

Bibliothèques de calcul scientifique : Généralités et applications au domaine des plasmas

Bernard DUSSOUBS

*Institut Jean Lamour, UMR 7198 CNRS – Université de Lorraine
Parc de Saurupt, CS 50840, 54011 Nancy Cedex, France.
courriel : bernard.dussoubs@univ-lorraine.fr*

Les bibliothèques numériques sont un outil très utile dans le domaine du calcul scientifique : elles permettent de réduire le temps de développement (en capitalisant et réutilisant le code développé par ailleurs) ; elles aident à assurer une meilleure performance tout en assurant la portabilité entre variables et systèmes ; elles permettent de fiabiliser les codes de calcul ; enfin la communauté d'utilisateurs et leur support sont disponibles pour fournir une aide à l'utilisation.

Pour une large gamme de problèmes rencontrés en calcul scientifique, il existe des bibliothèques numériques. Elles permettent ainsi de répondre à des besoins récurrents concernant l'algèbre linéaire (résolution de problèmes à matrices denses ou creuses), la résolution de systèmes linéaires (méthodes directes ou itératives), la résolution d'équations aux dérivées partielles ou d'équations différentielles ordinaires, le calcul de valeurs propres et vecteurs propres, la détermination de transformée de Fourier, l'optimisation, etc. Dans le domaine du calcul parallèle, ce sont des bibliothèques numériques qui permettent la gestion des communications (OpenMP, MPI, etc.). Dans le calcul HPC (Calcul : Haute Performance), pourvoyeur de grandes quantités de données, la gestion optimale des entrées-sorties (via des formats normalisés tels que HDF5 ou XML) est également gérée par des bibliothèques.

Le but de cette présentation est de montrer l'intérêt d'utiliser des bibliothèques numériques. Un certain nombre d'équations qui interviennent dans le domaine des plasmas seront d'abord listées, avec les méthodes numériques qu'elles mettent en jeu et les besoins en bibliothèques qui en découlent. A travers un premier exemple simple (produit matriciel), on verra l'intérêt pratique d'utiliser une bibliothèque. L'interfaçage des bibliothèques (dans le cas où plusieurs langages de programmation sont mis en jeu), leur optimisation, leur compilation et leur utilisation pratique seront ensuite abordés. Une liste des principales bibliothèques numériques, classées par thématique, sera présentée par la suite. En conclusion, l'intérêt des bibliothèques numériques est évident, mais quelques points de difficulté sont à garder en tête et un investissement humain est souvent nécessaire pour en profiter au mieux.