

Méthodes numériques et éléments de programmation

Guy Munhoven

Institut d'Astrophysique et de Géophysique (Bât. B5c)

Bureau 0/13

eMail: Guy.Munhoven@ulg.ac.be

Tél.: 04-3669771

07 octobre 2014

Plan du cours 2014-2015

Cours théoriques

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

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

22-09-2014 Fortran 95: bases, boucles

23-09-2014 Fortran 95: branchements, sous-programmes

23-09-2014 Fortran 95: modules, opérations d'entrée-sortie

29-09-2014 Fortran 95: tableaux

07-10-2014 Fortran: librairies et collections de routines

Les collections de programmes et bibliothèques Fortran

Méthodes
numériques et
éléments de
programmation

Guy
Munhoven

Netlib

Hàirer website

Autres

Pourquoi ré-inventer la roue ?

Netlib

Méthodes
numériques et
éléments de
programmation

Guy
Munhoven

Netlib

Hàirer website

Autres

- Localisation: <http://www.netlib.org>
- Énorme collection de programmes et de routines de calcul scientifique
- Plusieurs moteurs de recherche et listes de contenu par thèmes
- *GAMS Problem Taxonomy* permet la recherche de routines particulières à travers une classification des problèmes typiquement rencontrés
- qualité des codes déposés est généralement excellente.

Netlib – librairies particulièrement intéressantes

Méthodes
numériques et
éléments de
programmation

Guy
Munhoven

Netlib

Hàirer website

Autres

odepack : résolution d'équations différentielles ordinaires

blas (*Basic Linear Algebra Subprograms*)

- collection de routines FORTRAN 77 pour les opérations de base entre vecteurs et matrices
- version spéciale atlas, permettant une installation optimisée en fonction du matériel utilisé (type d'unité centrale, taille du cache, etc.), et ceci de manière automatique
- certains de compilateurs viennent avec des versions optimisées de blas (blas évtmt. même utilisé pour réaliser les opérations intrinsèques de calcul matriciel, p.ex., MATMUL)
- certaines distributions Linux la proposent aussi

Netlib – librairies particulièrement intéressantes

Méthodes
numériques et
éléments de
programmation

Guy
Munhoven

Netlib

Hàirer website

Autres

lapack (*Linear Algebra PACKage*)

- sous-routines FORTRAN 77 pour la résolution de systèmes linéaires
- des plus généraux aux plus particuliers (symétriques, tridiagonaux, ...)
- factorisation de matrices sous différentes formes (*LU*, *QR*, Cholesky, ...)
- problèmes aux valeurs propres et aux valeurs singulières
- interfaces Fortran 90 et 95 pour lapack: paquets lapack90/lapack95
- version spéciale pour machines parallèles à mémoire distribuée: scalapack

Netlib – bibliothèques particulièrement intéressantes

Méthodes
numériques et
éléments de
programmation

Guy
Munhoven

Netlib

Haïrer website

Autres

- `fftpack` (*Fast Fourier Transform PACKage*)
- `fishpak` : collection de sous-routines FORTRAN 77 pour la résolution numérique d'équations aux dérivées partielles elliptiques séparables
- `slatec` : 1400 routines mathématiques et statistiques
- `quadpack` : intégration numérique automatique pour fonctions 1D

Netlib

Méthodes
numériques et
éléments de
programmation

Guy
Munhoven

Netlib

Haïrer website

Autres

Collections

- `ode` (en particulier `ode/rksuite`), qui rassemble une multitude de routines servant à résoudre des équations différentielles ordinaires.
- `pdes` : quelques routines pour l'intégration numérique d'équations
- `specfun` : fonctions spéciales (Gamma, Bessel, etc.)

Ernst Hairer (Université de Genève)

Méthodes
numériques et
éléments de
programmation

Guy
Munhoven

Netlib

Hairer website

Autres

- <http://www.unige.ch/~hairer/software.html>
- Programmes développés par le groupe autour de Ernst Hairer et Gerhard Wanner à l'université de Genève
- Plupart des programmes en FORTRAN 77, certains aussi en MATLAB
- Rubriques d'un intérêt particulier :
 - *Nonstiff Differential Equations*, incluant les routines `dopri5` et `dop853` (des Dormand-Prince d'ordres 5(4) et 8(5,3), resp.);
 - *Stiff Differential Equations and Differential-Algebraic Problems*, avec `radau` (et quelques variantes), l'un des intégrateurs les plus performants¹ pour des problèmes raides.

1. probablement même *le* plus performant

Autres

Méthodes
numériques et
éléments de
programmation

Guy
Munhoven

Netlib

Hairer website

Autres

- Qualité d'information très variable (beaucoup d'URL "mortes", pas toujours bien maintenues à jour, souvent moins bien organisées que Netlib) mais collections parfois utiles quand même.
- Alan Miller's Fortran Software (<http://jblevins.org/mirror/amiller>)
- <http://www.fortran.com>
 - Liste *Fortran Tools, Libraries, and Applications Software* sous <http://www.fortran.com/tools>, incluant des liens vers d'autres collections de codes et sites d'information sur Fortran
- <http://www.fortranlib.com/freesoft.htm>
 - rubrique *Numerical/Statistical Calculation A-M* et *N-Z*
 - rubrique *Software Repositories*

- <http://www.fortran-2000.com/MichelList/index.html>
liste de ressources pour Fortran 90.
- <http://www.ifremer.fr/ditigo/molagnon/fortran90/contenu.html> reprend une liste d'utilitaires développés par Michel Olagnon
- <http://www.dmoz.org/Computers/Programming/Languages/Fortran/>