TARTU ÜLIKOOL
Arvutiteaduse instituut

Eero Vainikko

Fortran95 ja MPI

Tartu 2004

Selle õppevahendi koostamist toetas Eesti Infotehnoloogia Sihtasutus Tiigriülikooli projekti raames.

Toimetaja: Jaanus Pöial

© Eero Vainikko 2004

ISBN 9985-56-849-4

Tartu Ülikooli Kirjastus
www.tyk.ut.ee
Tellimus nr. 142

Sisukord

Sissejuhatus **5**

I Programmeerimine keeles Fortran95 7

1 Fortrani põhijooned **9**

1.1 Programmeerimiskeele FORTRAN ajalugu 11
1.2 Fortran77 puudusi 12
1.3 Mida uut on Fortran9x keeles võrreldes Fortran77-ga? 14

2 Fortran9x ja objekt-orienteeritus **17**

2.1 Andmetüübid 18
2.1.1 Põhitüübid 18
2.1.2 Konstantide defineerimine; esimene näiteprogramm 19
2.1.3 Kasutaja poolt defineeritavad e. tuletatud tüübid 20
2.1.4 Abstraktsed andmetüübid ja klassid 21
2.1.5 Polümorfism OO programmeerimise kontseptsioonis 25
2.1.6 Liidesedirektiiv 31

3 Keele Fortran9x elemendid **35**

3.1 Kommentaaride lisamine lähteteksti ridadele 35
3.2 Muutujate põhitüübid 35
3.3 Aritmeetilised operaatorid 36
3.4 Võrdlusoperaatorid 37
3.5 Stringitöötlus 38
3.6 Fortran95 viidad (*pointers*) 40

4 Massiivid ja operatsioonid nendega **43**

4.1 Fortran90 massiivide omadused 43
4.2 Elemantaaroperatsioonid massiividega 44
4.3 Massiivide sektorid ja konstruktorid 44
4.4 Reserveeritava mäluga massiivid 46
4.5 Automaatsed massiivid 47
4.6 Fiktiivsete argumentide deklareerimine 47
4.7 Standardfunktsioone massiividega 48

4.7.1 Päringufunktsioonid . . . 48
4.7.2 Kujumuutusoperatsioonid . . . 52
4.7.3 Vektorite ja maatriksite korrutamine . . . 52
4.7.4 Kitsendusfunktsioonid . . . 52
4.7.5 Asukohafunktsioonid . . . 53
4.7.6 Massiivi muutmise funktsioonid . . . 53
4.7.7 `WHERE` - direktiiv . . . 54
4.8 Sisend-väljund . . . 54
4.8.1 Formaadikirjeldused . . . 55
4.8.2 Failitöötlus . . . 56

II MPI (*The Message Passing Interface*) 59

5 Kontseptsioon 61

6 MPI kuus põhikäsku 65
6.1 MPI konstruktor ja destruktor . . . 66
6.2 Põhipäringud . . . 67
6.3 Teadete saatmine ja vastuvõtmine . . . 68
6.4 MPI-programmide kompileerimine ja käivitamine . . . 69

7 Veel MPI käske 71
7.1 MPI käskude liigitus . . . 71
7.2 Peamisi ühisoperatsioone . . . 71
7.3 Näide: Iseorganiseeruv kommunikatsioonimudel . . . 73

8 Mitteblokeeriv kommunikatsioon 77
8.1 Mitteblokeerivaid MPI käske . . . 77
8.2 Ühesuunaline kommunikatsioon kahe protsessori vahel . . . 78
8.3 Vastastikune kommunikatsioon ja tupikute vältimine . . . 79

9 Näide: Hõredate maatriksite klass 83
9.1 Hõredate maatriksite kolmikformaat . . . 83
9.2 Paralleliseerimine . . . 89
9.3 Kaasgradientide meetodi testimine . . . 99

Kokkuvõte 104

Kirjandus 105

Indeks 106

Sissejuhatus

Käesolev õppematerjal on mõeldud abivahendiks programmeerijale, kes vajab kõrgetasemelisi keelelisi vahendeid suuremahuliste ülesannete lahendamiseks, kus üheks oluliseks näitajaks on programmi tööaeg. Materjalid on kokku pandud Tartu Ülikooli Arvutiteaduse Instituudis autori poolt 2003. a. sügissemestril loetud erikursuse "Teadusarvutused" käigus, kuid on mõeldud laiemaks kasutamiseks nii teistel õppekursustel (nagu näiteks TÜ ATI erikursus "Paralleelarvutused") kui ka sõltumatuks kasutamiseks kõigile huvitatutele.

Me eeldame, et lugeja on tuttav programmeerimisega vähemalt ühes kõrgetasemelises keeles (nagu näiteks Java, C, C++, Pascal, MATLAB jne.) Materjali esitus baseerub suuresti näidetel ning süntaksivõrdlusel eri keelte vahel. Soovitav oleks et lugeja kasutaks käsikäes õppematerjaliga arvutit, kus on olemas Fortran90/95 kompilaator[1] ning installeeritud teateedastusteek MPI[2].

Kõik lähtetekstidena toodud programminäited on kättesaadaval internetiaadressilt `http://www.ut.ee/~eero/F95jaMPI/Kood/`. Näiteprogrammide koostamisel olid inspiratsiooniks mitmed nii autori enda kui ka õpilaste, kolleegide kui ka kirjanduses toodud näited. Kõik teiste poolt kirjutatud näiteprogrammid on autori poolt vähemal või rohkemal määral ümber kirjutatud ning modifitseeritud ja seetõttu oleks liiga keerukas viidata iga programmi kohta eraldi algtekstide komponentallikaid. Näidete valikul sai proovitud, kus vähegi võimalik, koostada täielikult töötavad programmid, mida lugeja saaks proovida ise kompileerida, käivitada, muuta, täiustada lähtetekste, eksperimenteerida. Julgustame siin seda aktiivselt tegema, kuna parim õppimisviis käib omarada läbi isikliku kogemuse!

Õppematerjali esimene osa on pühendatud programmeerimiskeelele Fortran.

Esimeses peatükis kirjeldame programmeerimiskeele valikukriteeriume, kirjeldame Fortrani eeliseid teiste levinud keelte seas ning anname lühikese ülevaate keele ajaloost. Ka kirjeldame lühidalt, mida uut tõi Fortran90/95 võrreldes eekäijatega.

Teises peatükis alustame keele detailsemat kirjeldamist, lähtudes eesmärgist kirjutada programme objekt-orienteeritud lähenemisviisil. Räägime andmete põhitüüpidest, kasutaja poolt defineeritavatest tüüpidest, abstraktsetest tüüpidest, klasside defineerimisest ning polümorfismist keeles Fortran90/95.

Kolmas peatükk tutvustab keele elemente. Toome mõningaid võrdlevaid tabeleid eri keelte sarnaste konstruktsioonide süntaksist. Räägime muuhulgas ka sõnetöötlusest Fortranis ja viidakäsitluse eripärast.

Neljas peatükk on pühendatud Fortran90/95 massiivitöötlusele. Kirjeldame massiivi-

---

[1]Õppematerjali kirjutamise ajal on näiteks Linux-tööjaamadele individuaalseks kasutamiseks tasuta litsentsiga saadaval Intel Fortrani kompilaator, vt. lähemalt `http://www.intel.com` .

[2]Vt. näiteks `http://www-unix.mcs.anl.gov/mpi/mpich/` või `http://www.lam-mpi.org/`

süntaksit, massiiviobjekte ning võimalikke operatsioone nendega, mõningaid käepäraseid eeldefineeritud funktsioone massiividega. Peatüki lõpetame Fortrani sisendi- ja väljundioperatsioonide kirjeldusega.

Antud õppematerjali teine osa on pühendatud teateedastusmeetodi standardile MPI (*the **M**essage **P**assing **I**nterface*).

Viies peatükk kirjeldab lühidalt teateedastusmeetodite üldist kontseptsiooni ja metoodikat nii MPI kui ka teiste teateedastusteekide puhul.

Kuuendas peatükis kirjeldame MPI kuut põhikäsku. Seitsmendas peatükis täiendame toodud käskudepagasit veel mõningate vajalike käskudega ühiskommunikatsiooni ja kahe protsessi vahelise suhtluse teostamiseks. Toome näite, kuidas kirjutada iseorganiseeruva kommunikatsiooniga programme.

Kaheksanda peatüki eesmärgiks on kirjeldada mitteblokeerivate kommunikatsioonikäskude kasutamist ning võimalusi tupikute vältimiseks paralleelprogrammides.

Viimases, üheksandas peatükis toome ühe reaalse näite paralleelprogrammeerimisest, kus demonstreerime Fortrani ja MPI kasutamist hõredate maatriksitega lineaarvõrrandite süsteemide lahendamisel kaasgradientide meetodil.

Mainime veel, et toodud materjal ei kata sugugi kogu Fortran95 ja MPI temaatikat ning seetõttu tuleks antud õppevahendisse suhtuda kui sissejuhatavasse materjali ning vajaduse korral pöörduda muu kirjanduse poole. Küll aga loodame, et käesoleva töö ilmumine eestikeelsena lihtsustab tunduvalt antud temaatika omandamist.

Autor on tänulik Merik Meristele antud õppematerjali käsikirjaga tutvumise, mitmete vigade paranduste ning kasulike soovituste eest, mis aitasid materjaliesitust täiustada.

Eero.Vainikko@ut.ee

Osa I

Programmeerimine keeles Fortran95

Peatükk 1

Fortrani põhijooned

Oletame, et meil on vaja sooritada suuremahulisi arvutusi näiteks teaduslikel eesmärkidel, modelleerimisel vms. Selleks tuleb meil leida sobiv riist- ja tarkvarast koosnev töökeskkond. Vaja on leida antud ülesande lahendamiseks sobiv riistvara piisavalt kiire protsessoriga, piisava mäluhulgaga jne. Ilmne küsimus on aga ka: millist programmeerimiskeelt ja muud abitarkvara kasutada? Keelevalikul suurte arvutusmahukate ülesannete lahendamiseks tuleks otsuse tegemisel esitada järgnevaid, omavahel paljuski seotud küsimusi:

A. Kui hästi üks või teine programmeerimiskeel saab hakkama ujukoma arvutustega?

Ujukomaoperatsioonide kiirus sõltub eelkõige ka arvuti protsessori arhitektuurist (näiteks, kui palju on konkreetsel protsessoril ujukoma-registreid ja konveiereid ujukomaarvudega operatsioonide teostamiseks), kuid paraku ka keele enda omapäradest. Näiteks tihti läheb (insener)arvutustes tarvis kompleksarvulisi muutujaid. On hea kui kompleksarvu-tüüp on keeleliselt toetatud, st. et tüüp kompleksarv on keeles olemas.

Nagu me näeme alapunktis 1.1, loodigi keel Fortran algselt silmas pidades vajadust efektiivselt ning lihtsalt sooritada suurel hulgal operatsioone ujukomaarvudega. Erinevalt näiteks C-keelte perekonnast, (keel C loodi tegelikult eelkõige süsteemprogrammeerimiseks), on kompleksarvu-tüüp Fortanis keele elemendiks.

B. Kuidas on realiseeritud massiivioperatsioonid?

Suurte andmehulkade töötlemisel organiseerime me andmeid enamasti massiividesse. Hea on, kui massiivid on keelde "sisse ehitatud" konstruktsioonid ehk andmeobjektid. See tagab nii programmitekstide lühiduse kui ka algoritmide realisatsiooni kompaktsuse. Lisaks on sellel suur mõju kompilaatori optimeerimisvõimele.

Fortran95-s **on** massiivid keele üheks lahutamatuks osaks. **Võib** öelda et massiivid on keelde sisseehitatud andmeobjektid. Programmeerimist lihtsustab massiivisüntaks keelelisel tasemel, see võimaldab üheselt määrata ära näiteks maatriksite ja vektorite vahelisi operatsioone ning kompilaator ise valib optimaalse realisatsiooni antud olukorrast lähtudes nende realiseerimiseks. Kuigi on võimalik ka näiteks C++ keelt täiendada massiivioperatsioonidega, ei saa me öelda, et see oleks antud keele algosa. Java-keeles on ujukomaarvude massiivid aga juba keele standardis defineeritud paraku kujul, mis teeb raskeks optimeerimise.

C. Millisel tasemel on kompilaatori optimeerimisvõime?

Kuigi on olemas teatud reeglid, mida optimaalsel programmeerimisel arvestada, jääb suur osa programmikoodi optimeerimistööst kompilaatori kanda. Ilmne reegel on: mida keerulisem keel, seda raskem on kompilaatoril teha õigeid optimeerimisotsuseid. Näiteks, keeles Fortran77 kirjutatud programmi on tunduvalt lihtsam optimeerida kui keeles C++, põhjuseks Fortran77 programmide staatiline mäluhaldus.

Fortran95 täiendab Fortran77 standardit moodsate keeleliste vahenditega, arvestades seejuures, et optimeeritavus säiliks niipalju kui võimalik. Objekt-orienteeritud kontseptsioonist rakendatakse vaid teatud kitsam osa, mis ei kahjusta programmikoodi optimeeritavust arvutuskiiruse mõttes.

D. Kas ja kuidas on realiseeritud objekt-orienteeritus?

Kuigi objekt-orienteeritud keelte eeliste detailsem väljatoomine ei mahu antud kirjutise raamidesse, mainime vaid, et mida keerulisemaks muutub kirjutatav programm, seda suurem on vajadus objekt-orienteeritud lähenemise võimaluste järele. Samas jällegi, mida keerulisemad ja võimalusterohkemad on objektid vaadeldavas keeles, seda raskem on kompilaatoril tagada optimaalsust.

Keeles Fortran95 on objekt-orienteeritus realiseeritud moodulite näol. Üks moodul võib sisaldada endas ühte või tervet hulka andmestruktuure, millel on defineeritud teatud operatsioonid. Samas võib öelda, et ka massiivid on keeles justkui omaette sisseehitatud klassid koos nendel defineeritud operatsioonidega.

E. Kuivõrd kõrgetasemeline on antud programmeerimiskeel?

Selge see, et C++ on kõrgetasemelisem kui C ning annab palju uusi võimalusi. Sarnaselt on Fortran95 kõrgematasemelisem keel kui Fortran77 ning muudab märksa lihtsamaks näiteks mäluhalduse ning massiividega opereerimise.

Kuigi ka Fortran95 keeles leidub igandeid, mis võimaldavad kirjutada halbu programme, on selles keeles kirjutatud arvutusliku iseloomuga programmid märksa lihtsamad ning kergemini loetavamad kui mõnes muus programmeerimiskeeles. Seda just tänu hästiarendatud massiivisüntaksi ja -operatsioonide toele.

Fortran95 kasuks räägib muuhulgas ka võimalus teha nn. massiivide indeksikontrolli, mis muudab programmide silumise ning muidu raskestiavastatavate vigade leidmise kergemaks. Tavaliselt on vaja programmi kompileerimisel anda kompilaatorile lisaparameeter `-C` mille tulemusena kompilaator genereerib ca 10 korda aeglasema programmi, kuid käivitamisel teostatakse reaalset massiiviindeksi piiride kontrolli (ja tihti ka näiteks mäluhalduse vigade otsingut) ning väljastatakse vastav veateade probleemide avastamisel.

Lisaks soovitaks lugeda artiklit aadressil http://www.lahey.com/PRENTICE.HTM, mis annab kujukaid fakte, mis demonstreerivad keelevaliku olulisust üht või teist sorti ülesande korral.

1.1 Programmeerimiskeele FORTRAN ajalugu

Programmeerimiskeele FORTRAN nimi on pärit IBM-lt, keele kompilaator *Mathematical **FOR**mula **TRAN**slation System* loodi 1950-ndate aastate lõpus. Antud keel oli mõeldud eelkõige matemaatiliste avaldiste ja arvutuste lihtsamaks programmeerimiseks sarnanemaks rohkem tegelikele matemaatilistele tekstidele. Eesmärgiks oli luua keel, mida oleks lihtne õppida, kuid mis oleks oma optimaalsuselt siiski suuteline võistlema assemblerkeelega. Enne seda kasutati programmeerimiseks masinkeelele sarnaseid programmikoode, programmeerija pidi muuhulgas hästi tundma konkreetse arvuti arhitektuuri, registrite arvu, masinkäskusid jne. Oma eesmärgi see üks esimesi kõrgtasemekeeli saavutas, võimaldades kiiremini programmeerida vaid väikese arvutuste efektiivsuskaoga: Fortran muutus kiiresti populaarseks. Aastaks 1963 oli loodud juba 40 erinevat kompilaatorit. Sisuliselt tekkis hulganisti erinevaid keele dialekte, mis tõi kaasa vajaduse keel standardiseerida.

Fortani versioonide ajalugu illustreerib kokkuvõtvalt järgmine graaf:

Fortran66 $\mapsto$ **Fortran77** $\mapsto$ **(Fortran8x)**$\mapsto$**Fortran90** $\mapsto$ **Fortran95** $\longrightarrow$ **(Fortran200x).**

Kirjeldame seda arengut järgnevas veidi lähemalt.

- Aastal 1966, peale 4 aastast tööd, valmis kõige esimene programmeerimiskeele standard üldse – Fortran66. Standard sisaldas kõigi dialektide ühisosa. Seega, selleks et kirjutada programme, mis töötaksid kõigil arvutitel, oli mõttekas järgida standardit. Standard pani aluse Fortrani järgnevale tuntusele – arvutitootjad varustasid oma tooted reeglina ka Fortrani kompilaatoriga. Samas jätkus keele täiustamine, kusjuures iga tootja tegi oma laiendusi, mis väljusid standardi raamest. Programmide lähtetekstide ühelt arvutilt teisele kohandamine muutus jälle keerukaks, kuna eri tootjad kasutasid erinevaid täiendusi, et kasvavate vajadustega kaasas käia. Ühilduvuseks võeti kasutusele nn. eeltöötluskäsud (sarnast tehnikat võime tihti kohata näiteks C koodides), mis halvendas aga programmide loetavust. See kõik ning lisaks ka paljude vahendite puudumine keeles lõi vajaduse täiustada standardit.

- Aastal 1978 loodi Fortran77 standard (USAs, 1980 ISO standardina).
  Fortran77, sisuliselt järjekordne dialekt, on tänapäevastes normides endiselt vanamoodne ning väheste võimalustega keel. Näiteks puudub selles rekursioon, dünaamiline mäluhaldus jms., peatume nendel lähemalt järgmises osas. Tänu keele suurele populaarsusele programmeerijate seas neil aastail ning lihtsusele, mida kujutas Fortran66 keeles kirjutatud programmide tõlkimine Fortran77 keelde, leidub tohutul hulgal endiselt kasutuses olevat tarkvara Fortran77-s.

- 1980 algul algas uue standardi loomine eelkõige põhjusel, et tekkinud olid uued keeled uute võimalustega ning paljud uued rakendused kirjutati juba muudes keeltes. Teadusarvutusteks, tehnilisteks ning numbrilisteks arvutusteks on aga Fortran alati parem olnud ning vaja oli keel kaasajastada. Uut standardit nimetati luues Fortran8x-ks kuid valmides sai sellest Fortran90. See on moodne Fortran77 täiendus, mis lisab mitmeid uusi võimalusi, samas on säilinud ühilduvus f77 standardiga ja keeles on

endiselt igandeid ehk vanamoodsaid keelekonstruktsioone, mis võimaldavad "kehvasti programmeerida". Ühilduvust oli vaja eelkõige selleks, et kergendada üleminekut uuele standardile ning et oleks võimalik kasutada tohutut hulka insenertehnilist ning teadusarvutuslikku tarkvarakogumit, mis selleks ajaks oli jõutud kirjutada.

- Järgnes Fortran95, hüpe ei ole siiski enam nii suur kui eelmise standardi loomisel. Hetkel töötatakse Fortran200x standardi kallal.

Ka keelel Fortran90/95 (ehk Fortran9x) on mitmeid täiendusi/modifikatsioone. Näiteks keel F, mille nime on inspireerinud keele C nime lühidus. Ka on keel ise Fortran90 lühendatud variant visates välja kõik igandid, mis keeles endiselt olemas selleks, et saaks kasutada Fortran77 programme. Iseenesest väga hea samm, kuid paraku tundub, et F ei ole võitnud piisavalt popolaarsust. Keel F on ühilduv Fortran90/95-ga, aga mitte vastupidi. Ka on olemas F tasuta LINUXi versioon.

Teiseks tuntuimaks modifikatsiooniks on HPF – High Performance Fortran, mõeldud paralleelprogrammeerimiseks. Sisuliselt täiendab see Fortran9x keelt spetsiaalsete makrodega, mis programmitekstis esituvad eriliste kommentaaridena kompilaatorile andmete paralleelse esituse ning töötluse kohta.

1.2 Fortran77 puudusi

Loetleme siin mõningaid standardse Fortran77 puudusi. Kuna Fortran77 lähtetekste on siiski võimalik kompileerida ka Fortran90 kompilaatoriga, siis on hea neid teada.

1. **Lähteteksti fikseeritud formaat *(fixed source format)***
   Üks kõige ebamugavamaid omadusi Fortran77-s. Päritud Fortran66-st, st. ajast kui programmeerimise osaks oli veel lähtetekstide käsitsi spetsiaalsesse vormi kirjutamine, mis pidi lihtsustama perforaatori tööd, kes iga käsurea kohta spetsiaalse masinaga perfokaardi mulgustas. Fikseeritud nõuded aga ise on järgmised:

   (a) 5 esimest positsiooni real on reserveeritud reanumbritele, ühes reas tohib olla kuni 72 sümbolit.

   (b) 6-s positsioon on rea jätkusümboli koht. Kui käsurida või avaldis on nii pikk, et ületab 72 sümboli piiri, saab rida jätkata, pannes 6-ndale positsioonile tühikust erineva sümboli. Tavaliselt peab seal olema aga tühik.

   (c) Kommentaare saab lisada vaid eraldi reana, pannes esimeseks sümboliks `C` või `$`. Seega, standardi järgi kommentaari rea lõppu lisada ei ole võimalik. Kommentaari saab siiski alustada suvalisest kohast real kasutades sümbolit "`!`", seda lubab enamus kompilaatoreid.

   (d) Standardis kasutatakse vaid suurtähti. Tegelikult enamus kompilaatoreid lubab kasutada ka väikeseid tähti, keel on tõstetundetu, st. et näiteks kirjed "`END`", "`End`" ja "`end`" on samatähenduslikud.

   (e) Identifikaatori maksimaalseks pikkuseks on 6 sümbolit. Tänapäevaste keeltega võrreldes on see muidugi väga ebamugav piirang, mis sunnib programmeerijat kulutama täiendavat aega sobivate lühendite väljamõtlemisele, muudab programmitekstide loetavuse halvemaks ning on vigade allikaks. Enamus hetkel kasutatavaid Fortran77 kompilaatoreid on sellest nõudest loobunud hoolimata standardist.

2. **Sisseehitatud paralleelsuse puudumine.** Näiteks massiiivitöötlusel tuleb Fortran77 korral iga massiivi elementi eraldi käsitleda, mis ei anna kompilaatorile piisavalt vabadust, juhul, kui on tegu näiteks mitmeprotsessorilise masinaga, et seda tööd protsessorite vahel jagada.

3. **Dünaamilise mäluhalduse puudumine.** Kogu kasutatav mälu tuleb standardi järgi ära määrata kompileerimise ajal. See on ühest küljest väga hea kompilaatorile endale – nii saab see teostada agressiivsemat optimeerimisstrateegiat. Samas on see aga ka väga piirav programmeerijale kuna tihti ei ole ette teada, kui suurt osa mälu ühel või teisel hetkel vaja läheb erinevate massiivide tarbeks. (Üsna tavaline praktika oli näiteks kirjutada omaenda `ALLOCATE`, ja `DEALLOCATE`-tüüpi käsud kus eraldati eri massiividele ühe suure algselt selleks etteantud massiivi osi vastavalt vajadusele programmi töö käigus. Vahel kutsuti aga isegi välja näiteks hoopis C-keele mäluhalduse operatsioone kui miski muu ei aidanud!) Mõnedel kompilaatoritel (näiteks SUNi f77) on aga mäluhalduse käsud standardiväliselt ka olemas.

4. **Kehv ühilduvus eri arhitektuuridel**. Seda just tänu erinevatele täiendustele eri tootjate poolt. See tekitas järjekordselt vajaduse uue standardi järele.

5. **Tuletatavate andmetüüpide (*ik. user-defined data types*) puudumine**, **rääkimata objekt-orienteerituse kontseptsiooni olemasolust**. Juhul, kui on tegemist suurema programmi või projektiga, mille kallal töötab mitu inimest või inimgruppi, siis on hästidefineeritud andmestruktuuride olemasolu ning objekt-orienteeritud lähenemisviis projekti edukuse üks eeltingimusi. Ilma kindla struktuurita programmi puhul tekib teatud piirist olukord, kus üht viga parandades tekib kümme viga juurde kuskil mujal programmmis.

6. **Rekursiooni puudumine**. Paljud algoritmid kasutavad rekursiooni. Optimeerimine läheb küll kompilaatoril rekursiooni puhul raskemaks, kuid rekursiooni võlu algoritmides on kirjutatud programmi lihtsuses ja lühiduses.

7. **Kõrvalefektide tekkimine ühisväljade jms. mäluoperatsioonide (nagu `COMMON`, `EQUIVALENCE`) kasutamisel.** Selliste keelekonstruktsioonide olemasolu muudab programmi muuhulgas raskesti loetavaks – ei ole võimalik nii lihtsalt aru saada, kus ja kas üks või teine teatud mäluaadressil paiknev muutuja oma väärtuse saab. See omakorda suurendab raskestiavastatavate vigade tõenäosust programmis.

Nagu nägime, on palju põhjusi Fortrani standardi kaasajastamiseks ning see standard on uuendamisel ka praegu. Vaatleme nüüd lähemalt uuendusi, mis Fortran90/95 tõid.

1.3 Mida uut on Fortran9x keeles võrreldes Fortran77-ga?

1. **Kasutusel on uus, vähemate piirangutega lähteteksti formaat.** Lühidalt võiks lähteteksti formaati kirjeldada järgmiselt:

   (a) Tegemist on nn. **vaba lähteteksti formaadiga** *(free source format)*, ükski positsioon ei ole eritähenduslik. Avaldise või käsu jätkamiseks uuelt realt kasutatakse sümbolit "`&`" jätkatava rea lõpus;

   (b) lubatud on kuni 132 sümbolit ühes reas;

   (c) lubatud on rohkem kui üks käsk samal real, käsud tuleb eraldada sel juhul semikooloniga;

   (d) on lubatud kirjutada kommentaare programmi lähtetekstiga samale reale, kommentaari algussümboliks on hüüumärk "`!`";

   (e) lubatud on nii suured- kui ka väikesed tähed (keel tõstetundetu);

   (f) identifikaatorid võivad olla kuni 31 sümbolit pikad, lubatud kasutada allkriipssümbolit "_ " eraldajana identifikaatori siseselt – see annab võimaluse paremini ja loetavalt programmeerida.

2. **Paralleelsust saab väljendada massiivioperatsioonides ja näiteks, `WHERE`-konstruktsiooniga.** Kui teostatakse massiivioperatsioone kasutades massiivinotatsiooni (vt. peatükk 4), saab kompilaator lisainformatsiooni massiivi elementide omavahelise sõltumatuse kohta antud operatsioonis ning teab, et antud operatsiooni on võimalik teostada paralleelselt, näiteks erinevatel konveieritel või protsessoritel.

3. **Dünaamilise mäluhalduse käskude olemasolu.** Lisatud on käsud `ALLOCATE` ja `DEALLOCATE` massiividele mälu eraldamiseks (vt. alapunkti 4.4). Ilma mälureserveerimise võimaluseta ei kujuta me tänapäeval ühtegi keelt ettegi.

4. **Eri arhitektuuridel ühilduvuseks on olemas konstruktsioon `KIND`.** Selliselt saab näiteks ära määrata konkreetsele muutujale määratud bittide arvu mis ei sõltu kasutatavast arhitektuurist (vt. alapunkti 2.1.1).

5. **Tuletatavad tüübid (*User-defined types*.)** Nii saab defineerida loogiliselt kokkusobivaid andmestruktuure, mis lihtsustab programmide loetavust ning programmeerimist üldse. Lähemalt teeme kasutaja poolt defineeritavatest tüüpidest e. tuletatud tüüpidest juttu alapunktis 2.1.3.

6. **Rekursioon on lubatud**. Fortran90/95 tuleb aga kompilaatorile öelda, kui tegemist on rekursiivse protseduuriga, vt. lähemalt alapunkti 2.1.5.

7. **Objektid, protseduurid, tüübid, gobaalsed ja lokaalsed definitsioonid** saab pakkida kokku **moodulitesse** (vt. Peatükki 2), s.o. objekt-orienteeritus on rakendatud keelekonstruktsiooni `module` abil.

- **Massiivide kujumuutuse operatsioonid (*reshaping and retyping*)** võimaldavad vältida Fortran77 staatilist `EQUIVALENCE` käsku (vt. alapunkti 4.7.2).
- **Protseduurliideste määramise võimalus (konstruktsioon `INTERFACE`)**, mis muuhulgas aitab kompilaatoril programmi optimeerida ning täpsustada semantikat teekide puhul. Teatud juhtudel on liides isegi kohustuslik (vt. alapunkti 2.1.6).
- **Võrreldes Fortran77-ga on järgnevad juhtimiskäsud uudsed:**
  - `DO`...`ENDDO`-tsükkel;
  - `DO`...`WHILE`-tsükkel;
  - `EXIT` – tsüklist väljumine;
  - `CYCLE` – hüpe tsükli uuele ringile;
  - `SELECT CASE` konstruktsioon.
- **Saab kasutada kapseldamist (*ik. encapsulation*).** Seesmised (ehk privaatsed) protseduurid või muutujad saab teha kättesaadavaks vaid lokaalselt antud moodulis.
- **On olemas võimalus operaatorite üledefineerimiseks.** Operaatorite üledefineerimine võimaldab lihtsustada programme keeruliste andmestruktuuride korral, muuta programmi loetavamaks ning lisada soovitud definitsioone ka moodulitele.

Märkus. Enamasti, soovist toetada täielikult ka Fortran77 standardit, leidub keeles Fortran90 mitmeid igandeid, mis on pärit juba Fortran66-st! Need on standardis varustatud märkega *"obsolescent"*. Selliste struktuuride hulka kuuluvad näiteks aritmeetiline `IF`-direktiiv, `ASSIGN`, `ASSIGN`-märgistatud `GOTO`-käsk, `FORMAT`-direktiiv, `PAUSE`-käsk, mitme `DO`-tsükli lõpetamine ühel märgendatud real. Enamikku neist Fortran95 standardis niikuinii enam ei eksisteeri. Standardis on veel ka konstruktsioone, mis on ilma *"obsolescent"* märgendita, kuid mida siiski ei soovitata kasutada. Nende hulka kuuluvad sellised konstruktsioonid nagu fikseeritud lähteteksti kuju (st. nagu Fortran77 korral); kaudselt defineeritud muutujad (**soovitav on kasutada alati `IMPLICIT NONE` käsku!**); `COMMON`-blokk; `EQUIVALENCE`-käsk (– tuleks kasutada `TRANSFER`-käsku tüübi muutusteks, võtmesõna `POINTER` muutujate aliaste defineerimiseks ning `ALLOCATABLE` atribuuti ajutise mäluruumi haldamiseks); `ENTRY`-käsk (mis lubab funktsiooni või alamprogrammi täitmist alustada mujalt kui esimeselt direktiivilt).

Peatükk 2

Fortran9x ja objekt-orienteeritus

Programmeerimiskeele Fortran77 puhul on tegemist protseduurkeelega, s.t. kasutaja programm koosneb üldjuhul järjestikusest protseduuride (funktsioonide, alamprogrammide) kogumist, mis üksteist välja kutsuvad ning peale töö lõppu juhtimise oma väljakutsujaprotseduurile tagasi annavad. Andmete üleandmine ühelt protseduurilt teisele toimub kas parameetrite abil või kasutades globaalseid mäluaadresse (`COMMON`, `EQUIVALENT`-käsud). Protseduurkeelte "hädad" suurte programmipakettide kirjutamisel on üldteada (näiteks, piisavalt suure projekti korral, parandades programmi mingis osas ühe vea on kerge tekitada mitu uut juurde mingis teises kohas) ning soovitav on kasutada objekt-orienteeritud lähenemisviisi. Eelnevalt nägime, et Fortran90 standard toetab endiselt ka Fortran77 protseduurlähenemisviisi, seega võimaldab kirjutada vanamoodsaid programme. Siin me püüame anda ülevaate, kuidas programmeerida objekt-orienteeritult Fortran9x keeles.

Kokkuvõtvalt võib öelda:

Objekt-orienteeritus (OO) on keeles Fortran90 realiseeritud moodulites; moodulid kätkevad endas klasse ning globaalseid andmestruktuure. OO paradigmast realiseerib Fortran9x vaid selle osa, mis tagab programmikoodi hea optimiseeritavuse.

Loetleme siin lühidalt OO paradigma elemendid, mis on Fortran9x-s realiseeritud:

- andmetüüpide abstraktsioon – saab defineerida tuletatud tüüpe ehk kasutajaandmetüüpe (lähemalt vt. alapunkti 2.1.3);
- andmete nähtavuspiirkondade juhtimine – `PRIVATE` ja `PUBLIC` atribuudid;
- kapseldamine – andmestruktuure ning meetodeid saab organiseerida moodulitesse ning saab kasutada eelmainitud andmete peitmise vahendeid;
- andmetüüpide ning meetodite päritavus ja laiendatavus – supertüübid, operaatorite üledefineerimine;
- taaskasutatavus – moodulid;
- polümorfism (*polymorphism*) – eri klassid ja objektid omavad sama funktsionaalsust. Saab kasutada programmikoodis, mis vajab seda funktsionaalsust sõltumata sellest, millise klassi või objektiga on tegu.

Järgnevalt käsitleme eeltoodud omaduste realisatsiooni keeles Fortran9x täpsemalt.

2.1 Andmetüübid

Fortran9x andmetüüpide käsitlemisel lähtume järgnevast skeemist:

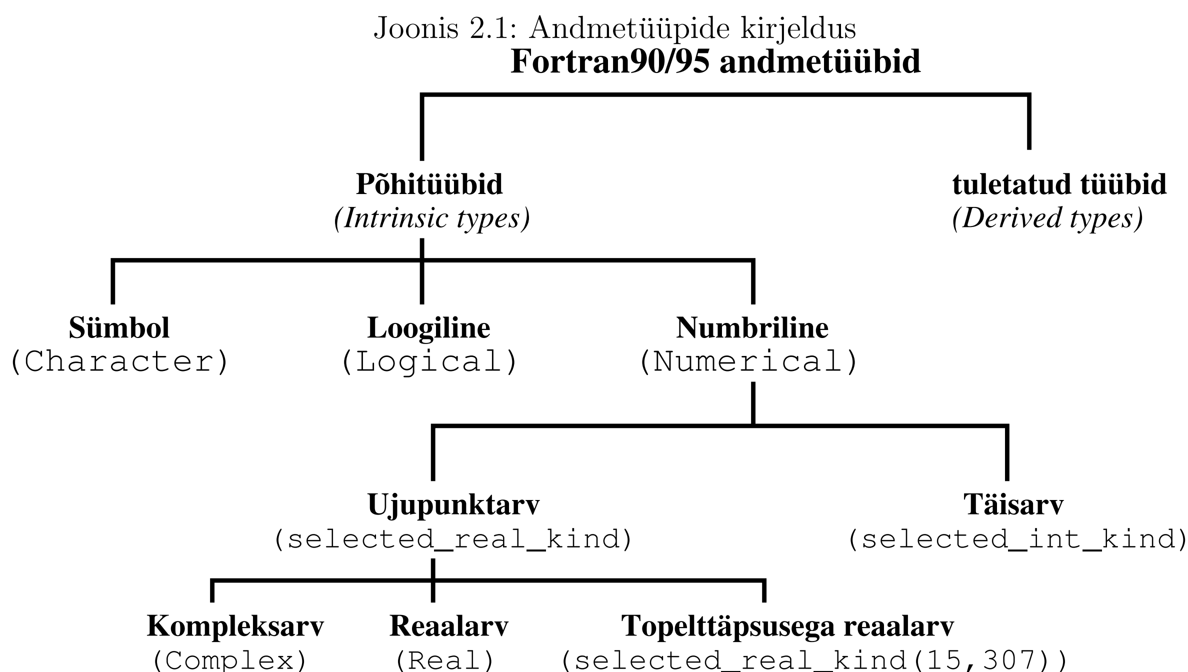
Põhitüübid → tuletatud tüübid → abstraktsed tüübid → klassid

Toodud skeem illustreerib OO kontseptsioonile tuginedes klasside kujunemist lähtudes põhitüüpide organisatsioonist tuletatud tüüpidesse lisades vajalikud abstraktsioonid.

2.1.1 Põhitüübid

Fortran9x põhitüübid (*inglise k. intrinsic types*) võib jagada kolme klassi: sümboltüüp (*character*), loogiline (*logical*) ja numbrilised tüübid (vt. joonist 2.1).

Joonis 2.1: Andmetüüpide kirjeldus



Sümboltüüp on analoogiliselt teiste keeltega mõeldud positiivsete täisarvuliste väärtuste ehk ASCII-koodi elementide määranguks; loogilise tüübi puhul on võimalikud 2 väärtust: kas tõene (`.true.`) või väär (`.false.`). Numbrilised ehk arvutüübid jagunevad täisarvudeks ning ujukomaarvudeks. Arvutüübid 32-bitisel protsessoril on järgmised:

Tüüp	Bittide arv	Kümnendkohtade arv	Piirkond
integer	16	10	-32,768 kuni 32,768
real	32	6	-10^{37} kuni 10^{37}
double precision*)	64	15	-10^{307}kuni 10^{307}
complex	2×32	2×6	2 real-tüüpi
*) F90 “igand” - vt. `selected_real_kind`			

Kuna erinevatel arvutiarhitektuuridel võivad standardse täisarvu või ujukomaarvu pikkused olla erinevad, siis ühilduvuse huvides on defineeritud käsud `selected_int_kind` ja `selected_real_kind`. Näiteks,

```
long = selected_int_kind(9)
topelt = selected_real_kind(15,307)
kvadraat = selected_real_kind(18,4932)
```

määrab täisarvutüübi `long` piirkonnaga -10^9 kuni 10^9, ujukomaarvutüübi `topelt` 15 kümnendkohaga ja eksponendiga vahemikus ±307 ning `kvadraat` 18 kümnendkohaga ja eksponendi piirkonnaga ±307. Juhul kui antud protsessor toetab toodud arvutüüpe, siis `integer(long)`, `real(topelt)` ja `real(kvadraat)` vastavad C++ tüüpidele `long int`, `double` ja `long double`. Juhul kui protsessor mõnda neist ei toeta, väljastatakse `kind`-muutuja väärtuseks negatiivne arv. Antud juhul võiks kasutada `real(topelt)` asemel ka Fortran77-st pärit `DOUBLE PRECISION` kuid seda peetakse Fortran9x igandiks.

2.1.2 Konstantide defineerimine; esimene näiteprogramm

Meie “hello-world”-programmiks on 2.1, kus on toodud näide konstantide defineerimisest ning nende organiseerimisest eraldi moodulisse. Mooduli kasutamiseks on `use`-käsk real number 17.

Lähtetekst 2.1: Matemaatiliste konstantide defineerimine

```
1  ! fail: Konstandid.f90
2  ! Moodul mis defineerib topelttäpsusega matem. konstante
3  module Konstandid ! Mooduli nimi
4    implicit none   ! Identifikaatoritüübi vaikeväärtusi pole vaja
5    !integer,parameter :: dp = selected_real_kind(15,307)
6    integer,parameter  :: dp = kind(1.d0) ! Alternatiivne kuju
7    real(dp),parameter :: e_Vaartus    = 2.71828182845904523560287_dp
8    real(dp),parameter :: pi_Vaartus   = 3.14159265358979323846264 3_dp
9    real(dp),parameter :: pi_Ruudus    = 9.86960440108935861883449 1_dp
10   real(dp),parameter :: pi_Ruutjuur  = 1.77245385090551602729816 7_dp
11   real(dp),parameter :: Ruutjuur_2st = 1.41421356237309504880_dp
12   ! kind-atribuudi alternatiivne süntaks: real(kind=dp) ...
13   real(kind=dp),parameter :: Ruutjuur_3st =  1.7320508075688772935_dp
14 end module Konstandid
15
16 program Test ! põhiprogrammi algus
17   use Konstandid   ! Kasuta defineeritud konstante
18   implicit none    ! Identifikaatoritüübi vaikeväärtusi pole vaja
19   real :: pi                          ! Lokaalse muutuja def.
20   print *, 'pi Vaartus on: ', pi_Vaartus ! Kuva konstant
21   pi = pi_Vaartus ; print *, 'pi = ', pi ! Esita madalama täpsusega
22 end program Test
23 ! Programmi väljund (Intel Fortran Compiler) :
24 ! pi Vaartus on:     3.14159265358979
25 ! pi =     3.141593
```

Märgime veel, et käsk `implicit none` (programmiridadel 4 ja 18) ütleb kompilaatorile, et ühelegi identifikaatorile antud blokis vaikimisi tüüpi ei määrata. Nii peab iga muutuja tüüp olema määratud, vastasel juhul genereeritakse kompileerimisel vastav viga. Juhul kui

`implicit none` ära jätta, saavad kõik muutujad, mis algavad sümboliga `i`,`j`,`k`,`l`,`m` või `n` automaatselt tüübiks `integer`, kõik ülejäänud aga tüübi `real`. Sellisel kompilaatori käitumisel ei oleks tegelikult midagi viga juhul, kui programmeerija suudab olla järjekindel, nimetades kõiki muutujaid vastavalt või defineerides tüübi vastasel juhul. Tõeline probleem võib aga tekkida juhul, kui kogemata teha mõne muutuja kirjapildis trükiviga. Tulemusena võib selline viga olla üliraskelt avastatav. Kuigi, ka siin on abi enamasti olemas: kompilaatoritel on parameeter (`-u` nii Inteli kui ka SUNi kompilaatori puhul), mis lisab `implicit none` vaikimisi justkui igale poole.

2.1.3 Kasutaja poolt defineeritavad e. tuletatud tüübid

Tuletatud tüüpide (*user-defined types*) loomisega tutvume järgneva näite varal:

Lähtetekst 2.2: Tuletatud tüüpide defineerimine

```
1  ! fail: tyybiloome.f90
2  program tyybiloome
3    implicit none
4    type keemiline_element                  ! Tuletatud andmetüüp
5      character(len=2) :: symbol
6      integer          :: aatomnumber
7      real             :: aatommass
8    end type
9    type(keemiline_element) :: argoon, sysinik, neoon ! elemendid
10   type(keemiline_element) :: Mendelejevi_Tabel(109) ! massiiv
11   real                    :: mass ! standardpikkusega ujupunktarv
12
13   sysinik%aatommass   = 12.010 ! komponendi väärtuste
14   sysinik%aatomnumber = 6      ! omistamised
15   sysinik%symbol      = "C"    !
16   argoon = keemiline_element("Ar",18,26.98) ! elemendi loomine
17   read *,neoon                           ! sisestada Ne 10 20.183
18   Mendelejevi_Tabel(5)  = argoon         ! elemendi lisamine massiivi
19   Mendelejevi_Tabel(17) = sysinik        ! elemendi lisamine massiivi
20   Mendelejevi_Tabel(55) = neoon          ! elemendi lisamine massiivi
21   mass = Mendelejevi_Tabel(5)%aatommass ! komponendi väärtus
22   print *, mass                     ! annab   26.98000
23   print *, neoon                    ! annab Ne          10    20.18300
24   print *, Mendelejevi_Tabel(17)! annab C            6    12.01000
25 end program tyybiloome
```

Programmis 2.2 defineeritakse ridadel 4-8 tüüp `keemiline_element` ning ridadel 9-10 on näide loodud tüübi kasutamisest. Nagu näeme, kasutatakse individuaalkomponentide eraldajana märki "`%`" (nagu näiteks ridadel 13-15); uuele tüübimuutujale väärtustekomplekti omistamiseks võib kasutada konstruktsiooni:

```
<tüübimuutuja>=<tüüp>(<kompon.1_väärtus>,<kompon.2_väärtus>,...)
```

nagu on toodud real number 16. Märkame ka, et näiteks sisestus- ja väljastusoperatsioone võib teostada tüübimuutuja kui tervikuga (ridadel 17 ja 23).

Loomulikult võib tuletatud tüübis kasutada ka juba olemasolevaid tuletatud tüüpe.

Järgnev programm demonstreerib eeltoodud näites defineeritud tüübi `keemiline_element` kasutamist tuletatud tüübis `ajalugu`:

Lähtetekst 2.3: Varemdefineeritud tuletatud tüübi kasutamine tuletatud tüübis

```
! fail: tyyptyybis.f90
program tyyptyybis
  implicit none
  type keemiline_element                      ! Tuletatud andmetüüp
    character(len=2) :: symbol
    integer          :: aatomnumber
    real             :: aatommass
  end type
  type ajalugu                                ! teine tüüp
    character(len=31)        :: elemendi_nimi
    integer                  :: avastamise_aasta
    type(keemiline_element)  :: keemia
  end type ajalugu
  type(keemiline_element)    :: hapnik                ! elemendid
  type(keemiline_element)    :: argoon,sysinik,neoon  ! elemendid
  type(keemiline_element)    :: Mendelejevi_Tabel(109) ! massiiv
  real                       :: mass ! standardpikkusega ujupunktarv
  type (ajalugu)             :: Joseph_Priestley      ! Avastaja

  sysinik%aatommass    = 12.010            ! komponendi väärtuste
  sysinik%aatomnumber = 6                  ! omistamised
  sysinik%symbol       = "C"               !
  argoon   = keemiline_element ("Ar", 18, 26.98) ! elemendi loomine
  hapnik = keemiline_element ("O",  76, 190.2)   ! elemendi loomine
  read *, neoon                             ! sisestada Ne 10 20.183
  Mendelejevi_Tabel( 5) = argoon        ! elemendi lisamine massiivi
  Mendelejevi_Tabel(17) = sysinik       ! elemendi lisamine massiivi
  Mendelejevi_Tabel(55) = neoon         ! elemendi lisamine massiivi
  mass = Mendelejevi_Tabel(5)%aatommass ! komponendi väärtus
  print *, mass                    ! annab   26.98000
  print *, neoon                   ! annab Ne          10    20.18300
  print *, Mendelejevi_Tabel(17) ! annab C             6    12.01000
  Joseph_Priestley = ajalugu("Hapnik",1774,hapnik) ! loomine
  print *, Joseph_Priestley ! annab: (Intel Fortran)
  ! Hapnik                        1774 O            76    190.2000
end program tyyptyybis
```

2.1.4 Abstraktsed andmetüübid ja klassid

Anname siin lühikese kirjelduse abstraktsetest andmetüüpidest ning sellest, millised vahendid leiduvad Fortran9x-s nende realiseerimiseks. Võib öelda et **abstraktne andmetüüp** (*Abstract Data Type (ADT)*)

- väljendab andmetüübi põhiomadusi,
- on defineeritud programmeerimiskeelest sõltumatul kujul,
- defineeritakse eelkõige lähtudes käitumisest ning tegelik realisatsioon on teisejärguline.

Toodud ADT omadused on Fortran9x keeles väljendatavad tuletatud tüüpide abil. Lisaks määrab ADT ära ka

- meetodid mis seotud antud andmetüübiga ja
- andmete ning meetodite nähtavuse.

Viimane omadus annab võimaluse peita ADT kasutaja eest ebaolulisi rakendusega seotud detaile. Me soovime et ADT kasutaja saaks ligipääsu vaid kasutajale olulistele komponentidele ning meetoditele ning ei vaeva teda üksikasjadega, kuidas miski realiseeritud on. Fortran9x annab selleks `PUBLIC` ja `PRIVATE` atribuutide lisamise võimaluse ADT eri komponentidele (nii muutujatele kui ka meetoditele).

Klass on sisuliselt vaid paar sammu edasi ADT-st. **Klass** on ADT laiendatuna kahe spetsiaalse meetodiga: **konstruktor** ja **destruktor**. Konstruktor on meetod, mis kutsutakse välja objekti loomisel – reserveeritakse mälu, algväärtustatakse muutujad. Destruktor aga vastupidi, teostab operatsioonid, mis on vajalikud objekti eksistentsi lõpetamisel: vabastab mälu jms.

Fortran95-s on automaatne mäluvabastus (Fortran90-s veel mitte). Automaatse mäluvabastuse korral tühistatakse mälueraldused automaatselt juhul, kui objekt ei ole enam aktiivne. Siiski on soovitav organiseerida mäluvabastust ise. Programmi paremaks tööks ja paremaks optimeerimisvõimeks soovitatakse lisaks vabastada mälu vastupidises järjekorras reserveerimisele, kui muidugi võimalik. See vähendab mälu fragmenteeritust ning parandab töökiirust.

Märkus. Fortran9x võimaldab ühte moodulisse koguda rohkem kui ühe tuletatud tüübi koos vastavate meetoditega. Lisaks saab moodulis defineerida ka globaalsed muutujad ja konstandid. Sellisena on defineeritav moodul mõnevõrra erinev klassikalise objekt-orienteeritud kontseptsiooni tavadest, võimaldades tegelikult teha rohkem kui "puhas" objekt-orienteeritud kontseptsioon lubaks.

Näide: Abstraktne andmetüüp ja klass

Järgnev näide illustreerib, kuidas defineerida abstraktseid andmetüüpe ning klasse.

Fibonacci arvudeks nimetatakse naturaalarvude jada $\{F_n\}$, kus $F_0 = F_1 = 1$ ja $n \geq 2$ korral

$$F_n = F_{n-1} + F_{n-2},$$

st. 1, 2, 3, 5, 8, 13, 21, ...

Lähtetekst 2.4: Fibonacci arvude klass

```
1 ! Fail: Fibonacci_arvud.f90
2 module klass_Fibonacci_arv
3
4   ! kõigepealt andmestruktuurid:
5   implicit none              ! (Aamen kirikus:)
```

```
6    public :: Liida,Valjasta          ! meetodid kasutajale
7    type Fibonacci_arv                ! tuletatud tüüp
8      private                         ! privaatsed muutujad:
9      integer :: alumine,ylemine,piir
10   end type Fibonacci_arv
11
12 contains ! seejärel meetodid antud klassis
13
14   function uus_Fibonacci_arv(max) result(num) ! isetehtud konstruktor
15     implicit none
16     integer,optional     :: max
17     type(Fibonacci_arv)  :: num
18     num = Fibonacci_arv (0, 1, 0)      ! sisseehitatud konstruktor
19     if (present(max)) then ! juhul kui piir oli antud:
20       num = Fibonacci_arv (0, 1, max) ! sisseehitatud konstruktor
21     endif
22   end function uus_Fibonacci_arv
23
24   function Liida(farv) result(summa)
25     implicit none
26     type(Fibonacci_arv),intent(in) :: farv ! sisendparam.-ei muuda
27     integer                        :: summa
28     summa = farv%alumine + farv%ylemine     ! liida komponendid
29   end function Liida
30
31   subroutine Valjasta(num)
32     implicit none
33     type (Fibonacci_arv),intent(inout) :: num      ! (muudab argumenti)
34     integer                            :: j,summa
35     if (num%piir < 0) return                  ! ei ole midagi teha
36     print *, 'M  Fibonacci(M)'                ! pealkiri
37     do j = 1, num%piir                        ! tsükkel üle piirkonna
38       summa = Liida(num)       ; print *, j, summa    ! liida ja väljasta
39       num%alumine = num%ylemine ; num%ylemine = summa ! täiusta
40     end do
41   end subroutine Valjasta
42 end module klass_Fibonacci_arv
43 ! include 'Fibonacci_arv.f90' ! vajalik juhul kui moodul olnuks eraldi
44                               ! failis antud nimega
45 program Fibonacci                      ! Põhiprogramm
46   use klass_Fibonacci_arv              ! pärib muutujad ja liikmed
47   implicit none
48   integer, parameter      :: lopp = 8 ! etteantud piir
49   type (Fibonacci_arv) :: num
50   num = uus_Fibonacci_arv(lopp)! isetehtud konstruktor
51   call Valjasta (num)           ! luua ja väljastada arvude jada
52 end program Fibonacci
53 ! käivitamine annab:
54 !  M  Fibonacci(M)
55 !  1  1
56 !  2  2
57 !  3  3
58 !  4  5
59 !  5  8
60 !  6  13
61 !  7  21
62 !  8  34
```

Fortran9x keeles on tuletatud tüüpide puhul olemas nn. **sisseehitatud konstruktor**. Sisseehitatud konstruktori nimeks on tuletatud tüübi nimi; parameetritena antakse ette kõik tuletatud tüübi moodustavate muutujate soovitavad väärtused. Toodud näites kasutatakse seda ridadel 18 ja 20 **kasutaja poolt defineeritava konstruktori** ehk **manuaalse konstruktori** (rida 14) loomisel. Nii on tavaks defineerida konstruktoreid mille puhul puuduvate liikmete väärtused asendatakse vaikeväärtustega.

Äsjatoodud näites kohtame ka direktiivi `intent` (ridadel 26 ja 33), mis on alati soovitatav lisada protseduuri argumentidele. See määrab ära antud funktsiooni või alamprogrammi kavatsuse antud argumendi suhtes. Võimalikud väärtused on:

- `intent(in)`, mis tähendab, et antud parameeter on vaid sisendparameeter ning selle väärtus antud blokis ei muutu. See tähendab muuhulgas, et antud protseduuris väärtuse omistamine sellele genereerib kompileerimisvea.
- `intent(out)` tähendab, et tegemist on vaid väljundparameetriga. Enne sellele väärtuse omistamist avaldistes kasutamine genereerib vea.
- `intent(inout)` – nii sise- kui ka väljundparameeter; kitsendusi ei ole.

Parameetrite liik on soovitatav ära määrata selleks, et vähendada eksimisvõimalusi programmeerimisel, kuid ka põhjusel, et nii antakse kompilaatorile optimeerimiseks vajalikku lisainformatsiooni, mis lihtsustab protsessi ja muudab tulemuse efektiivsemaks.

Toome siin ka näite `intent`-atribuutide kasutamise kohta:

Lähtetekst 2.5: Parameetrite edastamine alamprogrammidele väärtuse ja viida abil.

```
1  ! Fail: intent_tyybid.f90
2  program main
3    implicit none
4    integer :: sisestus
5    print *,"sisesta täisarv: "
6    read *, sisestus; print *,"Sisestati ",sisestus
7    ! Parameetri edastus väärtuse abil:
8    call Ei_Muuda( (sisestus) ) ! Parameetrit mitte muuta
9    print *, "Peale Ei_Muuda() on ta ",sisestus
10   ! Edastus viida abil:
11   call Muuda(sisestus) ! Kasuta ja muuda
12   print *, "Peale Muuda() on ta ",sisestus
13 end program
14
15 subroutine Muuda(Viit)
16 ! Muuda JUHUL KUI parameeter anti ette viidana
17   implicit none
18   integer,intent(inout) :: Viit
19   Viit = 100;
20   print *, "Alamprogrammis Muuda() sai ta väärtuseks ", Viit
21 end subroutine Muuda
22 subroutine Ei_Muuda(Vaartus)
23 ! Mitte muuta JUHUL KUI parameeter anti ette väärtusena
24   implicit none
25   integer :: Vaartus
26   Vaartus = 100
27   print *,"Alamprogrammis Ei_Muuda() saab ta väärtuseks ", Vaartus
28 end subroutine Ei_Muuda ! Käivitamine annab:
```

```
29 ! sisesta täisarv: 82
30 ! Sisestati             82
31 ! Alamprogrammis Ei_Muuda() saab ta väärtuseks          100
32 ! Peale Ei_Muuda() on ta             82
33 ! Alamprogrammis Muuda() sai ta väärtuseks          100
34 ! Peale Muuda() on ta             100
```

2.1.5 Polümorfism OO programmeerimise kontseptsioonis

Polümorfismiks (*polymorphism*) nimetatakse eri klasside ja objektide sarnase funktsionaalsuse ühendamist. Polümorfismi abil saab programmis ühendada sarnast funktsionaalsust eri klassides ja objektides üldisesse funktsiooni või alamprogrammi nii, et programmeerimisel ei pea mõtlema, mis tüüpi objektiga on parajasti tegu.

Fortran9x lubab eri moodulitesse kuuluvatel tuletatud tüüpidel defineeritud erinevaid funktsioone ehk meetodeid ühendada ühise funktsiooni või alamprogrammi nime alla käsu `module procedure` abil liidesedirektiivis. Toome siin järgneva näite:

Näide: Polümorfismi kasutamine

Lähtetekst 2.6: Geomeetrilised kujundid

```
1 ! Fail: Geomeetrilised_kujundid.f90
2 module klass_Ristkylik      ! defineerime objekti esimesest klassist
3   implicit none             ! ärme parem seda unusta
4   type Ristkylik
5     real :: alus,korgus
6   end type Ristkylik
7 contains ! Ristküliku pindala arvutamine
8   function ristkyliku_pindala(r) result(pindala)
9     type(Ristkylik),intent(in) :: r
10    real                       :: pindala
11    pindala = r%alus*r%korgus
12  end function ristkyliku_pindala
13
14  function loo_Ristkylik(kylg1,kylg2) result(nimi)
15    ! Konstruktor tüübile Ristkülik
16    real,optional,intent(in)      :: kylg1,kylg2
17    type(Ristkylik)               :: nimi
18    nimi = Ristkylik(1.,1.)    ! Vaikimisi ühikruut
19    if (present(kylg1)) nimi = Ristkylik(kylg1,kylg1)
20    if (present(kylg2)) then
21      nimi = Ristkylik(kylg1,kylg2)
22    endif
23  end function loo_Ristkylik
24 end module klass_Ristkylik
25
26 module klass_Ring      ! define the second object class
27  implicit none
28   real :: pi = 3.1415926535897931d0 ! Konstant Pi
29   type Ring
30     real :: raadius
31   end type Ring
```

```
32 contains ! Ringi pindala arvutamine
33   function ringi_pindala(c) result(pindala)
34     type (Ring),intent(in) :: c
35     real                   :: pindala
36     pindala = pi*c%raadius**2
37   end function ringi_pindala
38 end module klass_Ring
39
40 program geomeetrilised_kujundid  ! mõlemad tüübid ühises funktsioonis
41   use klass_Ring
42   use klass_Ristkylik
43   implicit none
44   ! Ühendav interface-käsk pindala arvutamiseks mõlema tüübi korral
45   interface arvuta_pindala
46     module procedure ristkyliku_pindala,ringi_pindala
47   end interface
48   ! Deklareerime mõned geomeetrilised kujundid:
49   type (Ristkylik) :: neli_kylge,ruut,yhikruut
50   type (Ring)      :: kaks_poolt             ! sisemus, välimus
51   real             :: pindala = 0.0          ! tulemus
52   ! Initsialiseeri ristkülik ja arvuta selle pindala
53   neli_kylge = Ristkylik(2.1,4.3)            ! sisseehitatud konstruktor
54   pindala = arvuta_pindala(neli_kylge)       ! üldfunktsioon
55   write(6,100) neli_kylge,pindala            ! väljastatakse komponendid
56   100 format (f3.1,"␣korda␣",f3.1,"␣ristküliku␣pindala␣on␣",f5.2)
57   ! Initsialiseeri ring ja arvuta selle pindala
58   kaks_poolt = Ring(5.4)                     ! sisseehitatud konstruktor
59   pindala = arvuta_pindala(kaks_poolt)       ! üldfunktsioon
60   write(6,200) kaks_poolt,pindala
61   200 format ("Ringi,␣mille␣raadius␣on␣",f3.1,",␣pindala␣on␣",f9.5 )
62   ! Eri konstruktorite testimine:
63   neli_kylge = loo_Ristkylik(2.1,4.3)        ! manuaalne konstruktor
64   pindala = arvuta_pindala(neli_kylge)       ! üldfunktsioon
65   write(6,100) neli_kylge,pindala
66
67   ruut = loo_Ristkylik(2.1)                  ! manuaalne konstruktor 2
68   pindala = arvuta_pindala(ruut)             ! üldfunktsioon
69   write(6,100) ruut,pindala
70
71   yhikruut = loo_Ristkylik()                 ! manuaalne konstruktor 3
72   pindala = arvuta_pindala(yhikruut)         ! üldfunktsioon
73   write(6,100) yhikruut,pindala
74
75 end program geomeetrilised_kujundid          ! Käivitamine annab:
76 ! 2.1 korda 4.3 ristküliku pindala on  9.03
77 ! Ringi, mille raadius on 5.4, pindala on  91.60885
78 ! 2.1 korda 4.3 ristküliku pindala on  9.03
79 ! 2.1 korda 2.1 ristküliku pindala on  4.41
80 ! 1.0 korda 1.0 ristküliku pindala on  1.00
```

Soovitav oleks uurida hoolega toodud programmi ja leida iseseisvalt vastused järgmistele küsimustele:

- Kuidas on rakendatud polümorfism? Milline osa programmist selle realiseerib (vt. ridu 45-47)?
- Kuidas kasutada sisseehitatud (*implicit*) konstruktoreid ja neid ise defineerida?

- Mida tähendab `optional` ehk suvandparameeter (vt. rida 16)?
- Pöörata muuhulgas tähelepanu `if`-direktiivi erinevatele kujudele ridadel 19 ja 20, (mõlemad on Fortran9x puhul lubatud)!

Näide: OO programmeerimine (sealhulgas `public`, `private` atribuudid ja operaatorite üledefineerimine, rekursioon)

Järgneva näite eesmärgiks on demonstreerida head programmeerimisstiili. Defineeritakse ratsionaalarvude klass, kusjuures tegelikud murdude liikmed ratsionaalarvudes on `private`-atribuudiga (vt. Programmi 2.7 ridu 6-9). Selleks, et kasutajal siiski oleks ligipääs antud andmetele, lisatakse spetsiaalsed päringufunktsioonid (read 66 ja 72). Tuleb võtta arvesse, et antud juhul väljaspool klassi enda meetodeid sisseehitatud konstruktorit ei saa kasutada ning tuleb hoolitseda ka selle eest, et klassi väljastpoolt kasutatavate meetodite hulgas leiduks vähemalt üks konstruktor vastavate õigustega (vt. ridu 101 ja 120).

Lähtetekst 2.7: Ratsionaalarvude klass

```
1  ! Fail: klass_Ratsionaalarv.f90
2  module klass_Ratsionaalarv
3    implicit none ! Õnneks ei läinud meelest lisada...:-)
4    ! kõik public-atribuudiga välja arvatud järgmised protseduurid:
5    private :: syt,taanda
6    type Ratsionaalarv
7      private ! privaatsed komponendid lugeja ja nimetaja
8      integer :: lugeja, nimetaja
9    end type Ratsionaalarv
10   ! operaatorite üledefineerimine interface-käsuga:
11   interface assignment (=)
12     module procedure omista_taisarv
13   end interface
14   interface operator (+)
15     module procedure liida_Ratsionaalarv
16   end interface
17   interface operator (*)
18     module procedure korruta_Ratsionaalarv
19   end interface
20   interface operator (==)
21     module procedure vordlus
22   end interface
23 contains                    ! funktsioonid mida vaja aritmeetikaks
24
25   function liida_Ratsionaalarv(a,b) result(c) ! op. + üledefineerimine
26     type(Ratsionaalarv),intent(in) :: a,b
27     type(Ratsionaalarv)            :: c
28     c%lugeja = a%lugeja * b%nimetaja + a%nimetaja * b%lugeja
29     c%nimetaja = a%nimetaja * b%nimetaja
30     call taanda(c)
31   end function liida_Ratsionaalarv
32
33   function konverteeri(nimi) result(value) ! ratsionaalarv reaalarvuks
34     type(Ratsionaalarv),intent(in) :: nimi
35     real                           :: value ! kümnendmurru kuju
36     value = float(nimi%lugeja) / nimi%nimetaja
```

```
37  end function konverteeri
38
39  function kopeeri_Ratsionaalarv (nimi) result (uus)
40    type(Ratsionaalarv),intent(in) :: nimi
41    type(Ratsionaalarv)            :: uus
42    uus%lugeja = nimi%lugeja
43    uus%nimetaja = nimi%nimetaja
44  end function kopeeri_Ratsionaalarv
45
46  subroutine kustuta_Ratsionaalarv(nimi)
47    ! hõivatud ressursside vabastamine, siin lihtsalt nullimine
48    type(Ratsionaalarv),intent(inout) :: nimi
49    nimi = Ratsionaalarv(0,1)
50  end subroutine kustuta_Ratsionaalarv
51
52  subroutine omista_taisarv(uus,I) ! op. "=" üledef. täisarvu puhul
53    type(Ratsionaalarv),intent(out) :: uus  ! operaatori vasak pool
54    integer,intent(in)              :: I    !             ja parem pool
55    uus%lugeja = I ; uus%nimetaja = 1
56  end subroutine omista_taisarv
57
58  recursive function syt(j,k) result(s) ! Suurim ühistegur
59    integer,intent(in) :: j, k ! lugeja,nimetaja
60    integer            :: s
61    if ( k == 0 ) then ; s = j
62    else ; s = syt(k,modulo(j,k))        ! rekursiivne käsk
63    endif
64  end function syt
65
66  function anna_Nimetaja(nimi) result(n)  ! päringufunktsioon
67    type(Ratsionaalarv),intent(in) :: nimi
68    integer                        :: n    ! nimetaja
69    n = nimi%nimetaja
70  end function anna_Nimetaja
71
72  function anna_Lugeja(nimi) result(n)    ! päringufunktsioon
73    type(Ratsionaalarv),intent(in) :: nimi
74    integer                        :: n    ! lugeja
75    n = nimi%lugeja
76  end function  anna_Lugeja
77
78  subroutine poora(nimi)          ! ratsionaalarvu pöördväärtus
79    type(Ratsionaalarv),intent(inout) :: nimi
80    integer                           :: temp
81    temp = nimi%lugeja
82    nimi%lugeja = nimi%nimetaja
83    nimi%nimetaja = temp
84  end subroutine poora
85
86  function vordlus(a_sisend,b_sisend) result(t_f) ! Võrdlus ==
87    type(Ratsionaalarv),intent(in) :: a_sisend,b_sisend!vasak == parem
88    type(Ratsionaalarv)            :: a,b ! koopiad taandamiseks
89    logical                        :: t_f ! TRUE või FALSE
90    a = kopeeri_Ratsionaalarv(a_sisend)
91    b = kopeeri_Ratsionaalarv(b_sisend)
92    call taanda(a) ; call taanda(b)         ! taanda väikseimale kujule
93    t_f = (a%lugeja==b%lugeja).and.(a%nimetaja==b%nimetaja)
94  end function vordlus
95
```

```
96    subroutine valjasta(nimi)                    ! murru väljastamiseks
97      type(Ratsionaalarv),intent(in) :: nimi
98      print *,nimi%lugeja,"/",nimi%nimetaja
99    end subroutine valjasta
100
101   function loo_Ratsionaalarv(lug,nim) result(nimi)
102   ! ratsionaalarvtüübi suvandkonstruktor
103     integer,optional,intent(in) :: lug,nim
104     type(Ratsionaalarv)         :: nimi
105     nimi = Ratsionaalarv(0,1) ! vaikeväärtused
106     if (present(lug)) nimi%lugeja = lug
107     if (present(nim)) nimi%nimetaja = nim
108     if (nimi%nimetaja == 0) nimi%nimetaja = 1
109     call taanda(nimi) ! lihtsusta
110   end function loo_Ratsionaalarv
111
112   function korruta_Ratsionaalarv(a,b) result(c) ! Op. "*" üledefin.
113     type(Ratsionaalarv),intent(in) :: a, b
114     type(Ratsionaalarv)            :: c
115     c%lugeja = a%lugeja * b%lugeja
116     c%nimetaja = a%nimetaja * b%nimetaja
117     call taanda(c)
118   end function korruta_Ratsionaalarv
119
120   function Ratsionaalarv_(lug,nim) result(nimi)
121   ! Public Konstruktor ratsionaalarvtüübile
122     integer,optional,intent(in) :: lug,nim
123     type(Ratsionaalarv)         :: nimi
124     if (nim==0) then ; nimi=Ratsionaalarv(lug,1)
125     else ; nimi = Ratsionaalarv(lug,nim)
126     end if
127   end function Ratsionaalarv_
128
129   subroutine taanda(nimi) ! lihtsaima ratsionalarvkuju leidmine
130     type(Ratsionaalarv),intent(inout) :: nimi
131     integer                           :: g ! suurim ühistegur
132     g = syt(nimi%lugeja,nimi%nimetaja)
133     nimi%lugeja = nimi%lugeja/g
134     nimi%nimetaja = nimi%nimetaja/g
135   end subroutine taanda
136 end module klass_Ratsionaalarv
```

Toodud näites tuleks tähelepanu pöörata eelkõige järgnevale:

- Kuidas toimub operaatorite üledefineerimine? (Vaata ridu 11-13, kus toimub omistamise üledefineerimine ning ridu 14-22, kus näitena on defineeritud üle mõned aritmeetilised operaatorid.)
- Rekursiooni puhul tuleb kompilaatorile öelda eraldi, et tegu on rekursiivse protseduuriga (vt. rida 58).
- Funktsioonides on soovitav kasutada `result`-atribuuti, nii nagu toodud näites igal pool ka on tehtud. Märgime siin siiski, et näiteks ridade 66-70 asemel võiks kasutada ka kuju

```fortran
integer function anna_Nimetaja(nimi)
  anna_Nimetaja = nimi%nimetaja
end function anna_Nimetaja
```

Siiski on `result`-atribuut alati kohustuslik rekursiivsete funktsioonide korral (read 58-64).

Järgneb näide klass_Ratsionaalarv kasutamise kohta:

Lähtetekst 2.8: Ratsionaalarvude klassi kasutamine (põhiprogramm)

```fortran
! Fail: Ratsionaalarvu_test.f90
include 'klass_Ratsionaalarv.f90'
program main
  use klass_Ratsionaalarv
  implicit none
  type(Ratsionaalarv) :: x, y, z

! --- Saab kasutada vaid juhul kui Ratsionaalarv ei ole private: ---
! x = Rational(23,7)   ! sisseehitatud konstr. kui public-komponendid
! ---
  x = Ratsionaalarv_(23,7)    ! public-atribuudiga konstruktor
  write (*,'("Ratsionaalarv x  = ")',advance='no'); call valjasta(x)
  write (*,'("Kümnendkujul  x  = ", g9.4)') konverteeri(x)
  call poora(x)
  write (*,'("pööratuna 1/x = ")',advance='no'); call valjasta(x)
  x = loo_Ratsionaalarv()          ! manuaalne konstruktor
  write (*,'("tegime nullilise x  = ")',advance='no')
  call valjasta(x)
  y = 11                  ! ratsionaalarv = taisarv üledefineeritud
  write (*,'("taisarv y    = ")',advance='no'); call valjasta(y)
  z = loo_Ratsionaalarv(23,7)     ! manuaalne konstruktor
  write (*,'("tegime ratsionaalarvu z  = ")',advance='no')
  call valjasta(z)
! Päringufunktsioonide testid:
  write (*,'("murru z peal on ", g4.0)') anna_Lugeja(z)
  write (*,'("murru z all on  ", g4.0)') anna_Nimetaja(z)
! Mitmesuguste funktsioonide teste:
  write (*,'("Teeme ratsionaalarvu x = 20/192, ")',advance='no')
  x = loo_Ratsionaalarv(20,192)  ! manuaalne konstruktor
  write (*,'("lihtsusatult x = ")',advance='no'); call valjasta(x)
  write (*,'("x kopeerimine y-sse annab ")',advance='no')
  y = kopeeri_Ratsionaalarv(x)
  write (*,'("peale kopeerimist y = ")',advance='no');call valjasta(y)
! Üledefineeritud operaatorite testimine:
  write (*,'("z * x annab ")',advance='no'); call valjasta(z*x)
  write (*,'("z + x annab ")',advance='no'); call valjasta(z+x)
  y = z  ! Üledfineeritud omistamine
  write (*,'("y = z annab y väärtuseks ")',advance='no')
  call valjasta(y)
  write (*,'("loogiline y == x annab ")',advance='no'); print *, y==x
  write (*,'("loogiline y == z annab ")',advance='no'); print *, y==z
! Destruktor:
  call kustuta_Ratsionaalarv(y) ! tegelikult vaid nulli siin...
  write (*,'("y kustutamine annab y = ")',advance='no')
```

```
45   call valjasta(y)
46 end program main ! Programm väljastab (SUN Fortran):
47 ! Ratsionaalarv x  = 23 / 7
48 ! Kümnendkujul  x  = 3.286
49 ! pööratuna 1/x = 7 / 23
50 ! tegime nullilise x  = 0 / 1
51 ! taisarv y     = 11 / 1
52 ! tegime ratsionaalarvu z  = 23 / 7
53 ! murru z peal on    23
54 ! murru z all on      7
55 ! Teeme ratsionaalarvu x = 20/192, lihtsusatult x = 5 / 48
56 ! x kopeerimine y−sse annab peale kopeerimist y = 5 / 48
57 ! z * x annab 115 / 336
58 ! z + x annab 1139 / 336
59 ! y = z annab y väärtuseks 23 / 7
60 ! loogiline y == x annab F
61 ! loogiline y == z annab T
62 ! y kustutamine annab y = 0 / 1
```

Nagu juba eelnevalt mainisime, ei saa (erinevalt lähteteksti 2.7 ridadega 49,105,124,125), programmis `Ratsionaalarvu_test.f90` (lähteteksti 2.8 ridadel 11,16,21,29) kasutada sisseehitatud konstruktorit. Põhjuseks on see, et tüübi `Ratsionaalarv` liikmed on `private`-atribuudiga ning kättesadavad vaid mooduli enda seest, `use`-käsk real 4 selleks veel õigust ei anna.

Antud näites on destruktor (lähteteksti 2.7 ridadel 46-50) vaid illustratiivne, kuna mälueraldust `Ratsionaalarv`-tüübis endas ei teostata. Vastasel korral oleks seal vaja kutsuda välja vastavad `deallocate`-käsud.

2.1.6 Liidesedirektiiv

Eelnevates näidetes esines juba `interface`-käsu erinevaid vorme (lähtetekst 2.6 read 45-47, lähtetekst 2.7 read 11-22), mis on seotud polümorfismi ja operaatorite üledefineerimisega. `Interface`-direktiivi üks põhilisi kasutuseesmärke tuleneb vajadusest anda kompilaatorile lisainformatsiooni välise funktsiooni või alamprogrammi parameetrite kohta. Millistel juhtudel on vaja kasutada `interface`-käsku?

Lihtne vastus oleks: siis kui kompilaator kurdab selle puudumise üle. Loetleme siin veel mõningaid juhtusid, kus `interface`-käsk peab kindlasti olema toodud:

- andes edasi alamprogrammi massiivi, millel on teada vaid järk (näiteks `A(:,:)`, `B(:)`);
- kutsudes välja funktsioon mis tagastab:
  - teadmata suurusega massiivi;
  - sõne mille pikkus ei ole ette teada (vt. näiteks programmi 3.4 read 5-14) või
  - viida;
- andes alamprogrammile parameetrina ette funktsiooni nime, mida välja kutsuda töö käigus. Selline praktika on üsna levinud Fortran77 puhul. Kuigi antud konstruktsiooni

väga ei julgustata Fortran9x puhul, toome siin näite, kuidas seda saab teha – kasutada tuleb `interface`-konstruktsiooni:

Lähtetekst 2.9: Arvu π arvutamine kasutades Simpsoni valemit (põhiprogramm)

```fortran
! Fail: Pi/leiapi.f90
! Programm mis arvutab Pi nii täpselt kui võimalik kasutamata
!   mingit eelteadmist pi kohta integreerides f(x) = sqrt(1-x**2)
!     lõigul [0 ,1/2]
! Informatsiooniks Pi väärtus 25 tüvekohaga:
!   real (kind=rk) :: PI25DT
!   parameter (PI25DT = 3.141592653589793238462643_rk)
program leiapi
  use RealKind ! uju.arv-tüübi (rk) äramääramine moodulis RealKind
  implicit none
  real(kind=rk) :: alpha,beta
  real(kind=rk) :: integraal,diff,diff_eelmine,theta,c
  real(kind=rk) :: pi, pi_eelmine,err,err_eelmine
  real(kind=rk) :: csimpson ! anname ette funktsiooni tüübi
  integer :: i, n
  interface
    function func_pi(x) result(f)
      use RealKind
      real(kind=rk) :: f
      real(kind=rk), intent(in) :: x
    end function func_pi
  end interface
  alpha = 0.0_rk
  beta  = 0.5_rk
! Lähendame integraali kasutades komposiit-Simpsoni valemit võttes
!   n = 2**i, kus i = 1, ... ,30
  integraal = csimpson(func_pi,alpha,beta,2)
  pi = 12.0_rk * (integraal - sqrt(3.0_rk)/8.0_rk)
  diff_eelmine = pi
  pi_eelmine = pi
  print*, 'i n PI Väärtuse_muutumine'
  print*,1,2,pi
  do i=2,30
    n = 2**i
    integraal = csimpson(func_pi,alpha,beta,n)
    pi = 12.0_rk*(integraal-sqrt(3.0_rk)/8.0_rk)
    ! Leia eelneva ja praeguse lähendi erinevus,
    !   kui see enam ei vähene, lõpeta
    diff = abs(pi-pi_eelmine)
    if (diff_eelmine/diff<1.0_rk) exit
    print*,i,n,pi,diff
    diff_eelmine = diff
    pi_eelmine = pi
  end do
end program leiapi
! Programmi väljund (SUN Fortran):
! i n PI Väärtuse_muutumine
! 1 2 3.14154543216311 57
! 2 4 3.1415895711116926 4.4138953810168 86E-5
! 3 8 3.1415924586206944 2.88750376853386 1E-6
! 4 16 3.1415926413667 58 1.82746063615013 55E-7
! 5 32 3.1415926528252624 1.14585043675674 57E-8
! 6 64 3.1415926535420002 7.16739556594348E-10
```

```
! 7 128 3.141592653586804З 4.48023840249334 2E−11
! 8 256 3.14159265358960 83 2.8039792709932953E−12
! 9 512 3.14159265358978 5 1.7674750552032492E−13
! 10 1024 3.14159265358979 35 8.43769498715119E−15
```

Märgime siin, et programmi 2.9 real 14 toodud väljakutsutava funktsiooni tüübimäärang peab olema antud, kui me tahame antud funktsiooni välja kutsuda (ridadel 27,35), vastasel korral annab kompilaator vea. Samas, ilma `interface`-blokita (read 16-22) antud programmi vigadeta kompileerida ei õnnestuks. See on defineeritud ka integraali arvutavas funktsioonis, mis reaalselt antud funktsiooni kasutab:

Lähtetekst 2.10: Simpsoni valemi rakendamine integraali leidmiseks

```
! Fail:Pi/csimpson.f90 −− Lihtne programm mis lähendab f.−i func
!        integraali lõigul [alpha,beta] kasutades Simpsoni valemit
function csimpson(func,alpha,beta,n) result(integraal)
  use RealKind
  implicit none
  real(kind=rk)                   :: integraal
  real(kind=rk),intent(in)        :: alpha,beta
  integer, intent(in) :: n
  ! Interface−blokk mis tagab et argumendid oleksid õiged
  interface
    function func(x) result(f)
      use RealKind
      real(kind=rk) :: f
      real(kind=rk),intent(in) :: x
    end function func
  end interface
  real(kind=rk) :: f_vasak,f_kesk,f_parem, h
  integer :: i
  h = (beta−alpha)/dble(n) ! dble() − topelttäpsusega uju.arvuks
  f_vasak = func(alpha)
  integraal = 0.0_rk
  do i=1,n
    f_kesk = func(alpha+(i−0.5_rk)*h)
    f_parem = func(alpha+i*h)
    integraal = integraal+(h/6.0_rk) &
              * (f_vasak+4.0_rk*f_kesk+f_parem)
    f_vasak = f_parem
  enddo
end function csimpson
```

Järgnevas on realiseeritud funktsiooni $\sqrt{1-x^2}$ arvutamine:

Lähtetekst 2.11: Funktsiooni rakendus π arvutamiseks.

```
! Fail: Pi/func_pi.f90
function func_pi(x) result(f)
  use RealKind
  implicit none
  real(kind=rk) :: f
  real(kind=rk), intent(in) :: x
  if (abs(x) <= 1.0_rk) then
    f = sqrt(1.0_rk−x**2)
```

```
9     else
10      print*,'Viga: ',x,' ei ole func_pi(x) määramispiirkonnas.'
11      stop
12    end if
13  end function func_pi
```

Ujukomaarvu tüübi määranguks on siin defineeritud moodul:

Lähtetekst 2.12: Moodul topelttäpsuse määranguks

```
1  ! Fail: Pi/RealKind.f90 -- Moodul topelttäpsuse määratlemiseks
2  Module RealKind
3    implicit none
4    !integer, parameter :: rk = selected_real_kind(6,37)     ! real
5    integer, parameter :: rk = selected_real_kind(15,307)    ! double
6    !integer, parameter :: rk = selected_real_kind(18,4932) ! 4-kordne
7  end module RealKind
```

Märgime, et toodud programminäites topelttäpsuse asendamiseks `real`-tüüpi ujukomaarvudega piisab vaid muudatusest failis 2.12. Väljakommenteeritud 4-kordne täpsusaste (rida 6) on paraku küll vähestel kompilaatoritel defineeritud (näiteks CRAY arhitektuuril).

Peatükk 3

Keele Fortran9x elemendid

Järgnevas toome mõningaid võrdlevaid tabeleid erinevate keelte süntaksi kohta. Toodud valik ei pretendeeri täielikkusele, vaid on pigem illustratiivse iseloomuga, lihtsustamaks Fortran9x keelekonstruktsioonide mõistmist eelneva kogemuse baasil mõnest teisest keelest.

3.1 Kommentaaride lisamine lähteteksti ridadele

Kommentaari lisamiseks Fortran9x programmiteksti suvalisele reale piisab sümbolist `!`. Kommentaar kestab kuni reavahetuseni. See on üsna sarnane näiteks MATLABI puhul, kus kommentaari alustussümboliks on % või C, C++ ja Java oma //-kommentaaridega. Järgnevas tabelis on toodud kokkuvõte eri keelte kommentaaride kujust:

Keel	Süntaks	Asukoht lähtekoodis
MATLAB	`% kommentaar (rea lõpuni)`	suvaline
C, C++, Java	`// kommentaar (rea lõpuni)`	suvaline
F90	`! kommentaar (rea lõpuni)`	suvaline
F77	`* kommentaar`	1. veerg

Märgime, et C, C++ ja Java `/*...*/`-kommentaarile sarnast konstruktsiooni, kus kommentaar võib jätkuda ka peale reavahetust, Fortran9x ei oma. Seega, juhul kui on näiteks vaja kommenteerida välja pikem programmilõik lähtetekstis, lisatakse kogu bloki iga rea ette sümbol `!`.

3.2 Muutujate põhitüübid

Järgnevas tabelis on toodud eri keelte põhiliste andmetüüpide võrdlus:

Tüüp	C++	F90	F77
byte	char	character ::	character
integer	int	integer ::	integer
ujukomaarv	float	real ::	real
topelttäpsusega ujup.	double	real*8 ::	double precision
kompleksarv		complex ::	complex
loogiline tüüp	bool	logical ::	logical
osuti tüüp	*	pointer ::	
struktuur	struct	type ::	

Märgime, et Fortrani keeles on muutujatel vaikimisi tüüp ette antud muutuja esitähe järgi. Antud käitumist on võimalik muuta implicit-käsu abil. Vaikeväärtused on näiteks defineeritavad järgnevate käskudega:

```
IMPLICIT INTEGER (I-N)    ! F77 ja F90 vaikeväärtus
IMPLICIT REAL (A-H,O-Z)   ! F77 ja F90 vaikeväärtus
```

Käsuga implicit none saab aga automaatse tüübimäärangu üldse välja lülitada. Implicit-käsk tuleb kirjutada vahetult peale use-käskusid enne muutujate deklaratsioone.

3.3 Aritmeetilised operaatorid

Aritmeetilised operaatorid on enamasti üsna standardsed eri keeltes. MATLABis on lisaks olemas elemendiviisilised aritmeetilised operatsioonid (sel juhul kirjutatakse operaatori ette ".", et eristada näiteks maatriksite korrutamist elementviisilisest korrutamisest). C++ keelele omaseid "++"-tüüpi operaatoreid Fortranis ei leidu ning tuleks kasutada kuju muutuja = muutuja+1. Ka on Fortranis täisarvulisel jagamisel jäägi leidmiseks sisseehitatud funktsioon modulo(a,b), kus b on a jagaja.

Kirjeldus	MATLAB	C++	Fortran
liitmine	+	+	+
lahutamine	-	-	-
korrutamine	* ja .*	*	*
jagamine	/ ja ./	/	/
eksponentsiaal	^ ja .^	pow(x,y)	**
jääk		%	
inkrement		++	
dekrement		--	

3.4 Võrdlusoperaatorid

Aritmeetiliste ja loogiliste operaatorite puhul võib öelda, et Fortran9x on pooled C++ keele operaatorite kujud omaks võtnud, samas kui loogilised operaatorid käivad endist viisi veel Fortran77 stiilis. (Samas, näiteks, ka `.eq.` `==` asemel on lubatud.)

<table>
<tr><th>Kirjeldus</th><th>MATLAB</th><th>C++</th><th>F90</th><th>F77</th></tr>
<tr><td>võrdne</td><td><code>==</code></td><td><code>==</code></td><td><code>==</code></td><td><code>.EQ.</code></td></tr>
<tr><td>mittevõrdne</td><td><code>~=</code></td><td><code>!=</code></td><td><code>/=</code></td><td><code>.NE.</code></td></tr>
<tr><td>väiksem kui</td><td><code><</code></td><td><code><</code></td><td><code><</code></td><td><code>.LT.</code></td></tr>
<tr><td>väiksem või võrdne</td><td><code><=</code></td><td><code><=</code></td><td><code><=</code></td><td><code>.LE.</code></td></tr>
<tr><td>suurem kui</td><td><code>></code></td><td><code>></code></td><td><code>></code></td><td><code>.GT.</code></td></tr>
<tr><td>suurem või võrdne</td><td><code>>=</code></td><td><code>>=</code></td><td><code>>=</code></td><td><code>.GE.</code></td></tr>
<tr><td>loogiline eitus</td><td><code>~</code></td><td><code>!</code></td><td><code>.NOT.</code></td><td><code>.NOT.</code></td></tr>
<tr><td>loogiline JA</td><td><code>&</code></td><td><code>&&</code></td><td><code>.AND.</code></td><td><code>.AND.</code></td></tr>
<tr><td>loogiline inklusiivne VÕI</td><td><code>!</code></td><td><code>||</code></td><td><code>.OR.</code></td><td><code>.OR.</code></td></tr>
<tr><td>loogiline eksklusiivne VÕI</td><td><code>xor</code></td><td></td><td><code>.XOR.</code></td><td><code>.XOR.</code></td></tr>
<tr><td>loogiline ekvivalents</td><td><code>==</code></td><td><code>==</code></td><td><code>.EQV.</code></td><td><code>.EQV.</code></td></tr>
<tr><td>loogiline mitteekvivalents</td><td><code>~=</code></td><td><code>!=</code></td><td><code>.NEQV.</code></td><td><code>.NEQV.</code></td></tr>
</table>

Näide. `Select case` süntaks

Järgnevas programmis on toodud näide, kuidas kasutatakse muutuja väärtusel põhinevat hargnemist:

Lähtetekst 3.1: Näide valikuoperaatori kasutamisest

```
1  program main
2  ! Näide valikuoperaatori select case süntaksi kasutamisest:
3    implicit none
4    integer :: taisarv ! kasutaja poolt sisestatav
5    print *, 'Sisesta␣kas␣0␣või␣1:'
6    read  *, taisarv
7    select case(taisarv)
8      case (0)
9        print *, 'Valisid␣0'
10     case (1)
11       print *, 'Valisid␣1'
12     case default
13       print *, 'Vale␣valik:␣', taisarv
14   end select
15 end program main
```

3.5 Stringitöötlus

Stringi- ehk sõnetöötlusega tutvume järgneva kolme lihtsa näite varal.

Lähtetekst 3.2: Kahe stringi võrdlus, ühendamine ning pikkuse leidmine

```
1  ! Fail: stringide_kasutamine.f90
2  program stringide_kasutamine
3    ! Kahe stringi võrdlus, ühendamine ning pikkuse leidmine
4    implicit none
5    character(len=10) :: string1, string2
6    character(len=20) :: string3
7    integer           :: pikkus
8    print *,'Sisesta esimene string (max 10 tähemärki):'
9    read '(a)',string1      ! etteantud formaadiga lugemine
10   print *,'Sisesta teine string (max 10 tähemärki):'
11   read '(a)',string2      ! etteantud formaadiga lugemine
12   if (string1==string2) then ! (võrdlus)
13     print *, "On samad."
14   else
15     print *, "On erinevad."
16   end if
17   string3 = trim(string1)//trim(string2) ! Ühendamine
18   print *,'Ühendatud string on:',string3
19   pikkus = len_trim(string3)
20   print *,'Ühendatud stringi pikkus on:',pikkus
21 end program stringide_kasutamine
```

Toodud programmis on `trim()` Fortran9x põhifunktsioon, mis väljastab stringi, milles on etteantud stringist lõputühikud tagant ära jäetud. Sarnaselt, `len_trim()` väljastab vastava stringi pikkuse.

Järgnevas näites demonstreeritakse, kuidas on võimalik teisendada stringi täisarvuks:

Lähtetekst 3.3: Stringi konverteerimine täisarvuks

```
1  ! Fail: numbriline_string.f90
2  program  numbriline_string
3    ! Numbrilise stringi konverteerimine täisarvuks
4    implicit none
5    character(len=5) :: vanusestring
6    integer          :: vanus
7    print *, "Sisesta oma vanus: "
8    read *, vanusestring
9    ! konverteerime kasutades isesfaili lugemist:
10   read (vanusestring,fmt='(i5)') vanus ! konverteeri täisarvuks
11   print *, "Su täisarvuline vanus on              ", vanus
12   print '(" Su binaarne vanus on                 ", b8)', vanus
13   print '(" Su vanus kuueteistkümnendsüsteemis on ", z8)', vanus
14   print '(" Su vanus kaheksandsüsteemis           ", o8)', vanus
15 end program numbriline_string
```

Lõpetuseks veel näide, kuidas saab muuta stringide sisu kas väikesteks tähtedeks või suurteks:

Lähtetekst 3.4: Tõste muutmine stringides

```
! Fail: tosteteisendused.f90
program tosteteisendused
  implicit none
  ! Deklareerime funktsioonide interfeisid:
  interface ! vaikesteks and suurteks
    function vaikesteks(string) result(uus_string)
      character(len=*),intent(in) :: string        ! teadmata pikkus
      character(len=len(string))  :: uus_string   ! sama pikkusega
    end function vaikesteks
    function suurteks(string) result(uus_string)
      character(len=*),intent(in) :: string        ! teadmata pikkus
      character(len=len(string))  :: uus_string   ! sama pikkus
    end function suurteks
  end interface
! Testime tõsteteisendusi
  character (len=34) :: test='Ahvidele␣võimalikult␣palju␣BANAANE'
  print *,"Algselt␣string:␣",test
  test = vaikesteks(test)
  print *, "Peale␣funktsiooni␣vaikesteks:␣",test
  test = suurteks(test)
  print *, "Peale␣funktsiooni␣suurteks:␣", test
end program tosteteisendused

function vaikesteks(string) result(uus_string)
  implicit none
  character(len = *),intent(in) :: string      ! teadmata pikkus
  character(len =len(string))    :: uus_string ! sama pikkusega
  character(len=30),parameter    ::             &
    SUURED = 'ABCDEFGHIJKLMNOPQRSTUVWÕÄÖÜXYZ', &
    vaiksed = 'abcdefghijklmnopqrstuvwõäöüxyz'
  integer :: k     ! tsükliloendur
  integer :: pos   ! positsioon alfabeedis
  uus_string = string        ! kopeeri kogu string
  do k = 1,len(string)       ! tähtede muutmine
    pos = index(SUURED,string(k:k)) ! kas täht SUURED hulgas?
    if (pos/=0) uus_string(k:k) = vaiksed(pos:pos) ! muuda
  end do
end function vaikesteks

function suurteks(string) result(uus_string)
  implicit none
  character(len=*),intent(in) :: string        ! teadmata pikkus
  character(len=len(string))  :: uus_string    ! sama pikkusega
  character(len=30),parameter ::                 &
    SUURED = 'ABCDEFGHIJKLMNOPQRSTUVWÕÄÖÜXYZ',&
    vaiksed = 'abcdefghijklmnopqrstuvwõäöüxyz'
  integer :: k     ! tsükliloendur
  integer :: pos   ! positsioon alfabeedis
  uus_string = string        ! kopeeri kogu string
  do k = 1,len(string)       ! tähtede muutmine
    pos = index(vaiksed,string(k:k)) ! kas täht vaiksed hulgas?
    if (pos/=0) uus_string(k:k) = SUURED(pos:pos) ! muuda
  end do
```

```
54 end function suurteks
55 ! Programmm annab käivitamisel:
56 ! Algselt string: Ahvidele võimalikult palju BANAANE
57 ! Peale funktsiooni vaikesteks: ahvidele võimalikult palju banaane
58 ! Peale funktsiooni suurteks: AHVIDELE VÕIMALIKULT PALJU BANAANE
```

Toodud näiteks kasutatakse sisefunktsiooni `index` (rida 51), mis väljastab alamstringi (teine parameeter) positsiooni etteantud stringis (esimene parameeter) või nulli, kui sellist alamstringi ei leidu.

3.6 Fortran95 viidad (*pointers*)

Andmed paiknevad arvuti mälus mingil kindlal mäluaadressil. Etteantud andmete mäluaadressi nimetatakse antud andmete **viidaks**, muutujat, mis võib antud aadressi hoida – **viitmuutujaks**. Fortran9x viidad sarnanevad pigem C++ viitadele, olles muutuja või massiivi osa aliaseks, samas võimaldamata näiteks mäluaadresside peenaritmeetikat nagu keeles C. Samas, erinevalt C++ keelest, on säilitatud viitade puhul hea optimeerimisvõime kompilaatorile.

Viida määranguks tuleb tüübidefinitsioonis lisada atribuut `pointer`. Viidale sihi (*target*) omistamise operaatoriks on: `=>` . Muutuja, millele tahame viidata, peab omama atribuuti `target`.

Üks Fortran9x sisefunktsioone on:

```
associated(viida_nimi,sihi_nimi)
```

mis väljastab `.true.` juhul kui antud viit on seotud valitud sihiga, vastasel juhul `.false.`

Viida sihi tühistamine (ehk nullimine) toimub eri keeltes järgmiselt:

C, C++	`pointer_name = NULL`
Fortran90	`nullify(viitade_nimede_loetelu)`
Fortran95	`pointer_name = NULL()`

Tähtis reegel: kus iganes ka viit programmis ei esine, seostatakse seda alati vastava sihiga e. viidatava konstruktsiooniga. Antud omaduse esitab programminäide:

Lähtetekst 3.5: Avaldised viitadega

```
1 ! Fail: avaldised_viitadega.f90
2 program avaldised_viitadega
3   ! Näide viitade kasutamise kohta avaldistes
4   implicit none
5   integer,pointer :: p, q, r      ! viidad
6   integer,target  :: i=1,j=2,k=3 ! sihid
7   q => j                        ! q viitab täisarvule j
8   p => i                        ! p viitab täisarvule i
```

```
9     ! Avaldis mis näeb küll välja justkui viidaaritmeetika asendab
10    ! viidad automaatselt sihiga:
11    q = p+2          ! tähendab: j = i + 2 = 1 + 2 = 3
12    print *,i,j,k ! väljasta sihtide väärtused: 1, 3, 3
13    p => k           ! p viitab nüüd k-le
14    print *,(q-p) ! tähendab väljastada: j - k = 3 - 3 = 0
15    ! kontrollime viidete seotust sihtidega:
16      print *,associated(r)     ! false
17      r => k                      ! r viitab nüüd k-le
18      print *,associated(p,i)   ! false
19      print *,associated(p,k)   ! true
20      print *,associated(r,k)   ! true
21 end program avaldised_viitadega
22 ! Väljund (Intel Fortran):
23 !          1          3          3
24 !          0
25 ! F
26 ! F
27 ! T
28 ! T
```

Järgnevas toome näite kuidas saab kasutada viiteid massiivi eri osadele osutamiseks:

Lähtetekst 3.6: Viitade kasutamine massiivi eri osadele osutamiseks

```
1  ! Fail: massiiviviidad.f90
2  program  massiiviviidad
3    ! Näiteid viitadest massiivi erinevatele osadele
4    implicit none
5    integer,parameter  :: max = 5
6    integer            :: kesk,tsykliloendaja
7    integer,target     :: massiiv(max)= (/10,20,30,40,50 /)
8    integer,pointer    :: esiosa(:),tagaosa(:),otsad(:)
9    kesk = max/2  ! jagame viideteks esiosa ja tagaosa
10   esiosa  => massiiv(:kesk)
11   tagaosa => massiiv(kesk+1:)
12   otsad   => massiiv(1:max:(max-1))
13   do tsykliloendaja = 1,max     ! tsükkel üle massiivi pikkuse
14     print *, 'massiiv(', tsykliloendaja, &
15     ')=',massiiv(tsykliloendaja)
16   end do
17   print *, 'Massiivi␣esiosa␣on:␣', esiosa
18   print *, 'Massiivi␣tagaosa␣on:␣', tagaosa
19   print *, 'Massiivi␣otsad␣on:␣', otsad
20 end program massiiviviidad
21 ! Käivitamine annab (SUN):
22 ! massiiv( 1 )= 10
23 ! massiiv( 2 )= 20
24 ! massiiv( 3 )= 30
25 ! massiiv( 4 )= 40
26 ! massiiv( 5 )= 50
27 ! Massiivi esiosa on:  10 20
28 ! Massiivi tagaosa on:  30 40 50
29 ! Massiivi otsad on:  10 50
```

Viimases näites kasutasime juba mitmeid konstruktsioone, mis on seotud Fortran9x massiividega. Vaatlemegi neid lähemalt järgnevas peatükis.

Peatükk 4

Massiivid ja operatsioonid nendega

Massiivid ja nende käsitlus keeles Fortran9x teeb antud keele tõeliselt atraktiivseks programmeerijale, kel on vaja töödelda suurel hulgal andmekogumeid. Massiive võib vaadelda kui keelde sisseehitatud objekte, on olemas nii konstruktori-laadsed käsud kui ka destruktori tüüpi operatsioonid, lisaks suurel hulgal vajalikke meetodeid massiividega. Massiivitöötluse notatsioon on sarnane sellele, mis on kasutusel näiteks MATLAB-is. Kes on MATLAB-is (või sellele sarnanevas, tasuta litsentsiga interpretaatorikeeles SciLab) maatriksitega töötanud, oskab hinnata selle lihtsust ning väljenduslikkust.

4.1 Fortran90 massiivide omadused

Loetleme järgnevas põhilisi omadusi Fortran9x massiivide kohta:

- On olemas spetsiaalne massiivi-notatsioon, mis võimaldab lihtsasti töötada massiivi osadega ehk alammassiividega. Antud süntaks laieneb tegelikult kogu keelele. Näiteks on defineeritud kõik aritmeetilised operatsioonid ka massiivide puhul.
- Massiivid võivad olla nii funktsioonide või alamprogrammide parameetriteks kui ka funktsioonide poolt tagastatavateks väärtusteks.
- Massiivide tüübid seotuna mälueraldusviisiga võib jagada järgmisse kolme liiki:
  - etteantud kujuga (*assumed-shape*) massiivid,
  - reserveeritava mäluga (*allocatable*) massiivid ja
  - automaatsed (*automatic) massiivid.*
- Leiduvad spetsiaalsed operaatorid tööks massiividega, nagu näiteks `WHERE`-direktiiv.

Et järgnev oleks lihtsamini arusaadav, siis lepime kõigepealt kokku järgnevate terminite suhtes:

Massiivi järk *(rank)* – antud massiivi dimensioonide arv;

massiivi ulatus *(extent)* – massiivi alumise raja ja ülemise raja vahe igas dimensioonis;

massiivi kuju ***(shape)*** – massiivi järk koos massiivi ulatusega;

massiivi suurus ***(size)*** – antud massiivi kõigi elementide arv.

4.2 Elemantaaroperatsioonid massiividega

Avaldistes võib kasutada massiivi indekseerimata identifikaatorit. Sel juhul tehakse operatsioon kõigi massiivi elementidega. (Peab ainult hoolitsema selle eest, et kõigi avaldistes olevate massiivide kujud oleksid sarnased.) Toome siin lihtsa võrdleva näite Fortran77 ja Fortran90 massiivioperatsioonide kohta:

Fortran77	Fortran90
`REAL a(100), b(100)`	`real, dimension(100) :: a, b`
`DO 1 i = 1,100`	
` a(i) = 2.0`	`a = 2.0`
`1 b(i) = b(i)*a(i)`	`b = b * a`

Märgime ühtlasi, et enamus standardfunktsioone (nagu näiteks `SIN, ABS, DBLE` jne.) töötavad ka massiivide korral:

```
real,dimension(2,3) :: h,f
real :: g=.5
  f = 10.0
  h = sin(f)
  g = sin(f(2,1))
```

Mõnedele standardfunktsioonidele saab lisada parameetri `dim`, mis näitab ära, millise dimensiooniga on tegu. Toome näiteks järgneva programmilõigu:

```
integer :: i, j
real,dimension(2,3) :: g
  i = size(g) ! annab 6
  i = size(g,dim=1) ! annab esimese dimensiooni pikkuse, 2
  j = size(g,dim=2) ! annab teise dimensiooni pikkuse, 3
```

Funktsioon `shape` annab maatriksi kuju, nagu on toodud järgnevas näitelõigus:

```
integer,dimension(2,3) :: s
  s = shape(g) ! annab mõlemad dimensioonid, (/2,3/)
```

4.3 Massiivide sektorid ja konstruktorid

Juhul, kui on vaja teha mingit toimingut või operatsiooni teatud alammassiiviga etteantud massiivist, siis võib kasutada massiivide alamindeksite määratlemise kolmikut järgneval kujul:

`algindeks : lõppindeks : samm`

Toome järgnevas lihtsa võrdleva näite;

Fortran77:	Fortran9x:
REAL A(10,10),B(10,10) DO 1 J=1,8 DO 2 I=1,8 A(I,J) = B(I+1,J+1) 2 CONTINUE 1 CONTINUE	REAL, DIMENSION(10,10) :: A,B A(1:8,1:8) = B(2:9,2:9)

Juhul, kui kasutatavas kolmikus `samm` ära jätta, siis loetakse selle vaikeväärtuseks 1. Samas, juhul kui `algindeks` ja/või `lõppindeks` ära jätta, loetakse see vaikimisi väikseimaks või vastavalt suurimaks indeksiks antud massiivi dimensioonis. Seega näiteks

```
integer,dimension(2,3) :: g
integer,dimension(2,3,3) :: f
g = f(:,:,2) ! tähendab sama mis g(1:2,1:3)=f(1:2,1:3,2)
g = f(:,1,1:3) ! tähendab sama mis: g(1:2,1:3)=f(1:2,1,1:3)
```

Massiivkonstante (st. massiive, mille kõigil või teatud osal elementidel on üks konstantne väärtus), saab defineerida näiteks nii:

```
real,dimension(1024) :: a
a(1:1024) = 1.0 ! sama mis: a = 1.0
a(:1024:2) = 2.0 ! a(1)=a(3)=...= 2.0
```

Teiseks mugavaks võimaluseks on kasutada järgmist tüüpi **massiivikonstruktorit**:

```
a = (/ (i,i=1,1024) /) ! a(1)=1,a(2)=2,a(3)=3,...
a = (/ (i,i=1,4096,4) /) ! a(1)=1,a(5)=5,...
```

Massiivikonstruktor töötab vaid 1-dimensionaalse massiivi korral, kuid kui on vaja mitmemõõtmelisi massiive initsialiseerida, võib kasutada sisseehitatud funktsioone `reshape` ja `shape` nagu toodud järgnevas näites:

Lähtetekst 4.1: Reshape ja shape kasutamine massiivi kujumuutuseks

```
integer,dimension(2,3) :: g
g = reshape( (/ 1.,2.,3.,4.,5.,6. /), shape(g))
```

Funktsioon `reshape` ütleb antud juhul, et lineaarset massiivi tuleb tegelikult interpreteerida 2-mõõtmelise massiivi `g` kujul.

Fortran interpreteerib mitmedimensionaalseid massiive kui ühedimensionaalseid, kusjuures esimene indeks varieerub kõige kiiremini. Öeldakse, et Fortranis salvestatakse maatrikseid veergude kaupa, erinevalt näiteks C keelest, kus salvestatakse ridade kaupa. Seega, massiivi `g` elementi indeksitega `(i,j)` interpreteeritakse tegelikkuses kui:

```
size(g,dim=1)*(j - 1) + i
```

Näiteks, massiiv:

```
g(1,1) = 1.; g(2,1) = 2.
```

```
g(1,2) = 3.; g(2,2) = 4.
g(1,3) = 5.; g(2,3) = 6.
```

on tegelikult salvestatud kujul `(/ 1.,2.,3.,4.,5.,6. /)`.

Kordame veelkord, et Fortran9x massiiviavaldistes peavad massiivide kujud olema sarnased, st. dimensioonide arv ja ulatus igas dimensioonis peavad olema võrdsed. Kusjuures skalaare võib kasutada avaldistes koos mistahes kujul massiividega. Õnneks suudab enamuse sellistest eksimustest avastada kompilaator lähteteksti töötluse käigus.

4.4 Reserveeritava mäluga massiivid

Fortran9x-s saab dünaamiliselt reserveeritava mäluga massiividele mälu eraldada käsuga `ALLOCATE`. Massiivikirjelduses peab aga esinema `ALLOCATABLE` atribuut, mis deklareerib, et tegu on reserveeritava mäluga massiiviga:

```
1 program simulate
2   implicit none
3   integer :: n
4   integer,dimension(:,:),allocatable :: a
```

See defineerib massiivi nime ja järgu (e. dimensioonide arvu) kuid jätab massiivi ulatuse määratlemata kuni näiteks massiivi suurus selgub peale sisselugemist:

```
5   print *,'Sisesta n:'
6   read *,n
7   if (.NOT.allocated(a)) allocate(a(n,2*n))
```

Kui massiivi `a` enam vaja ei ole, tuleb anda käsk:

```
108   deallocate(a)
109 end program simulate
```

NB! Eksisteerib oht mälulekkeks programmis juhul, kui uuesti reserveerida mälu samale massiivile ilma, et eelnevalt oleks kutsutud välja vastav `DEALLOCATE` käsk!

Märkus. Praktikas kasutatakse atribuudi `allocatable` asemel tihti hoopis `pointer`-atribuuti. Põhjuseks on asjaolu, et `pointer`-atribuudi puhul `allocate`-`deallocate` käsud töötavad samuti nagu `allocatable`-atribuudi puhul, kuid mälueralduse või -vabastuse võib sooritada ka näiteks alamprogrammis. Ka ei ole `allocatable`-tüüpi massiivid nähtavad mälu reserveerinud alamprogrammiblokist väljaspool! Muuhulgas, ka kompilaatorid võivad anda sellist laadi vigade korral üsna ebaadekvaatset informatsiooni, kui üldse.

4.5 Automaatsed massiivid

Automaatseid massiive kasutatakse situatsioonides, kus alamprogramm või funktsioon vajab lokaalset massiivi, mille suurus sõltub sisendparameetritest. Seda saaks realiseerida näiteks nii:

```
subroutine vanaviisi(a,n,m,lokaalne_massiiv)
  implicit none
  integer :: n,m
  real :: a(n,m),lokaalne_massiiv(n,m)
```

eeldades, et `lokaalne_massiiv` on saanud mäluealduse juba enne alamprogrammi `vanaviisi()` väljakutset. Juhul, kui `lokaalne_massiiv` on vajalik vaid lokaalselt alamprogrammi sees, võib kasutada automaatse massiivi konstruktsiooni. Sel juhul näeb see välja järgnevalt:

```
subroutine automaatne(a,n,m)
  implicit none
  integer :: n,m
  real :: a(n,m),lokaalne_massiiv(n,m)
```

Mälueraldus massiivile `lokaalne_massiiv` toimub automaatselt alamprogrammi `automaatne()` sisenemisel ning mälu vabastatakse samuti automaatselt alamprogrammist väljumisel.

4.6 Fiktiivsete argumentide deklareerimine

Alamprogrammi parameetrites olevate massiivide korral on kasutajal teatud vabadus, millises suhtes alamprogrammi või funktsiooni tegelikud parameetriteks olevad massiivid on fiktiivsete parameetritega (st. vastavad parameetrid, mis on defineeritud alamprogrammi enda seesmiseks kasutamiseks). On kolm erinevat võimalust: **etteantud kujuga**, **eeldatud suurusega** ning **eeldatud kujuga** fiktiivsed massiivparameetrid.

A. Etteantud kujuga *(explicit-shape)* fiktiivsed massiivargumendid

Ka Fortran77-s võib alamprogrammile edasiantav massiiv olla ettemääratud kujuga (järgu ja ulatusega), kuid see etteantud kuju ei pea tingimata kokku langema massiiviga, mis on alamprogrammi tegelikuks parameetriks. Alamprogrammi selline deklaratsioon määrab vaid ära lokaalselt, kuidas antud massiivi interpreteeritakse. Masiivide ulatused võivad olla kas staatilised või häälestatavad (*adjustable*) alamprogrammi argumentidega. Näiteks:

```
subroutine s1(a,b,c,k,m,n)
  real :: a(100,100) ! on staatiline massiiv
  real :: b(m,n) ! häälestatud
  real :: c(-10:20,k:n) ! häälestatud
```

B. Eeldatava suurusega *(assumed-size)* fiktiivsed massiivargumendid (vananenud, mittesoovitatav konstruktsioon)

FORTRAN 77 lubab ka nn. eeldatava suurusega massiive, kuid ainult viimases indeksis. Selleks asendatakse vastav raja sümboliga “*”. (Põhineb sellel, et massiivide tegelik salvestus mälus on lineaarne. Kuid selline mälumudel ei ole tegelikult hea näiteks hajussüsteemide korral ning on mittesoovitatav kuju.) Toome siin näite:

```
subroutine s2(a,b,c,k,m,n)
  real :: a(100,100) ! staatiline
  real :: b(m,*) ! eeldatava suurusega
  real :: c(-10:20,k:*) ! eeldatava suurusega
```

C. Eeldatava kujuga *(assumed-shape)* fiktiivsed massiivargumendid

Sellisel juhul tuleb ette anda vaid massiivi järk. Ulatust ette ei määrata. Iga dimensiooni kohta on vaja anda kirjeldus kujul: `[algindeks]:[lõppindeks]`. Näiteks,

```
subroutine s3(a,b,c,k)
  real :: a(100,100) ! staatiline
  real :: b(:,:) ! eeldatava kujuga
  real :: c(-10:20,k:) ! häälestatud
```

NB! Antud juhul peab seda alamprogrammi väljakutsuvas blokis olema defineeritud `interface`-liides.

Kokkuvõtvalt toome erinevad fiktiivsete massiivargumentide võimalused ära järgnevas näites alamprogrammi päisest:

```
subroutine massiivityybid(f,g,nx,ny,nz)
  implicit none
  integer :: nx, ny, nz
  real,dimension(2,3,4) :: ff ! määratud kuju
  real,dimension(nx,ny,ny) :: f !eeldatav suurus
  real,dimension(:,:) :: g ! eeldatav vorm
  real,dimension(size(g,1),size(g,2)) :: s ! automaatne
  real,dimension(:,:),allocatable :: t ! allokeeritav massiiv
  !.....
end subroutine
```

4.7 Standardfunktsioone massiividega

Vaatleme mõningaid Fortran90 sisseehitatud (ehk standard-)funktsioone massiivide kohta päringute tegemiseks. Need võimaldavad kirjutada üldisemaid protseduure, mis ei sõltu massiivi tüübist tegelikes argumentides:

4.7.1 Päringufunktsioonid

Loetleme järgnevalt mõningaid päringufunktsioone massiivide kohta:

`size(A[,dim])`: Väljastab massiivi `A` suuruse, või juhul kui antud `dim`, siis antud mõõtme ulatuse.

`shape(B)`: Väljastab 1-mõõtmelise täisarvulise massiivi, mille elementideks on `B` iga mõõtme ulatus.

`lbound(C[,dim])`: Annab massiivi `C` iga mõõtme kohta alumise indeksi, või siis vastava arvu dimensiooni `dim` olemasolu korral.

`ubound(D[,dim])`: Sarnane funktsiooniga `lbound`, kuid väljastatakse ülemised indeksid.

Illustreerime toodud funktsioone lihtsa näitega:

Lähtetekst 4.2: Lihtne näide päringufunktsioonide kohta

```
! Fail: paring.f90
program paring
  integer, dimension(-30:-25,12:18,0:4,5) :: a
  print *,'    size(a):',size(a)
  print *,'  size(a,1):',size(a,1)
  print *,'  lbound(a):',lbound(a)
  print *,'lbound(a,2):',lbound(a,2)
  print *,'  ubound(a):',ubound(a)
  print *,'ubound(a,3):',ubound(a,3)
  print *,'   shape(a):',shape(a)
end program paring
! Programmi väljund (Intel Fortrani kompil.)
!     size(a):         1050
!   size(a,1):            6
!   lbound(a):          -30          12           0           1
! lbound(a,2):           12
!   ubound(a):          -25          18           4           5
! ubound(a,3):            4
!    shape(a):            6           7           5           5
```

Fortran9x massiive võib sisuliselt lugeda teatud spetsiaalseteks **objektideks** millel on olemas kindlaksmääratud omadused ja meetodid päringute sooritamiseks nende omaduste kohta. Järgnev näide demonstreerib muuhulgas, kuidas saab alamprogrammile anda ette parameetreid (rida 49) olles kindel, et tegelik parameeter vastab õigele fiktiivsele parmeetrile:

Lähtetekst 4.3: Päringufunktsioonide kasutamine alamprogrammides

```
! Fail: testarrfun.f90
module vahetus
contains
  subroutine vahetaja(a1,b1,a2,b2)
    implicit none
    integer, optional, dimension(:) :: a1,b1
    integer, optional, dimension(:,:) :: a2,b2
    integer, dimension(size(a1)) :: work1
    !integer, dimension(size(a2,1),size(a2,2)) :: work2 ! ifc annab
                                                        !runtime-vea:
      !Allocate error 494: Allocation of Array with extent of
      !                   -459085316 failed
    integer, dimension(:,:), allocatable :: work2
    if (present(a1)) then
      work1=a1
      a1=b1
      b1=work1
    endif
    if (present(a2)) then
      allocate(work2(size(a2,1),size(a2,2)))
```

```
21        work2=a2
22        a2=b2
23        b2=work2
24        deallocate(work2)
25      endif
26    end subroutine vahetaja
27  end module vahetus
28  program testarrfun
29    use vahetus
30    implicit none
31    integer, dimension(4)    :: a,b
32    integer, dimension(3,3)  :: aa,bb
33    integer, dimension(2), parameter :: d=shape(bb)
34    integer :: i
35    a=(/(i,i=1,size(a))/)
36    b=(/(i,i=size(a),1,-1)/)
37    print *,'a  =',a
38    print *,'b  =',b
39    aa=reshape((/(i,i=1,size(aa))/),(/3,3/))
40    !bb=reshape((/(i,i=size(bb),1,-1)/),(/3,3/))
41    bb=reshape((/(i,i=size(bb),1,-1)/),d)          ! (sama tulemus:)
42    print *,'aa =',aa
43    print *,'bb =',bb
44    call vahetaja(a,b)
45    print *,'----------- Peale vahetusi: ---------------'
46    print *,'a  =',a
47    print *,'b  =',b
48    !call vahetaja(a,b,aa,bb) ! aga a ja b juba vahetatud! :
49    call vahetaja(a2=aa,b2=bb)
50    print *,'aa =',aa
51    print *,'bb =',bb
52  end program testarrfun
53  ! Programmi väljund (Sun Fortran komp.) :
54  ! a  = 1 2 3 4
55  ! b  = 4 3 2 1
56  ! aa = 1 2 3 4 5 6 7 8 9
57  ! bb = 9 8 7 6 5 4 3 2 1
58  ! ----------- Peale vahetusi: ---------------
59  ! a  = 4 3 2 1
60  ! b  = 1 2 3 4
61  ! aa = 9 8 7 6 5 4 3 2 1
62  ! bb = 1 2 3 4 5 6 7 8 9
```

Toome siin veel sellesama ülesande lahenduse, kuid kirjutatuna veidi erinevalt, arvestades polümorfismi võimalusi Fortran9x keeles::

Lähtetekst 4.4: Eelnev programm kirjutatuna arvestades polümorfismi võimalusi Fortran9x-s

```
1  ! Fail: testarrfun2.f90
2  module vahetus2
3    interface vahetaja
4      module procedure vahetaja1, vahetaja2
5    end interface
6  contains
7    subroutine vahetaja1(a1,b1)
8      implicit none
9      integer, dimension(:) :: a1,b1
```

```
10        integer, dimension(size(a1)) :: work1
11        work1=a1
12        a1=b1
13        b1=work1
14     end subroutine vahetaja1
15     subroutine vahetaja2(a2,b2)
16        implicit none
17        integer, dimension(:,:) :: a2,b2
18        integer, dimension(:,:), allocatable :: work2
19        allocate(work2(size(a2,1),size(a2,2)))
20        work2=a2
21        a2=b2
22        b2=work2
23        deallocate(work2)
24     end subroutine vahetaja2
25     ! Et täiesti universaalset protseduuri saada, tuleks jätkata:
26     ! subroutine vahetaja3
27     !    . . .
28     ! jne. kuni vahetaja7
29  end module vahetus2
30
31  program testarrfun2
32     use vahetus2
33     implicit none
34     integer, dimension(4)    :: a,b
35     integer, dimension(3,3)  :: aa,bb
36     integer, dimension(2), parameter :: d=shape(bb)
37     integer :: i
38     a=(/(i,i=1,size(a))/)
39     b=(/(i,i=size(a),1,-1)/)
40     print *,'------------ Massiivid algul : --------------'
41     print *,'a  =',a
42     print *,'b  =',b
43     aa=reshape((/(i,i=1,size(aa))/),d)
44     bb=reshape((/(i,i=size(bb),1,-1)/),d)
45     print *,'aa =',aa
46     print *,'bb =',bb
47     call vahetaja(a,b)
48     print *,'------------ Peale vahetusi : ----------------'
49     print *,'a  =',a
50     print *,'b  =',b
51     call vahetaja(aa,bb)
52     print *,'aa =',aa
53     print *,'bb =',bb
54  end program testarrfun2
55  ! Programm väljastab (SUN) :
56  ! ------------ Massiivid algul : --------------
57  ! a  = 1 2 3 4
58  ! b  = 4 3 2 1
59  ! aa = 1 2 3 4 5 6 7 8 9
60  ! bb = 9 8 7 6 5 4 3 2 1
61  ! ------------ Peale vahetusi : ----------------
62  ! a  = 4 3 2 1
63  ! b  = 1 2 3 4
64  ! aa = 9 8 7 6 5 4 3 2 1
65  ! bb = 1 2 3 4 5 6 7 8 9
```

4.7.2 Kujumuutusoperatsioonid

Eepooltoodud näites 4.1 kasutasime juba sisefunktsiooni `reshape`, mis transformeerib massiivi ühest kujust teise. Sellised funktsioonid on veel:

Funktsioon `spread(A,dim,ntk)` tekitab massiivist `A` `ntk` koopiat suunas `dim`. Näiteks, juhul kui `A=(/7,4/)`, siis

$$\texttt{spread(A,2,3)=}\begin{pmatrix} 7 & 7 & 7 \\ 4 & 4 & 4 \end{pmatrix}; \quad \texttt{spread(A,1,3)=}\begin{pmatrix} 7 & 4 \\ 7 & 4 \\ 7 & 4 \end{pmatrix}.$$

Funktsioon `pack(B,mask[,vektor])` pakib suvalise kujuga massiivi ühedimensionaalsesse massiivi kasutades loogilist massiivi `mask`. Juhul kui vektor on antud, siis tulemusvektori pikkuseks on `vektor`-i pikkus, vastasel juhul on pikkuseks väärtuste `.true.` arv massiivis `mask`. Näiteks, juhul kui

$$\texttt{mask=}\begin{pmatrix} T & F & T \\ F & T & F \end{pmatrix}$$

ja

$$\texttt{A=}\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 4 & 5 & 6 \end{pmatrix},$$

siis `pack(A,mask)` on `(/1,3,5/)`; `pack(A,mask,(/7,8,9,10/))` on `(/1,3,5,10/)`. Viimasel juhul võetakse tulemusvektoriks `vektor`, milles on esimesed kolm komponenti asendatud.

4.7.3 Vektorite ja maatriksite korrutamine

Juhul kui meil on antud kaks sarnase kujuga massiivi `A` ja `B`, siis `A*B` tähendab nende elementviisilist korrutamist. Kui me tahame aga leida `A` ja `B` korrutist maatriksite korrutamise mõttes, siis on selleks olemas sisefunktsioon `matmul`. Näiteks,

```
integer :: n,k,m
real :: A(n,k),B(k,m),C(n,m)
  C=matmul(A,B)  ! Realiseerib maatriksite korrutamise
```

Tuleb vaid hoolt kanda, et tegurite kujud ühilduksid maatriksite korrutamiseks sobivalt.

Sisefunktsioon `dot_product(A,B)` realiseerib skalaarkorrutise, ehk `matmul` erijuhu juhul kui `A` oleks reavektor (`A(1,n)`) ning `B` veeruvektor (`B(n,1)`). `Dot_product(A,B)` puhul peavad aga `A` ja `B` olema sama kujuga massiivid (näiteks `A(n)`,`B(n)`).

4.7.4 Kitsendusfunktsioonid

Kitsendusfunktsioonid massiividega on näiteks `sum, product, count, maxval, any, all`. Toome siin vaid paar illustreerivat näidet:

```
real :: a(1024),b(4,1024),skaalar
  skaalar = sum(a) ! kõigi elementide summa
  a = product(b,DIM=1) ! esimeses dimensioonis olevate elementide
                       !                                  korrutis
  skaalar = count(a==0) ! annab nulliliste elementide arvu
  skaalar = maxval(a,mask=a<0) ! nullilähedaseim negatiivne element
```

On olemas loogilised kitsendusfunktsioonid nagu näiteks `all` ja `any`:

```
logical :: a(n)
real,dimension(n) :: b, c
if (all(a)) ...       ! globaalne .AND.
if (all(b==c)) ...    ! tõene juhul kui võrdus kehtib igal pool
if (any(a)) ...       ! globaalne  .OR.
if (any(b<0.0)) ...   ! tõene juhul kui suvaline element < 0.0
```

4.7.5 Asukohafunktsioonid

Asukohafunktsioonide abil saab leida massiivi teatud elemendi positsiooni.

Sisefunktsioonid `maxloc` ja `minloc` väljastavad vastavalt massiivi minimaalse või maksimaalse elemendi positsiooni.

Funktsioon `maxloc(A[,mask])` väljastab ühedimensionaalse massiivi, mille elementide arvuks on massiivi `A` dimensioonide arv. Selle väärtuseks on indeksite loetelu, mis määrab ära massiivi `A` maksimaalse elemendi asukoha (nende elementide hulgast kus `mask` väärtus on `.true.` juhul kui `mask` antud on). Funktsioon `minloc` leiab analoogselt minimaalse väärtuse.

4.7.6 Massiivi muutmise funktsioonid

Sellesse kategooriasse kuuluvad sisefunktsioonid `cshift`, `eoshift` ja `transpose`.

Funktsioon `transpose(maatriks)` tagastab 2-dimensionaalse massiivi `maatriks` transponeeritul, st. tulemuses on element `(i,j)` asendatud elemendiga `(j,i)`.

Funktsioon `cshift(A,shift,dim)` tagastab sama tüübi ja kujuga massiivi nagu `A`, kuid nihutab tsükliliselt maatriksit `shift` sammu suunas `dim`.

Funktsioon `eoshift(A,shift,dim[,boundary])` töötab sarnaselt funktsiooniga `cshift`, kuid tsirkulatsiooni ei toimu. Tühjad kohad asendatakse nullilise väärtusega või parameetri boundary väärtusega selle olemasolu korral.

Funktsioonide chsift ja eoshift kasutamise kohta toome järgneva näite:

Lähtetekst 4.5: Sisefunktsioonide cshift ja eoshift kasutamine.

```
1  program cshift_test
2    interface
3      subroutine valjasta_maatriks(a)
4        integer :: A(:,:)
5      end subroutine valjasta_maatriks
6    end interface
7    integer,dimension(4,5) :: G,F
8    integer :: i,j
9    G = reshape( (/ (i,i=1,size(G)) /),shape(G))
10   print *,'maatriks G on:'
```

```
11    call valjasta_maatriks(G)
12    F = cshift(G,shift=-1,dim=1)
13    print *,'maatriks cshift(G) on:'
14    call valjasta_maatriks(F)
15    F = eoshift(G,shift=-2,dim=2,boundary=88)
16    print *,'maatriks eoshift(G) on:'
17    call valjasta_maatriks(F)
18 end program cshift_test
19
20 subroutine valjasta_maatriks(A)
21    integer :: A(:,:),i,j
22    do i=1,size(A,dim=1)
23       print *,(A(i,j),j=1,size(A,dim=2))
24    enddo
25 end subroutine valjasta_maatriks
26 ! Programm väljastab (Intel Fortran kompilaator):
27 ! maatriks G on:
28 !            1           5           9          13          17
29 !            2           6          10          14          18
30 !            3           7          11          15          19
31 !            4           8          12          16          20
32 ! maatriks cshift(G) on:
33 !            4           8          12          16          20
34 !            1           5           9          13          17
35 !            2           6          10          14          18
36 !            3           7          11          15          19
37 ! maatriks eoshift(G) on:
38 !           88          88           1           5           9
39 !           88          88           2           6          10
40 !           88          88           3           7          11
41 !           88          88           4           8          12
```

4.7.7 WHERE - direktiiv

Operatsioone saab kitsendada vaid teatud massiivi elementidele `where`-direktiiviga. See on ühetasemeline käsk, (uus `where` ei tohi välimises `where`-blokis esineda). Sisuliselt nagu `if`-käsk kus argumendiks on loogiline massiiv. Olemas on ka `else where` klausel:

```
real,dimension(7,7) :: a,b
!...
where (a/=0) b=1/a
!...
where (a>2.0)
   b = a*9.0
else where
   b = a/3.0
end where
```

4.8 Sisend-väljund

Anname siin vaid mõningaid kasulikke näpunäiteid Fortran9x sisendi- ja väljundioperatsioonide kohta. Detailsemaks tutvuseks soovitame lugeda Fortran9x kirjandust.

4.8.1 Formaadikirjeldused

Sisestamiseks on käsk `read`, väljastamiseks käsud `print` ja `write`. Nagu eelpooltoodud näidetes näha võis, on kõige lihtsamaks väljastamismooduseks käsk `print *`, sisestamiseks aga käsk `read`, näiteks:

```
read *,muutuja
print *,'muutuja=',muutuja[,'muutuja2='][,muutuja2],...
```

Seejuures tähistab `'*'` standardväljundit või -sisendit, mis üldjuhul on vastavalt arvutiekraan ja klaviatuur. Käsk `print *` on tegelikult pärit Fortran77-st ning on ekvivalentne Fortran9x `write(*,*)`-käsuga (kirjutada standardväljundisse standardses formaadis iga trükitava välja kohta). Käsk `read *` on samas ekvivalentne `read(*,*)`-käsuga. Märgime siin, et see “standardne formaat” on paraku kompilaatoriti erinev. Sellepärast, saavutamaks kompilaatorist sõltumatut väljundikuju, tuleks kasutada formaadikirjeldust `format`.

`Format`-kirjeldusega saab ette anda `read(*,*)` ja `write(*,*)` käsule väljastatava või sisestatava väärtuse kuju asendades teise ’`*`’ vastava kirjega. `Format`-kirje võib olla defineeritud neljal erineval viisil:

1. Parameetrina otse käsus endas, formaadikirje peab olema ümbritsetud sulgudega. Näiteks:

```
write(*,'(I5,F10.2)') ...muutujad...
```

2. `Format`-kirje võib olla defineeritud eraldi parameetrina:

```
character(len=*), parameter :: FMT1 = "(I5,F10.2)"
write(*,FMT1) ...muutujad...
```

3. `Format`-kirje saab defineerida ka string-muutujas:

```
character(len=20) :: FMT1 = "(I5,F10.2)"
write(*,FMT1) ...muutujad...
```

4. Võimalik on ka eraldiseisev `format-`direktiiv:

```
write (*,10) ...muutujad...
10 format(I5,F10.2)
```

Viimast kuju kasutatakse juhul, kui mitmes eri kohas on vaja samas formaadis midagi väljastada ning üldiselt keerukamatel juhtudel.

Näide:

```
! Variant 1:
character(len=*),parameter :: fmt='(2i3,i9,A11)'
write (*,fmt) 1,2,3,'  on numbrid'
! Variant 2:
write (*,'(2i3,i9,A11)') 1,2,3,'  on numbrid'
! Variant 3:
write (*,'(2i3,i9,A)') 1,2,3,'  on numbrid'
! Variant 4:
write (*,10) 1,2,3
10 format(2i3,i9,'  on numbrid')
! väljastavad kõik sama tulemuse:
!  1  2          3  on numbrid
```

Loetleme siin mõningate formaadisümbolite tähendusi:

Formaadisümbol `i` tähistab täisarvu. Sellele peab järgnema täisarvu kohtade arv, näiteks `i4` tähendab, et tuleb trükkida täisarv nelja sümboli pikkusele väljale. Kui tegelik väljastatava arvu kohtade arv on väiksem kui 4, siis lisatakse ette tühikud.

Igale kirjeldusele võib ette kirjutada korduste arvu. Näiteks, `3i5` tähendab, et trükitakse 3 viiekohalist täisarvu.

Sümbol `f` on ujukomaarvu tähis. Kirje `f10.2` tähendab, et trükitava arvu kogupikkus on maksimaalselt 10 ja 2 kohta on peale koma. NB! kui arv on negatiivne, siis ka miinusmärk võtab ühe koha (nii nagu ka “`.`”).

Näiteks:

```
write (*,'(f10.2)') -1234567.89
```

annab väljundis vea, selle asemel tuleks kirjutada:

```
write (*,'(f11.2)') -1234567.89
```

Sümboliga `e` tähistatakse ujukomaarvu eksponentsiaalsel kujul, näiteks:

```
write (*,'(e10.2)') -1234567.89 ! annab: -0.12E+07
```

Formaadisümbol `a` ütleb, et tegemist on kirjega.

Juhul kui on vaja midagi lugeda või kirjutada ilma reavahetuseta, võib lisada atribuudi `advance='no'.` Näiteks:

```
do i=1,5
  write (*,'(A,I2)',ADVANCE='NO') ' i =',i
enddo
write (*,'(A)') ' rea lõpp.'
! väljastab:
! i = 1 i = 2 i = 3 i = 4 i = 5 rea lõpp.
```

4.8.2 Failitöötlus

Seni oli toodud näidetes `write` käskudes esimeseks parameetriks (ehk välisseadme tunnuseks) olnud '`*`' mis on vaikimisi number '`6`' ehk käsuaken. Selleks parameetriks saab võtta aga ka näiteks stringimuutuja. Näiteks:

```
character(len=80) :: kirje
write (kirje,'(e15.9)') -1234567.89
write (*,*) 'kirje  on:',kirje
```

annab tulemuseks:

```
kirje on:-.123456787E+07
```

Välisseadmeks võib aga defineerida hoopis faili, avades selle eelnevalt `open`-käsuga, nagu näiteks:

```
open(2,file='failinimi.txt')
write (2,*) 'Faili kirjutamine'
close(2)
```

mis loob faili nimega `failinimi.txt` mille sisuks saab:

```
Faili kirjutamine
```

(NB! Juhul kui selline fail juba eksisteerib, kirjutatakse see üle (nii et parem on mitte võtta failinimeks `minu_dissertatsioon.doc`, kui selline juhtub eksisteerima ja on ainus koopia).)

Failist lugemine toimub sarnaselt:

```
open(3,FILE='failinimi.txt')
read (3,'(80A)') kirje
close(3)
```

Käsul `open` on palju atribuute, millest vaid mõnda olulisemat siin lähemalt käsitleme (mõnda ülejäänut vaid mainime ning vajaduse korral tuleks manuaalidest ise täpsemalt nende kohta lugeda):

- Atribuut `FORM`. Väärtusteks kas `FORMATTED` (vaikeväärtus) või `UNFORMATTED`. `FORMATTED` tähendab, et faili puhul on tegemist tekstifailiga, `UNFORMATTED` puhul tehakse operatsioone binaarsel kujul, mis on üldjuhul palju kiirem. (Kui tegemist on binaarsete failidega, siis peab arvestama muuhulgas, et eri arvutiarhitektuurid salvestavad 4- või 8-baidilisi sõnu erinevalt. Enimlevinud on nn. *little endian* (näiteks Inteli protsessorid) ja *big endian* (näiteks SUN) formaadid. Seega, juhul kui fail on salvestatud binaarselt üht tüüpi arvutil, ei pruugi seda saada niisama lihtsalt sisse lugeda teist tüüpi arvutiarhitektuuril.)

Näide käsu `open` atribuudi `FORM` kasutamisest:

```
open(3,FILE='failinimi.dat',FORM='UNFORMATTED')
```

- Atribuut `ACTION`. Väärtusteks kas `READWRITE` (vaikimisi), `READ`, või `WRITE`. Väljendab eesmärki, mis antud failiga on plaanis peale avamist. Näiteks juhul, kui `ACTION='READ'` kuid proovida faili kirjutada, väljastatakse viga.

- Atribuut STATUS. Väärtusteks kas OLD (fail peab avades juba eksisteerima), NEW (faili ei tohi avades eksisteerida), REPLACE (juhul kui avatav fail juba olemas, siis see asendatakse uuega), SCRATCH (fail säilitatakse vaid kuni vastava close käsuni või programmi töö lõppemiseni) või UNKNOWN (vaikeväärtus, tegelik käitumine sõltub arvutisüsteemist).

- Atribuut ACCESS määrab faili võimalike operatsioonide tüübid; väärtusteks kas SEQUENTIAL (vaikimisi) või DIRECT. (SEQUENTIAL puhul lubatud käsud BACKSPACE (tagasiliikumine), REWIND (algusse liikumine) ja ENDFILE (võimalus ise panna faililõpusümbol).)

- Atribuut POSITION määrab positsioni failitöötluse alghetkel. Väärtusteks ASIS (vaikeväärtus, juhul kui fail juba eksisteerib ja on avatud, siis positsiooni ei muudeta), REWIND (minnakse faili algusse) või APPEND (kui fail eksisteerib, siis asutakse selle lõppu).

Üks vajalikke atribuute, mis on lubatud kõigi, read, write, open, close korral on IOSTAT. Selle abil on võimalik veasituatsioone "kinni püüda". Demonstreerime seda järgneva programmilõigu abil:

```
character(len=80) :: kirje,kirje2
integer :: ios
open(4,FILE='failinimi.txt',ACTION='READ',IOSTAT=ios)
if (ios/=0) then
  write (*,*) 'faili avamine lugemiseks ebannestus'
else
  read (4,'(80a)') kirje
  write (*,*) 'kirje  on:',kirje
  read (4,'(80a)',IOSTAT=ios) kirje2
  if (ios/=0) then ! juhul kui failis pole rohkem ridu:
    print *,'faili lpp!'
  else
    write (*,*) '2 kirje  on:',kirje2
  endif
  close(4)
endif
```

Osa II

MPI (*The Message Passing Interface*)

Peatükk 5

Kontseptsioon

Paralleelprogrammeerimises on kasutusel kaks põhilist mudelit: **jagatud mäluga multiprotsessori mudel** ning **teateedastusmudel**. Antud õppematerjalis tutvustame lähemalt vaid **teateedastusmudelit**. **Jagatava mälu (*shared memory*)** mudeli puhul on eelduseks ühise mäluruumi olemasolu paralleelselt töötavatel protsessoritel; informatsiooni vahetamine eri protsessidel toimub selles hästiorganiseeritud mälupöördumiste kaudu. Enimkasutatavaks standardiks sedalaadi programmeerimisel on OpenMP standard, kuid rohkem me sellel siin ei peatu. **Teateedastusmudeli** eeliseks tuleb pidada võimalust realiseerida seda ka jagatava mäluga arhitektuuride korral, mis on seega universaalsem. Kirjutades paralleelprogrammi lähtekoodi teateeedastusmeetodil saab seda edukalt kasutada lisaks hajussüsteemidele (*distributed systems*) ka jagatud mäluga multiprotsessor-arvutil.

Teateedastusmeetodil on mitmeid realisatsioone. Kaks tuntumat nendest on PVM (*Parallel Virtual Machine*) ja MPI (Message Passing Interface). Esimene neist, PVM, sai tuntuks veidi varem tänu tasuta kättesaadava PVM-teegi olemasolule. PVM on üks konkreetne projekt, samas üsna edukas, nii et paljud kasutavad seda endiselt. MPI on aga vastukaaluks kujunenud tegelikult standardiks (MPI, nn MPI-1 standard aastast 1992, MPI-2 standard aastast 1998), millel leidub mitmeid realisatsioone. Populaarsemad realisatsioonidest on MPICH (*MPI Chameleon Implementation*) ja LAM-MPI, mis on mõlemad tasuta kopeeritava lähtekoodiga. Lisaks leidub mitmeid arhitektuuri-põhiseid kommertsiaalseid realisatsioone (SUN-MPI, SGI-MPI, Scali-MPI jne.) Märgime, et tegelikult saab MPI programme käivitada ka näiteks üheprotsessorilisel arvutil – käivitatakse mitu UNIXi protsessi samal masinal, mis omavahel suhtlevad MPI käskude abil sarnaselt mitmeprotsessorilise juhuga. Nii saab programme kirjutada ja siluda suvalisel arvutil, millel on MPI installeeritud.

MPI-s kasutatavat teateedastusmudelit võib lühidalt iseloomustada järgnevate omadustega:

- Kõik protsessid on omavahel sõltumatud üksteisest sõltumatu mäluga. Enamus MPI programme kasutab järgnevat struktuuri (kuigi ka mõned teised kujud, nagu näiteks klient-serveri mudel, on võimalikud):
  - Kõigi protsesside juhtimiseks kirjutatakse üks ja sama programm;
  - eri protsessidel on erinevad andmete alamhulgad.

- Kommunikatsioon ehk protsessidevaheline andmetevahetus toimub teadete saatmise ja vastuvõtmise teel.

- Teade sisaldab edastatavaid andmeid ning lisaks teatud informatsiooni:

```
dest - vastuvõtva protsessi ID
srce - saatja ID
tag - teate pealkiri
len - teate pikkus
comm - kommunikaator
type - teatetüüp
buffer - tegelikud andmed mida antud teatega edastatakse
```

Enne, kui saab ja on vajadust üldse mingeid teateid saata, tuleb moodustada paralleelsed andmestruktuurid. Toome näiteks programmilõigu kahe vektori (massiivi) summa arvutamiseks:

```
do i=1,n
  z(i)=x(i)+y(i)
end do
```

Paralleliseerides selle kahel protsessoril, peame eelkõige otsustama, kuidas me soovime protsessorite vahel jagada ära andmed (antud juhul massiivi elemendid)? Oletame, et jagame massiivid pooleks, siis andmete paiknemine on järgmine:

```
1 ! Protsess 0
2 real, dimension(1:n/2) :: x,y,z
```

```
! Protsess 1
real, dimension(n/2+1:n) :: x,y,z
```

Paralleliseerides näeb eeltoodud programmilõigu tsükkel välja selline:

```
3 ! Protsess 0
4 do i=1,n/2
5   z(i)=x(i)+y(i)
6 end do
```

```
! Protsess 1
do i=n/2+1,n
  z(i)=x(i)+y(i)
end do
```

Näeme et antud juhul kommunikatsiooni vaja ei ole. Kui aga soovime paralleliseerida järgnevat programmilõiku:

```
1 real(kind=rk) :: a,x(n),y(n)
2 a=0.0_rk
3 do i=1,n
4   a=a+x(i)*y(i)
5 end do
```

kahel protsessoril, saame analoogselt:

```
1 ! Protsess 0
2 real(rk) :: a0,x(n/2),y(n/2)
3 a0=0.0_rk
4 do i=1,n/2
5   a0=a0+x(i)*y(i)
6 end do
7 a = a0+a1
```

```
! Protsess 1
real(rk)::a1,x(n/2+1:n),y(n/2+1:n)
a1=0.0_rk
do i=n/2+1,n
  a1=a1+x(i)*y(i)
end do
a = a0+a1
```

Näeme, et real number 7 olevate omistamisoperatsioonide teostamiseks on tarvis kommunikatsiooni. Antud näidetes oli paralleelsete andmestruktuuride loomine lihtne. Praktikas ettetulevates ülesannetes moodustab paralleelsete andmestruktuuride ülesehitus tihti mahukaima osa. Me veendume selles ka ise käesoleva õppematerjali viimases peatükis esitatava veidi suurema, reaalsest elust toodud näite varal.

Järgnevalt vaatleme, kuidas protsessidevahelist kommunikatsiooni teostada kasutades MPI võimalusi.

Peatükk 6

MPI kuus põhikäsku

MPI koosneb spetsiaalsetest andmestruktuuridest (nagu näiteks tüübidefinitsioonid, kommunikaatorid (mis kujutavad endast teatud protsesside alamhulka), eeldefineeritud konstantidest jms.) ning MPI käskudest. Kui lugeda programmiteksti, mis kasutab MPI-d siis eristuvad MPI-ga seotud direktiivid tekstis eesliidese `MPI_` kasutamisega, mis tähendab, et tegu on MPI käsu või andmestruktuuriga.

Võib tunda huvi, kui suur on MPI standard? Esmapilgul tundubki ta üsna mahukas sisaldades päris suure arvu käskusid. Samas võib öelda, et MPI on lihtne ja väike, kuna piisab vaid mõne loetud põhikäsu teadmisest.

Selleks, et kirjutada valmis paralleelprogramm, piisab põhimõtteliselt vaid kuuest MPI käsust. Loetleme siin need käsud, (käskudest täpsemalt veidi hiljem):

1. `MPI_Init` – MPI andmestruktuuride initsialiseerimiskäsk. Alati esimene MPI-käsk suvalises MPI programmis.
2. `MPI_Comm_Size` – Selle käsu abil saab teha päringu teiste protsesside arvu kohta antud paralleelprogrammis või protsesside alamhulgas..
3. `MPI_Comm_Rank` – Päring, mille abil saab protsess teada oma järgu ehk ID antud grupis.
4. `MPI_Send` – Teate saatmine.
5. `MPI_Receive` – Teate vastuvõtmine.
6. `MPI_Finalize` – MPI andmestruktuuride destruktor, töö lõpetamine. Viimane MPI-käsk MPI-programmis.

Suur osa paralleelprogrammide funktsionaalsusest on toodud kuues käsus juba olemas. Paljud teised käsud baseeruvad nendel põhikäskudel või on nende modifikatsioonid.

Järgnevalt meie "hello world" paralleelprogramm:

Lähtetekst 6.1: Lihtne MPI teatesaatmise -vastuvõtu programm

```
1 ! Fail: mpi_tervitus.f90
2 program mpi_tervitus
3   use mpi ! MPI-andmestruktuuride, konstantide, interfeiside moodul
```

```
4    integer :: minuid, proarv ! MinuID ja PROtsessideARV
5    integer :: pikkus ! teate pikkus
6    parameter (pikkus=MPI_MAX_PROCESSOR_NAME+1) ! MPI eeldef.-d konst.
7    character*(pikkus) :: nimi,charpuhver
8    integer :: stat(MPI_STATUS_SIZE),ierr,i,dest,tag,tegpikk
9    ! ------------ Ettevalmistav osa ------------
10   call MPI_Init(ierr) ! Initsialiseerimne. Vea korral ierr 0-st erinev
11   ! MPI_COMM_WORLD: Eeldefineeritud kommunikaator kuhu kuuluvad kõik
12   !                 protsessid mis antud programmi käivitasid
13   call MPI_Comm_size(MPI_COMM_WORLD,proarv,ierr) ! Protsesside arv?
14   call MPI_Comm_rank(MPI_COMM_WORLD,minuid,ierr) ! MinuID päring
15                                            ! (0 <= minuid < proarv)
16   call MPI_Get_processor_name(nimi,tegpikk,ierr) ! Protsessori
17          ! nimepäring (protsessori või tööjaama süsteemne nimi, kus
18          ! antud  protsess jookseb (ebaolulisi MPI abikäske) )
19   ! ------------ Ettevalmistava osa lõpp ------------
20   if (minuid/=0) then
21     dest = 0 ! sihtprotsessi järk
22     tag  = minuid ! Teate
23     ! Saata teade pealkirjaga "tag" protsessile järguga "dest"
24     ! kommunikaatoris "MPI_COMM_WORLD", mille sisuks on andmed
25     ! tüübist "MPI_CHARACTER" algusaadressil "nimi" pikkusega "pikkus"
26     call MPI_Send(nimi,pikkus,MPI_CHARACTER,dest,tag, &
27          MPI_COMM_WORLD,ierr)
28   else
29     print *,' Kokku on ',proarv,'paralleelset protsessi'
30     print *,' Põhiprotsess ',minuid,' jookseb protsessoril  ',nimi
31     do i=1,proarv-1
32       ! Võtta vastu teade mis saadetud teele käsuga MPI_Send. Esimesed
33       ! kolm argumenti määravad ära teate aadressi, pikkuse ja tüübi
34       ! teate sisu salvestamiseks. MPI_ANY_SOURCE ja MPI_ANY_TAG on
35       ! jokkerväärtused saatja-protsessi järgu ja teate TAGi jaoks.
36       ! (võiks asendada mõlemad arvuga i antud juhul)
37       ! Seitsmes argument "stat" on massiiv pikkusega MPI_STATUS_SIZE
38       ! mille abil saab teha päringuid saabunud teate kohta.
39       call MPI_Recv(charpuhver,pikkus,MPI_CHARACTER,MPI_ANY_SOURCE, &
40              MPI_ANY_TAG,MPI_COMM_WORLD,stat,ierr)
41       print*,' Protsess ',stat(MPI_SOURCE), &
42              ' jookseb protsessoril ',charpuhver
43     end do
44   endif
45   ! ------------ Teadete lõpp ------------
46   call MPI_Finalize(ierr) ! (Lõpetab MPI töö, vabastab mälu, tühistab
47                           ! saabumata teadete järjekorra jms.)
48   stop
49 end program mpi_tervitus
```

6.1 MPI konstruktor ja destruktor

Selleks, et programmis saaks kasutada MPI teegi käske, tuleb kompilaatorile kuidagi teatavaks teha, kust neid leida. Keele C korral on selleks käsk

```
#include "mpi.h"
```

Fortran77 korral saab MPI-teadlikkuse programmile lisada käsuga:

```
include 'mpif.h'
```

Keele Fortran9x jaoks on aga üldjuhul kõik MPI definitsioonid, konstandid, andmestruktuurid ja interfeisid antud moodulis nimega `mpi` mille kaasamiseks tuleb lisada rida:

```
use mpi
```

Kõige esimene MPI käsk, mis programmis on `MPI_Init`, on defineeritud kujul:

```
subroutine MPI_Init(ierr)
integer, intent(out) :: ierr
```

`MPI_Init` tuleb alati välja kutsuda enne kõiki teisi MPI käske, juhul kui MPI initsialiseerimine õnnestus, siis täisarvuline väljundparameeter `ierr` saab väärtuseks konstandi `MPI_SUCCESS`, vastasel korral saab `ierr` väärtuseks veakoodi, mis on sõltuv realisatsioonist. (Praktiliselt kõikidel MPI käskudel on Fortrani puhul viimaseks parameetriks `ierr`. C-keele korral toimub aga MPI-käskude poole pöördumine sarnaselt käsuga: `ierr=MPI_Init()`.)

Vastupidiselt `MPI_Init` käsule, peab käsk `MPI_Finalize` defineerituna kujul

```
subroutine MPI_Finalize(ierr)
integer, intent(out) :: ierr
```

ilmuma peale kõiki teisi MPI käske; `MPI_Finalize` lõpetab kõik pooleliolevad kommunikatsioonid, vabastab mälu jne. Seega võib seda nimetada MPI destruktoriks.

6.2 Põhipäringud

Käsk `MPI_Comm_Rank` kujul

```
subroutine MPI_Comm_Rank(komm, jark, ierr)
integer, intent(in) :: komm !näiteks MPI_COMM_WORLD
integer, intent(out) :: jark, ierr
```

tagastab muutujas `rank` väljakutsuva protsessi ID täisarvuna vahemikus `0` kuni `proarv-1`, kus `proarv` on protsesside arv antud kommunikaatoris. MPI kommunikaator on viide paralleelprogrammis osalevate protsesside teatud (alam)hulgale. Fortrani puhul on selleks viiteks teatud täisarvuline väärtus. Kommunikaator, millele viitab konstant `MPI_COMM_WORLD` ühendab endas kõiki protsesse, mis algselt käivitati ühtse MPI programmina.

Käsu `MPI_Comm_Size` abil saab teada protsesside koguarvu toodud kommunikaatoris; alamprogramm on kujul:

```
subroutine MPI_Comm_Size(komm, proarv, ierr)
integer, intent(in) :: komm !näiteks MPI_COMM_WORLD
integer, intent(out) :: proarv, ierr
```

6.3 Teadete saatmine ja vastuvõtmine

Teate saatmiseks on käsk `MPI_Send`:

```
subroutine MPI_Send(buffer,len,<MPI_type>,dest,tag,comm,ierr)
integer,intent(in) :: len,<MPI_type>
<type>,intent(in) :: buffer(len)
integer,intent(in) :: dest,tag,comm
integer,intent(out) :: ierr
```

Käsuga saadetakse teade protsessile järguga `dest`, mille sisuks on massiiv mälu algusaadressilt `buffer` andmetüübist `<MPI_type>` elementide arvuga `len`. Juhul kui `len=1`, siis võib `buffer` olla ka lihtmuutuja tüübist `<type>`. Teate identifitseerimiseks lisatakse sellele `tag` – positiivne täisarv.

Me kirjutame `<MPI_type>` nurksulgudes `<...>` seetõttu, et see tuleb tegelikult asendada ühe täisarvulise MPI poolt eeldefineeritud tüübikonstandiga vastavalt tegelikule muutujatüübile või eritähendust omavaga MPI tüübikonstandiga. `<MPI_type>` võib näiteks olla üks eeldefineeritud tüüpidest:

`<MPI_type>`	Andmetüüp
`MPI_CHARACTER`	sümboltüüp
`MPI_INTEGER`	täisarvutüüp
`MPI_LOGICAL`	Fortrani `LOGICAL`-tüüpi
`MPI_REAL`	ujukomaarvutüüp
`MPI_DOUBLE_PRECISION`, ka `MPI_REAL8`	topelttäpsusega ujukomaarvutüüp
`MPI_COMPLEX`	kompleksarvu tüüp
`MPI_DOUBLE_COMPLEX`	topelttäpsusega kompleksarvutüüp

Lisaks on olemas ka mehhanism isedefineeritud tüüpide loomiseks, mis võimaldab luua struktuurseid andmekooslusi või kasutada tüüpi `MPI_PACKED`, mille korral saab spetsiaalsete käskuda abil "pakkida" ka erinevat tüüpi muutujate või massiivide väärtusi kokku ühte teatesse.

Teate vastuvõtmiseks on käsk `MPI_Recv`:

```
call MPI_Recv(buffer,len,<MPI_type>,srce,tag,comm,status,ierr)
integer,intent(in) :: len,<MPI_type>
integer,intent(in) :: srce,tag,comm
<type>,intent(out) :: buffer(len)
integer,intent(out) :: status(MPI_STATUS_SIZE)
integer,intent(out) :: ierr
```

Siin on parameetrite `buffer, len` ja `<MPI_type>` tähendus sama, mis käsu `MPI_Send` korral eelpool. Sealjuures, teate saatja järguks on `srce`. Selleks võib kasutada ka nn. jokkerit `MPI_ANY_SOURCE`; sarnaselt võib `tag` olla `MPI_ANY_TAG`. Parameetri `status(MPI_STATUS_SIZE)` abil saab teha päringu saamaks teada saabunud teate tegeliku saatja, `tag` väärtuse, teate pikkuse (vt. programminäidet 6.1, rida 41).

6.4 MPI-programmide kompileerimine ja käivitamine

Tavaliselt on **MPI-programmide kompileerimiseks** olemas vastav skript või programm, mis automaatselt annab põhikompilaatorile ette vajalikud teed päisefailidele ning teekide leidmiseks. Näiteks `f95` programmide kompileerimiseks on olemas käsk `mpif95` (`mpf95` SUN arhitektuuril), C-keeles kirjutatud MPI programmide jaoks on vastavalt käsk `mpicc` (ja `mpcc` SUN arvutitel).

Programmi käivitamiseks näiteks 4 protsessoril tuleks anda käsk:

Linux: `mpirun -np 4 a.out`

või: `mpirun -machinefile masinad -np 4 a.out` (MPICH korral)

kus failis `masinad` on loetletud arvutite IP-aadressid millel tahetakse programmi käivitada.

SUN: `mprun -np 4 a.out` . (Kui on soov kasutada kõiki tööjaamu antud klastril, siis `mprun -np 0 a.out`.)

Peatükk 7

Veel MPI käske

Toodud kuue MPI käsu abil saab põhimõtteliselt paralleelprogrammi kirjutatud, kuid enamus MPI programme kasutavad siiski mõned korrad rohkemat arvu erinevaid MPI käske. Paljud neist muudavad protsessidevahelise kommunikatsiooni lihtsamaks ja mugavamks lähtuvalt konkreetsest situatsioonist ning eesmärkidest. Alljärgnevas esituses püüame lähtuda järgnevast MPI käskude liigitusest.

7.1 MPI käskude liigitus

MPI käsud võib jagada eri rühmadesse vastavalt sellele, kas need on **kahe protsessi vahelised (*point2point*) käsud**, **ühiskäsud ehk kollektiivkäsud; blokeerivad** või **mitteblokeerivad**. Kui käsu väljakutse piirkond on terve kommunikaator, näiteks `MPI_COMM_WORLD` (vt. alapunkti 6.2), siis on tegemist ühiskommunikatsiooni (*collective communication*) käsuga. Sellisel juhul peavad kõik protsessid antud kommunikaatoris selle käsu välja kutsuma. On olemas mehhanismid alamhulkade loomiseks etteantud kommunikaatoril, st., alamkommunikaatorite tekitamiseks, millel siis on võimalik ühiskäske täitvate protsesside hulka vajaduse järgi kujundada. Kõik ühiskommunikatsiooni käsud on **blokeerivad**, st., et ühegi teise protsessi töö ei saa jätkuda enne, kui kõik kommunikaatori protsessid on vastava käsuni jõudnud. Ka kahe protsessi vaheline kommunikatsioon võib olla blokeeriv, aga ka **mitteblokeeriv**. Näites 6.1 toodud teate saatmise ja vastuvõtu käsud olid blokeerivad. Efektiivsema paralleelprogrammi saavutamiseks on aga tihti käepärasem kasutada mitteblokeerivat teate saatmist ja vastuvõtmist millel peatume lähemalt peatükis 8.

7.2 Peamisi ühisoperatsioone

Tihti esineb paralleelprogrammeerimisel situatsioone, kus on vaja kõigi kommunikaatori protsesside sünkronisatsiooni. Vajalik on see siis, kui peab olema kindel, et kõik protsessid on oma töö käigus jõudnud teatud kindla verstapostini. Selliseks käsuks on

```
MPI_Barrier(comm, ierr)
```

Käsku `MPI_Barrier` kasutatakse kõigi kommunikaatori `comm` protsesside sünkroniseerimi-

seks. Tegelikult on nii, et mida vähem sünkronisatsioonipunkte paralleelprogrammis leidub, seda efektiivsemaid programme saab kirjutada. Kuid alati ilma läbi ei saa, eriti programmide silumisel. Käsk `MPI_Barrier` on aga kasulik vaid seal, kus mingit andmetevahetust vaja ei lähe ja tähtis on vaid sünkronisatsioon.

Käsuga

```
MPI_Bcast(buffer,len,<MPI_type>,root,comm,ierr)
```

saadab protsess järguga `root` kõigile protsessidele kommunikaatoris `comm` andmed `<MPI_type>`-tüüpi massiivist pikkusega `len` aadressilt `buffer`. Tegemist on blokeeriva käsuga!

Käsk

```
MPI_Reduce(sndbuf,rcvbuf,len,<MPI_type>,<MPI_op>,root,comm,ierr)
```

kogub kõigi protsesside `sndbuf`-väärtused kokku protsessile `root` sooritades ühtlasi operatsiooni `<op>`. Sooritatavaks operatsiooniks `<MPI_op>` võib olla:

MPI_op	Operatsioon (op)
MPI_MAX	Maksimum
MPI_MIN	Miinimum
MPI_PROD	Korrutis
MPI_SUM	Summa
MPI_LAND	Loogiline .AND.
MPI_LOR	Loogiline .OR.
MPI_LXOR	Loogiline .XOR.
MPI_BAND	Bitiviisiline .AND.
MPI_BOR	Bitiviisiline .OR.
MPI_BXOR	Bitiviisiline .XOR.

MPI standardis leidub mehhanism ka programmeerija enda poolt defineeritavate operatsioonide lisamiseks. Siin sellel lähemalt ei peatu.

Erinevalt järgnevast käsust muutub käsu `MPI_Reduce` korral `rcvbuf` väärtus vaid protsessil järguga `root`.

Käsk

```
MPI_Allreduce(sndbuf,rcvbuf,len,<MPI_type>,<MPI_op>,comm,ierr)
```

on täiesti sarnane eelmise käsuga selle vahega, et kõik protsessorid saavad tulemuse muutujasse või massiivi `rcvbuf`.

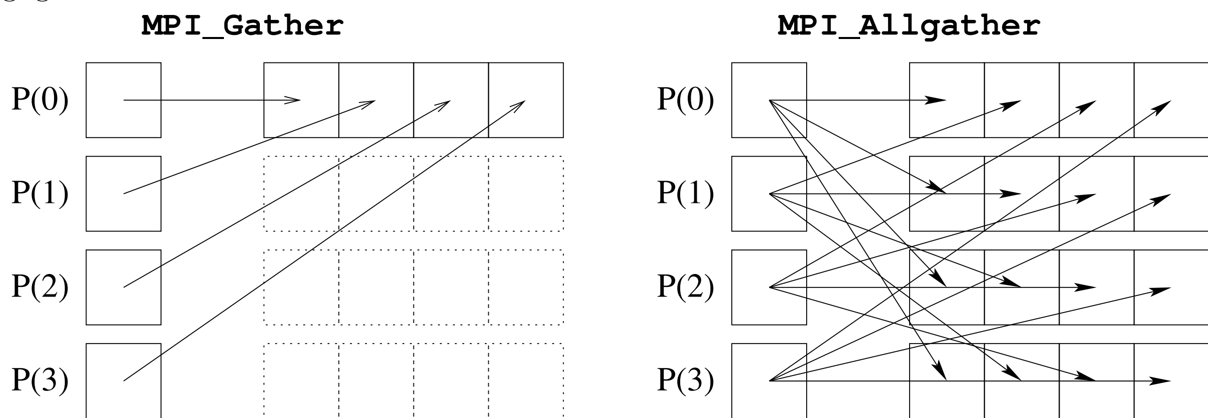
Ka läheb vahel vaja käske `MPI_Gather` ja `MPI_Allgather`, mis on mõeldud väärtuste kokkukorjamiseks eri protsessidelt ühte massiivi. Käsud on järgneva süntaksiga:

```
MPI_Gather(sndbuf,sndlen,<MPI_send_type>, &
           rcvbuf,recvlen,<MPI_recv_type>,root,comm,ierr)
```

ja

```
MPI_Allgather(sndbuf,sndlen,<MPI_send_type>, &
              rcvbuf,recvlen,<MPI_recv_type>,comm,ierr)
```

Sarnaselt `MPI_(All)reduce` käskudega, saab käsu `MPI_Allgather` abil iga kommunikaatori liige omale tulemuse erinevalt käsust `MPI_Gather`, kus tulemuse saab vaid protsessor järguga `root=0`:



Käsuga `MPI_Gather` vastupidiseks operatsiooniks on `MPI_Scatter`:

```
MPI_Scatter(sndbuf,sndlen,<MPI_send_type>, &
            rcvbuf,recvlen,<MPI_recv_type>,root,comm,ierr)
```

Selle abil saab igale protsessile saata erinevaid andmeid protsessilt järguga `root`.

Lõpetuseks siin veel ühest käsust, mis ei ole ei blokeeriv ei ka kommunikatsiooni teostav, kuid on üsna käepärane mõõtmaks programmi tööaega:

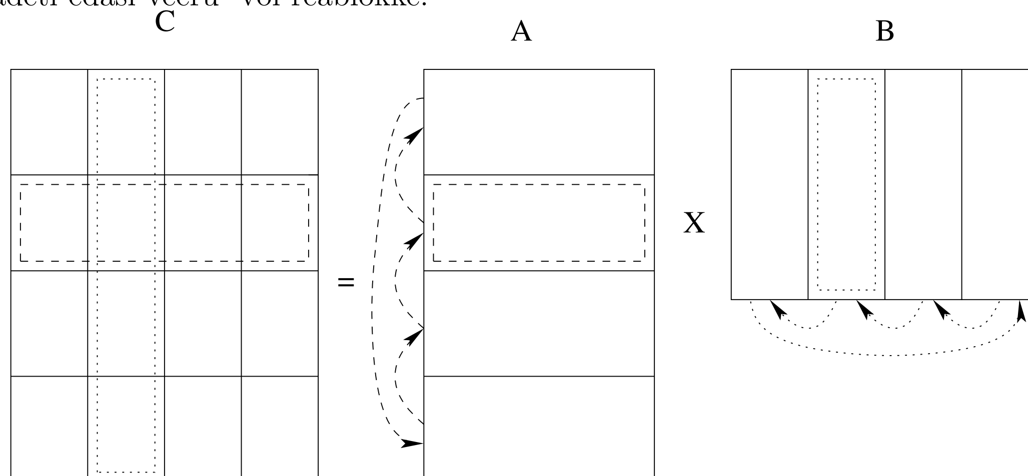
```
real*8 :: t
t = MPI_Wtime()
```

on funktsioon mis annab süsteemse kella väärtuse topelttäpsusega ujukomaarvuna. Tihti annab see täpsema tulemuse kui funktsioon `cpu_time`.

7.3 Näide: Iseorganiseeruv kommunikatsioonimudel

Olgu meil vaja arvutada maatrikskorrutis $C = A \times B$, kus C on $n \times m$-maatriks, A on $n \times k$-maatriks ning B on $k \times m$-maatriks. Selleks leidub mitmeid rakendusvõimalusi. Näiteks võib jagada maatriksi A ridadekaupa P blokiks (n/P rida blokis) ning B jagada veergudekaupa P blokiks (m/P veergu blokis), kus P on protsesside arv. Algselt saab iga protsess järguga i kummastki maatriksist i-nda bloki, arvutab alamblokkide korrutise ning kasutades ringkommunikatsiooni, saadab oma rea- või veerubloki naabrile $i-1$ (kusjuures 0-järku protsess saadab oma bloki protsessile järguga $P-1$). Tulemuseks saame nii maatriksi

C hajutatud kujul vastavalt kas reablokkidena või veerublokkidena sõltuvalt sellest, kas saadeti edasi veeru- või reablokke.



Selline lähenemine on põhimõtteliselt igati mõistlik, eriti juhul, kui kasutada mitteblokeerivat kommunikatsiooni nagu näeme järgnevas peatükis. Ainus probleem võib tekkida olukorras, kus protsessorite jõudlused ei ole mingil põhjusel võrdsed. Sellisel juhul võib kasutada hoopis **iseorganiseeruvat kommunikatsioonimudelit**, kus iga nn. tööprotsess (*slave*) küsib juhtprotsessilt (*master*) uut tööd niipea, kui ta on oma eelmise ülesandega valmis saanud.

Järgnevas näites saadetakse kõigile protsessidele algselt laiali terve maatriks B ning iga tööprotsess saab algselt ühe maatriksi A rea. Selline lähenemisviis erineb eeltoodud skeemist, kuid tagab protsessorite ühtlase tööjaotuse hoolimate igaühe jõudlusest konkreetsel ajahetkel.

Lähtetekst 7.1: Iseorganiseeruva kommunikatsiooniga maatriksite korrutamine

```
1  ! Fail: mpi_mat_korda_mat.f90
2  ! Iseorganiseeruva kommunikatsioonimudeliga näide kahe maatriksi
3  ! maatrikskorrutise leidmiseks.
4  program mpi_mat_korda_mat
5    use mpi
6    use RealKind ! kind-parameetri rk definitsioon
7    implicit none
8    integer,parameter :: MAX_ARIDU=100,MAX_AVEERGE=10000,MAX_BVEERGE=100
9    real(kind=rk) :: A(MAX_ARIDU,MAX_AVEERGE),B(MAX_AVEERGE,MAX_BVEERGE)
10   real(kind=rk) :: C(MAX_ARIDU,MAX_BVEERGE)
11   real(kind=rk) :: buffer(MAX_AVEERGE),vastus(MAX_AVEERGE)
12   real(kind=rk) :: t1,t2
13   integer :: minuid,master,parv,ierr,status(MPI_STATUS_SIZE)
14   integer :: i,j,saadet,saatja,k
15   integer :: vastuse_koht,rida,aridu,aveerge
16   integer :: bridu,bveerge,cridu,cveerge
17   integer :: MPI_rk !Ei pruugi ette teada, kas MPI_REAL või MPI_REAL8
18   call MPI_INIT(ierr) ! MPI saagu
19   call MPI_COMM_RANK(MPI_COMM_WORLD,minuid,ierr )
20   call MPI_COMM_SIZE(MPI_COMM_WORLD,parv,ierr )
21   print *, "Protsess ",minuid," koguarvust ",parv," alustab"
22   master = 0
23   aridu = 100
24   aveerge = 10000
25   bridu = 10000
```

```
26     bveerge = 100
27     cridu    = aridu
28     cveerge = bveerge
29     if ( minuid .eq. master ) then
30       print *,'tüvekohtade␣arv␣(precision):',precision(1.0_rk)
31       print *,'eksponendi␣ulatus␣(range):',range(1.0_rk)
32       do i=1,aveerge ! Lihtsalt mingid väärtused testimiseks...
33         do j=1,aridu
34           A(j,i)=i
35         enddo
36       enddo
37       do i=1,bveerge
38         do j=1,bridu
39           B(j,i)=i
40         enddo
41       enddo
42     endif
43     if (precision(1.0_rk)>=15) then
44       MPI_rk=MPI_DOUBLE_PRECISION
45     else
46       MPI_rk=MPI_REAL
47     endif
48     call MPI_BARRIER(MPI_COMM_WORLD,ierr)
49     t1=MPI_WTime(ierr)
50     if (parv==1) then
51        C=matmul(A,B)
52     else
53       if (minuid.eq.master) then
54         saadet=0
55         ! saadame B kõigile ülejäänud protsessidele:
56         do i = 1,bveerge
57           call MPI_BCAST(B(1,i),bridu,MPI_rk,master, &
58                          MPI_COMM_WORLD,ierr)
59         enddo
60         ! igale protsessile üks A rida; tag-iks reanumber:
61         do i = 1,parv-1
62           do j = 1,aveerge
63             buffer(j) = A(i,j)
64           enddo
65           call MPI_SEND(buffer,aveerge,MPI_rk,i, &
66                         i,MPI_COMM_WORLD,ierr)
67           saadet=saadet+1
68         enddo
69         do i=1,cridu
70           call MPI_RECV(vastus,cveerge,MPI_rk,MPI_ANY_SOURCE, &
71                         MPI_ANY_TAG,MPI_COMM_WORLD,status,ierr)
72           saatja        = status(MPI_SOURCE)
73           vastuse_koht  = status(MPI_TAG)
74           do j=1,cveerge
75             C(vastuse_koht,j)=vastus(j)
76           enddo
77           if (saadet<aridu) then
78             do j=1,aveerge
79               buffer(j)=A(saadet+1,j)
80             enddo
81             call MPI_SEND(buffer,aveerge,MPI_rk, &
82                           saatja,saadet+1,MPI_COMM_WORLD,ierr)
83             saadet=saadet+1
84           else ! teade töö lõpetamiseks:
```

```
85           call MPI_SEND(1.0,1,MPI_rk,saatja, &
86                          0,MPI_COMM_WORLD,ierr)
87         endif
88       enddo
89       !Vastuse väljatrükk:
90       do i = 1,cridu;do j = 1,cveerge
91           print *, "C(", i, ",", j, ") = ", C(i,j)
92       enddo;enddo
93     else
94       ! võtta vastu B, seejärel arvutada C ridu kuni lõputeade
95       do i=1,bveerge
96         call MPI_BCAST(B(1,i),bridu,MPI_rk, &
97                        master,MPI_COMM_WORLD, ierr)
98       enddo
99       call MPI_RECV(buffer,aveerge,MPI_rk,master, &
100                    MPI_ANY_TAG,MPI_COMM_WORLD,status,ierr)
101      do while (status(MPI_TAG).ne.0)
102        rida=status(MPI_TAG)
103        do i=1,bveerge
104          vastus(i)=0.0
105          do j=1,aveerge
106            vastus(i)=vastus(i)+buffer(j)*B(j,i)
107          enddo
108        enddo
109        call MPI_SEND(vastus,bveerge,MPI_rk,master, &
110                      rida,MPI_COMM_WORLD,ierr)
111        call MPI_RECV(buffer,aveerge,MPI_rk,master, &
112                      MPI_ANY_TAG,MPI_COMM_WORLD,status,ierr)
113      enddo
114    endif
115  endif
116  call MPI_BARRIER(MPI_COMM_WORLD,ierr) ! veendumaks et kõik siin
117  t2=MPI_WTime(ierr)
118  if (minuid.eq.0) then
119    write(*,*) 'Ajakulu:',t2-t1
120  endif
121  call MPI_BARRIER(MPI_COMM_WORLD,ierr)
122  call MPI_FINALIZE(ierr) ! MPI lõpetamine
123  stop
124 end program mpi_mat_korda_mat
125 ! Kompileerimiseks SUNil:
126 ! mpf95 -dalign -c RealKind.f90;mpf95 -dalign mpi_mat_korda_mat.f90 -
      lmpi
```

Peatükk 8

Mitteblokeeriv kommunikatsioon

Senivaadeldud MPI käsud olid blokeerivad, st. programm jääb käsku täites ootele kuni vastav MPI käsk on lõpetanud. Kuna kommunikatsioonioperatsioonid on üldjuhul palju aeganõudvamad kui näiteks mäloperatsioonid, siis tähendab see tihti tühja ootamist mõne teate saabumise või ärasaatmise taga selle asemel, et näiteks sooritada mõnda vajalikku arvutust. Sellepärast on olemes mitteblokeerivad MPI käsud.

8.1 Mitteblokeerivaid MPI käske

Tihti on paremaks paralleelsuseks vaja kommunikatsioonist tulenevaid ooteaegu täita kasulike arvutustega. Selline strateegia võimaldab kirjutada paremini skaleeruvaid paralleelprogramme. MPI standardis on olemas mitteblokeerivad kommunikatsioonikäsud nagu näiteks mitteblokeeriv teate saatmisfunktsioon `MPI_Isend`:

```
subroutine MPI_Isend(buffer,len,<MPI_type>,dest,tag,comm,request,ierr)
integer,intent(in) :: len,<MPI_type>
<type>,intent(in) :: buffer(len)
integer,intent(in) :: dest,tag,comm
integer,intent(out) :: request,ierr
```

ja mitteblokeeriv teate vastuvõtmisfunktsioon `MPI_Irecv`:

```
call MPI_Irecv(buffer,len,<MPI_type>,srce,tag,comm,request,ierr)
integer,intent(in) :: len,<MPI_type>
integer,intent(in) :: srce,tag,comm
<type>,intent(out) :: buffer(len)
integer,intent(out) :: status(MPI_STATUS_SIZE)
integer,intent(out) :: request,ierr
```

Toodud käsud alustavad kommunikatsioonioperatsiooniga “tagaplaanil” andes juhtimise kohe üle vahetult järgnevale programmiblokile. Selleks, et nii oleks võimalik korrektselt programmeerida, peab leiduma mehhanism, kuidas kindlaks teha, kas üks või teine mitteblokeeriv kommunikatsioonioperatsioon on juba lõpetanud või mitte. Kõikidel mitteblokeerivatel käskudel on üks lisaparameeter `request`, mis on sisuliselt viit tagaplaanil

toimuva operatsiooniobjektile. Selle abil saab kontrollida teate staatust. Blokeerivalt saab sellist päringut teha käsuga `MPI_Wait`:

```
call MPI_Wait(request,status,ierr)
integer,intent(in) :: request
integer,intent(out) :: status(MPI_STATUS_SIZE)
integer,intent(out) :: ierr
```

Programmi töö ei jätku enne, kui vastav kommunikatsioonioperatsioon on lõppenud. Mitteblokeeriva päringu `MPI_Test` korral aga kommunikatsioonioperatsiooni lõppemist ootama ei jääda:

```
call MPI_Test(request,flag,status,ierr)
integer,intent(in) :: request
logical,intent(out) :: flag
integer,intent(out) :: status(MPI_STATUS_SIZE)
integer,intent(out) :: ierr
```

Juhul, kui kommunikatsioonioperatsioon viidaga `request` on lõppenud, saab loogiline muutuja `flag` väärtuseks `.true.`, vastasel korral on väärtus `.false.`.

Mitteblokeerivad käsud on tihti kokkuvõttes kiiremad.

8.2 Ühesuunaline kommunikatsioon kahe protsessori vahel

Oletame, et meil on kaks protsessi järguga `minuid=0` ja `minuid=1` ning meil on vaja saata protsessilt järguga `0` mingi teade protsessile järguga `1`. Seega on meil tegemist ühesuunalise kommunikatsiooniga nende protsesside vahel ning meil on põhimõtteliselt neli erinevat võimalust:

1. Blokeeriv `send` ja blokeeriv `receive`:

```
if (minuid==0) then
  call MPI_Send(sendbuf,len,<MPI_type>,1,tag,comm,ierr)
elseif (minuid==1) then
  call MPI_Recv(recvbuf,len,<MPI_type>,0,tag,comm,status,ierr)
endif
```

2. Mitteblokeeriv `send` ja blokeeriv `receive`:

```
if (minuid==0) then
  call MPI_Isend(sendbuf,len,<MPI_type>,1,tag,comm,request,ierr)
  . . .
  call MPI_Wait(request,status,ierr)
elseif (minuid==1) then
  call MPI_Recv(recvbuf,len,<MPI_type>,0,tag,comm,status,ierr)
endif
```

3. Blokeeriv `send` ja mitteblokeeriv `receive`:

```
if (minuid==0) then
  call MPI_Send(sendbuf,len,<MPI_type>,1,tag,comm,ierr)
elseif (minuid==1) then
  call MPI_Irecv(recvbuf,len,<MPI_type>,0,tag,comm,request,ierr)
  . . .
  call MPI_Wait(request,status,ierr)
endif
```

4. **Mitteblokeeriv** `send` **ja mitteblokeeriv** `receive`:

```
if (minuid==0) then
  call MPI_Isend(sendbuf,len,<MPI_type>,1,tag,comm,request,ierr)
  . . .
  call MPI_Wait(request,status,ierr)
elseif (minuid==1) then
  call MPI_Irecv(recvbuf,len,<MPI_type>,0,tag,comm,request,ierr)
  . . .
  call MPI_Wait(request,status,ierr)
endif
```

Käsu `MPI_Wait` võib panna programmis suvalisse kohta peale vastavat mitteblokeerivat käsku, kuid enne `sendbuf` (või vastavalt `recvbuf`) järgmist kasutamist. Ühesuunaline kommunikatsioon on lihtne kuid siiski ka juba veaaldis – peab alati hoolt kandma, et igal `receive`-käsul oleks vastav `send`-käsk olemas ja vastupidi. Vastasel korral jääb üks protsessidest "lõpmatuseni" teadet ootama, juhul kui tegemist oli blokeeriva `receive`-käsuga; juhul, kui aga kasutada mitteblokeerivat `receive`-käsku, ei saa `recvbuf` oodatud väärtust iial kätte.

8.3 Vastastikune kommunikatsioon ja tupikute vältimine

Juhul, kui meil on tegu kahe protsessiga, mis mõlemad tahavad midagi üksteisele saata ja üksteiselt ka teadet samaaegselt vastu saada, on asi juba keerulisem. Järgnevalt demonstreerime erinevaid variante **tupikute** tekkimise võimaluse seisukohalt.

Tupik (*deadlock*) ehk nn. "surnud seis" on olukord, kus protsessorid jäävad üksteise järel ootama ilma, et ükski midagi kasulikku suudaks teha.

Tupikud võivad tekkida:

- `send`- ja `receive`-käsu valest järjekorrast tingituna
- süsteemse teateedastuspuhvri ületäitumisest.

Kahesuunalise kommunikatsiooni puhul on kolm erinevat võimalust:

1. Mõlemad protsessorid alustavad `send`-käsuga ja seejärel tuleb `receive`-käsk.
2. Mõlemad protsessorid alustavad `receive`-käsuga ja seejärel `send`-käsk.

3. Üks protsess alustab send-käsuga ja seejärel tuleb receive-käsk, teine protsess sooritab need käsud aga vastupidises järjekorras

Tupikute vältimiseks võib kasutada mitteblokeerivaid käske. Sõltuvalt blokeeringu olemasolust tuleneb siit eri võimalusi.

1. Send-käsk kõigepealt, seejärel receive-käsk:

Vaatleme järgnevat programmilõiku, kus kasutame blokeerivaid kommunikatsioonioperatsioone:

```
if (minuid==0) then
  call MPI_Send(sendbuf,len,<MPI_type>,1,tag,comm,ierr)
  call MPI_Recv(recvbuf,len,<MPI_type>,1,tag,comm,status,ierr)
elseif (minuid==1) then
  call MPI_Send(sendbuf,len,<MPI_type>,0,tag,comm,ierr)
  call MPI_Recv(recvbuf,len,<MPI_type>,0,tag,comm,status,ierr)
endif
```

See töötab probleemideta seni, kuni sendbuf pikkus len on väiksem kui süsteemi teateedastuspuhver. Vastasel juhul tekib tupik. **Miks?** Probleem on nimelt selles, et MPI_Send-käsu korral kantakse sendbuf sisu esmalt eraldiseisvasse mäluregiooni, teateedastuspuhvrisse, kust siis seejärel tegelik andmete ülekanne toimub. Juhul, kui len on pikem kui see puhver, siis kantakse sendbuf sisu puhvrisse osade kaupa – peale seda, kui esimene osa puhvrist on teisele protsessile juba üle kantud, saab alles hakata sendbuf teise osa sisu puhvrisse kandma. Seega tekib mõlemal protsessil juba enne MPI_Send-käsu lõppu vajadus, et teine protsess alustaks oma MPI_Recv-käsuga, see pole aga võimalik, kuna MPI_Send ei ole ka seal veel lõpetanud.

Antud olukorras saab toodud probleemi vältida kirjutades send-käsu mitteblokeerivana:

```
if (minuid==0) then
  call MPI_Isend(sendbuf,len,<MPI_type>,1,tag,comm,request,ierr)
  call MPI_Recv(recvbuf,len,<MPI_type>,1,tag,comm,status,ierr)
  call MPI_Wait(request,status,ierr)
elseif (minuid==1) then
  call MPI_Isend(sendbuf,len,<MPI_type>,0,tag,comm,request,ierr)
  call MPI_Recv(recvbuf,len,<MPI_type>,0,tag,comm,status,ierr)
  call MPI_Wait(request,status,ierr)
endif
```

Küsimus: Miks ei tohi kirjutada käsku MPI_Wait kohe peale MPI_Isend-käsku?

2. Receive kõigepealt, seejärel send.

Järgnev programmilõik, mis kasutab blokeerivaid käske, põhjustab tupiku sõltumatult süsteemse teateedastuspuhvri suurusest:

```
if (minuid==0) then
  call MPI_Recv(recvbuf,len,<MPI_type>,1,tag,comm,status,ierr)
  call MPI_Send(sendbuf,len,<MPI_type>,1,tag,comm,ierr)
elseif (minuid==1) then
  call MPI_Recv(recvbuf,len,<MPI_type>,0,tag,comm,status,ierr)
  call MPI_Send(sendbuf,len,<MPI_type>,0,tag,comm,ierr)
endif
```

Kasutades aga mitteblokeerivat MPI_Irecv-käsku saame tupikuvaba lahenduse:

```
if (minuid==0) then
  call MPI_Irecv(recvbuf,len,<MPI_type>,1,tag,comm,request,ierr)
  call MPI_Send(sendbuf,len,<MPI_type>,1,tag,comm,ierr)
  call MPI_Wait(request,status,ierr)
elseif (minuid==1) then
  call MPI_Irecv(recvbuf,len,<MPI_type>,0,tag,comm,request,ierr)
  call MPI_Send(sendbuf,len,<MPI_type>,0,tag,comm,ierr)
endif
```

Küsimus: Kas MPI_Isend kasutamisest olnuks kasu?

3. Üks protsessidest alustab käsuga send teine aga käsuga receive.

Sõltumata sellest, kas kasutada MPI_(I)Send või MPI_(I)Recv, on järgnev lahendus tupikuvaba:

```
if (minuid==0) then
  call MPI_Send(sendbuf,len,<MPI_type>,1,tag,comm,ierr)
  call MPI_Recv(recvbuf,len,<MPI_type>,1,tag,comm,status,ierr)
elseif (minuid==1) then
  call MPI_Recv(recvbuf,len,<MPI_type>,0,tag,comm,status,ierr)
  call MPI_Send(sendbuf,len,<MPI_type>,0,tag,comm,ierr)
endif
```

Üldjuhul soovitatakse kasutada järgnevat mudelit:

```
if (minuid==0) then
  call MPI_Isend(sendbuf,len,<MPI_type>,1,tag,comm,request1,ierr)
  call MPI_Irecv(recvbuf,len,<MPI_type>,1,tag,comm,request2,ierr)
elseif (minuid==1) then
  call MPI_Isend(sendbuf,len,<MPI_type>,0,tag,comm,request1,ierr)
  call MPI_Irecv(recvbuf,len,<MPI_type>,0,tag,comm,request2,ierr)
endif
call MPI_Wait(request1,status1,ierr)
call MPI_Wait(request2,status2,ierr)
```

Peatükk 9

Näide: Hõredate maatriksite klass

Antud õppematerjali lõpetuseks toome ühe veidi suuremahulisema näite Fortran95 ja MPI kasutamisest reaalse ülesande lahendamiseks. Püüame siin demonstreerida käsitletud programmeerimisvõtteid ja -vahendeid ning näeme, kuidas lihtsate vahenditega võib jõuda reaalsete tulemusteni.

Näide: Kaasgradientide meetod hõredate maatriksitega süsteemide lahendamiseks.

Andmestruktuurid hõredate maatriksite korral

Tihti on teadusarvutustes ja üldse matemaatilisel modelleerimisel kasutuses lõplike diferentside meetod (*FDM, finite differences method*), lõplike elementide meetod (*FEM, finite element method*) või lõplike mahtude meetod (*FVM, finite volume method*). Kõigi nende meetodite tulemuseks on hõredate maatriksitega lineaarvõrrandite süsteemid. Maatriksit loetakse hõredaks juhul, kui enamus maatriksi elementidest on nullid. Tavalise, kahemõõtmelise massiivina selliste maatriksite kujutamine arvutis oleks ebaefektiivne. Järgnevalt vaatleme üht lihtsat formaati hõredate maatriksite arvutis kujutamiseks.

9.1 Hõredate maatriksite kolmikformaat

Kolmikformaadis (*triple storage format*) antakse maatriksi A iga nullist erinev element a_{ij} kolme arvu abil: täisarvulised indeksid i ja j ning (enamuses rakendustes) reaalarvuline maatriksi elemendi väärtus a_{ij}. Seega, saame maatriksi A kujutamiseks kolm massiivi:

```
integer,dimension(1:nz) :: indi,indj
real(kind=rk),dimension(1:nz) :: vals
```

Üks enamlevinumaid praktilisi ülesandeid on võrrandisüsteemi

$$A\mathbf{x} = \mathbf{b} \tag{9.1}$$

lahendamine. Hõredate maatriksite korral kasutatakse tihti iteratiivseid meetodeid. Juhul, kui $N \times N$ maatriks A on lisaks veel ka sümmeetriline, siis üheks levinumaks lahendusalgoritmiks on **kaasgradientide meetod**. Meie eesmärk siin on luua üldine hõredate maatriksite klass, täiustada seda paralleeltöötluseks vajaminevate mehhanismidega ning rakendada seda ühe konkreetse ülesande – Poissoni ülesande lahendamiseks kasutades paralleliseeritud kaasgradientide meetodit.

Selleks, et oleks lihtne valida ujukomaarvude täpsusastet kogu programmis tervikuna vaid ühest kohast, defineerime sobiva mooduli

Lähtetekst 9.1: Moodul ujukomaarvude täpsuse etteandmiseks MPI programmidele.

```
1  !Fail: mpi_CG/RealKind.f90
2  ! Moodul topelttäpsuse määratlemiseks
3  module RealKind
4    use mpi
5    implicit none
6    !        Tavaline ujukoma täpsus: (kommenteerida välja üks kahest)
7    ! integer,parameter :: rk = selected_real_kind(6,37)
8    ! integer,parameter :: MPI_RK = MPI_REAL
9    !        Topelttäpsus:
10   integer,parameter :: rk = selected_real_kind(15,307)
11   integer,parameter :: MPI_RK = MPI_DOUBLE_PRECISION
12 end module RealKind
```

Toodud moodulis on rida 11 vajalik MPI-käskudele õige täpsusastme määramiseks (lisaks sisefunktsiooni `selected_real_kind` kasutamisele `kind`-parameetri `rk` määramisele).

Järgnevalt defineerime mooduli hõredate maatriksite kujutamiseks kolmikformaadis koos konstruktori (rida 16), destruktori (rida 32) ja meie jaoks tähtsaima funktsiooni $y = Ax$ operatsiooniga (rida 43):

Lähtetekst 9.2: Hõredate maatriksite klass.

```
1  !Fail: mpi_CG/sparse_mat.f90
2  module sparse_mat
3    !-----------------------------------------------------------------
4    ! Hõredate maatriksite klass
5    !-----------------------------------------------------------------
6    use RealKind
7    implicit none
8    type sparse_m
9      integer:: nearv                                  ! nullist erin. el. :arv
10     integer,dimension(:),pointer :: indi,indj        !    mat(i:rida,j:veerg)
11     real(kind=rk),dimension(:),pointer :: val        !    mat(i,j) väärtus
12   end type sparse_m
13
14   contains
15
16   function Loo_sparse_m(nearv,Aindi,Aindj,Aval) result(mat)
17     !---------------------------------------------------------------
18     ! Konstruktor
19     !---------------------------------------------------------------
20     implicit none
```

```
21      type(sparse_m) :: mat
22      integer,intent(in) :: nearv
23      integer,intent(in),dimension(nearv),optional :: Aindi,Aindj
24      real(kind=rk),intent(in),dimension(nearv),optional :: Aval
25      allocate(mat%indi(nearv),mat%indj(nearv),mat%val(nearv))
26      mat%nearv=nearv
27      if (present(Aindi)) mat%indi=Aindi
28      if (present(Aindj)) mat%indj=Aindj
29      if (present(Aval)) mat%val=Aval
30    end function Loo_sparse_m
31
32    subroutine Kustuta_sparse_m(mat)
33      !------------------------------------------------------------
34      ! Destruktor
35      !------------------------------------------------------------
36      implicit none
37      type(sparse_m),intent(in out) :: mat
38      mat%nearv=0
39      deallocate(mat%indi,mat%indj)
40      deallocate(mat%val)
41    end subroutine Kustuta_sparse_m
42
43    function sparse_Ax(A,x) result(y)
44      !------------------------------------------------------------
45      ! funktsioon y=Ax  hõredate maatriksite korral
46      !------------------------------------------------------------
47      implicit none
48      type(sparse_m),intent(in) :: A
49      real(kind=rk),intent(in),dimension(:) :: x
50      real(kind=rk),dimension(size(x)) :: y ! sama pikk kui x !
51      integer :: i,j
52
53      y=0.0_rk ! nullime, kuna y automaatne massiiv
54      do j=1,A%nearv
55        i=A%indi(j)
56        y(i)=y(i)+A%val(j)*x(A%indj(j))
57      end do
58    end function sparse_Ax
59
60    subroutine tryki_sparse_m(A)
61      !------------------------------------------------------------
62      ! Väljatrükk (kasulik debugimisel;)
63      !------------------------------------------------------------
64      implicit none
65      type(sparse_m),intent(in) :: A
66      integer :: j
67      do j=1,A%nearv
68        print *,'sparse_m(',j,'):',A%indi(j),A%indj(j),A%val(j)
69      end do
70    end subroutine tryki_sparse_m
71
72    function Laplace_M(N) result(mat)
73      !------------------------------------------------------------
74      ! Klassi sparse_m testimiseks:  Funktsioon mis loob Laplace'i
75      !   operaatori diskretisatsioonimaatriksi ühtlasel ruudukujulisel
76      !   2D-võrgul Dirichlet nulliliste rajatingimuste korral
77      !------------------------------------------------------------
78      implicit none
79      type(sparse_m) :: mat
```

```
80     integer,intent(in) :: N ! Laplace'i maatriksi mõõtmed:
81                             !    (N^2 x N^2)
82     integer :: nearv,i,k
83     integer :: el              !
84     nearv=N*(N+2*(N-1))+2*(N-1)*N ! Nullist erin. elem. arv
85     mat=Loo_sparse_m(nearv) ! Hõreda maatriksi konstruktor
86     el=0
87     ! Põhidiagonaalblokk
88     !    elemendid põhidiagonaalil
89     do i=1,N**2
90       el=el+1
91       mat%indi(el)=i
92       mat%indj(el)=i
93       mat%val(el)=4.0_rk
94     end do
95     !    elemendid kõrvaldiagonaalidel
96     do k=1,N ! tsükkel üle diagonaalblokkide
97      el=el+1 !    iga diagonaalbloki teine nullist erin.el.:
98      mat%indi(el)=(k-1)*N+1
99      mat%indj(el)=(k-1)*N+2
100     mat%val(el)=-1.0_rk
101     el=el+1 !    iga diagonaalbloki eelviimane nullist erin.el.:
102     mat%indi(el)=k*N
103     mat%indj(el)=k*N-1
104     mat%val(el)=-1.0_rk
105     do i=(k-1)*N+2,k*N-1
106       el=el+1 ! alamdiagonaal:
107       mat%indi(el)=i
108       mat%indj(el)=i-1
109       mat%val(el)=-1.0_rk
110       el=el+1 ! ülemdiagonaal:
111       mat%indi(el)=i
112       mat%indj(el)=i+1
113       mat%val(el)=-1.0_rk
114     end do
115    end do
116   ! Ülejäänud Laplace'i maatriksi blokid:
117    do i=N+1,N**2-N ! teisest kuni eelviimase blokireani:
118      el=el+1 ! All-diagonaalblokid:
119      mat%indi(el)=i
120      mat%indj(el)=i-N
121      mat%val(el)=-1.0_rk
122      el=el+1 ! Peal-diagonaalblokid:
123      mat%indi(el)=i
124      mat%indj(el)=i+N
125      mat%val(el)=-1.0_rk
126    end do
127    ! Esimene peal-diagonaalblokk:
128    do i=1, N
129      el=el+1
130      mat%indi(el)=i
131      mat%indj(el)=i+N
132      mat%val(el)=-1.0_rk
133    end do
134    ! Viimane all-diagonaalblokk:
135    do i=N**2-N+1,N**2
136      el=el+1
137      mat%indi(el)=i
```

```
138        mat%indj(el)=i-N
139        mat%val(el)=-1.0_rk
140      end do
141      ! Konttroll:
142      if (el/=nearv) print*, "VIGA: vale nearv!"
143    end function Laplace_M
144  end module sparse_mat
```

Klassi `sparse_mat` testimiseks on toodud alamprogramm `Laplace_M` (Lähteteksti 9.2 rida) Laplace'i maatriksite genereerimiseks. Laplace'i maatriks tekib näiteks Poissoni võrrandi

$$u_{xx} + u_{yy} = f, \quad \Omega = \{(x, y) : 0 \leq x \leq 1, \ \ 0 \leq y \leq 1\}, \tag{9.2}$$

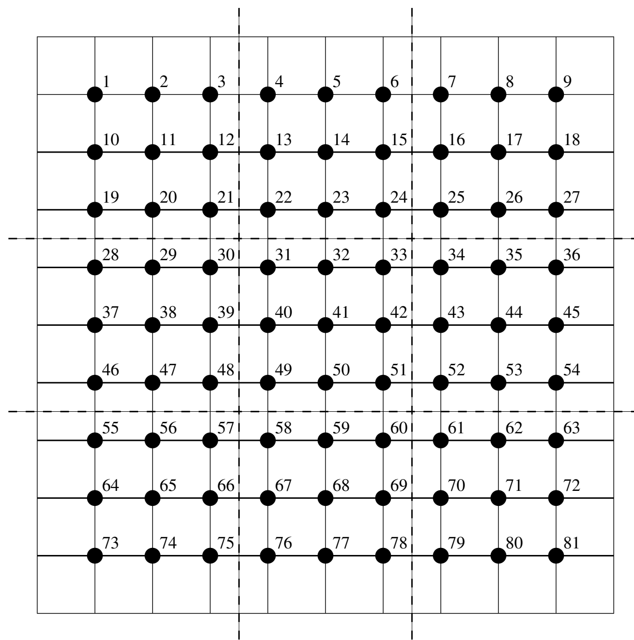
diskretiseerimisel nulliliste Dirichlet' rajatingimuste korral. Kui diskretiseerimisvõrk on ühtlane ning koosneb $n \times n$ sõlmest, siis näeb $n^2 \times n^2$ Laplace'i maatriks välja järgmine:

$$A = \begin{bmatrix} B & -I & 0 & \cdots & 0 \\ -I & B & -I & \ddots & \vdots \\ 0 & -I & B & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & -I \\ 0 & \cdots & 0 & -I & B \end{bmatrix}, \tag{9.3}$$

kus $n \times n$ maatriks B on kujul:

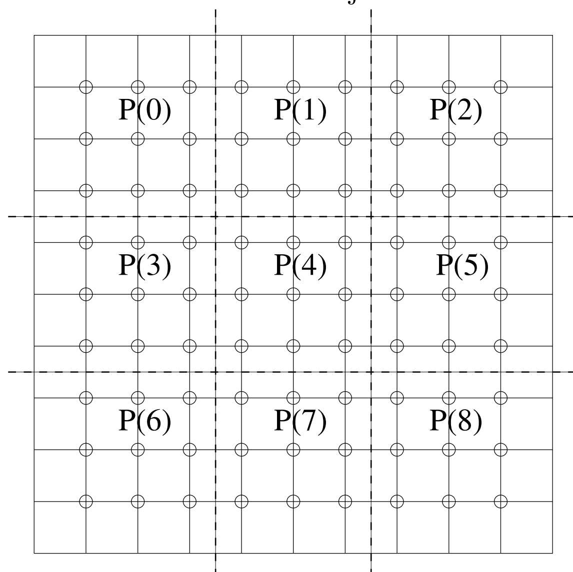
$$B = \begin{bmatrix} 4 & -1 & 0 & \cdots & 0 \\ -1 & 4 & -1 & \ddots & \vdots \\ 0 & -1 & 4 & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & -1 \\ 0 & \cdots & 0 & -1 & 4 \end{bmatrix}$$

ja I on ühikmaatriks. Funktsioon `Laplace_M` saab ette vaid ühe parameetri – n – sõlmede arvu nii x kui ka y-telje suunas. Järgneval joonisel on toodud eeldatav (üks võimalikest) võrgusõlmede numeratsioon `Laplace_M` juhul kui $n = 9$.

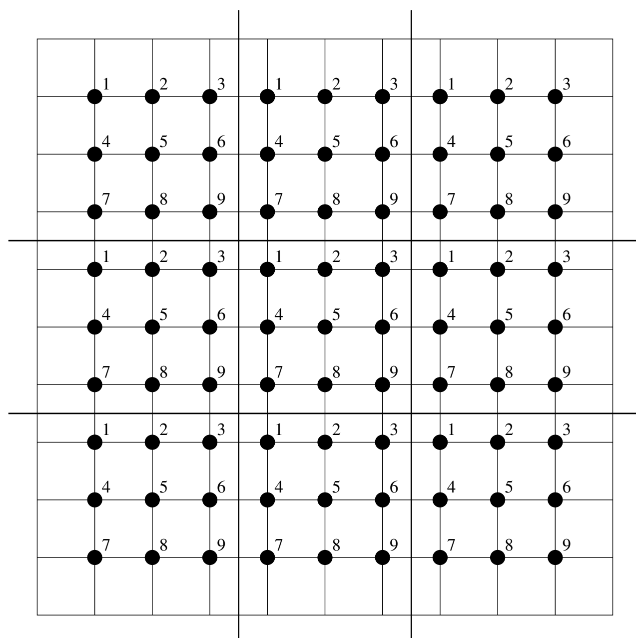

1
2
3
4
5
6
7
8
9
10
11
12
13
14
15
16
17
18
19
20
21
22
23
24
25
26
27
28
29
30
31
32
33
34
35
36
37
38
39
40
41
42
43
44
45
46
47
48
49
50
51
52
53
54
55
56
57
58
59
60
61
62
63
64
65
66
67
68
69
70
71
72
73
74
75
76
77
78
79
80
81

9.2 Paralleliseerimine

Paralleliseerimiseks jagame ülesande lahenduspiirkonna Ω almpiirkondadeks. Lihtsuse mõttes teeme tükelduse p võrdseks osaks nii x kui ka y-suunas, saades $P = p^2$ mittekattuvat alampiirkonda Ω_k, $k = 0, ..., P-1$, kus P on etteantud protsesside arv. Järgneval joonisel on toodud võimalik jaotus $P = 9$ alampiirkonnaks $p = 3$ korral:



Jaotuse tulemusena saab iga protsess endale teatud arvu sõlmi, mis saavad igal protsessil lokaalse numeratsiooni. **Üks võimalik** lokaalne numeratsioon on toodud järgneval joonisel:

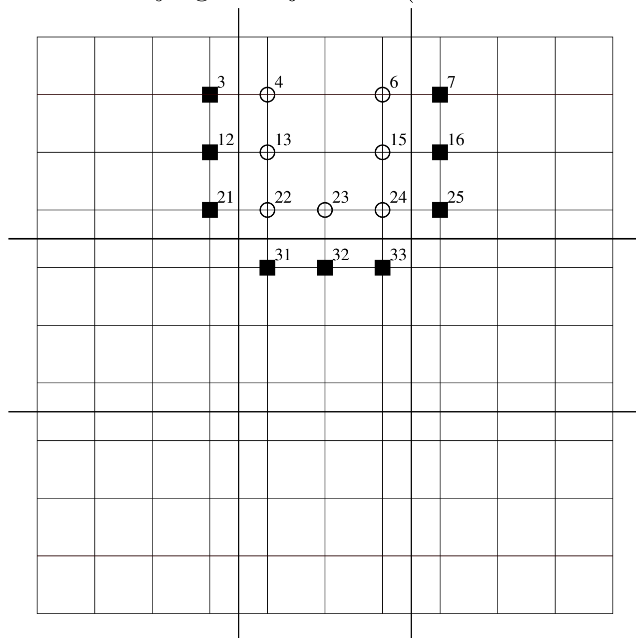


(Märgime, et tegelik lokaalne numeratsioon võib vabalt olla erinev joonisel toodust.)

Me eeldame, et protsess järguga 0 ($P(0)$) genereerib Laplace'i maatriksi A, jagab selle vastavalt toodud skeemile alammaatriksiteks $A^{(k)}$, $k = 0, .., P-1$ selliselt, et suvaline maatriksi A element $a_{ij} \in A^{(k)}$ **parajasti siis,** kui **mõlemad** indeksid $i, j \in \Omega_k$. Seejärel jaotab protsess $P(0)$ alammaatriksid laiali (jättes ka iseendale ühe alammaatriksi).

Saanud kätte oma alammaatriksi, nummerdab iga protsess oma sõlmed lokaalselt ringi ning samas genereerib massiivi `global2local`, kus `global2local(k)` annab k-nda globaalse sõlme numbri lokaalses järjestuses.

Selleks, et kogu maatriks A saaks kaetud, tuleb lisada ka sellised maatriksi A elemendid a_{ij}, mille korral $i \in \Omega_k$ ja $j \in \Omega_l$, kus $k \neq l$ (st. ühendused joonisel, mis on alampiirkondadevahelise joonega läbi lõigatud.) Selleks saadab protsess $P(0)$ igale ülejäänule ka vastava täiendmaatriksi. Kõik protsessid lisavad vastavalt saadud täiendmaatriksile oma lokaalsete sõlmede massiivi lõppu niinimetatud vari-sõlmed. Varisõlmede asukoht protsessi $P(1)$ korral on toodud järgneval joonisel (tähistatud ruudukestega):



(Märgime, et joonisel on sõlmede numbrid toodud globaalses numeratsioonis, tegelikult saab ka iga varisõlm lokaalse järjestuse, mis kajastub massiivis `global2local`.)

Etteantud protsessil on oluline teada, millisele naaberprotsessile tema suvaline varisõlm tegelikult vastab. Selleks saadab protsess $P(0)$ laiali ka massiivi `so_reg(1:n`^{2}`)`, ("sõlmeomanike register") mis annab iga sõlme kohta alampiirkonna numbri, kuhu antud sõlm kuulub. Selle abil leitakse iga varisõlmele vastava naaberpiirkonna tegeliku sõlme lokaalne järk kasutades massiivi `global2local` naaberprotsessil.

Kirjeldatud andmestruktuurid luuakse järgnevas programmilõigus, mis kirjeldab ära klassi `par_sparse_mat` konstruktori, destruktori ning kõik ülejäänud vajaminevad meetodid, ka need mis on loodud andmete hajutamiseks protsessorite vahel ning tulemuse kokkukogumiseks protsessile $P(0)$. Märgime, et toodud `par_sparse_mat` meetodid ja andmestruktuurid on realiseeritud nii, et need töötavad suvalise `so_reg(1:n`^{2}`)` massiivi korral.

Lähtetekst 9.3: Hajusate hõredate maatriksite klass

```
1  ! Fail: mpi_CG/par_sparse_mat.f90
2  module par_sparse_mat
3    use sparse_mat
4    use RealKind
5    use mpi
6    type par_sparse_m
7      integer :: siseyhendusi ! lokaalse maatriksi nullist erin. el.
8                              !   arv ilma yhendusteta varisõlmedesse
9      integer :: variyhendusi ! lok. maatriksi yhend. arv varisõlmedesse
10     type(sparse_m) :: sise_mat! ühendustega vaid sisesõlmedel
11     type(sparse_m) :: vari_mat! ühendustega sise- ja varisõlmede vahel
12   end type par_sparse_m
```

```
13   type alamhulk ! kasutame alamhulkade defineerimiseks sõlmede hulgal
14     integer :: solmi
15     integer,dimension(:),pointer :: solmenumbrid
16   end type alamhulk
17   type(alamhulk),dimension(:),allocatable :: varisolmed_naabrilt, &
18     minusolmed_naabrile,partitsioon
19   integer,dimension(:),pointer :: varisolmede_algus_naabrile
20   real(kind=rk),dimension(:),pointer :: puhver,masteri_puhver
21   integer :: omasolmi,varisolmi,myid,numprocs,master
22   integer :: glob_solmi ! sõlmede koguarv
23
24   contains
25
26   function Loo_par_sparse_mat(comm,so_reg,A) result(par_mat)
27     !------------------------------------------------------------------
28     ! Konstruktor
29     !   Saab sisendiks maatriksi A mis on defineeritud vaid
30     !   kommunikaatori comm 0-ndal protsessil.
31     !   so_reg -- (sõlmeomanike register) antud algselt vaid
32     !              0-ndal protsessil, väljundiks ülejäänutel
33     !   Väljundiks on par_mat objekt tüübist par_sparse_m,
34     !   (defineeritud varisõlmede
35     !------------------------------------------------------------------
36     implicit none
37     integer,intent(in) :: comm ! kommunikaator
38     type(sparse_m),intent(in) :: A ! suur maatriks 0ndal prots.
39     integer,dimension(:),pointer :: so_reg ! iga sõlme omaniku järk
40     type(par_sparse_m) :: par_mat ! konstrueeritav hajusobjekt
41     integer,dimension(:),pointer :: global2local
42     integer :: stat(MPI_STATUS_SIZE),ierr,sisepiir
43     call MPI_COMM_RANK(comm,myid,ierr) ! protsessi järk
44     call MPI_COMM_SIZE(comm,numprocs,ierr) ! protsesside arv
45
46     master=0 ! 0 on peamine
47     if (myid==master) then
48       glob_solmi=size(so_reg)
49     endif
50     ! Saadame laiali sõlmede arvu ja kuuluvuse:
51     call MPI_BCAST(glob_solmi,1,MPI_INTEGER,master,comm,ierr)
52     if (myid/=master) then
53       allocate(so_reg(glob_solmi))
54     endif
55     call MPI_BCAST(so_reg,glob_solmi,MPI_INTEGER,master,comm,ierr)
56     par_mat = hajuta_mat(A,so_reg)
57     call suhtluse_ettevalmistus(so_reg,par_mat)
58     if (myid==master) then
59       call tee_partitsioonid(comm,so_reg)
60     endif
61
62     contains ! abiprotseduurid:
63
64     function hajuta_mat(A,so_reg) result(par_A)
65       !------------------------------------------------------------------
66       ! hajuta_mat tulemusel hajutatakse masteri A protsesside vahel
67       !   hajusobj.-ks par_mat lähtudes sõlmeomanike registrist so_reg
68       !   par_A objektis on aga maatriksites indeksid veel globaalsed
69       !------------------------------------------------------------------
70       implicit none
71       type(sparse_m) :: A ! defineeritud vaid protsessil 0
```

```
72       type(par_sparse_m) :: par_A ! tulemuseks maatriks A hajusana
73       integer :: so_reg(:) ! seda teavad kõik
74       integer :: i,j,id,esiloendur,tagaloendur,mitu
75       integer,dimension(:),allocatable :: Aelarv ! A elementide arv,
76                                             ! mis antud protsessile kuulub
77       integer,dimension(:),allocatable :: Aindi,Aindj
78       real(kind=rk),dimension(:),allocatable :: Aval
79       if (myid.eq.master) then
80         allocate(Aelarv(0:numprocs-1))
81         Aelarv=0
82         do i=1,A%nearv
83           j=so_reg(A%indi(i))
84           Aelarv(j)=Aelarv(j)+1
85         end do
86         ! vaatame maatriksi läbi iga protsessi seisukohalt:
87         do id=1,numprocs-1
88           mitu=Aelarv(id)
89           call MPI_SEND(mitu,1,MPI_INTEGER,id,master,comm,ierr)
90           allocate(Aindi(mitu),Aindj(mitu),Aval(mitu))
91           esiloendur=0
92           tagaloendur=mitu
93           ! kõigepealt pannakse massiividesse Aindi, Aindj ja Aval
94           ! need maatriksi A elemendid, mille mõlemad indeksid
95           ! (i ja j) kuuluvad samale protsessile
96           do i=1,A%nearv
97             if(so_reg(A%indi(i))==id) then ! juhul kui id sõlm
98               if (so_reg(A%indj(i))==id) then ! sisõlm-sisesõlm
99                 esiloendur=esiloendur+1
100                Aindi(esiloendur)=A%indi(i)
101                Aindj(esiloendur)=A%indj(i)
102                Aval(esiloendur)=A%val(i)
103              else ! sisesõlm-varisõlm: ühendused lisame tagaossa:
104                Aindi(tagaloendur)=A%indi(i)
105                Aindj(tagaloendur)=A%indj(i)
106                Aval(tagaloendur)=A%val(i)
107                tagaloendur=tagaloendur-1
108              end if
109            endif
110          end do
111          if (esiloendur/=tagaloendur) then! otsad koos?
112            print *,'VIGA: loenduriviga.'
113          endif
114          call MPI_SEND(esiloendur,1,MPI_INTEGER,id,master,comm,ierr)
115          ! saadame A tüki ära:
116          call MPI_send(Aindi,mitu,MPI_INTEGER,id,master,comm,ierr)
117          call MPI_send(Aindj,mitu,MPI_INTEGER,id,master,comm,ierr)
118          call MPI_send(Aval,mitu,MPI_RK,id,master,comm,ierr)
119          deallocate(Aindi,Aindj,Aval)
120        end do
121      else ! slave võtab pakutu vastu:
122        call MPI_RECV(mitu,1,MPI_INTEGER,master,master,comm,stat,ierr)
123        call MPI_RECV(sisepiir,1,MPI_INTEGER,master,master, &
124                      comm,stat,ierr)
125        allocate(Aindi(mitu),Aindj(mitu),Aval(mitu))
126        call MPI_RECV(Aindi,mitu,MPI_INTEGER,master,master, &
127                      comm,stat,ierr)
128        call MPI_RECV(Aindj,mitu,MPI_INTEGER,master,master, &
129                      comm,stat,ierr)
130        call MPI_RECV(Aval,mitu,MPI_RK,master,master,comm,stat,ierr)
```

```
131          par_A%siseyhendusi=sisepiir
132          par_A%variyhendusi=mitu-sisepiir
133          ! Loodud maatriksites on indeksid globaalses järjestuses...
134          par_A%sise_mat=Loo_sparse_m(sisepiir,Aindi,Aindj,Aval)
135          par_A%vari_mat=Loo_sparse_m(par_A%variyhendusi, &
136            Aindi(sisepiir+1),Aindj(sisepiir+1),Aval(sisepiir+1))
137          deallocate(Aindi,Aindj,Aval)
138        endif
139        ! Masteri enda alammaatriks ka:
140        if (myid.eq.master) then
141          mitu=Aelarv(master)
142          allocate(Aindi(mitu),Aindj(mitu),Aval(mitu))
143          esiloendur=0
144          tagaloendur=mitu
145          ! kõigepealt pannakse massiividesse Aindi, Aindj ja Aval kirja
146          ! need maatriksi A elemendid, mille mõlemad indeksid (i ja j)
147          ! kuuluvad samale protsessile
148          do i=1,A%nearv
149            if(so_reg(A%indi(i))==master) then ! juhul kui masteri sõlm
150              if (so_reg(A%indj(i))==master) then ! sisõlm-sisesõlm
151                esiloendur=esiloendur+1
152                Aindi(esiloendur)=A%indi(i)
153                Aindj(esiloendur)=A%indj(i)
154                Aval(esiloendur)=A%val(i)
155              else ! sisesõlm-varisõlm: ühendused lisame tagaossa:
156                Aindi(tagaloendur)=A%indi(i)
157                Aindj(tagaloendur)=A%indj(i)
158                Aval(tagaloendur)=A%val(i)
159                tagaloendur=tagaloendur-1
160              end if
161            endif
162          end do
163          if (esiloendur/=tagaloendur) then! otsad koos?
164            print *,'VIGA:␣loenduriviga.'
165          endif
166          sisepiir=esiloendur
167          par_A%siseyhendusi=esiloendur
168          par_A%variyhendusi=mitu-esiloendur
169          ! Loodud maatriksites indeksid veel globaalses järjestuses...
170          par_A%sise_mat = &
171            Loo_sparse_m(par_A%siseyhendusi,Aindi,Aindj,Aval)
172          par_A%vari_mat=Loo_sparse_m(par_A%variyhendusi, &
173            Aindi(sisepiir+1),Aindj(sisepiir+1),Aval(sisepiir+1))
174          deallocate(Aindi,Aindj,Aval)
175          deallocate(Aelarv)
176        endif
177      end function hajuta_mat
178
179      subroutine suhtluse_ettevalmistus(so_reg,par_A)
180        integer,intent(in) :: so_reg(:) ! seda teavad kõik
181        type(par_sparse_m) :: par_A ! maatriks hajusobjektina
182        ! solmenumbrite teisenduseks:
183        integer,dimension(:),pointer :: global2local
184        integer,dimension(:),allocatable :: ootus,ireqs,ireqr
185        integer :: i,j,k,loendur,naaber,id,maxsaata
186
187        allocate(varisolmed_naabrilt(0:numprocs-1))
188        allocate(minusolmed_naabrile(0:numprocs-1))
189        allocate(ireqs(0:numprocs-1))
```

```
190     allocate(ireqr(0:numprocs-1))
191     allocate(global2local(glob_solmi))
192     global2local=0
193     loendur=1
194     do i=1,glob_solmi
195       if(so_reg(i)==myid) then
196         global2local(i)=loendur
197         loendur=loendur+1
198       end if
199     end do
200     omasolmi=loendur-1 ! antud protsessi oma sõlmede arv
201     allocate(ootus(0:numprocs-1)) ! sõlmede arv protsessilt
202     ootus=0
203     ! Märgistame global2local kohad mis globaalses numeratsioonis
204     !   saavad olema meie varisõlmede kohad esialgu arvuga -1,
205     !   samas loendame ootuse igalt naabrilt:
206     do i=1,par_A%variyhendusi
207       if(global2local(par_A%vari_mat%indj(i))==0) then
208         global2local(par_A%vari_mat%indj(i))=-1
209         naaber=so_reg(par_A%vari_mat%indj(i))
210         ootus(naaber)=ootus(naaber)+1
211       end if
212     end do
213     ! Varisõlmed iga naabri jaoks asuvad eraldi:
214     allocate(varisolmede_algus_naabrile(0:numprocs-1))
215     varisolmede_algus_naabrile=0
216     do id=0,numprocs-1
217       if(id/=myid) then
218         varisolmede_algus_naabrile(id)=loendur
219         loendur=loendur+ootus(id)
220       end if
221     end do
222     varisolmi=loendur-omasolmi-1 ! varisolmede arv antud protsessil
223     ! INFOVAHETUS. Kõigepealt võtame mälu:
224     do id=0,numprocs-1
225       varisolmed_naabrilt(id)%solmi=0
226       if(ootus(id)/=0) then
227         allocate(varisolmed_naabrilt(id)%solmenumbrid(ootus(id)))
228       end if
229     end do
230     do i=1,glob_solmi
231       if(global2local(i)==-1) then !Vaatama uuesti varislm. asukohti
232         j=so_reg(i) ! omanik on j
233         k=varisolmed_naabrilt(j)%solmi+1
234         varisolmed_naabrilt(j)%solmi=k ! suurendame ühevõrra
235         varisolmed_naabrilt(j)%solmenumbrid(k)=i ! salvest.glob.num.
236         global2local(i)=varisolmede_algus_naabrile(j)+k-1!uus väärt.
237       end if
238     end do
239     ! Nüüd võime lok. maatriksite indeksid teisendada lokaalseks:
240     do i=1,par_A%siseyhendusi
241       par_A%sise_mat%indi(i)=global2local(par_A%sise_mat%indi(i))
242       par_A%sise_mat%indj(i)=global2local(par_A%sise_mat%indj(i))
243     end do
244     do i=1,par_A%variyhendusi
245       par_A%vari_mat%indi(i)=global2local(par_A%vari_mat%indi(i))
246       par_A%vari_mat%indj(i)=global2local(par_A%vari_mat%indj(i))
247     end do
248     ! Teavitame protsesse, mitu sõlme neilt (nemad salvestavad selle
```

```
249     !    muutujas minusolmed_naabrile(:)%solmi)
250     do id=0,numprocs-1
251       if(id/=myid) then
252         call MPI_Send(varisolmed_naabrilt(id)%solmi,1, &
253                MPI_INTEGER,id,myid,comm,ierr)
254       end if
255     end do
256     minusolmed_naabrile(myid)%solmi=0
257     maxsaata=0
258     do id=0,numprocs-1
259       if(id/=myid) then
260         call MPI_Recv(k,1,MPI_INTEGER,MPI_ANY_SOURCE, &
261                MPI_ANY_TAG,comm,stat,ierr)
262         minusolmed_naabrile(stat(MPI_TAG))%solmi=k
263         if(k>maxsaata) maxsaata=k
264       end if
265     end do
266     allocate(puhver(maxsaata)) ! kasut. hiljem tegel. väärt. saatm.
267     call MPI_BARRIER(comm,ierr)
268
269     ! saadame teistele varisolmed_naabrilt(id)%solmenumbrid
270     !    tulemus salvest. kui
271     !    minusolmed_naabrile(protsessi_nr)%solmenumbrid
272     do id=0,numprocs-1
273       if(ootus(id)/=0) then
274         call MPI_Isend(varisolmed_naabrilt(id)%solmenumbrid, &
275              ootus(id),MPI_INTEGER,id,myid,comm,ireqs(id),ierr)
276       end if
277     end do
278     do id=0,numprocs-1
279       k=minusolmed_naabrile(id)%solmi
280       if(k/=0) then
281         allocate(minusolmed_naabrile(id)%solmenumbrid(k))
282         call MPI_Irecv(minusolmed_naabrile(id)%solmenumbrid,k, &
283                MPI_INTEGER,id,id,comm,ireqr(id),ierr)
284       end if
285     end do
286     do id=0,numprocs-1 ! ootame, kuni kõik saadetud
287       if(ootus(id)/=0) then
288         call MPI_Wait(ireqs(id),stat,ierr)
289       end if
290     end do
291     do id=0,numprocs-1 ! ootame, kuni kõik saabunud
292       if(minusolmed_naabrile(id)%solmi/=0) then
293         call MPI_Wait(ireqr(id),stat,ierr)
294       end if
295     end do
296     ! lõpuks teisendame indeksid lokaalseteks ja OK:
297     do id=0,numprocs-1
298       do i=1,minusolmed_naabrile(id)%solmi
299         minusolmed_naabrile(id)%solmenumbrid(i) = &
300           global2local(minusolmed_naabrile(id)%solmenumbrid(i))
301       end do
302     end do
303     deallocate(ootus)
304     deallocate(global2local)
305     deallocate(ireqr)
306     deallocate(ireqs)
307   end subroutine suhtluse_ettevalmistus
```

```
308  end function Loo_par_sparse_mat
309
310  function par_sparse_Ax(comm,A,par_x0,nulli) result(par_y)
311    !-------------------------------------------------------------
312    ! funktsioon y=Ax hõredate hajusmaatriksite korral
313    !-------------------------------------------------------------
314    implicit none
315    integer,intent(in) :: comm ! kommunikaator
316    type(par_sparse_m),intent(in) :: A
317    real(kind=rk),intent(in),dimension(:) :: par_x0
318    logical,optional,intent(in) :: nulli ! .true., => par_y=0 algul
319    real(kind=rk),dimension(size(par_x0)) :: par_y ! sama pikk kui x !
320    ! vajame massiivi, kus ruumi ka varisolmedele:
321    real(kind=rk) :: par_x(omasolmi+varisolmi) ! automaatne massiiv
322    integer :: i,j,k,id
323    integer,dimension(:),allocatable :: ireq
324    integer :: stat(MPI_STATUS_SIZE),ierr
325
326    par_x(1:size(par_x0)) = par_x0
327    allocate(ireq(0:numprocs-1))
328    do id=0,numprocs-1 ! varisolmede väärtuste vastuvõtu alustus
329      k=varisolmed_naabrilt(id)%solmi
330      if (k/=0) then
331        call MPI_Irecv(par_x(varisolmede_algus_naabrile(id)),k, &
332          MPI_RK,id,id,comm,ireq(id),ierr)
333      end if
334    end do
335    do id=0,numprocs-1 ! teistele protsessidele nende varisõlmed
336      k=minusolmed_naabrile(id)%solmi
337      if (k/=0) then
338        do i=1,k ! kogume puhvrisse
339          puhver(i)=par_x(minusolmed_naabrile(id)%solmenumbrid(i))
340        enddo ! ...ja saadame teele, TAG=myid
341        call MPI_Send(puhver,k,MPI_RK,id,myid, &
342                      comm,ierr)
343      endif
344    enddo
345    if (present(nulli)) then ! algväärtustamine kui vaja
346      if (nulli) par_y=0.0_rk
347    end if
348    ! Korrutame siseõlmede osa:
349    par_y = sparse_Ax(A%sise_mat,par_x)
350    ! Veendume, et varisolmede väärtused kohal:
351    do id=0,numprocs-1
352      if (varisolmed_naabrilt(id)%solmi/=0) then
353        call MPI_WAIT(ireq(id),stat,ierr)
354      endif
355    enddo
356    ! lisame varsiolmede osa korrutise:
357    par_y = par_y + sparse_Ax(A%vari_mat,par_x)
358    deallocate(ireq)
359  end function par_sparse_Ax
360
361  !-------------------------------------------------------------
362  ! Alamprogrammid, mis vajalikud tööks vektoritega:
363  !-------------------------------------------------------------
364  subroutine tee_partitsioonid(comm,so_reg)
365    !-------------------------------------------------------------
366    ! masteri ettevalmistus vektorite hajutuseks ja kokkukogumiseks
```

```
367    !   (alternatiiv oleks koguda kõigi global2local>0 asukohad)
368    !------------------------------------------------------------
369    implicit none
370    integer,intent(in) :: comm ! kommunikaator
371    integer,intent(in) :: so_reg(:)
372    integer,dimension(:),allocatable :: solmedearv
373    integer :: i,k,id,omanik,maxsaata
374    integer :: numprocs,ierr
375    call MPI_COMM_SIZE(comm,numprocs,ierr) ! protsesside arv
376
377    allocate(solmedearv(0:numprocs-1)) ! loendab solmi igal protsessil
378    solmedearv=0
379    do i=1,glob_solmi
380      omanik=so_reg(i)
381      solmedearv(omanik)=solmedearv(omanik)+1
382    end do
383    allocate(partitsioon(0:numprocs-1)) ! tüübist alamhulk
384    ! leiame partitsioonide suurused:
385    do id=0,numprocs-1
386      partitsioon(id)%solmi=0
387      allocate(partitsioon(id)%solmenumbrid(solmedearv(id)))
388    end do
389    do i=1,glob_solmi ! partitsioonidesse jagamine
390      omanik=so_reg(i)
391      k=partitsioon(omanik)%solmi+1
392      partitsioon(omanik)%solmi=k
393      partitsioon(omanik)%solmenumbrid(k)=i
394    end do
395    maxsaata=MAXVAL(solmedearv)
396    deallocate(solmedearv)
397    allocate(masteri_puhver(maxsaata))
398  end subroutine tee_partitsioonid
399
400  subroutine hajuta_vektor(comm,vec,minu_osavec)
401    !------------------------------------------------------------
402    ! master hajutab vec laiali osavektoriteks
403    !------------------------------------------------------------
404    implicit none
405    integer :: comm ! kommunikaator
406    real(kind=rk),dimension(:) :: vec ! antud vaid masteril
407    real(kind=rk),dimension(:) :: minu_osavec ! tulemusena kõigil
408    integer :: id,stat(MPI_STATUS_SIZE),ierr
409    integer :: i,k
410    if (myid==master) then
411      do id=1,numprocs-1
412        k=partitsioon(id)%solmi
413        do i=1,k
414          masteri_puhver(i)=vec(partitsioon(id)%solmenumbrid(i))
415        end do
416        call MPI_Send(masteri_puhver,k,MPI_RK,id,myid,comm,ierr)
417      end do
418      do i=1,partitsioon(master)%solmi ! masteri enda osa
419        minu_osavec(i)=vec(partitsioon(master)%solmenumbrid(i))
420      end do
421    else ! slave 'id:
422      call MPI_Recv(minu_osavec,omasolmi,MPI_RK, &
423                    master,master,comm,stat,ierr)
424    endif
425  end subroutine hajuta_vektor
```

```
426
427   subroutine kogu_vektor_kokku(comm,minu_osavec,vec)
428     !—————————————————————————————————————————————————————
429     ! master kogub osavektorid kokku suureks vektoriks vec
430     !—————————————————————————————————————————————————————
431     implicit none
432     integer :: comm ! kommunikaator
433     real(kind=rk),dimension(:) :: vec ! defineeritud vaid masteril
434     real(kind=rk),dimension(:) :: minu_osavec ! defineeritud kõigil
435     integer :: stat(MPI_STATUS_SIZE),ierr,saatja
436     integer :: id,i
437     if (myid/=master) then ! minu vektori osa masterile,TAG=myid
438       call MPI_Send(minu_osavec,omasolmi,MPI_RK, &
439                     master,myid,comm,ierr)
440     else
441       do i=1,partitsioon(master)%solmi ! master alustab enda osaga
442         vec(partitsioon(master)%solmenumbrid(i))=minu_osavec(i)
443       end do
444       do id=1,numprocs-1 ! (saabuva teate pikkus pole tegelikult õige)
445         call MPI_Recv(masteri_puhver,size(masteri_puhver),MPI_RK, &
446               MPI_ANY_SOURCE,MPI_ANY_TAG,MPI_COMM_WORLD,stat,ierr)
447         saatja=stat(MPI_TAG)
448         do i=1,partitsioon(saatja)%solmi
449           vec(partitsioon(saatja)%solmenumbrid(i))=masteri_puhver(i)
450         end do
451       end do
452     endif
453   end subroutine kogu_vektor_kokku
454
455   subroutine Kustuta_par_sparse_mat(A)  ! destruktor TODO !
456     !—————————————————————————————————————————————————————
457     ! Destruktor
458     !—————————————————————————————————————————————————————
459     implicit none
460     type(par_sparse_m),optional :: A
461     integer :: id,k
462     if (present(A)) then ! Kustutame maatriksi
463       call Kustuta_sparse_m(A%sise_mat)
464       call Kustuta_sparse_m(A%vari_mat)
465     else ! vabastame kõik loodud mälustruktuurid (soovitatakse
466          !       teha tagurpidises järjekorras allokeerimisega)
467       ! mälueraldused alamprogrammist tee_partitsioonid:
468       if (myid==master) then
469         deallocate(masteri_puhver)
470         do id=numprocs-1,0,-1
471           deallocate(partitsioon(id)%solmenumbrid)
472         end do
473         deallocate(partitsioon)
474       endif
475       ! alamprogramm suhtluse_ettevalmistus(so_reg,par_A):
476       do id=numprocs-1,0,-1
477         if(minusolmed_naabrile(id)%solmi/=0) then
478           deallocate(minusolmed_naabrile(id)%solmenumbrid)
479         end if
480       end do
481       deallocate(puhver)
482       do id=numprocs-1,0,-1
483         if (varisolmed_naabrilt(id)%solmi/=0) then
484           deallocate(varisolmed_naabrilt(id)%solmenumbrid)
```

```
485           end if
486         end do
487         deallocate(varisolmede_algus_naabrile)
488         deallocate(minusolmed_naabrile)
489         deallocate(varisolmed_naabrilt)
490       endif
491     end subroutine Kustuta_par_sparse_mat
492 end module par_sparse_mat
```

Sellega ongi loodud kõik antud näites vajalikud andmestruktuurid paralleelse kaasgradientide meetodi realiseerimiseks.

9.3 Kaasgradientide meetodi testimine

Lisaks hajutatud maatriksile A jaotatakse protsessi $P(0)$ poolt laiali vastavalt ka vektor **b**, see on realiseeritud alamprogrammis `hajuta_vektor` (vt. lähteteksti 9.3 rida 400). Kõik kaasgradientide algoritmis vajaminevad abivektorid on vaid hajutatud kujul. Üksnes vastusvektor **x** kogutakse peale soovitud täpsuse saavutamist kokku protsessile $P(0)$ alamprogrammi `kogu_vektor_kokku` abil (lähteteksti 9.3 rida 427).

Paralleelse kaasgradientide meetodi tööks on vaja sooritada paralleelselt kahte põhioperatsiooni:

1. **Skalaarkorrutised**, mis on ühel protsessil kõige parem realiseerida Fortran95 sisefunktsiooni `dot_product` abil (järgnevas lähtekoodis 9.4 ridadel 123 ja 129). Selleks, et igalt protsessilt saadud tulemused kokku liita nii, et kõik protsessid saaksid tulemusena teada summa, on mugavaim ja efektiivseim võimalus kasutada käsku `MPI_Allreduce` nagu on toodud lähtekoodi 9.4 ridadel 124 ja 130.

2. **Maatriksi korrutamine vektoriga**, mis on realiseeritud `par_sparse_mat` klassifunktsioonina `par_sparse_Ax` (vt. lähteteksti 9.3 rida 310).
   Antud operatsiooni paralleelne realisatsioon on toodud programmi efektiivsuse võtmeküsimusi – kasutatakse mitteblokeerivat kommunikatsiooni, täites teadete vahetamisele kuluva aja kasulike arvutustega. Operatsioon teostatakse viies etapis:
   A. Alustatakse varisõlmede mitteblokeerivaid vastuvõtuoperatsioone käskudega `MPI_Irecv` kõigilt naaberprotsessidelt, kellega antud protsessi seob mõni varimaatriksi ühendus (vt. lähteteksti 9.3 ridu 328-334).
   B. Alustatakse mitteblokeerivaid saatmisoperatsioone `MPI_Isend`-käskudega, mille sisuks on antud protsessilt naabritele vajaminevad väärtused (naaberprotsessid kaasajastavad oma vastavate varisõlmede väärtused peale saabunud etapi A teadete vastuvõtmist).
   C. Sooritatakse Ax-operatsioon sisemaatriksiga (lähteteksti 9.3 rida 349) kutsudes välja klassi `sparse_mat` funktsiooni `sparse_Ax` vt. (lähteteksti 9.2 rida 43).
   D. Veendutakse, et kõik varisõlmede väärtused on naabritelt saabunud (lähteteksti 9.3 read 351-355).
   E. Sooritatakse Ax-operatsioon sisemaatriksiga (lähteteksti 9.3 rida 357).

Järgnevalt toome kaasgradientide meetodi paralleelse realisatsiooni ja põhiprogrammi:

Lähtetekst 9.4: Suurte hõredate maatriksitega süsteemide paralleelne lahendamine kaasgradientide meetodiga

```
1 ! Fail: mpi_CG/par_sparse_lahenda.f90
2 !-----------------------------------------------------------------------
3 ! Programm, mis lahendab hõreda maatriksiga sümmeetrilisi
4 !   lineaarvõrrandite süsteeme kasutades kaasgradientide
5 !   meetodit. Prooviks lahendatakse Poissoni ülesanne
6 !   Laplace'i maatriksiga, mis tekib Dirichlet' nulliliste
7 !   rajaväärtuste korral ühikruudus ühtlase võrgu puhul.
8 !-----------------------------------------------------------------------
9 program par_sparse_lahenda
10   use par_sparse_mat
11   implicit none
12   type(sparse_m) :: A
13   type(par_sparse_m) :: par_A
14   real(rk),dimension(:),allocatable :: par_x,x0,y,par_y,vastus
15   integer,dimension(:),pointer :: so_reg ! sõlmeomanike register
16   real(rk) :: t1,t2,t3,t4
17   real(rk) :: eps=1.0E-10_rk
18   integer :: ierr,p,n,solmi,i,it
19
20   call MPI_INIT(ierr) ! initsialiseerime MPI
21   call MPI_COMM_RANK(MPI_COMM_WORLD,myid,ierr) ! järk myid
22   call MPI_COMM_SIZE(MPI_COMM_WORLD,numprocs,ierr) ! prots.arv
23   master=0
24   if (myid==master) then
25     p=INT(SQRT(DBLE(numprocs))) ! p - ruutjuur protsesside arvust
26                                 !   mitu alampiirkonda kummaski suunas
27     if (p**2/=numprocs) then
28       print *,'Prots. arv peab olema arvu ruut! (1,4,9,16,25,...)'
29       stop
30     endif
31     print *, 'Sisestage n (peab jaguma', p, '-ga):'
32     read *, n              ! n - sõlmede arv nii x kui ka y suunas
33     print *, 'n = ', n
34     solmi = n*n            ! ruudukujuline piirkond
35     A=Laplace_M(n)         ! A - hõre, (n*n)X(n*n) Laplace'i maatriks
36     print *,'Otsitavaid: ',solmi
37     print *,'Maatriksis nullist erinevaid elemente:', A%nearv
38     allocate(so_reg(solmi)) ! so_reg - sõlmeomanike register, massiiv
39                             !   mis annab iga sõlme protsessi numbri
40     do i=1,solmi
41       so_reg(i)=(((i-1)/n)/(n/p))*p+MOD(i-1,n)/(n/p)
42     end do
43   endif
44
45   ! Käivitame stopperi:
46   call MPI_Barrier(MPI_COMM_WORLD,ierr)
47   if (myid==master) then
48     t1 = MPI_Wtime()
49   endif
50   par_A = Loo_par_sparse_mat(MPI_COMM_WORLD,so_reg,A)
51   ! Paneme stopperi seisma:
52   call MPI_Barrier(MPI_COMM_WORLD,ierr)
53   if (myid==master) then
```

```
    t2 = MPI_Wtime()
  endif

  ! Teeme testimiseks valmis juhusliku parema poole vektori
  if (myid==master) then
    allocate(x0(solmi),y(solmi))
    call random_seed()
    call random_number(x0)
    ! x0=1.0_rk ! testimiseks
    y=sparse_Ax(A,x0) ! süsteemi Ax=y lahendiks seega x0 !
  endif
  ! Käivitame stopperi:
  call MPI_Barrier(MPI_COMM_WORLD,ierr)
  if (myid==master) then
    t3 = MPI_Wtime()
  endif
  allocate(par_y(omasolmi),par_x(omasolmi))
  call hajuta_vektor(MPI_COMM_WORLD,y,par_y)
  par_x = Kaasgradientide_meetod(par_A,par_y,eps,it)
  if (myid.eq.master) then
    allocate(vastus(solmi))
  endif
  call kogu_vektor_kokku(MPI_COMM_WORLD,par_x,vastus)
  ! Paneme stopperi seisma:
  call MPI_Barrier(MPI_COMM_WORLD,ierr)
  if (myid==master) then
    t4 = MPI_Wtime()
  endif

  if (myid.eq.master) then
    call Kustuta_sparse_m(A)            ! sparse_m destruktor
  endif
  call Kustuta_par_sparse_mat(par_A)  ! par_sparse_m destruktor
  call Kustuta_par_sparse_mat()       ! par_sparse_mat destruktor

  if (myid.eq.master) then
    print *,'Lahendi maksimaalne viga:', MAXVAL(ABS(vastus-x0))
    print *,'Initsialiseerimisaeg:', t2-t1
    print *,'Lahendamisaeg:', t4-t3,', kokku ',it,' iteratsiooni'
    deallocate(vastus)
  endif
  deallocate(par_x,par_y)
  if (myid==master) then
    deallocate(y,x0)
    deallocate(so_reg) ! teistel protsessidel allokeeriti mujal...
  endif
  call MPI_Finalize(ierr)

contains
  function Kaasgradientide_meetod(par_A,par_y,eps,it) result(par_x)
    !---------------------------------------------------------------
    ! Lahendab hajusa systeemi Ax=y täpsusega eps
    !---------------------------------------------------------------
    implicit none
    type(par_sparse_m) :: par_A
    real(rk) :: par_y(:),eps
    integer,intent(out) :: it ! iteratsioonide arv
    real(rk) :: par_x(omasolmi)
    real(rk) :: vanarho,rho,alpha,beta,tmp
```

```
113         ! automaatsed abimassiivid:
114         real(rk) :: p(omasolmi),q(omasolmi),r(omasolmi)
115         integer :: ierr
116
117         par_x=0.0_rk
118         vanarho=1.0_rk
119         r=par_y-par_sparse_Ax(MPI_COMM_WORLD,par_A,par_x,nulli=.true.)
120         p=0.0_rk
121         it=0
122         do while(vanarho>eps**2.AND.it<3000)
123           tmp=dot_product(r,r) ! sisefunktsioon
124           call MPI_Allreduce(tmp,rho,1,MPI_RK,MPI_SUM, &
125                               MPI_COMM_WORLD,ierr)
126           beta=rho/vanarho
127           p=r+beta*p
128           q=par_sparse_Ax(MPI_COMM_WORLD,par_A,p,nulli=.true.)
129           tmp=dot_product(p,q)
130           call MPI_Allreduce(tmp,alpha,1,MPI_RK,MPI_SUM, &
131                               MPI_COMM_WORLD,ierr)
132           alpha=rho/alpha
133           par_x=par_x+alpha*p
134           r=r-alpha*q
135           vanarho=rho
136           it = it+1
137           if (myid==0) then
138             print *,it,dsqrt(rho)
139           endif
140         end do
141       end function Kaasgradientide_meetod
142 end program par_sparse_lahenda
```

Märgime, et antud kujul tuleks toodud näites protsessorite arvuks valida kas 1, 4, 9, 16, jne (st. mingi arvu ruut). Lisame täielikkuse huvides ka toodud programmi kompileerimiseks vajamineva `Makefile`-i:

Lähtetekst 9.5: Makefile toodud näiteprogrammi kompileerimiseks.

```
# Fail: mpi_CG/Makefile

# SUN arhitektuur:
F90 = mpf95 # SUN
# FLAGS = -u -dalign -g -C # debugimiseks
FLAGS = -u -fast -dalign -xarch=v8plusa
LIBS = -lmpi -lmopt -xlic_lib=sunperf -lnsl -ls3l -lmvec

#Linux:
# F90 = ifc # Intel Fortran Compiler Linuxi korral
# #FLAGS = -u -g -C # debugimiseks
# FLAGS = -u -O

MODO = RealKind.o sparse_mat.o par_sparse_mat.o
TESTO = par_sparse_lahenda.o

PRG = par_sparse_lahenda

all: $(PRG)

$(PRG): $(MODO) $(TESTO)
```

```
        $(F90) $(FLAGS) -o $(PRG) $(MODO) $(TESTO) $(LIBS)

.SUFFIXES:       .o .f90
.f90.o:
        $(F90) $(FLAGS) -c $*.f90

clean:
        rm -f core* *.o *.mod $(PRG)
```

Kokkuvõte

Antud õppematerjal oli sissejuhatuseks paralleelprogrammeerimisele kasutades Fortran90/95 keelt ja MPI teateedastusstandardit. Märgime, et mõlemad standardid, nii Fortrani kui ka MPI standard, on tegelikult pidevas edasiarenduses. Seega on kirjeldatud materjal ise pidevas muutuses ning täiustamises. (Selle õppematerjali kirjutamise ajal on valmimas Fortran200x standard; siinkirjeldatud MPI käsud katavad vaid osa MPI-1 standardist, MPI-2 standard on valmis ning lisab mitmeid uusi kontseptsioone nagu näiteks dünaamiline protsesside tekitamine jms. Ettevalmistamisel on juba ka MPI-3 standard.) Küll aga on mõlema standardi areng pidevalt ees tegelikest, reaalselt olemasolevatest realisatsioonidest, st. Fortrani kompilaatoritest ning MPI teekidest. Võime öelda, et siintoodud materjalid on kindlaks baasiks ka tulevastele arengutele, moodustades mõlema käsitletud tarkvarasüsteemi põhituuma. Edasiseks materjali omandamiseks soovitame konsulteerida aga juba kirjandust, millest siin anname väikese ülevaate.

Fortran90/95 kohta võib täpsemalt lugeda raamatust [1], mis annab põhjaliku ülevaate kogu keele kohta. Raamatus [2] käsitletakse objekt-orienteeritud kontseptsiooni programmeerimisel keeles Fortran90/95. Iseseisvaks õppimiseks sobivad ka ülevaated [3,4], mis on saadaval Internetist. Teine neist ([4]) kirjeldab küll Fortran90 edasiarendust paralleelarvutitele, HPF-i (*High Performance Fortran*), kuid annab ka Fortran90 kohta üsna põhjaliku ülevaate. Konkreetsete tehniliste detailide kohta on kõige hõlpsam konsulteerida (SUNi ja Inteli) kompilaatorite manuaale [5,6,7], mis on kättesaadavad Internetist.

MPI standardist (täpsemalt MPI-1) võib lugeda raamatust [8]. Selles põhjalikus MPI käsitluses leidub muuhulgas soovitusi ning tehnikat paralleelprogrammide silumiseks. Raamatus [9] antakse sissejuhatus paralleelprogrammeerimisse kasutades MPI-d, kusjuures kirjeldatakse üsna põhjalikult ka MPI standardit ennast kasutaja seisukohalt. Ühe või teise MPI käsu kuju ja argumentide kohta saab aga teha järelepärimisi kasutades tavalist UNIXi `man` käsku, eeldades et MPI teegi dokumentatsioon on tööjaamale paigaldatud; vastasel korral on sama informatsioon kättesaadav ka Internetist [10].

Kirjandus

1. M Metcalf and J Reid, Fortran 90/95 Explained; ISBN: 0198505582, Oxford University Press, 1999.

2. Ed Akin, Object-Oriented Programming via Fortran90/95. Cambridge University Press, 2003.

3. Dr. C.-K. Shene Fortran 90 Tutorial (http://www.cs.mtu.edu/~shene/COURSES/cs201/NOTES/fortran.html).

4. Dr. A C Marshall. HPF Programming Course Notes (http://hkusuc.hku.hk/cc/sp2/ftp/hpf/5days/courseno.ps).

5. SUNi kompilaatorite dokumentatsioon (http://developers.sun.com/prodtech/cc/reference/docs/index.html).

6. Intel Fortran Programmers's Reference (http://www.intel.com/software/products/compilers/techtopics/for_prg.htm).

7. Intel Fortran Libraries Reference (http://www.intel.com/software/products/compilers/techtopics/for_lib.htm).

8. W Gropp. Using MPI : portable parallel programming with the message-passing interface; ISBN: 0262571048, The MIT Press, 1994.

9. P S Pacheco. Parallel programming with MPI; ISBN 1558603395, Morgan Kaufmann Publishers, 1997.

10. MPI käskude manuaal (http://www-unix.mcs.anl.gov/mpi/www/index.html).

Indeks

`abs`, 44
abstraktne andmetüüp, 18, 21, 22
ADT, 21
`ADVANCE`, 56
`all`, 52, 53
`allocatable`, 46
`allocate`, 13, 14, **46**, 51, 85, 91–97, 100, 101
.AND., 37
`any`, 52, 53
`associated`, 40
automaatne
  massiiv, 47

`BACKSPACE`, 58

`character`, 36
`close`, 57
`complex`, 36
`count`, 52, 53
`cshift`, 53, 54

`dble`, 44
`deallocate`, 13, 14, **46**, 51, 85, 92, 93, 95–99, 101
destruktor, 22
`dimension`, 44
`dot_product`, 52
`double precision`, 18, 19

`else where`, 54
`ENDFILE`, 58
`eoshift`, 53, 54
.EQV., 37

F - keel, 12
failitöötlus, 56
.false., 18, 40
fikseeritud lähteteksti formaat, 12
fiktiivsed massiivargumendid
  eeldatava
    kujuga, 48
    suurusega, 47
  etteantud kujuga, 47
formaadisümbol
  a, 56
  e, 56
  f, 56
  i, 56
`format`, 55, 56
Fortran77, 14
Fortran9x, 12

hõredate maatriksite kolmikformaat, 83
hajussüsteemid (*distributed systems), 61*
HPF - High Performance Fortran, 104
HPF - High Performance Fortran, 12

`implicit integer`, 36
`implicit none`, 19, 20, **36**
`implicit real`, 36
`include`, 23, 30
`index`, 40
`integer`, 36
`intent`, 24
`interface`, 15, 32, 33, 48
`IOSTAT`, 58

jagatava mälu (*shared memory) mudel, 61*

kaasgradientide meetod, 84
***kind**, 14*
klass, 22
klassid, 18, ***22***
kommentaaride lisamine, 35
konstruktor, 22
  manuaalne, 24
  sisseehitatud, 24

LAM-MPI, *61*
Laplace'i maatriks, *87*
lbound, *49*
len_trim, *38*
liidesedirektiiv, *31*
logical, *36*
loogiline tüüp, *18*

maatriksite korrutamine, *52*
massiivi
  alamindeksid, *44*
  asukohafunktsioonid, *53*
  järk, *43*, *46*
  kitsendusfunktsioonid, *52*
  konstruktor, *45*
  kuju, *44*, *46*
  kujumuutusoperatsioonid, *52*
  muutmise funktsioonid, *53*
  päringufunktsioonid, *48*
  suurus, *44*
  ulatus, *43*, *46*
matmul, *52*
maxloc, *53*
maxval, *52*, *53*
minloc, *53*
module, *14*
module procedure, *25*, *26*
moodul, *17*
MPI
  blokeerivad käsud, *71*
  destruktor, *67*
  kommunikaator, *67*
  mitteblokeerivad käsud, *77*
  realisatsioonid, *61*
  ühisoperatsioonid, *71*
MPI_Allgather, *72*, *73*
MPI_Allreduce, *72*, *99*
MPI_ANY_SOURCE, *68*
MPI_ANY_TAG, *68*
MPI_BAND, *72*
MPI_Barrier, *71*, *72*
MPI_Bcast, *72*
MPI_BOR, *72*
MPI_BXOR, *72*
MPI_CHARACTER, *68*
MPI_Comm_Rank, *65*, ***67***
MPI_Comm_Size, *65*, ***67***
MPI_COMM_WORLD, ***67***, *71*
MPI_COMPLEX, *68*
MPI_DOUBLE_COMPLEX, *68*
MPI_DOUBLE_PRECISION, *68*
MPI_Finalize, *65*, *67*, ***67***
MPI_Gather, *72*
MPI_Init, *65*, ***67***
MPI_INTEGER, *68*
MPI_Irecv, *77*, *99*
MPI_Isend, *77*, *99*
MPI_LAND, *72*
MPI_LOGICAL, *68*
MPI_LOR, *72*
MPI_LXOR, *72*
MPI_MAX, *72*
MPI_MIN, *72*
MPI_PACKED, *68*
MPI_PROD, *72*
MPI_REAL, *68*
MPI_REAL8, *68*
MPI_Receive, *65*
MPI_Recv, *68*
MPI_Reduce, *72*
MPI_Scatter, *73*
MPI_Send, *65*, *68*
MPI_STATUS_SIZE, *68*
MPI_SUCCESS, *67*
MPI_SUM, *72*
MPI_Test, *78*
MPI_type, *68*
MPI_Wait, *78*, *79*
MPI_Wtime(), *73*
mpicc, *69*
MPICH, *61*
mpif95, *69*
mpirun, *69*
mprun, *69*

.NEQV., *37*

.NOT., *37*
NULL(), *40*
nullify, *40*

open, *57*
open atribuut
  ACCESS
    DIRECT, *58*
    SEQUENTIAL, *58*
  ACTION
    READWRITE, *57*
  FORM, *57*
    FORMATTED, *57*
    UNFORMATTED, *57*
  IOSTAT, *58*
  POSITION
    APPEND, *58*
    ASIS, *58*
    REWIND, *58*
  STATUS
    OLD, *58*
    REPLACE, *58*
    SCRATCH, *58*
    UNKNOWN, *58*
OpenMP, *61*
optional, *27*
.OR., *37*

pack, *52*
parameter, *19*
pointer, *36*, ***40***, *41*, *46*, *84*, *91*, *93*, *100*
polümorfism, *17*, ***25***
present, *49*
print, ***55***
private, *17*, *22*, *27*
product, *52*, *53*
public, *17*, *22*, *27*
PVM, *61*

read, ***55***, *57*
real, *36*
real*8, *36*
recursive, *28*
rekursioon, *14*, *27*
request, *77*
reserveeritav massiiv, *46*
reshape, *45*, *50*, *52*
result, *29*, *30*
REWIND, *58*

select case, *37*
selected_int_kind, *18*
selected_real_kind, *84*
selected_real_kind, *19*, *34*
shape, *44*, *45*, ***48***
sin, *44*
sisend-väljund, *54*
size, *44*, *45*, ***48***, *49*, *50*
spread, *52*
standardsisend, *55*
standardväljund, *55*
sum, *52*, *53*
SUN-MPI, *61*

tag, *62*
target, *40*, ***40***, *41*
teateedastusmudel, *61*
transpose, *53*
trim, *38*
.true., *18*, *40*, *52*
tuletatud andmetüübid, *13*, *14*, *18*
tupik, *79*, *80*
type, *20*, *21*, *23*, *25*, *26*, ***36***, *84*, *85*, *90*, *91*, *93*, *96*, *98*, *100*, *101*

ubound, *49*
ujukomaoperatsioonide kiirus, *9*
use, *19*
use mpi, *67*

vaba lähteteksti formaat, *14*
viit, *40*

where, *14*, *43*, ***54***
write, *30*, ***55***, *56*

.XOR., *37*