

Calcul scientifique...

... mathématiques et programmation (C, Fortran).

Philippe HELLUY

28 janvier 2014

Le Calcul Scientifique, quésaco ?

- Calcul sur ordinateur de la solution d'un problème mathématique.
- Le calcul peut-être exact ou approché (contrôle de l'erreur).
- Applications : météo, mécanique des fluides, électromagnétisme, crash tests, « page ranking », sondages, plasmas, *etc.*
- Utiliser de la façon la plus efficace la puissance de calcul disponible. Éviter : Sage, Maple, Java, Python, Scilab, Matlab, OCaml...
- C, C++, Fortran : les plus utilisés sur supercalculateurs du top 500.
- Parallélisme, processeurs multi-cœur et architectures hétérogènes. Performance/watt : « green computing ».

Ordres de grandeur (2013)

- Unité : le FLOPS (FLoating point Operation Per Second).
Giga= 10^9 , Tera= 10^{12} , Peta= 10^{15} , Exa= 10^{18} .
- CRAY Y-MP (1990) : 2 GFLOPS.
- Un smartphone : 1 GFLOPS. Un netbook : 5 GFLOPS
- Un PC : 100 GFLOPS
- Un GPU : 1 TFLOPS
- Supercalculateur Airain (CEA France) : 420 TFLOPS, 20.000 cœurs.
- Tianhe-2 (Chine) : 34 PFLOPS, Titan (USA) : 17 PFLOPS, 500.000 cœurs.

Quelques exemples

- Un générateur de rayon X.
- Une onde RADAR sur un avion.
- Interaction entre une onde choc et une bulle dans l'eau.
- Un tokamak

- Inventé en 1954 (IBM). FORMula TRANslator. Traduire des formules mathématiques en langage machine.
- Plusieurs évolutions : Fortran I, II , III (1958), IV (1962), Fortran66, Fortran77, **Fortran90** (allocation dynamique), 95, 2003 (objets), 2008 (calcul parallèle), 2015 (interopérabilité avec C, C++).
- BASIC : dérivé de Fortran pour l'éducation.
- De multiples bibliothèques : LAPACK (algèbre linéaire), IMSL (statistiques).
- Calcul vectoriel et matriciel inclus dans le langage.
- Performances des compilateurs.
- Parallélisme : couplage très fréquent avec les bibliothèques MPI ou OpenMP.
- Incontournable sur les supercalculateurs.

- Utiliser le bon langage pour la bonne application.
- Site web : java ou php.
- Calcul formel : Sage, Maple.
- Calculs légers : Python, Matlab, Scilab.
- ***Calcul intensif : Fortran, C et C++.***

- Langage compilé. Texte du programme : `hello.f90`.
Compilation : `gfortran toto.f90`. Exécution : `./a.out`
- Les erreurs surviennent à la compilation (5% du temps de débogage) ET SURTOUT à l'exécution (95% du temps de débogage).
- Changer le nom de l'exécutable : `gfortran -o go toto.f90 ; ./go`
- Notion de données (data), pile (stack), tas (heap). La taille de données+pile est connue à la compilation. L'allocation dynamique : nécessité du tas. Erreur de segmentation...

- début, fin.
- les types : int, real*4, real*8. Attention :
 $1/2 \neq 1.d0/2 \neq 1.e0/2$.
- les tableaux statiques et dynamiques, les constantes.
Comprendre les erreurs de segmentation. Option de compilation pour le débogage.
- les boucles (do, while, end do)
- les tests (if ... else ... else if ... endif)
- les fichiers, les entrées-sorties.
- Exemple : construire un vecteur des n premiers nombres premiers. Cas où n est fixé à l'avance ou donné par l'utilisateur. Sauvegarder le résultat dans un fichier.



Cours de Fortran de l'IDRIS. http://www.idris.fr/data/cours/lang/f90/choix_doc.html



Aide mémoire UNIX Université de Jussieu.
<http://abiens.snv.jussieu.fr/Linfo/docs/LV231/aideMemoireUnix.pdf>



Unix sous Windows : projet CYGWIN.
<http://www.cygwin.com/>



C, C++ et Fortran sous Android.
<https://play.google.com/store/apps/details?id=com.pdaxrom.cctools&hl=fr>