

Méthodes numériques et éléments de programmation

Guy Munhoven

Institut d'Astrophysique et de Géophysique (Bât. B5c)
Bureau 0/13
eMail: Guy.Munhoven@ulg.ac.be
Tél.: 04-3669771

23 septembre 2014

Plan du cours 2014-2015

Cours théoriques

16-09-2014 Méthodes numériques pour E.D.O.: introduction

*22-09-2014 Méthodes de Runge-Kutta; Contrôle du pas;
Équations raides*

22-09-2014 Fortran 95: bases, boucles

23-09-2014 Fortran 95

- Rappels
- Branchements
- Sous-programmes

23-09-2014 Fortran 95: modules; opérations E/S

29-09-2014 Fortran 95: tableaux

07-10-2014 Fortran 95: compléments

Structure générale d'un programme Fortran

General Structure of a Fortran Program

Méthodes
numériques et
éléments de
programma-
tion

Guy
Munhoven

Rappels

Sous-
programmes

```
[PROGRAM nom_du_programme]  
instructions de spécification et de déclaration  
instructions exécutables  
[CONTAINS  
procédures internes]  
END [PROGRAM [nom_du_programme]]
```

Options indiquées entre [...], ces derniers étant à omettre

Instructions de spécification et de déclaration

Specifications and declarations

Méthodes
numériques et
éléments de
programma-
tion

Guy
Munhoven

Rappels

Sous-
programmes

- Préciser des extensions à utiliser
 - ⇒ p. ex., *USE module*
- Adopter conventions de codage particulières
 - ⇒ *IMPLICIT NONE* (pas de typage par défaut)
- Définir les *types* de données à traiter
 - ⇒ à valeurs entières, réelles, chaînes de caractères, ...
- Conférer des *attributs* (propriétés particulières) à certaines données
 - ⇒ *PARAMETER* (constante symbolique)
 - ⇒ *DIMENSION(...)* (tableaux à plusieurs dimensions)
- Définir interfaces avec d'autres parties du programme

Déclarations

Declarations

Méthodes
numériques et
éléments de
programmation

Guy
Munhoven

Rappels

Sous-
programmes

- Forme générique d'une déclaration

type [, *liste d'attributs*] [::] *identificateur* [= *valeur_initiale*]

- :: obligatoire si attributs ou valeurs initiales données

Exemples : déclarations de variables

```
INTEGER i, j, k
REAL :: x = 1.0, x2 = 1E-6
DOUBLE PRECISION :: y = -1.0d0, tol = 1D-12
LOGICAL :: l, option1 = .TRUE., option2 = .FALSE.
COMPLEX :: z
CHARACTER(LEN=80) :: nom_fichier, version_programme
```

Déclarations

Declarations

Méthodes
numériques et
éléments de
programmation

Guy
Munhoven

Rappels

Sous-
programmes

Exemples d'attributs : PARAMETER, DIMENSION, ...

Exemples : déclarations de variables avec attributs

```
DOUBLE PRECISION, PARAMETER :: pi = 3.14159265358979323846D+00
DOUBLE PRECISION, PARAMETER :: un_demi = 1D0/2D0
CHARACTER(LEN=*), PARAMETER :: version = 'Version 0.3 du 27NOV2007'
INTEGER, PARAMETER :: n_lons = 64, n_lats = 32, n_vert = 10
DOUBLE PRECISION, DIMENSION(12) :: temp_moy_mens
REAL, DIMENSION(n_lons, n_lats, n_vert) :: vitesse_vent, p_atmos
INTEGER, PARAMETER :: j_semaine = 7
INTEGER, PARAMETER, DIMENSION(12) :: njours_mois = &
    (/ 31, 28, 31, 30, 31, 30, 31, 31, 30, 31, 30, 31 /)
```

Initialisation à la déclaration: expressions permises

Initialisation at declaration: allowed expressions

Méthodes
numériques et
éléments de
programmation

Guy
Munhoven

Rappels

Sous-
programmes

Expression d'initialisation: expression constante faisant intervenir uniquement

- des constantes (identificateurs avec attribut PARAMETER)
- des opérations arithmétiques de base
- des exponentiations avec exposant INTEGER
- fonctions élémentaires intrinsèques à arguments de type INTEGER et/ou CHARACTER uniquement
- les fonctions intrinsèques de transformation REPEAT, RESHAPE, SELECTED_INT_KIND, SELECTED_REAL_KIND, TRIM
- les fonctions intrinsèques d'interrogation (*inquiry functions*) LBOUND, UBOUND, SIZE, LEN, KIND, ...
- constructeur de tableaux fixes

Types de données : précision et gamme portable

Data Types : Portable Precision

Méthodes
numériques et
éléments de
programmation

Guy
Munhoven

Rappels

Sous-
programmes

- SELECTED_INT_KIND(*r*) retourne comme résultat
 - identifiant INTEGER du type INTEGER souhaité, si disponible pour le compilateur utilisé
 - -1 sinon
- SELECTED_REAL_KIND(*p*, *r*) retourne comme résultat
 - identifiant INTEGER du type REAL souhaité, si disponible pour le compilateur utilisé
 - -1 si la précision demandée n'est pas disponible
 - -2 si l'étendue demandée n'est pas disponible
 - -3 si ni précision ni étendue demandées ne sont disponibles
- Identifiants sont souvent, mais non pas obligatoirement, identiques au nombre d'octets par unité ⇒ ne pas s'y fier

Types de données : précisions et gammes portables

Data Types : Portable Precision

Méthodes
numériques et
éléments de
programmation

Guy
Munhoven

Rappels

Sous-
programmes

Exemple d'utilisation des précisions et gammes portables

```
! 'Short integer': -10^5 < valeurs < +10^5
INTEGER, PARAMETER :: si = SELECTED_INT_KIND(5)
! 'Long integer': -10^9 < valeurs < +10^9
INTEGER, PARAMETER :: li = SELECTED_INT_KIND(9)

! 'Simple precision': 6 décimales de précision,
!                   10^-30 < ABS(valeurs) < 10^+30
INTEGER, PARAMETER :: sp = SELECTED_REAL_KIND(6,30)
! 'Double precision': 16 décimales de précision,
!                   10^-300 < ABS(valeurs) < 10^+300
INTEGER, PARAMETER :: dp = SELECTED_REAL_KIND(16,300)

INTEGER(KIND=si) :: i = 10_si      ! short integer
INTEGER(KIND=li) :: j, k=1000000_li ! long integer

REAL(KIND=sp) :: x = 1E-24_sp      ! simple precision
REAL(KIND=dp) :: d = 1E+60_dp      ! double precision
```

Constantes littérales

Literal Constantes

Méthodes
numériques et
éléments de
programmation

Guy
Munhoven

Rappels

Sous-
programmes

Représentations de 10 comme constante

10	INTEGER, espèce par défaut
10_lint	INTEGER, espèce lint (si définie, i.e., si une constante INTEGER de nom lint a été déclarée et initialisée auparavant)
10.; 1E1; 10.E0	REAL, espèce par défaut
10.DO	REAL, espèce DOUBLE PRECISION par défaut
10._wp	REAL, espèce wp (si définie)

Formes possibles, mais déconseillées

10_4	INTEGER, espèce 4 (si supportée)
10._8; 1.E+1_8	REAL, espèce 8 (si supportée)

Opérations entre types différents : conversions

Operations Between Different Types: Conversions

Méthodes
numériques et
éléments de
programmation

Guy
Munhoven

Rappels

Sous-
programmes

- Conversion de type vers le type le plus fort
 - $\text{INTEGER} \prec \text{REAL} \prec \text{DOUBLE PRECISION}$
 - $\text{REAL} \prec \text{COMPLEX}$ de même espèce
 - exception: si ****** est suivie d'un **INTEGER**, ce dernier ne sera pas converti, quelque soit le type de la base de puissance
 - $(-1.)^{**2}$ sera évalué correctement à $(-1.) * (-1.) = 1.$
 - $(-1.)^{**2}$ donne lieu à une exception arithmétique, car calculée comme $\text{EXP}(2. * \text{LOG}(-1.))$
 - Conversions effectuées au fur et à mesure de l'évaluation d'expressions complexes: attention aux pièges et surprises
- ⇒ Inclure les constantes littérales avec leur type approprié

Contrôle de l'exécution d'un programme

Execution control

Méthodes
numériques et
éléments de
programmation

Guy
Munhoven

Rappels

Sous-
programmes

- Instructions exécutables suivent les spécifications et déclarations
- Normalement
 - exécution séquentielle des instructions, ligne par ligne
- Possibilité
 - de répéter des blocs d'instructions: *boucles*
 - de sélectionner des blocs d'instructions, d'en ignorer d'autres, selon des critères prédéfinis: *branchements* (alternatives, choix multiples, déviations)
 - d'arrêt: instruction **STOP**

Boucles: actions répétitives

Loops: Repetitive Action

Méthodes
numériques et
éléments de
programmation

Guy
Munhoven

Rappels

Sous-
programmes

Boucle indéterminée

```
[nom_de_boucle:] DO
```

Instructions de la boucle

```
END DO [nom_de_boucle]
```

Boucle contrôlée par indices

```
[nom_de_boucle:] DO i = i_ini, i_fin [, i_inc]
```

Instructions de la boucle

```
END DO [nom_de_boucle]
```

Boucle contrôlée par condition logique (DO WHILE())

```
[nom_de_boucle:] DO WHILE(condition_logique)
```

Instructions de la boucle

```
END DO [nom_de_boucle]
```

Boucles: actions répétitives

Loops: Repetitive Action

Méthodes
numériques et
éléments de
programmation

Guy
Munhoven

Rappels

Sous-
programmes

- Si un *nom_de_boucle* précède DO, il doit obligatoirement suivre le END DO correspondant.
- Aussi bien l'indice *i* qui contrôle une boucle, que les *paramètres de boucle* *i_ini*, *i_fin* et *i_inc* doivent être de type INTEGER.
- Il n'est pas permis de modifier directement la valeur de l'indice *i* à l'intérieur de la boucle.
- La *condition_logique* d'une boucle DO WHILE ne peut pas se réduire à une simple variable logique: en modifiant la valeur de cette variable à l'intérieur de la boucle on modifierait le *critère* de la boucle, ce qui n'est pas permis.

Branchements : exécution conditionnelle

Branching: Conditional Execution

Méthodes
numériques et
éléments de
programma-
tion

Guy
Munhoven

Rappels

Sous-
programmes

- Instructions normalement exécutées de manière séquentielle
- Branchements et structures de contrôle permettent des ordres d'exécution différents selon des cas à définir
- Deux types majeurs
 - Branchement conditionnel
 - Choix multiple

Branchement conditionnel : IF-THEN-ELSE

Conditional Branching: IF-THEN-ELSE

Méthodes
numériques et
éléments de
programma-
tion

Guy
Munhoven

Rappels

Sous-
programmes

- Forme générique

```
[nom_de_branchement:] IF (expression_logique_1) THEN  
    Bloc d'instructions 1  
[ELSEIF (expression_logique_2) THEN [nom_de_branchement]  
    Bloc d'instructions 2  
  
...  
[ELSE [nom_de_branchement]  
    Bloc d'instructions n]  
ENDIF [nom_de_branchement]
```

- *nom_de_branchement* optionnel pour structurer le programme (p.ex., pour branchements imbriqués, ou IF/ENDIF éloignés l'un de l'autre), et unique dans l'unité de programme

Branchement conditionnel : IF-THEN-ELSE

Conditional Branching: IF-THEN-ELSE

Méthodes
numériques et
éléments de
programmation

Guy
Munhoven

Rappels

Sous-
programmes

- Les *expression_logique_i* sont évaluées de manière séquentielle
- Uniquement le '*Bloc d'instructions*' de la première *expression_logique_i* qui est évaluée à `.TRUE.` est exécuté (éventuellement aucun)
- Forme courte sans alternatives, sur une seule ligne

```
IF (expression_logique) instruction
```

⇒ noter l'absence du THEN dans cette forme courte

Choix multiple : SELECT CASE

Multiple Choice: SELECT CASE

Méthodes
numériques et
éléments de
programmation

Guy
Munhoven

Rappels

Sous-
programmes

- Forme générique

```
[nom_de_branchement:] SELECT CASE (var)  
  CASE (liste_valeurs_1) [nom_de_branchement]  
    Bloc d'instructions 1  
  [CASE (liste_valeurs_2) [nom_de_branchement]  
    Bloc d'instructions 2]  
  ...  
  [CASE DEFAULT [nom_de_branchement]  
    Bloc d'instructions par défaut]  
END SELECT
```

- Possibilité d'inclure un *nom_de_branchement* optionnel pour structurer le programme

Choix multiple : SELECT CASE

Multiple Choice: SELECT CASE

Méthodes
numériques et
éléments de
programmation

Guy
Munhoven

Rappels

Sous-
programmes

- 'Bloc d'instructions x ' exécuté si var est incluse dans la liste de valeurs $liste_valeurs_x$ (entre parenthèses), donnée de valeurs isolées val et/ou d'intervalles $inf:sup$, séparés par des virgules
- CASE DEFAULT fournit un bloc d'instructions à exécuter lorsqu'aucun des cas explicitement inclus n'est applicable
- var doit être de type INTEGER, LOGICAL ou CHARACTER de manière à ne considérer que des tests permettant de vérifier des égalités réalisables de manière exacte
- Les différents cas doivent être disjoints
- Les tests ne peuvent pas faire intervenir d'autres variables que var : tous les cas possibles doivent pouvoir être distingués déjà à la compilation

Sous-programmes

Subprograms

Méthodes
numériques et
éléments de
programmation

Guy
Munhoven

Rappels

Sous-
programmes

- Regrouper des tâches bien définies dans des entités délimitées, comme, p.ex.,
 - résolution d'un système d'équations linéaires
 - calcul d'une intégrale
 - calcul d'une fonction ne faisant pas partie des fonctions intrinsèques
- Modularisation de programmes
- Ré-utilisation de parties pour d'autres programmes
- Possibilité de travailler à plusieurs sur un même programme

Sous-programmes

Subprograms

Méthodes
numériques et
éléments de
programmation

Guy
Munhoven

Rappels

Sous-
programmes

Deux classes : fonctions, sous-routines

Forme générique d'une fonction

```
[type] FUNCTION nom_fonction ([liste_arguments]) [RESULT(var_resultat)]  
  instructions de spécification et de déclaration  
  instructions exécutables  
[CONTAINS  
  procédures internes]  
END [FUNCTION nom_fonction]
```

Forme générique d'une sous-routine

```
SUBROUTINE nom_sous_routine [(liste_arguments)]  
  instructions de spécification et de déclaration  
  instructions exécutables  
[CONTAINS  
  procédures internes]  
END [SUBROUTINE nom_sous_routine]
```

Sous-programmes

Subprograms

Méthodes
numériques et
éléments de
programmation

Guy
Munhoven

Rappels

Sous-
programmes

- Structure semblable à celle d'un programme principal
- Un sous-programme peut faire appel à d'autres sous-programmes.
- Communication avec le programme ou sous-programme appelant via
 - variables de la liste d'arguments, appelées variables muettes ou factices (en Anglais : *dummy variables*);
 - blocs COMMON (un concept FORTRAN 77 obsolète en Fortran 90 — à remplacer par des MODULES);
 - des MODULES.
- Appel de fonction par affectation ou dans une expression
$$X = \text{nom_fonction}(\text{liste_arguments_appel}).$$
- Appel de sous-routine par CALL
$$\text{CALL nom_sous_routine}(\text{liste_arguments_appel}).$$

VARIABLES DE SOUS-PROGRAMMES : ATTRIBUTS SPÉCIAUX

Special Attributes for Subprogram Variables

Méthodes
numériques et
éléments de
programmation

Guy
Munhoven

Rappels

Sous-
programmes

VARIABLES Muettes

- **INTENT(IN)** — le contenu d'une telle variable est destiné uniquement à être lu et ne peut pas être modifié;
- **INTENT(OUT)** — le contenu d'une telle variable est supposé indéfini au moment de l'appel et ne peut pas être utilisé avant initialisation dans le sous-programme-même;
- **INTENT(INOUT)** — variable peut être considérée comme initialisée et son contenu comme librement modifiable;
- **OPTIONAL** — variable optionnelle, dont la présence ou non peut être testée à l'aide de la fonction logique intrinsèque `PRESENT(optional_var_name)`.

VARIABLES DE SOUS-PROGRAMMES : ATTRIBUTS SPÉCIAUX

Special Attributes for Subprogram Variables

Méthodes
numériques et
éléments de
programmation

Guy
Munhoven

Rappels

Sous-
programmes

VARIABLES locales

- **SAVE** — le contenu d'une telle variable est sauvegardé et restera disponible lors d'appels ultérieurs:

en général, une variable locale, à laquelle on n'a pas explicitement donné une valeur spécifique, doit être supposée comme indéfinie (c.-à-d., en pratique, à valeur aléatoire);

toute variable initialisée à la déclaration reçoit automatiquement l'attribut **SAVE**.
- **EXTERNAL** — cette variable donne le nom d'un sous-programme (de type **FUNCTION** ou **SUBROUTINE**).

Sous-programmes de type fonction

Function Subprograms

Méthodes
numériques et
éléments de
programmation

Guy
Munhoven

Rappels

Sous-
programmes

- Permet d'élargir la librairie de fonctions intrinsèques.
- Retour du résultat de l'appel de fonction
 - en affectant la valeur de retour à une variable locale de la fonction qui porte le même nom que le fonction;
 - en affectant la valeur à la variable *var_resultat* donnée en argument de l'option RESULT.
- Typage du résultat soit par
 - les règles de typage par défaut à partir de la première lettre du nom de la fonction (*déconseillé*);
 - préfixation du mot-clé FUNCTION avec le type;
 - déclaration d'un identificateur du même nom que la fonction avec le type désiré au sein de la fonction;
 - déclaration de la variable *var_resultat* de l'option RESULT dans la partie de déclaration de la fonction;
 - option RESULT obligatoire si le résultat est un tableau.

Sous-programmes de type fonction

Function Subprograms

Méthodes
numériques et
éléments de
programmation

Guy
Munhoven

Rappels

Sous-
programmes

Exemple d'appel de fonction

```
PROGRAM demo_func
...
INTEGER :: n_termes=10000
DOUBLE PRECISION :: pi, pi_calc! déclarer aussi la fonction
...
pi = pi_calc(n_termes)
END PROGRAM demo_func
! - - - - -
DOUBLE PRECISION FUNCTION pi_calc(n)
INTEGER, INTENT(IN) :: n! Variable muette
INTEGER :: i! Variable locale
DOUBLE PRECISION :: delta, pm_un = -1D0
pi_calc = 1D0! Nom de fonction peut être utilisé comme variable
DO i = 2, n
  delta = 1D0/(2D0*DOUBLE(i)-1D0)
  pi_calc = pi_calc + pm_un*delta
  pm_un = -pm_un
END DO
END FUNCTION pi_calc
```

Alternatives de typage pour fonctions

Alternative Function Typing

Méthodes
numériques et
éléments de
programmation

Guy
Munhoven

Rappels

Sous-
programmes

Exemples de typage

```
DOUBLE PRECISION FUNCTION pi_calc(n)
INTEGER, INTENT(IN) :: n! Variable muette
...
pi_calc = ...
END FUNCTION pi_calc
! - - - - -
FUNCTION pi_calc(n)
DOUBLE PRECISION :: pi_calc
INTEGER, INTENT(IN) :: n! Variable muette
...
pi_calc = ...
END FUNCTION pi_calc
! - - - - -
FUNCTION pi_calc(n) RESULT(pi)
DOUBLE PRECISION :: pi
INTEGER, INTENT(IN) :: n! Variable muette
...
pi = ...
END FUNCTION pi_calc
```

Sous-programmes internes/externes

Internal and External Subprograms

Méthodes
numériques et
éléments de
programmation

Guy
Munhoven

Rappels

Sous-
programmes

- Sous-routines et fonctions peuvent être incluses dans le programme principal ou d'autres sous-programmes entre les séparateurs CONTAINS et END ⇒ *procédures internes*
 - appelables uniquement à l'intérieur de l'unité de programme qui les contient
 - permet meilleure structuration des tâches à effectuer
 - *procédures internes* ont accès illimité aux variables de leur unité-hôte, sauf à celles qui y sont redéclarées, et qui restent locales à la procédure interne.
- Une procédure interne ne peut pas contenir de procédure interne.
- Tout sous-programme qui n'est pas contenu dans un autre programme/sous-programme est considéré comme *externe*, même s'il se trouve dans le même fichier.