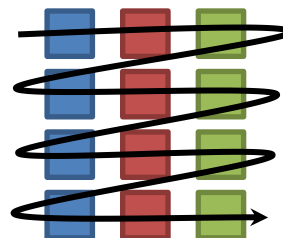


uspořádání prvků matice v paměti

C/C++

$A[i][j]$

Prvky jsou za sebou v řádcích
(row based).



Pokud voláme funkce z knihoven BLAS či LAPACK nutno počítat s rozdílným indexováním vícerozměrných polí.

Pole – paměťový model

Fortran

```
double precision :: d(10,10)
double precision :: sum
integer          :: i,j
!-----

sum = 0.0d0
do i=1, 10
  do j=1,10
    sum = sum + d(j,i)
  end do
end do
```

index se mění nejrychleji pro řádky

C/C++

```
double* d[];
double sum;
//-----

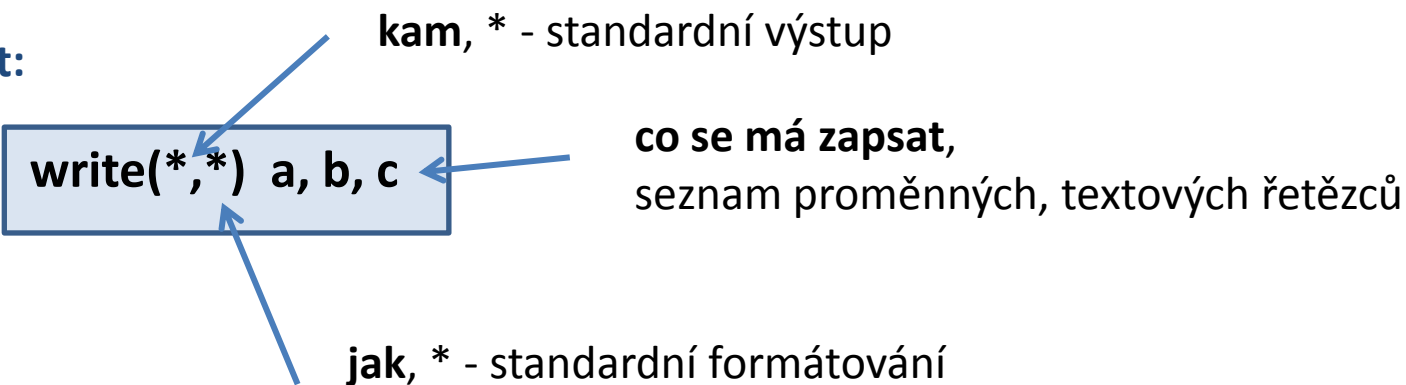
sum = 0.0;
for(int i=0; i < 10; i++){
  for(int j=0; j < 10; j++){
    sum += d[i][j];
  }
}
```

index se mění nejrychleji pro sloupce

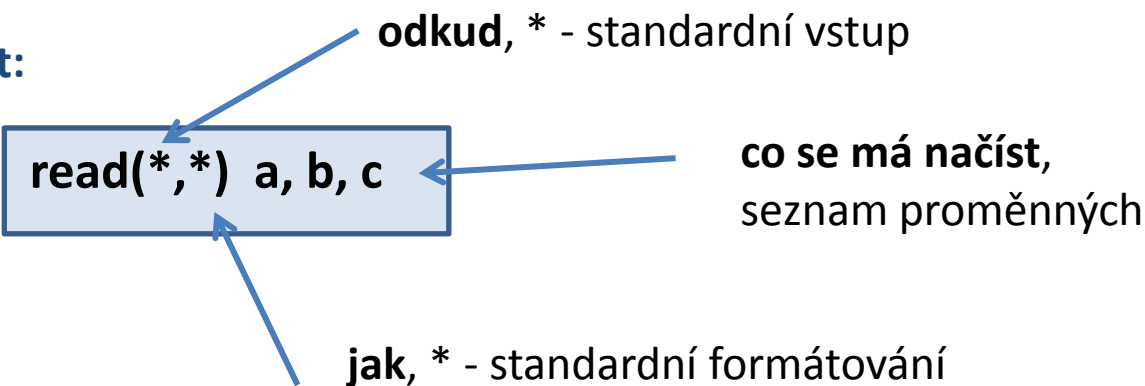
Poznámka: uvedené uspořádání nemá vliv na funkci, ale na rychlost vykonávání

I/O operace

Zápis dat:



Čtení dat:



Soubory se otevírají příkazem **open**. Zavírají příkazem **close**.

I/O operace - formátování

Formátovaný výstup:

```
write(*,10) a, b, c
```

```
10 format('Hodnota a=',F10.6,' hodnota b=',F10.6, ' hodnota c=',F10.6)
```

- formát může být uveden před i za příkazem write či read
- formátovací typy:
 - F – reálné číslo ve fixním formátu
 - E – reálné číslo ve vědeckém formátu
 - I – celé číslo
 - A - řetězec

Zápis dat bez vypsaní znaku konce řádku:

```
write(*,10,ADVANCE='NO') a, b, c
```

 musí být uveden formát

Další vlastnosti jazyka

1. podpora pointerů
2. struktury
3. objektově orientované programování

Domácí úkol

Nepovinné.

Cvičení 2

1. Napište program, který vypočte určitý integrál uvedený níže. K integraci použijte obdélníkovou metodu.

$$I = \int_0^1 \frac{4}{1+x^2} dx$$

2. Čemu se integrál rovná? Zjištění zdůvodněte.

Literatura

- <http://www.root.cz/serialy/fortran-pro-vsechny/>
- <http://gcc.gnu.org/onlinedocs/gfortran/>
- Dokumentace ke kompilátoru ifort
- Clerman, N. S. Modern Fortran: style and usage; Cambridge University Press: New York, 2012.