# C2115
# Praktický úvod do superpočítání

**VIII. lekce**

Petr Kulhánek

kulhanek@chemi.muni.cz

Národní centrum pro výzkum biomolekul, Přírodovědecká fakulta
Masarykova univerzita, Kamenice 5, CZ-62500 Brno

# Obsah

## FORTRAN

- **Úvod**
  historie jazyka Fortran, Hello world!, překladače, překládáme, volby překladače
- **Syntaxe**
  program, rozdíly oproti F77, proměnné, řídící 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

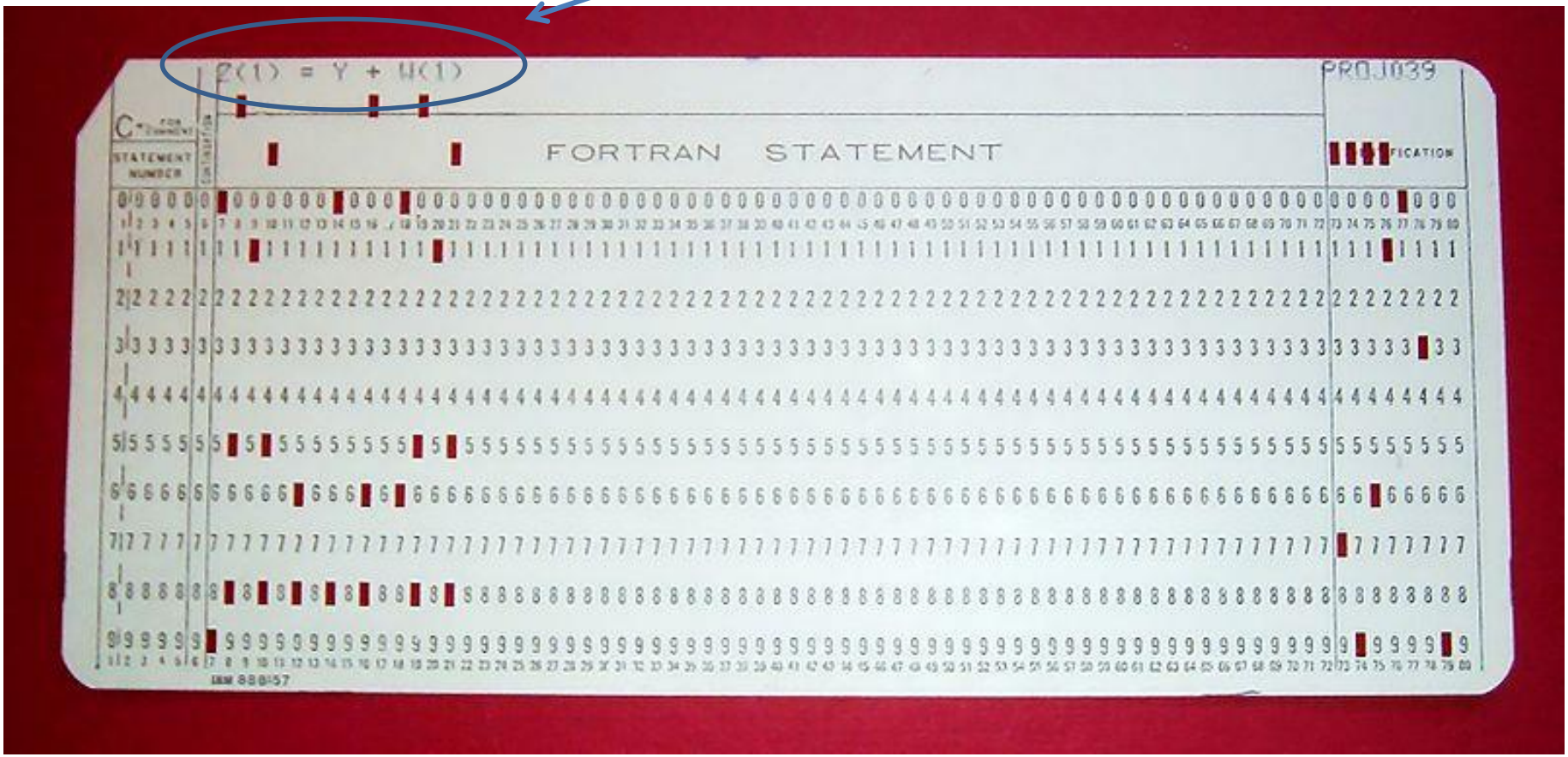
**Verze jazyka:**

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




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

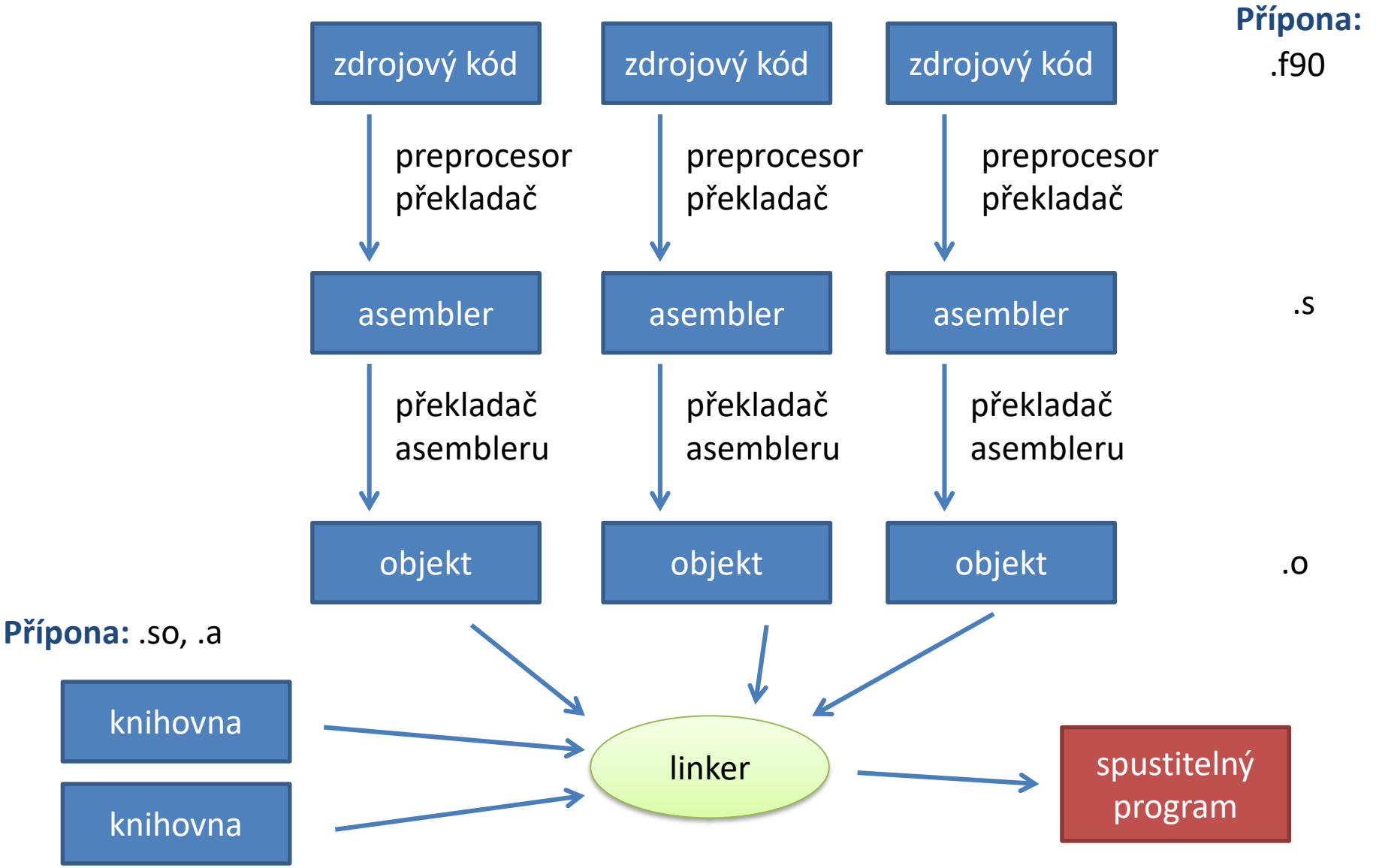
**Intel® Composer XE**

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:
.f90
zdrojový kód
zdrojový kód
zdrojový kód
preprocesor
překladač
preprocesor
překladač
preprocesor
překladač
asembler
asembler
asembler
.s
překladač
asembleru
překladač
asembleru
překladač
asembleru
objekt
objekt
objekt
.o
Přípona: .so, .a
knihovna
knihovna
linker
spustitelný
program

# Užitečné volby překladače

## Volby překladače:

| | |
|---|---|
| **-o** | název výsledného programu |
| **-c** | přeloží zdrojový kód do objektového kódu |
| **-S** | přeloží zdrojový kód do asembleru |
| **-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

```
12345678901234567890123456789012345678901234567890123456789012345678901234567890123456789

C toto je komentar
      implict 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 odsazovaní 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**
**#ifundef**
**#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.

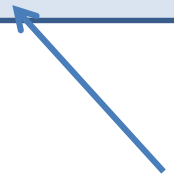
# Proměnné

```
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:**

| | |
|---|---|
| **+** | sčítaní |
| **-** | 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 = pocatecní_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

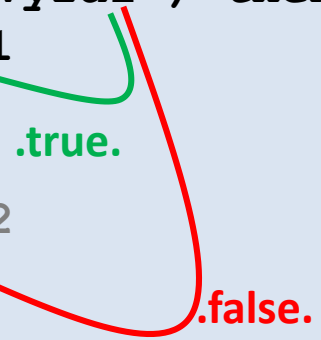
```
integer                    :: i
!--------------------------
do i = 1, 10, 2
   write(*,*) i
end do
```

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.** | vetší 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 promennych
…
! vlastni program
! volani funkce nebo procedury
…
! konec programu
…
contains

! definice funkci 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 cist
double precision, intent(out)     :: b      ! do argumentu lze pouze zapisovat
double precision, intent(inout)   :: c      ! s argumentem lze pracovat libovolne
```

# 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)
```

Výsledek funkce se **musí použít**.

**Volání procedur:**

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

# 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)
!-----------------------------------------------------
! vlastni 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)
!-----------------------------------------------------
! vlastni telo procedury
b = a + b
end subroutine moje_procedura_3
```

# Některé standardní funkce a procedury

## Matematické funkce:

| | |
|---|---|
| sin(x) | |
| cos(x) | |
| sqrt(x) | druhá odmocnina |
| exp(x) | |
| log(x) | **přirozený** logaritmus |
| log10(x) | dekadický logaritmus |

## Náhodné čísla:

| | |
|---|---|
| call **random_seed**() | inicializuje generátor náhodných čísel |
| call **random_number**(number) | nastaví proměnou **number** na náhodné číslo v intervalu <0.0;1.0) |

## Měření času:

| | |
|---|---|
| call **cpu_time**(time) | nastaví hodnotu proměnné **time** na čas běhu programu v sekundách (s mikrosekundovým rozlišením) |

# Pole

**Staticky definovaná pole:**

```
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)

**Dynamicky deklarovaná pole:**

```
double precision,allocatable      :: a(:)
double precision ,allocatable     :: d(:,:)
! ------------------------------------------------
! alokace 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 celočíselných 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 vectoru a

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

**Prvky pole se indexují od jedné.***

Velikost pole lze zjistit funkci **size**.

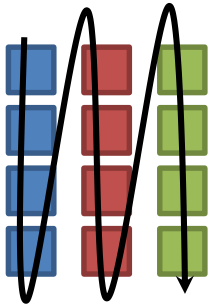
* rozsahy indexů pro jednotlivé rozměry lze však měnit

# Pole – paměťový model

**Fortran**

a(i,j)

Prvky jsou za sebou ve sloupcích (column based).

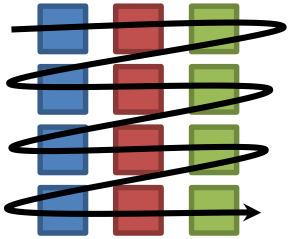


uspořádání prvků matice v paměti

**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++**

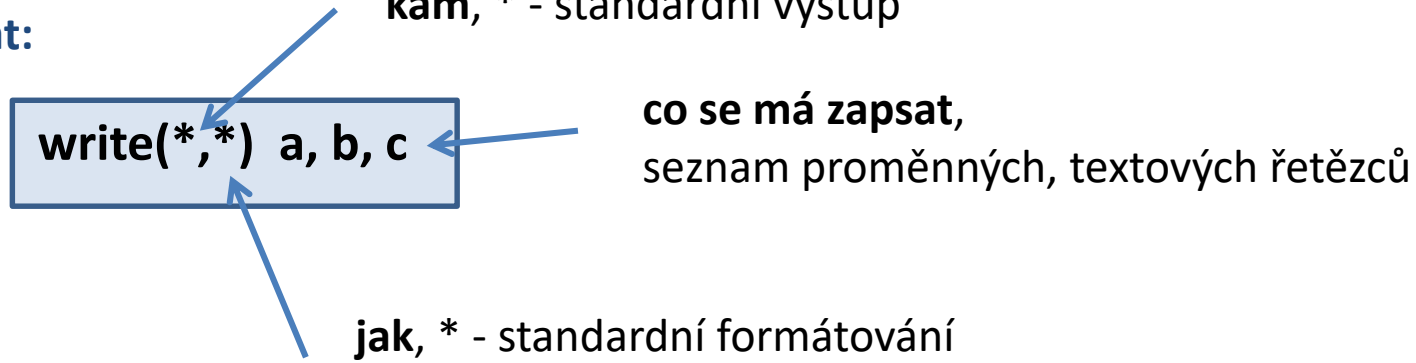
```
double* d[];
double   sum;
//---------------------------------

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

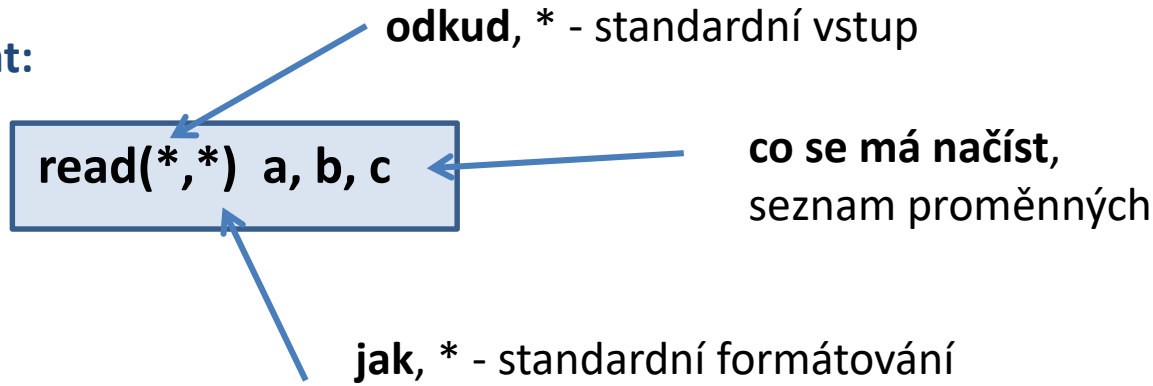
**Poznámka:** uvedené uspořádání nemá vliv na funkci, ale na rychlost vykonávání

# 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.