ŋqdqɏeɎ bɆ dədɆbɎɜə d ɕɔɑbɔɏ Ɉqdqɏqɏè

УДК 004.438Fortran
ББК 32.973.22
М27

V27 Арьен Маркус

Современный Fortran на практике / пер. с англ. Снастин А. В. – М.: ДМК Пресс, 2015. – 308 с.: ил.

ISBN 978-5-97060-302-4

Язык программирования Fortran изначально был предназначен для математических вычислений с максимальной производительностью. В последний стандарт Fortran 2008 включено множество современных функциональных возможностей: средства объектно-ориентированного программирования, специализированные операции с массивами, типы, определяемые пользователем и поддержка параллельных вычислений.

Данное учебное руководство поможет программистам на языке Fortran научиться применять все вышеперечисленные функциональные возможности в соответствии с современными требованиями: модульность, лаконичность, объектно-ориентированный подход и рациональное использование ресурсов, а также организация работы с учётом наличия нескольких процессоров. В книге рассматриваются практические примеры взаимодействия с программами, написанными на языке C, управления памятью, применения графики и графических пользовательских интерфейсов, параллельные вычисления с использованием библиотек MPI, OpenMP и комассивов (coarrays). Кроме того, автор анализирует некоторые числовые алгоритмы и их реализации, а также показывает, как можно применить некоторые библиотеки с открытыми исходными кодами.

Original English language edition published by Cambridge University Press, 32 Avenue of the Americas, New York, NY 10013-2473, USA. © Arjen Markus 2012. Russian-language edition copyright © 2015 by DMK Press. All rights reserved.

Все права защищены. Любая часть этой книги не может быть воспроизведена в какой бы то ни было форме и какими бы то ни было средствами без письменного разрешения владельцев авторских прав.

Материал, изложенный в данной книге, многократно проверен. Но, поскольку вероятность технических ошибок все равно существует, издательство не может гарантировать абсолютную точность и правильность приводимых сведений. В связи с этим издательство не несет ответственности за возможные ошибки, связанные с использованием книги.

ISBN 978-1-107-01790-0 (англ.)
ISBN 978-5-97060-302-4 (рус.)

© Arjen Markus, 2012
© Оформление, перевод на русский язык
ДМК Пресс, 2015

ŋqdqɏeɎ bɆ dədɆbɎɜə d ɕɔɑbɔɏ Ɉqdqɏqɏè

ŋqdqɐeɎ bɆ dəpɆbɎɜə d ɕɔɑbɔɐ Ɉqqdɏqɐè

ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие Майкла Меткалфа 11

Предисловие автора 15

Глава 1. Введение в современный Fortran 17

1.1. Особенности современного Fortran 17

1.2. Fortran 90 21

1.3. Fortran 95 25

1.4. Fortran 2003 26

1.5. Fortran 2008 28

1.6. Что осталось неизменным.. 29

Глава 2. Функции для работы с массивами 32

2.1. Передача массивов в аргументах 33

Производительность при использовании функций обработки массивов 35

2.2. Элементные функции и автоматическое перераспределение памяти 36

2.3. Два более сложных примера 38

Дистанционирование иррациональных чисел 38

Быстрая сортировка QuickSort..40

2.4. Компактный стиль 41

Глава 3. Математические абстракции 44

3.1. Автоматическое дифференцирование 44

Проблемы при вычислениях 49

3.2. Дискретное программирование...................................... 50

Управление памятью 51

3.3. Перечислимое множество решений Диофантовых уравнений 53

3.4. Отложенные или ленивые вычисления 56

ŋqdqɐeɎ bɆ dəpɆbɎɜə d ɕɔɑbɔɐ Ɉqqdɏqɐè

ŋqdqɐeɎ bɆ dedɆbɎɜe d ɕɔɑbɔɐ Ɉqddɏqɐè

Глава 4. Управление памятью 60
4.1. Динамически изменяемые массивы 60
4.2. Утечки памяти при использовании указателей 61
4.3. Увеличение размера массива 62
4.4. Строки символов с изменяемой длиной 63
4.5. Сочетание автоматических и динамических массивов 66
4.6. Производительность массивов разных типов 67
4.7. Параметризованные производные типы 69
4.8. Утечки памяти в производных типах 71
4.9. Производительность и доступ к памяти 76
Глава 5. Проблема интерфейса 80
5.1. Подстановка параметров 82
5.2. Использование пула данных 84
Данные в модулях 85
Внутренние подпрограммы 88
5.3. Передача дополнительных аргументов 89
Массив параметров 89
Использование функции transfer() 90
Процедуры, связанные с типом 91
Указатели на процедуры 93
5.4. Управляющие конструкции 95
Библиотека OpenMP 100
5.5. Работа с числовыми значениями различной точности 102
5.6. Резюме 103
Глава 6. Взаимодействие с программами на языке C на примере работы с СУБД SQLite 105
6.1. Соответствие типов данных 106
6.2. Передача аргументов между подпрограммами, написанными на C и на Fortran 109
6.3. Соглашения об именовании и вызовах функций 110
6.4. Работа с производными типами 113
6.5. Создание интерфейса к СУБД SQLite 116
Глава 7. Графика, GUI и Интернет 124
7.1. Вывод результатов в графическом виде 125
7.2. Графические пользовательские интерфейсы (GUI) 131

ŋqdqɐeɎ bɆ dedɆbɎɜe d ɕɔɑbɔɐ Ɉqddɏqɐè

ŋqdqɏeɎ bɆ dədɆbɎзə d ɕɔɑbɔɏ Ɉqddɏqɏè

7.3. Интернет 139
7.4. Работа с XML-файлами 143

Глава 8. Модульное тестирование 148
8.1. Инструментальные средства тестирования 148
8.2. Пример: обработка трёхдиагональной матрицы 149
8.3. Проектирование и реализация 153
8.4. Заключительные замечания 155

Глава 9. Просмотр и рецензирование исходного кода 157
9.1. Соблюдать определённость и однозначность 158
Используйте явные объявления переменных и констант 158
Используйте предусловия 160
Переменные, сохраняющие свои значения между вызовами 161
Видимость интерфейса к подпрограмме или функции 161
Доступность переменных и подпрограмм 161
Вариант default в блоке select и ветвь else в блоке if 162
Информативные сообщения об ошибках 162
9.2. Избегать излишней сложности и запутанности 164
9.3. Избегать «ловушек» 169
Правильная обработка ошибок 169
Сравнение вещественных чисел 169
Смешанная точность 171
Неожиданные результаты при работе с отрицательными числами 171
Автоматические массивы 172
Ошибки могут возникать не только при работе с числами 173
9.4. Писать простой и понятный код 173

Глава 10. Устойчивая к ошибкам реализация нескольких простых алгоритмов 178
10.1. Обзор существующих подобных методик 179
10.2. Линейная интерполяция 181
10.3. Простые статистические методы и характеристики 187
10.4. Поиск корней уравнения 195

Глава 11. Объектно-ориентированное программирование 209
11.1. Расширение типов и процедуры, связанные с типами 209
Передача объекта в другом аргументе 211

ŋqdqɏeɎ bɆ dədɆbɎзə d ɕɔɑbɔɏ Ɉqddɏqɏè

ŋqdqɏeɎ bɆ dədɆbɎɜə d ɕɔɑbɔɏ Ɉqddɏqɏè

Расширение до трёх измерений ... 212
Пример: случайные перемещения в двух и в трёх измерениях ... 215
Определение динамического типа ... 217
Наблюдение за частицами ... 217
11.2. Интерфейсы как контракты ... 221
Аппроксимация множественного наследования ... 225
11.3. Использование прототипирования ... 226
Пример: моделирование поведения рыб ... 229
11.4. Абстрактные типы данных и обобщённое программирование ... 232
11.5. Изменение поведения типа данных ... 235
11.6. Шаблоны проектирования ... 237
Шаблон проектирования Factory ... 238
Шаблон проектирования Наблюдатель ... 241

Глава 12. Параллельное программирование ... 245
12.1. Простые числа ... 246
Библиотека OpenMP ... 248
Интерфейс MPI ... 251
Комассивы ... 255
12.2. Декомпозиция по доменам ... 259
OpenMP ... 261
MPI ... 265
Комассивы ... 266
12.3. Другие методики параллельного программирования ... 268
12.4. Резюме ... 270

Приложение А. Инструментальные средства для разработки и сопровождения ... 271
А.1. Компиляторы ... 271
А.2. Средства сборки программ ... 272
А.3. Интегрированные среды разработки ... 275
А.4. Средства проверки во время выполнения ... 276
А.5. Системы управления версиями ... 278
А.6. Документирование исходного кода ... 279
А.7. Охват кода тестированием и статический анализ ... 281

Приложение Б. Некоторые нюансы использования Fortran ... 285

ŋqdqɏeɎ bɆ dədɆbɎɜə d ɕɔɑbɔɏ Ɉqddɏqɏè

ŋqdqɐэʎ bɆ dэdɆbʎзэ d ɛɔɑbɔɐ Ɉqdqʎqɐè

Б.1. Особенности стандарта 285
- Вычисление логических выражений по короткой схеме 285
- Сохранение значений локальных переменных 286
- Ещё об инициализации 287
- Двойная точность и вычисление правой части выражений 287
- Передача одного и того же аргумента дважды 288
- REAL(4) 290
- Признак конца файла (EOF), вывод на экран и т. п. 290
- Внешние и внутренние (встроенные) подпрограммы 291
- Несовпадения в интерфейсах: предполагаемая форма и явная форма массивов 292
- Инициализация генератора случайных чисел 293
- Открытие одного и того же файла дважды 294

Б.2. Массивы 294
- Использование автоматических и временных массивов может привести к переполнению стека 294
- Границы массивов с начальным индексом меньше 1 296
- Объявления массивов: dimension(:) и dimension(*) 296

Б.3. Динамические библиотеки 297
- Открытие файла в программе и использование его в DLL и наоборот 297
- Выделение памяти в DLL и освобождение этой памяти в программе и наоборот 298
- Аргументы командной строки недоступны в DLL 298
- Подпрограммы или данные из основной программы, используемые в DLL 298

Приложение В. Зарегистрированные товарные знаки, упоминаемые в данной книге 300

Список литературы 302

Предметный указатель 309

ŋqdqɐэʎ bɆ dэdɆbʎзэ d ɛɔɑbɔɐ Ɉqdqʎqɐè