
Calcul numérique scientifique en Fortran avec A^ST_EX

Distribution A^ST_EX
(T_EX & Co pour PC)

Version française
Mai 1999 (3.0h)

MCours.com

Michel Lavaud

Distribution A^ST_EX
(T_EX & Co pour PC)

Calcul numérique scientifique en Fortran avec A^ST_EX
Version française
14 mai 1999

Ce manuel est disponible à l'adresse :

Association AsTEX
BP 6532
45065 ORLÉANS cedex 2 (France)

Tél. : 02 38 64 09 94

e-mails : astex-admin@univ-orleans.fr, delombera.negga@wanadoo.fr

web : <http://www.univ-orleans.fr/EXT/ASTEX>

Copyright © 1999, MICHEL LAVAUD

Table des matières

1	Introduction	5
1.1	Le compilateur g77 et Emx	5
1.2	La librairie Slatec	6
1.3	L'interface <code>fortran.bat</code>	6
2	Prise en main	7
2.1	Un premier essai	7
2.2	Intégration avec une sous-routine de SLATEC	8
2.3	Couplage avec \TeX	9
3	Compléments	11
3.1	La librairie SLATEC	11
3.2	Personnalisation de <code>fortran.bat</code>	12
3.3	Compilation et édition des liens	12
3.4	Documentation	12

Chapitre 1

Introduction

Ce chapitre décrit les ingrédients nécessaires pour faire des calculs en Fortran avec la distribution $\text{A}^{\text{S}}\text{T}_{\text{E}}\text{X}$.

1.1 Le compilateur g77 et Emx

Pour compiler et exécuter des programmes en Fortran, vous avez besoin d'un compilateur Fortran et de divers utilitaires (éditeur de liens, etc.) . La distribution $\text{A}^{\text{S}}\text{T}_{\text{E}}\text{X}$ contient le compilateur Fortran g77 , de la FSF, et le port Emx du compilateur gcc et des utilitaires GNU, par E. MATTES nécessaires pour compiler et exécuter des programmes en C. Tous ces programmes se trouvent dans le répertoire principal $\text{ast}\backslash\text{emx}$ du cédérom.

Emx est un port pour OS/2, donc 32 bits. Il est par conséquent aussi rapide que les autres ports 32 bits pour Linux et Windows 9x/NT¹. Par rapport à ces derniers, Emx présente le gros avantage d'être utilisable avec tous les systèmes d'exploitation disponibles sur PC (DOS, OS/2, Win 3.x/9x/NT et Linux), grâce aux utilitaires emx.exe de E. MATTES, rsx.exe et rsxwin.exe de R. SCHNITTKER².

¹Dans tous les cas et en dernier ressort, c'est du code pour 386 qui est exécuté, et la vitesse d'exécution de ce code dépend du processeur et non de l'OS.

²Ces deux utilitaires figurent par ailleurs déjà dans la distribution $\text{A}^{\text{S}}\text{T}_{\text{E}}\text{X}$ puisque $\text{emT}_{\text{E}}\text{X}$ les utilise aussi.

1.2 La librairie Slatec

Pour faire du calcul numérique scientifique, il vous faut aussi une librairie de sous-routines qui contienne les algorithmes de calcul numérique les plus fréquemment utilisés (pour vous éviter de les reprogrammer). La distribution $A^S T_{E^X}$ contient SLATEC (du Los Alamos National Laboratory et de Sandia Labs). Cette librairie regroupe environ 1400 sous-routines en Fortran 77, qui couvrent une grande partie des domaines du calcul numérique scientifique. Toutes ces sous-routines sont utilisables librement, et le code source est disponible. Les sources se trouvent dans le répertoire principal `ast\num\fortran\slatec` du cédérom.

Pour pouvoir utiliser une sous-routine quelconque de SLATEC, vous avez besoin du fichier source (pour le mode d'emploi) et du fichier `slatec.a` (pour l'exécution). Ce dernier se trouve dans le répertoire `ast\emx\lib`.

1.3 L'interface fortran.bat

La mise au point d'un programme en Fortran se fait (comme pour T_{E^X}) par le cycle habituel édition / compilation / exécution. Pour utiliser commodément le compilateur et la librairie Slatec, il vous faut une interface qui évite de taper une ligne de commande à chaque étape. La distribution $A^S T_{E^X}$ vous propose l'interface `fortran.bat`. Elle se trouve dans le répertoire `ast\astex` de votre disque dur. Vous pouvez la lancer en tapant `fortran` dans une fenêtre DOS, ou en cliquant sur le bouton Fortran de l'assistant $A^S T_{E^X}$ (barre d'outils Programmes | Programmes inclus dans $A^S T_{E^X}$ 3.0).

Cette interface est écrite dans le langage Batch du DOS, de sorte qu'elle puisse tourner telle quelle sous tous les systèmes d'exploitation disponibles sur PC (DOS, Win3.x/9x/NT, OS/2 et Linux). Par ailleurs, le code source est disponible ; vous pouvez donc l'adapter complètement à vos besoins et à vos habitudes. Un intérêt supplémentaire du langage Batch est que vous n'avez pas à acheter et/ou installer un compilateur ou un interpréteur spécial pour exécuter vos modifications.

Le revers de la médaille est que cette interface est très rustique : elle fonctionne en mode texte uniquement, le langage Batch du DOS ne permettant pas de créer des interfaces graphiques. Une version plus conviviale (mais spécifique à Windows 9x/NT) est en préparation.

Chapitre 2

Prise en main

Ce chapitre explique, à l'aide d'exemples simples, comment compiler un programme en Fortran, comment le lier à la librairie Slatec et comment sortir les résultats automatiquement en T_EX.

2.1 Un premier essai

Lancez le programme `fortran.bat` en cliquant sur le bouton Fortran de l'assistant A^ST_EX (panneau Programmes | Programmes inclus dans AsTeX 3.0), ou en cliquant sur l'icône Utilitaires DOS du dossier AsTeX 3.0 et en tapant `fortran` à l'invite du DOS. Ouvrez un nouveau fichier en cliquant sur l'option Nouveau fichier du menu principal, et donnez-lui pour nom `demos\essai` (sans extension) si ce n'est pas déjà fait¹.

Cliquez sur le nom du fichier pour confirmer ou tapez sur la touche Entrée. Le menu vous propose l'option Edition par défaut. Cliquez sur l'option ou tapez sur Entrée. Le texte du programme `demo.f` s'affiche :

```
C Fichier de demo
  write (6,2)
2   format('Au revoir')
    I=1
    J=I+1
    PRINT *, I,J
    end
```

¹C'est en principe l'option par défaut, à l'installation.

Cliquez sur **Fichier** | **Quitter** pour quitter l'éditeur. L'option **Compiler** est maintenant mise en inverse vidéo. Cliquez sur cette option ou appuyez simplement sur la touche **Entrée**. La compilation est alors lancée. Vous devez voir apparaître le message **** Compilation en cours**. Puis, lorsqu'elle est terminée, l'option par défaut du menu se met automatiquement sur **Exécuter**.

Cliquez sur cette option ou appuyez sur la touche **Entrée**. Vous devez alors voir s'afficher à l'écran :

```
Au revoir
1 2
* Exécution terminée.
```

Voilà ! Vous avez exécuté votre premier programme Fortran dans l'environnement d' $\text{A}^{\text{S}}\text{T}_{\text{E}}\text{X}$.

2.2 Intégration avec une sous-routine de SLATEC

L'utilité du Fortran vient du nombre considérable de sous-routines scientifiques écrites dans ce langage, et librement accessibles. Utilisons par exemple la sous-routine **AVINT** de la librairie **SLATEC**. Elle permet d'intégrer numériquement une fonction définie par une suite de paires (x_i, y_i) .

La distribution contient un programme de test de nom **h2a1b_01.f** dans le répertoire **ast\astex\demos**. Pour le vérifier, tapez sur la touche **F3**. Puis lancez le cycle édition / compilation / exécution :

1. Cliquez sur l'option **Nouveau fichier** du menu Fortran, entrez le nom **demos\h2a1b_01** et appuyez sur **Entrée** pour confirmer.
2. L'option **Editer** doit être en inverse vidéo. Appuyez sur **Entrée** pour voir le contenu du fichier :

```
DIMENSION X(5), Y(5)
...
```

3. Sortez de l'éditeur, ce qui vous fait revenir au menu principal Fortran, puis lancez comme précédemment les options **Compiler** puis **Exécuter**.
4. Vous voyez apparaître le message

```
Résultat : x^3/3 de 1 à 3 =  
8.66666698  
* Exécution terminée.
```

5. L'option `Editer` est maintenant en inverse vidéo. Sélectionnez-la, remplacez la ligne `XUP=3.` par `XUP=4.`, puis 3 par 4 dans l'instruction `FORMAT`, sauvegardez, compilez et exécutez comme indiqué ci-dessus. Vous devez maintenant avoir :

```
Résultat : x^3/3 de 1 à 4 =  
21.  
* Exécution terminée.
```

Voilà ! Vous venez de faire votre premier calcul numérique en utilisant une sous-routine de la bibliothèque SLATEC. Votre travail a consisté simplement à écrire les données à transmettre à la sous-routine, puis à récupérer le résultat. Vous n'avez pas eu à vous soucier des détails de l'algorithme d'intégration, ni de son implémentation en Fortran.

2.3 Couplage avec T_EX

Le couplage de T_EX avec les langages de programmation en général, et avec le Fortran en particulier, est très simple à mettre en œuvre, parce que T_EX permet d'écrire des formules mathématiques complexes avec du texte ASCII ordinaire et une syntaxe parfaitement connue (pas de codage propriétaire et non documenté) et parce qu'il est stable dans le temps (pas de modifications dans le codage, d'une version à l'autre)². Ceci permet de sortir le résultat d'un calcul Fortran avec la ou les formules mathématiques associées. Tout risque d'erreur de transcription est ainsi éliminé, contrairement à ce qui se passerait si l'on était obligé d'importer le résultat dans un éditeur d'équations tel que celui de Word.

Le programme de test `h2a1b_02.f`³ permet d'illustrer ce point :

²Ces raisons sont valables aussi pour les logiciels de calcul formel, tous permettant d'exporter leurs résultats en T_EX.

³Le fichier `h2a1b_02.f` se trouve dans le répertoire `ast\num\fortran\slatec\demos` du cédérom, ou dans le module `slatdoc.zip` du paquet de calcul numérique `PaqNumC`, si vous téléchargez la distribution sur le réseau.

1. Cliquez sur l'option **Nouveau fichier** et remplacez le 01 final par 02, de sorte que le nouveau nom de fichier est `h2a1b_02`.
2. Cliquez sur **Editer**, repérez le paragraphe «Impression du résultat en TeX».
3. Dans la première ligne de ce paragraphe (qui commence par `OPEN`), remplacez `h:` par le nom du lecteur où vous avez installé la distribution $A^S T_{E}X$.
4. Sauvez, compilez puis exécutez. Vous ne devez voir apparaître aucun résultat : il est enregistré dans le fichier `tempor1.tex` de votre répertoire temporaire.
5. Cliquez sur l'icône TeXShell, chargez le fichier `tempor1.tex` à l'aide de l'option `File|Open` puis compilez le document avec l'option `F6 Compose`.
6. Affichez le résultat avec l'icône `AsTeX dvi`. Vous devez voir apparaître le résultat sous la forme suivante :

$$\int_{1.00000}^{6.00000} f(x)dx = 71.66666$$

Voilà, vous avez créé votre premier document $T_{E}X$ à partir d'un programme Fortran, de façon automatique.

Cette méthode est particulièrement utile par exemple pour sortir des tables de formules avec différentes valeurs des paramètres, ou pour sortir le résultat d'un programme donné, avec des conditions expérimentales différentes à chaque lancement du programme.

Chapitre 3

Compléments

Ce chapitre explique comment choisir les sous-routines de la librairie Slatec et comment personnaliser l'interface `fortran.bat`.

3.1 La librairie SLATEC

La librairie SLATEC contient un peu plus de 1400 sous-routines. Celles-ci se trouvent dans le répertoire `ast\num\fortran\slatec\src` du CD-ROM.

La documentation de SLATEC se trouve dans le répertoire principal `ast\num\fortran\slatec\doc`. La documentation originale se trouve dans le sous-répertoire `en`, et la traduction en français d'André JACCOMARD dans le sous-répertoire `fr`. Vous pouvez afficher la documentation française à partir du panneau `PanDoc\Docmsc` de l'assistant $\text{A}^{\text{S}}\text{T}_{\text{E}}\text{X}$ (Doc / Fontes | Documentations diverses d'AsTeX).

Pour savoir quelle sous-routine utiliser, il faut se reporter à la classification GAMS (bouton `Slatec cls` du panneau `PanDoc\Docmsc` de l'assistant). Celle-ci classe hiérarchiquement les problèmes numériques. Par exemple, l'intégration et la différentiation numériques sont classées à la lettre H. La différentiation est classée à la rubrique H1 et l'intégration numérique à la rubrique H2. L'intégration de dimension 1 est dans la rubrique H2A et l'intégration numérique multidimensionnelle dans la rubrique H2B.

3.2 Personnalisation de fortran.bat

Vous pouvez très facilement adapter le programme `ast\astex\fortran.bat` à vos besoins ou à vos habitudes. Par exemple, si vous souhaitez éditer vos programmes Fortran avec notepad plutôt que edit, il suffit d'ouvrir le fichier `fortran.bat` sous éditeur et de remplacer les lignes :

```
:edit
rem notepad %FILE%.f
edit %FILE%.f
```

par

```
:edit
notepad %FILE%.f
rem edit %FILE%.f
```

3.3 Compilation et édition des liens

L'option `Compiler` lance plusieurs programmes les uns à la suite des autres. Pour avoir leur liste, vous pouvez taper, à partir de l'invite du DOS :

```
g77 -v essai.f
```

En cas de problème à la compilation, l'option `-v` (« verbose ») permet de savoir quel programme a été interrompu.

3.4 Documentation

Outre la documentation de Slatec, la distribution contient le livre *Professional Programmer's Guide to Fortran 77*, par Clive PAGE (suggestion de C. de IZARRA). Les fichiers `prof77.tex` et `prof77.dvi` se trouvent dans le module `fortran.zip` et sont installés dans le répertoire `ast\num\fortran\doc\en`.

Les principales documentations sur le Fortran sont accessibles à partir du panneau `PanDoc\Fortran` de l'assistant.