



Fortran 90/95

Quelles nouveautés?

Anne-Sophie Mouronval

Laboratoire MSS-MAT

26 avril 2004

MCours.com

Objectifs

- Connaître les principaux apports de F90/95
- Identifier les aspects obsolètes

Formations supplémentaires ou ateliers pour ceux qui le souhaiteront ...

Historique

- 1954 -- Projet de création du premier langage symbolique par IBM : FORTRAN (Mathematical FORmula TRANslating System).
- 1966 -- Fortran IV (Fortran 66), première norme.
- 1977 -- Fortran V (Fortran 77).
- 1991/1992 -- Norme ANSI Fortran 90
- 1994 -- Premiers compilateurs Fortran 90 Cray et IBM.
- 1999 -- Sur Cray T3E puis IBM RS/6000 Fortran 95
- · 2004? -- Fortran 2003

Compatibilité F77/F90

 La norme 77 est <u>totalement incluse</u> dans la norme 90.

- Quelques comportements différents parmi lesquels :
 - beaucoup plus de fonctions/sous-programmes intrinsèques.
 - ⇒ risque d'homonymie avec procédures externes F77.
 - ⇒ attribut EXTERNAL recommandé pour les procédures externes non intrinsèques.
 - attribut SAVE automatiquement donné aux variables initialisées par l'instruction DATA (en F77 c'était "constructeur dépendant").

Apports de Fortran 90

- 1. "Format libre".
- 2. Objets de types dérivés.
- 3. Blocs DO--END DO, SELECT CASE, WHERE.
- 4. Extensions tableaux : profil, conformance, manipulation, fonctions intrinsèques.
- 5. Allocation dynamique de mémoire (ALLOCATE).
- 6. Pointeurs.
- 7. Procédures internes (CONTAINS), modules (USE).
- 8. Arguments: OPTIONAL, INTENT, PRESENT, passage par mot-clé.
- 9. Bloc interface, surcharge d'opérateurs ...
- 10. Procédures récursives.
- 11. Nouvelles fonctions intrinsèques.

Format & syntaxe

Format libre:

- 132 caractères par ligne;
- `!` : commentaires;
- `&`: continuation de ligne;
- `;`: séparateur d'instruction;
- blancs significatifs.

Exemple:

```
a = 0.; b = 3.
c = 4.0 * sin(a) * cos(b) + &
    log(b)

PRINT*, "Cette ligne se continue &
    &sur la ligne suivante"
```

Nouvelle syntaxe possible pour certains opérateurs logiques (F77 \rightarrow F90):

.LE.
$$\rightarrow$$
 <= .LT. \rightarrow < .EQ. \rightarrow == .GE. \rightarrow >= .NE. \rightarrow /=

Forme générale d'une déclaration

```
type[, liste_attributs ::] liste_objets
```

Différents types:

- * real
- * integer
- * double precision
- * complex
- * character
- * logical
- * type

Différents attributs :

parameter constante symbolique

dimension taille d'un tableau

allocatable objet dynamique

pointer objet défini comme pointeur

target objet accessible par pointeur (cible)

save objet statique

intent vocation d'un argument muet

optional argument muet facultatif

public ou private visibilité d'un objet défini

dans un module

external ou intrinsic nature d'une procédure

Forme générale d'une déclaration (ii)

Exemple:

```
integer :: nbre, cumul
real :: x, y, z

integer, save :: compteur
integer, parameter :: n = 5

double precision a(100) ! Non recommandé
double precision, dimension(100) :: a
complex, dimension(-2:4, 0:5) :: c
real, pointer :: ptr
```

Types dérivés (i)

Structure de données regroupant des données (composantes) hétérogènes.

1. Définition des types dérivés :

```
TYPE Personne

CHARACTER(LEN=20) :: nom

INTEGER :: age

REAL :: taille

END TYPE Personne
```

2. Déclaration (attribut TYPE):

```
TYPE (Personne) :: ind1, ind2, ind3, ind4
```

3. Initialisation *via* un **constructeur de structure** (du même nom que le type créé) :

```
ind1 = Personne( 'Durand', 45, 1.70 )
ind2 = Personne( 'Dupont', 30, 1.64 )
```

MCours.com

Types dérivés (ii)

Affectation et manipulation :

Accès à un champ : l'opérateur "%" :

```
ind1%nom ! Durand
ind2%age ! 30
```

Opérations sur les composantes :

```
INTEGER :: somme
somme = ind1%age + ind2%age
```

Structures de contrôle (i) : boucles DO

Principales nouveautés :

1. Possibilité de nommer les boucles

```
[étiquette:] DO [contrôle de boucle]

bloc

END DO [étiquette]
```

2. Boucles DO sans contrôle de boucle (condition + EXIT pour en sortir)

```
do
    read(*, *) nombre
    if (nombre == 0) EXIT
        somme = somme + nombre
end do
```

3. Instruction CYCLE (abandonne le traitement de l'itération courante)

```
do
    read(*, *, iostat=eof)x
    if (eof /= 0) EXIT
    if (x <= 0.) CYCLE
    y = log(x)
end do</pre>
```

Structures de contrôle (ii) : SELECT CASE

```
Exemple
integer :: n
SELECT CASE(n)
                 ! n=0
    CASE (0)
      print *, ' il est nul'
    CASE(1, 2) ! n=1 ou 2
      print *, ' il est petit'
    CASE (3:10)
                  ! 3 <= n <= 10
       print *, ' il est moyen'
    CASE (11:) ! n <= 11
       print *, ' il est grand'
    CASE DEFAULT ! autres cas
       print *, ' il est négatif'
```

END SELECT

Tableaux : définitions

Déclaration d'un tableau : attribut DIMENSION.

- Etendue d'un tableau dans une dimension = nombre d'éléments dans cette dimension.
- Profil d'un tableau = vecteur dont chaque élément est l'étendue du tableau dans la dimension correspondante.

Deux tableaux sont conformants s'ils ont le même profil.

Exemple:

```
real, dimension (-5:4,0:2) :: x real, dimension (0:9,-1:1) :: y
```

L'étendue des tableaux x et y est 10 dans la $1^{\text{ère}}$ dimension et 3 dans la $2^{\text{ème}}$.

```
Ils ont même profil : le vecteur (/ 10, 3 /), \Rightarrow ils sont conformants.
```

Tableaux: initialisation

Possibilité d'initialiser un tableau 1D au moment de sa déclaration ou lors d'une instruction d'affectation au moyen de constructeur de tableaux.

- Pour les tableaux de rang supérieur à 1 on utilisera la fonction RESHAPE que nous verrons plus loin.
- Constructeur de tableau : vecteur de scalaires dont les valeurs sont encadrées par les caractères (/ et /).

Exemple:

Rq; utilisation de boucles implicites possible.

Tableaux: manipulation

F90 permet de manipuler globalement l'ensemble des éléments d'un tableau (en fait, plusieurs opérateurs ont été sur-définis afin d'accepter des objets de type tableau comme opérande).

Important : les tableaux intervenant dans une expression doivent être conformants.

Exemple:

Remarque:

Ici l'opérateur * est une multiplication terme à terme (différent de MATMUL)

Tableaux: sections

Il est possible de faire référence à une partie d'un tableau appelée "section de tableau" ou "sous-tableau".

• Sections régulières : ensemble d'éléments dont les indices forment une progression arithmétique (notation par triplets) de la forme :

```
val_init:val_fin:pas
```

• La notation dégénérée ":" correspond à l'étendue de la dimension considérée.

Exemple:

Tableaux : sections (ii)

La valeur d'une expression tableau est entièrement évaluée avant d'être affectée.

Ainsi, pour inverser un tableau, on pourra écrire :

```
real, dimension(20) :: tab

tab(:) = tab(20:1:-1)
```

Ce qui n'est pas du tout équivalent à :

```
integer :: i

do i=1,20
    tab(i) = tab(21-i)
    end do
```

Remarque:

il est également possible d'accéder à des éléments quelconques d'un tableau par l'intermédiaire d'un vecteur d'indices ("indexation indirecte").

On parle alors de section irrégulière ...

Tableaux : fonctions intrinsèques (i)

Interrogation

SHAPE (array) et SIZE (array[,dim]):

profil et taille (ou étendue de la dimension indiquée via dim) de array.

UBOUND (array[, dim]) et LBOUND (array[, dim]): bornes sup/inf de chacune des dimensions (ou seulement de celle indiquée via dim) de array.

```
MAXVAL(array[,dim][,mask]) et
MINVAL(array[,dim][,mask])
```

où mask est un tableau de type logical conformant avec array.

max et min de array.

Exemple:

MINVAL(A, dim=2, mask=A>3) retourne (/ 5,4 /).

Autres fonctions: MAXLOC(...), MINLOC(...),
ALL(...), ANY(...), COUNT(...).

Tableaux : fonctions intrinsèques (ii)

Construction/transformation

```
RESHAPE(source, shape[,pad][,order])
```

Cette fonction permet de construire un tableau d'un profil donné à partir d'éléments d'un autre tableau.

Exemple:

```
RESHAPE ((/(i,i=1,6)/), (/2,3/))
```

a pour résultat :

```
| 1 3 5 |
```

Autres fonctions:

```
CSHIFT(...), EOSHIFT(...),
PACK(...), UNPACK(...),
SPREAD(...), MERGE(...),
TRANSPOS(...).
```

Tableaux : fonctions intrinsèques (iii)

```
PRODUCT (array[, dim][, mask]) et SUM (array[, dim][, mask]) : somme et produit des éléments d'un tableau.
```

Exemple:

DOT_PRODUCT (vector_a, vector_b) :
produit scalaire des deux vecteurs.

MATMUL (matrix_a, matrix_b) : produit matriciel de deux matrices ou d'une matrice et d'un vecteur.

Tableaux: instruction et bloc WHERE

L'instruction WHERE permet d'effectuer des affectations de type tableau par l'intermédiaire d'un filtre (masque logique).

Forme générale:

```
WHERE (mask)
          bloc1
ELSEWHERE
           bloc2
```

END WHERE

où mask est une expression logique retournant un tableau de logiques.

Exemple:

```
real, dimension(10) :: a
       WHERE (a > 0.)
               a = log(a)
       ELSEWHERE
       a = 1.
       END WHERE
```

Tableaux dynamiques (i)

- En Fortran 90, il est possible de faire de l'allocation dynamique de mémoire.
- Les tableaux ainsi crées sont appelés "tableaux dynamiques" ou "tableaux à profil différé.
- Déclaration : spécifier l'attribut ALLOCATABLE.
- Allocation via l'instruction ALLOCATE à laquelle on indique le profil désiré.
- Libération de l'espace mémoire allouée : instruction DEALLOCATE.
- La fonction intrinsèque ALLOCATED permet d'interroger le système pour savoir si un tableau est alloué ou non.

Tableaux dynamiques (ii)

Exemple:

```
real, dimension(:,:), ALLOCATABLE :: a
Integer :: n,m,err
read *, n, m
   if (.not. ALLOCATED(a)) then
       ALLOCATE (a (n,m), stat=err)
       if (err /= 0) then
       print *, "Erreur à l'allocation &
                &du tableau a"
       stop 4
       end if
  end if
```

DEALLOCATE (a)

Pointeurs (i)

· Définition

En C, Pascal \Rightarrow variable contenant l'adresse d'objets.

En Fortran $90 \Rightarrow$ alias.

- États d'un pointeur
- 1. Indéfini : à sa déclaration en tête de programme
- 2. Nul: alias d'aucun objet
- 3. Associé: alias d'un objet appelé cible.

MCours.com

Pointeur (ii)

- Cible: objet pointé (attribut TARGET).
- Le **symbole binaire** => sert à valoriser un pointeur.

Exemple:

```
integer, target :: n
integer, pointer :: ptr1, ptr2

n = 10
ptr1 => n
ptr2 => ptr1
n = 20
print *, ptr2 ! on trouve 20
```

Remarques:

- 1. p1 et p2 étant deux pointeurs, $p1 \Rightarrow p2$ implique que p1 prend l'état de p2 (indéfini, nul ou associé à la même cible)
- 2. La fonction intrinsèque ASSOCIATED permet de comparer deux pointeurs

Procédures (i)

F77 : procédures externes (= unité de compilation)

F90: nouvelles possibilités:

1. Procédure interne :

procédure contenue à l'intérieur d'un programme principal, d'une procédure externe ou d'une procédure-module. Elle

- est appelée de la même façon qu'une procédure externe
- est compilée en même temps que l'unité qui l'héberge (son **hôte**)
 - a accès à des informations appartenant à son hôte
 - est placée après le mot clé CONTAINS
 - n'est pas visible de l'extérieur de son hôte.

2. Procédure-module:

procédure contenue dans un module après le mot clé CONTAINS. Elle peut contenir une procédure interne.

Procédure interne : exemple

PROGRAM Thingy

```
IMPLICIT NONE
....
CALL OutputFigures(NumberSet)
....
```

CONTAINS

```
SUBROUTINE OutputFigures(Num)
REAL, DIMENSION(:), INTENT(IN) :: Num
PRINT*, "Here are the figures", Num
END SUBROUTINE OutputFigures
```

END PROGRAM Thingy

Remarque:

Ne pas confondre les procédures internes/externes (lieu d'apparition de la procédure) et les procédures intrinsèques/"extrinsèques" (provenance de la procédure).

Procédure : interface

En F77: procédures externes, interface inexistante.

⇒ Risque d'incohérence entre l'utilisation de cette procédure et sa déclaration locale (erreurs non détectées à la compilation : nombre d'arguments incorrect etc ...).

Solutions en Fortran 90 :

1/ par le biais de procédures internes ou de procédures-modules (interfaçage automatique)

2/ par le biais de blocs-interfaces explicites présents ou accessibles permettant de préciser à l'unité appelante toutes les contraintes d'appel.

⇒ Les erreurs de cohérence seront détectées à la compilation.

Remarque:

Pour les fonctions intrinsèques, l'interface est implicite.

Interface explicite "simple" (ou anonyme)

Subroutine externe maxmin:

```
Subroutine maxmin (vect, v max, v min, ctl, rgmax)
implicit none
real, dimension(:), intent(in) :: vect
             intent(out) :: v max, v min
real,
integer, optional, intent(out) :: rgmax
         intent(inout) :: ctl
integer,
v max = MAXVAL(vect) ; v min = MINVAL(vect)
ctl = 1; ...
end subroutine maxmin
Interface à placer dans chaque unité appelante :
!----- Bloc interface-----
interface
Subroutine maxmin(vect, v max, v min, ctl, rgmax)
  real, dimension(:), intent(in) :: vect
           intent(out) :: v max, v min
 real,
 integer, optional, intent(out) :: rgmax
                intent(inout) :: ctl
  integer,
end subroutine maxmin
end interface
```

Apports des interfaces

- Détection des erreurs liées à la non cohérence des arguments d'appel et des arguments muets (type, attributs et nombre).
- Possibilité de contrôler la vocation des arguments en fonction des attributs INTENT et OPTIONAL.
- Possibilité de tester l'absence des arguments optionnels (fonction PRESENT).
- Passage d'arguments par mot-clé.
- Transmission du profil et de la taille des tableaux à profil implicite et possibilité de les récupérer via les fonctions SHAPE et SIZE.

par mot-clé

Préciser la vocation des arguments muets de façon à pouvoir contrôler plus finement l'usage qui en est fait.

Pour ce faire, F90 a prévu :

1. l'attribut INTENT d'un argument :

```
o entrée seulement ⇒INTENT(IN),
o sortie seulement ⇒INTENT(OUT),
o mixte ⇒INTENT(INOUT)
```

2. l'attribut OPTIONAL pour déclarer certains arguments comme optionnels et pouvoir tester leur présence éventuelle dans la liste des arguments d'appel (fonction intrinsèque PRESENT).

Par ailleurs, F90 permet aussi le **passage des arguments par mot-clé** (+ fiable que le **passage positionnel**).

Exemple (i)

On considère la subroutine externe suivante :

Subroutine maxmin (vect, v max, v min, ctl, rgmax)

```
implicit none
real, dimension(:), intent(in) :: vect
real,
                  intent(out) :: v max, v min
integer, optional, intent(out) :: rgmax
integer,
                  intent(inout) :: ctl
v max = MAXVAL(vect)
v min = MINVAL(vect)
ctl = 1
if (present(rgmax)) then
  rgmax = MAXLOC(vect, DIM=1)
  ctl = 2
endif
print *,'Taille vecteur :',SIZE(vect)
print *,'Profil vecteur :',SHAPE(vect)
```

end subroutine maxmin

Exemple (ii)

Program inout

```
implicit none
integer, parameter :: n=5
integer
                  :: rgmax=0,ctl=0
real, dimension(n) :: v=(/1.,2.,40.,3.,4./)
               :: vmax, vmin
real
!----- Bloc interface-----
Interface
Subroutine maxmin (vect, v max, v min, ctl, rgmax)
 real, dimension(:), intent(in) :: vect
              intent(out) :: v max, v min
 real,
 integer, optional, intent(out) :: rgmax
               intent(inout) :: ctl
 integer,
end subroutine maxmin
end interface
1-----
!-- Appel positionnel
call maxmin(v, vmax, vmin, ctl, rgmax)
!-- Appel positionnel ss arg. optionnel rgmax
call maxmin(v, vmax, vmin, ctl)
!-- Idem a mot cle
call maxmin(vect=v, v max=vmax, &
                   ctl=ctl, v min=vmin)
```

end program inout

Tableaux à profil implicite

Extrait du programme appelant :

```
integer, dimension(5,6) :: t
  interface !<<<<<<<<<|
    subroutine sp(t) |
    integer, dimension(:,:) :: t |
    end subroutine sp |
  end interface !<<<<<<<<|
t = 0 ; call sp(t) ...</pre>
```

Subroutine externe:

t est un tableau à profil implicite.

Rq: ne pas confondre "tableau à profil implicite" (recommandé) et "tableau à taille implicite" (déconseillé).

Cas d'interface "explicite" obligatoire

Il existe 10 cas où une interface est obligatoire, parmi lesquels :

- fonction à valeur tableau,
- fonction à valeur pointeur,
- tableau à profil implicite,
- passage d'arguments à mots-clé,
- argument optionnel,
- procédure générique,
- surcharge ou définition d'un opérateur,
- surcharge du symbole d'affectation.

• • •

Interfaces génériques (i)

En + des interfaces "simples", il existe des interfaces "génériques" (3 types).

1. Les interfaces "nommées" (ou génériques stricto sensu)

Exemple (à placer dans un module):

```
INTERFACE CLEAR ! Nom fct generique
MODULE PROCEDURE clear_int
MODULE PROCEDURE clear_real
END INTERFACE
```

+ définition des procédures clear_int et clear_real

2. Les interfaces opérateurs (création ou sur-définition d'opérateurs)

Exemples (à placer dans un module):

```
INTERFACE OPERATOR (.TWIDDLE.)
  MODULE PROCEDURE itwiddle, rtwiddle
END INTERFACE

INTERFACE OPERATOR (*)
  MODULE PROCEDURE mult
END INTERFACE
```

+ définition des procédures

Interfaces génériques (ii)

3. Les interfaces-assignations (pour surcharger le symbole d'affectation =)

Exemple (à placer dans un module):

```
INTERFACE ASSIGNMENT (=)
  MODULE PROCEDURE real_to_int
END INTERFACE
```

+ définition de la fonction real_to_int

MODULES

- Un module est une unité de programme particulière (mot clé MODULE) introduite en Fortran 90 pour encapsuler :
 - des données et des définitions de types dérivés,
 - des blocs interfaces,
 - des procédures (après l'instruction CONTAINS),

...

- Son utilisation au sein d'un programme se fait grâce à l'instruction USE suivi du nom du module [+ mot clé ONLY].
- Ces ressources sont par défaut accessibles à l'utilisateur (attribut PUBLIC) mais peuvent être rendues privées (attribut PRIVATE).
- Il doit être compilé séparément avant de pouvoir être utilisé.

Exemple

Module (dans un fichier sépare de préférence) :

MODULE stack

END MODULE stack

Programme utilisant ce module:

```
PROGRAM StackUser
```

<u>USE stack</u> ! Place avant tout le reste

```
IMPLICIT NONE
...
CALL push(14); CALL push(21);
```

END PROGRAM StackUser

MCours.com

Quelques fonctions intrinsèques utiles (i)

- Les types prédéfinis en F90 sont en fait des noms génériques renfermant chacun un certain nombre de variantes ou sous-types que l'on peut sélectionner à l'aide du paramètre KIND lors de la déclaration des objets.
- Fonction intrinsèque SELECTED INT_KIND (r) Elle retourne un entier qui correspond au sous-type permettant de représenter les entiers n tels que : $-10^r < n < 10^r$
- Fonction intrinsèque SELECTED_REAL_KIND(p,r) (p=précision et r=étendue).

Elle retourne un entier qui correspondant au soustype permettant de représenter les réels x répondant à la demande avec :

$$10^{-r} < |x| < 10^{+r}$$

Exemple

! On decide que les entiers n,m sont < 99

integer, parameter :: p = selected_int_kind(2)

integer(kind=p) :: n, m

Quelques fonctions intrinsèques utiles (ii)

TINY(x): plus petite valeur réelle représentable dans le sous-type de x (limite d'underflow).

 ${\tt HUGE}\,({\tt x}):$ plus grande valeur réelle ou entière représentable dans le sous-type de ${\tt x}$ (limite d'overflow).

Aspects obsolètes en F90

- 1. IF arithmétique : IF (ITEST) 10,11,12
- 2. Branchement au END IF depuis l'extérieur (H.N.95)
- 3. Boucles DO pilotées par réels (H.N.95)
- 4. Partage d'une instruction de fin de boucle
- 5. Fins de boucles autres que CONTINUE ou END DO
- 6. ASSIGN et le GO TO assigné (H.N.95)
- 7. ASSIGN d'une étiquette de FORMAT (H.N.95)
- 8. RETURN multiples
- 9. PAUSE (H.N.95)
- 10. Format d'édition Hn (H.N.95)

(H.N.95): aspect devenant Hors Norme 95.

Principales nouveautés de la norme 95

- 1. Bloc FORALL
- 2. Attributs pure et Elemental pour certaines procédures
- 3. Fonction intrinsèque NULL() pour forcer un pointeur à l'état nul
- 4. Valeur initiale par défaut pour les composantes d'un type dérivé
- 5. Fonction intrinsèque CPU TIME
- 6. Bloc WHERE: imbrication possible
- 7. Expressions d'initialisation étendues
- 8. MAXLOC/MINLOC: ajout de l'argument dim

Etc ...

Futur = Fortran 2003 (+ orienté objet : héritage ...)

Aspects obsolètes en F95

- 1. Le "format fixe" du source
 - \Rightarrow "format libre".
- 2. Le GO TO calculé
 - \Rightarrow SELECT CASE.
- 3. L'instruction DATA placée au sein des instructions exécutables
 - ⇒ avant les instructions exécutables.
- 4. Statement functions

```
(sin deg(x)=\sin(x*3.14/180.))
```

- ⇒ procédures internes.
- 5. Le type CHARACTER*... dans les déclarations
 - \Rightarrow CHARACTER (LEN=...).
- 6. Le type CHARACTER (LEN=*) de longueur implicite en retour d'une fonction
 - \Rightarrow CHARACTER (LEN=len (str)).

Conseils pour passer de F77 à F90

- 1. S'assurer de la fiabilité du code de départ (passer en **IMPLICIT NONE** ...)
- 2. Passer en format libre
- 3. Eliminer les aspects obsolètes de F77
 (détection à la compilation grâce à des options, exemple pour xlf:
 qlanglvl=90std/95std/95pure/...)
- 4. Créer des modules, mettre en oeuvre des interfaces (réfléchir au regroupement des sousprogrammes, à l'arborescence des modules ...)
- 5. Retoucher les listes d'arguments (préciser les vocations, tableaux à profil implicite, passage par mots-clé)
- 6. Utiliser les nouvelles possibilités pour les tableaux et les fonctions intrinsèques

Remarque : il existe des outils d'aide à la conversion (ex NEC : Trans90 de PSUITE ...)

Références

A la bibliothèque ECP

- DELANNOY C. Programmer en Fortran 90 Guide complet (1997)
- DUBESSET M., VIGNES J. Les Spécificités du Fortran 90 (1990)
- •LIGNELET P. Manuel complet du langage Fortran 90 et Fortran 95 (1996)
- LIGNELET P. Structures de données et leurs algorithmes avec Fortran 90 et Fortran 95 (1996)
- METCALF M., REID J., Fortran 90/95 explained (1996)

Sur Internet

- www.liv.ac.uk/HPC/HTMLFrontPageF90.html
- www.idris.fr dans les supports de cours

MCours.com