

Clusters de Calcul & bibliothèques.

7 octobre 2009

Clusters de
Calcul &
bibliothèques.

Des bibliothèques
pour quoi faire ?

Structure d'un
code de calcul

Classification des
bibliothèques :

Du point de vue
applicatif

Du point de vue
de la disponibilité

Du point de vue
des langages

Licences

Un exemple
type : Lapack &
Atlas

Installations

Bibliothèques
packagées

Installation à
partir du source

Cas particuliers .

Kit de survie

- 1 Des bibliothèques pour quoi faire ?
- 2 Structure d'un code de calcul
- 3 Classification des bibliothèques :
 - Du point de vue applicatif
 - Du point de vue de la disponibilité
 - Du point de vue des langages
 - Licences
- 4 Un exemple type : Lapack & Atlas
- 5 Installations
 - Bibliothèques packagées
 - Installation à partir du source
 - Cas particuliers .
- 6 Kit de survie

Clusters de
Calcul &
bibliothèques.

Des bibliothèques
pour quoi faire ?

Structure d'un
code de calcul

Classification des
bibliothèques :

Du point de vue
applicatif
Du point de vue
de la disponibilité
Du point de vue
des langages
Licences

Un exemple
type : Lapack &
Atlas

Installations

Bibliothèques
packagées
Installation à
partir du source
Cas particuliers .

Kit de survie

Ce qu'on ne veut pas redévelopper :

- parce qu'on n'en a pas le temps
- pour ne pas repartir de zéro.
- parce que l'écriture de certains codes est très spécialisée.

Clusters de
Calcul &
bibliothèques.

Des bibliothèques
pour quoi faire ?

Structure d'un
code de calcul

Classification des
bibliothèques :

Du point de vue
applicatif
Du point de vue
de la disponibilité
Du point de vue
des langages
Licences

Un exemple
type : Lapack &
Atlas

Installations

Bibliothèques
packagées
Installation à
partir du source
Cas particuliers .

Kit de survie

Règle générale

On passe le plus clair du temps dans de *petites* parties du code.

Clusters de
Calcul &
bibliothèques.

Des bibliothèques
pour quoi faire ?

Structure d'un
code de calcul

Classification des
bibliothèques :

Du point de vue
applicatif

Du point de vue
de la disponibilité

Du point de vue
des langages

Licences

Un exemple
type : Lapack &
Atlas

Installations

Bibliothèques
packagées

Installation à
partir du source

Cas particuliers .

Kit de survie

Règle générale

On passe le plus clair du temps dans de *petites* parties du code.

Un code de calcul scientifique peut être vu comme un ensemble de *boucles* imbriquées.

Clusters de
Calcul &
bibliothèques.

Des bibliothèques
pour quoi faire ?

Structure d'un
code de calcul

Classification des
bibliothèques :

Du point de vue
applicatif

Du point de vue
de la disponibilité

Du point de vue
des langages

Licences

Un exemple
type : Lapack &
Atlas

Installations

Bibliothèques
packagées

Installation à
partir du source

Cas particuliers .

Kit de survie

Exemple

$$\frac{du}{dt} = F(u). \quad (1)$$

ou est un vecteur.

Clusters de
Calcul &
bibliothèques.

Des bibliothèques
pour quoi faire ?

Structure d'un
code de calcul

Classification des
bibliothèques :

- Du point de vue applicatif
- Du point de vue de la disponibilité
- Du point de vue des langages
- Licences

Un exemple
type : Lapack &
Atlas

Installations

- Bibliothèques packagées
- Installation à partir du source
- Cas particuliers .

Kit de survie

Exemple

$$\frac{du}{dt} = F(u). \quad (1)$$

ou est un vecteur. Passage de t à $t + h$:

- boucle sur :
 - calcul de $A_{i,j} = \frac{\partial F(u)_i}{\partial u_j}$.
 - calcul de $F(u)$.
 - résolution du système linéaire $AX = F(u)$
 - $U := U - X$.

La totalité de cette procédure peut être une routine(=procédure d'une bibliothèque), mais surtout la résolution du système linéaire le sera.

Clusters de
Calcul &
bibliothèques.

Des bibliothèques
pour quoi faire ?

Structure d'un
code de calcul

Classification des
bibliothèques :

Du point de vue
applicatif
Du point de vue
de la disponibilité
Du point de vue
des langages
Licences

Un exemple
type : Lapack &
Atlas

Installations

Bibliothèques
packagées
Installation à
partir du source
Cas particuliers .

Kit de survie

Attention !

- vrai pour le *Calcul scientifique* : modélisation EDPs, statistiques, modélisation stochastique.

Clusters de
Calcul &
bibliothèques.

Des bibliothèques
pour quoi faire ?

Structure d'un
code de calcul

Classification des
bibliothèques :

Du point de vue
applicatif

Du point de vue
de la disponibilité

Du point de vue
des langages

Licences

Un exemple
type : Lapack &
Atlas

Installations

Bibliothèques
packagées

Installation à
partir du source

Cas particuliers .

Kit de survie

Attention !

- vrai pour le *Calcul scientifique* : modélisation EDPs, statistiques, modélisation stochastique. (Programmes peu ou pas récursifs).
- faux (partiellement) pour le calcul formel (Exemple : Sage). Parcours d'arbres, récursion (Lisp).

Clusters de
Calcul &
bibliothèques.

Des bibliothèques
pour quoi faire ?

Structure d'un
code de calcul

Classification des
bibliothèques :

Du point de vue
applicatif
Du point de vue
de la disponibilité
Du point de vue
des langages
Licences

Un exemple
type : Lapack &
Atlas

Installations

Bibliothèques
packagées
Installation à
partir du source
Cas particuliers .

Kit de survie

Du point de vue applicatif

- calcul pur : systèmes linéaires, FFT, générateurs aléatoires, résolution d'équations différentielles ordinaires, optimisation.

Clusters de
Calcul &
bibliothèques.

Des bibliothèques
pour quoi faire ?

Structure d'un
code de calcul

Classification des
bibliothèques :

**Du point de vue
applicatif**

Du point de vue
de la disponibilité

Du point de vue
des langages

Licences

Un exemple
type : Lapack &
Atlas

Installations

Bibliothèques
packagées

Installation à
partir du source

Cas particuliers .

Kit de survie

Du point de vue applicatif

- calcul pur : systèmes linéaires, FFT, générateurs aléatoires, résolution d'équations différentielles ordinaires, optimisation.
- services système. Exemple : mesure du temps, xml

Clusters de
Calcul &
bibliothèques.

Des bibliothèques
pour quoi faire ?

Structure d'un
code de calcul

Classification des
bibliothèques :

**Du point de vue
applicatif**

Du point de vue
de la disponibilité

Du point de vue
des langages

Licences

Un exemple
type : Lapack &
Atlas

Installations

Bibliothèques
packagées

Installation à
partir du source

Cas particuliers .

Kit de survie

Du point de vue applicatif

- calcul pur : systèmes linéaires, FFT, générateurs aléatoires, résolution d'équations différentielles ordinaires, optimisation.
- services système. Exemple : mesure du temps, xml
- communication (mpi...)

Clusters de
Calcul &
bibliothèques.

Des bibliothèques
pour quoi faire ?

Structure d'un
code de calcul

Classification des
bibliothèques :

**Du point de vue
applicatif**

Du point de vue
de la disponibilité

Du point de vue
des langages

Licences

Un exemple
type : Lapack &
Atlas

Installations

Bibliothèques
packagées

Installation à
partir du source

Cas particuliers .

Kit de survie

Du point de vue applicatif

- calcul pur : systèmes linéaires, FFT, générateurs aléatoires, résolution d'équations différentielles ordinaires, optimisation.
- services système. Exemple : mesure du temps, xml
- communication (mpi...)
- post-traitement. Exemple : fichiers normalisés (hdf5), visualisation (vtk, paraview).

Clusters de
Calcul &
bibliothèques.

Des bibliothèques
pour quoi faire ?

Structure d'un
code de calcul

Classification des
bibliothèques :

**Du point de vue
applicatif**

Du point de vue
de la disponibilité

Du point de vue
des langages

Licences

Un exemple
type : Lapack &
Atlas

Installations

Bibliothèques
packagées

Installation à
partir du source

Cas particuliers .

Kit de survie

Du point de vue de la disponibilité

- bibliothèques packagées dans les distributions Linux,
- bibliothèques fournies en source.

Clusters de
Calcul &
bibliothèques.

Des bibliothèques
pour quoi faire ?

Structure d'un
code de calcul

Classification des
bibliothèques :

Du point de vue
applicatif

**Du point de vue
de la disponibilité**

Du point de vue
des langages

Licences

Un exemple
type : Lapack &
Atlas

Installations

Bibliothèques
packagées

Installation à
partir du source

Cas particuliers .

Kit de survie

Poids de l'histoire : fortran 77

Premières bibliothèques : utilisation de la compilation séparée en Fortran.

Les procédures (=subroutine) ne fournissent pas de descripteur de l'interface au programme appelant.

Clusters de
Calcul &
bibliothèques.

Des bibliothèques
pour quoi faire ?

Structure d'un
code de calcul

Classification des
bibliothèques :

Du point de vue
applicatif

Du point de vue
de la disponibilité

**Du point de vue
des langages**

Licences

Un exemple
type : Lapack &
Atlas

Installations

Bibliothèques
packagées

Installation à
partir du source

Cas particuliers .

Kit de survie

Poids de l'histoire : fortran 77

Premières bibliothèques : utilisation de la compilation séparée en Fortran.

Les procédures (=subroutine) ne fournissent pas de descripteur de l'interface au programme appelant. Possibilités de fabriquer des paquets binaires indépendants (l'éditeur de liens se charge de tout assembler).

Clusters de
Calcul &
bibliothèques.

Des bibliothèques
pour quoi faire ?

Structure d'un
code de calcul

Classification des
bibliothèques :

Du point de vue
applicatif

Du point de vue
de la disponibilité

**Du point de vue
des langages**

Licences

Un exemple
type : Lapack &
Atlas

Installations

Bibliothèques
packagées

Installation à
partir du source

Cas particuliers .

Kit de survie

- avantage 1 : facile à interfacer avec C ou d'autres langages (Python) en écrivant une interface.

Clusters de
Calcul &
bibliothèques.

Des bibliothèques
pour quoi faire ?

Structure d'un
code de calcul

Classification des
bibliothèques :

Du point de vue
applicatif

Du point de vue
de la disponibilité

**Du point de vue
des langages**

Licences

Un exemple
type : Lapack &
Atlas

Installations

Bibliothèques
packagées

Installation à
partir du source

Cas particuliers .

Kit de survie

- avantage 1 : facile à interfacer avec C ou d'autres langages (Python) en écrivant une interface.
- avantage 2 : excellente optimisation : imbatale.
- avantage 3 : vieux codes, libres : très testés.

Clusters de
Calcul &
bibliothèques.

Des bibliothèques
pour quoi faire ?

Structure d'un
code de calcul

Classification des
bibliothèques :

Du point de vue
applicatif

Du point de vue
de la disponibilité

**Du point de vue
des langages**

Licences

Un exemple
type : Lapack &
Atlas

Installations

Bibliothèques
packagées

Installation à
partir du source

Cas particuliers .

Kit de survie

- avantage 1 : facile à interfacer avec C ou d'autres langages (Python) en écrivant une interface.
- avantage 2 : excellente optimisation : imbatale.
- avantage 3 : vieux codes, libres : très testés.
- inconvénient 1 : erreurs faciles à faire, difficiles à détecter.
- inconvénient 2 : vieux langage.

Clusters de
Calcul &
bibliothèques.

Des bibliothèques
pour quoi faire ?

Structure d'un
code de calcul

Classification des
bibliothèques :

Du point de vue
applicatif

Du point de vue
de la disponibilité

**Du point de vue
des langages**

Licences

Un exemple
type : Lapack &
Atlas

Installations

Bibliothèques
packagées

Installation à
partir du source

Cas particuliers .

Kit de survie

- avantage 1 : facile à interfacier avec C ou d'autres langages (Python) en écrivant une interface.
- avantage 2 : excellente optimisation : imbatale.
- avantage 3 : vieux codes, libres : très testés.
- inconvénient 1 : erreurs faciles à faire, difficiles à détecter.
- inconvénient 2 : vieux langage.

Exemple type : Lapack.

Paquets de fichiers .f à compiler et à transformer en bibliothèque.

Clusters de
Calcul &
bibliothèques.

Des bibliothèques
pour quoi faire ?

Structure d'un
code de calcul

Classification des
bibliothèques :

Du point de vue
applicatif
Du point de vue
de la disponibilité
**Du point de vue
des langages**
Licences

Un exemple
type : Lapack &
Atlas

Installations

Bibliothèques
packagées
Installation à
partir du source
Cas particuliers .

Kit de survie

C et C++

fichiers .h (.hpp) et .c (.cc, .cpp).

Clusters de
Calcul &
bibliothèques.

Des bibliothèques
pour quoi faire ?

Structure d'un
code de calcul

Classification des
bibliothèques :

Du point de vue
applicatif

Du point de vue
de la disponibilité

**Du point de vue
des langages**

Licences

Un exemple
type : Lapack &
Atlas

Installations

Bibliothèques
packagées

Installation à
partir du source

Cas particuliers .

Kit de survie

C et C++

fichiers .h (.hpp) et .c (.cc, .cpp).

- .h : doit être accessible aux programmes appelants,
- .c idem .f

Clusters de
Calcul &
bibliothèques.

Des bibliothèques
pour quoi faire ?

Structure d'un
code de calcul

Classification des
bibliothèques :

Du point de vue
applicatif
Du point de vue
de la disponibilité
**Du point de vue
des langages**
Licences

Un exemple
type : Lapack &
Atlas

Installations

Bibliothèques
packagées
Installation à
partir du source
Cas particuliers .

Kit de survie

C et C++

fichiers .h (.hpp) et .c (.cc, .cpp).

- .h : doit être accessible aux programmes appelants,
- .c idem .f

Interfaces fournies vers d'autres langages (Fortran).

Clusters de
Calcul &
bibliothèques.

Des bibliothèques
pour quoi faire ?

Structure d'un
code de calcul

Classification des
bibliothèques :

Du point de vue
applicatif

Du point de vue
de la disponibilité

**Du point de vue
des langages**

Licences

Un exemple
type : Lapack &
Atlas

Installations

Bibliothèques
packagées

Installation à
partir du source

Cas particuliers .

Kit de survie

C++

Bibliothèques génériques. Exemple `array<pommes>`,
`array<poires>`, etc...

Clusters de
Calcul &
bibliothèques.

Des bibliothèques
pour quoi faire ?

Structure d'un
code de calcul

Classification des
bibliothèques :

Du point de vue
applicatif

Du point de vue
de la disponibilité

**Du point de vue
des langages**

Licences

Un exemple
type : Lapack &
Atlas

Installations

Bibliothèques
packagées

Installation à
partir du source

Cas particuliers .

Kit de survie

C++

Bibliothèques génériques. Exemple `array<pommes>`,
`array<poires>`, etc...

Pas de compilation séparée possible. Une bibliothèque=
ensemble de `.h`

Cas type : `stl`, `boost`, `blitz++`.

Clusters de
Calcul &
bibliothèques.

Des bibliothèques
pour quoi faire ?

Structure d'un
code de calcul

Classification des
bibliothèques :

Du point de vue
applicatif

Du point de vue
de la disponibilité

**Du point de vue
des langages**

Licences

Un exemple
type : `Lapack &
Atlas`

Installations

Bibliothèques
packagées

Installation à
partir du source

Cas particuliers .

Kit de survie

Python

Facilités pour interfaces Python avec *toutes* les bibliothèques
C, C++ et Fortran !
Stock considérable.
En général une bibliothèque fait l'interface avec...une
bibliothèque.

Clusters de
Calcul &
bibliothèques.

Des bibliothèques
pour quoi faire ?

Structure d'un
code de calcul

Classification des
bibliothèques :

Du point de vue
applicatif

Du point de vue
de la disponibilité

**Du point de vue
des langages**

Licences

Un exemple
type : Lapack &
Atlas

Installations

Bibliothèques
packagées

Installation à
partir du source

Cas particuliers .

Kit de survie

Licences

- Libres ou commerciales.

Clusters de
Calcul &
bibliothèques.

Des bibliothèques
pour quoi faire ?

Structure d'un
code de calcul

Classification des
bibliothèques :

Du point de vue
applicatif

Du point de vue
de la disponibilité

Du point de vue
des langages

Licences

Un exemple
type : Lapack &
Atlas

Installations

Bibliothèques
packagées

Installation à
partir du source

Cas particuliers .

Kit de survie

Licences

- Libres ou commerciales.
- libres : licence gpl ou autre.

Clusters de
Calcul &
bibliothèques.

Des bibliothèques
pour quoi faire ?

Structure d'un
code de calcul

Classification des
bibliothèques :

Du point de vue
applicatif

Du point de vue
de la disponibilité

Du point de vue
des langages

Licences

Un exemple
type : Lapack &
Atlas

Installations

Bibliothèques
packagées

Installation à
partir du source

Cas particuliers .

Kit de survie

Licences

- Libres ou commerciales.
- libres : licence gpl ou autre.
- Attention aux vieilles bibliothèques : licence souvent pas définie. A considérer comme *propriétaires*.

Clusters de
Calcul &
bibliothèques.

Des bibliothèques
pour quoi faire ?

Structure d'un
code de calcul

Classification des
bibliothèques :

Du point de vue
applicatif

Du point de vue
de la disponibilité

Du point de vue
des langages

Licences

Un exemple
type : Lapack &
Atlas

Installations

Bibliothèques
packagées

Installation à
partir du source

Cas particuliers .

Kit de survie

Licences

- Libres ou commerciales.
- libres : licence gpl ou autre.
- Attention aux vieilles bibliothèques : licence souvent pas définie. A considérer comme *propriétaires*.
- Attention à la redistribution.

Clusters de
Calcul &
bibliothèques.

Des bibliothèques
pour quoi faire ?

Structure d'un
code de calcul

Classification des
bibliothèques :

Du point de vue
applicatif

Du point de vue
de la disponibilité

Du point de vue
des langages

Licences

Un exemple
type : Lapack &
Atlas

Installations

Bibliothèques
packagées

Installation à
partir du source

Cas particuliers .

Kit de survie

Un exemple type : Lapack & Atlas

- Lapack : algèbre linéaire sur des matrices simples (pleines ou bandes).

Clusters de
Calcul &
bibliothèques.

Des bibliothèques
pour quoi faire ?

Structure d'un
code de calcul

Classification des
bibliothèques :

Du point de vue
applicatif

Du point de vue
de la disponibilité

Du point de vue
des langages

Licences

Un exemple
type : Lapack &
Atlas

Installations

Bibliothèques
packagées

Installation à
partir du source

Cas particuliers .

Kit de survie

Un exemple type : Lapack & Atlas

- Lapack : algèbre linéaire sur des matrices simples (pleines ou bandes).
 - fortran 77 et *toujours en évolution*.
 - fiable !
 - opérations de base dédiées aux BLAS.

Clusters de
Calcul &
bibliothèques.

Des bibliothèques
pour quoi faire ?

Structure d'un
code de calcul

Classification des
bibliothèques :

Du point de vue
applicatif
Du point de vue
de la disponibilité
Du point de vue
des langages
Licences

Un exemple
type : Lapack &
Atlas

Installations

Bibliothèques
packagées
Installation à
partir du source
Cas particuliers .

Kit de survie

Un exemple type : Lapack & Atlas

- Lapack : algèbre linéaire sur des matrices simples (pleines ou bandes).
 - fortran 77 et *toujours en évolution*.
 - fiable !
 - opérations de base dédiées aux BLAS.
- Atlas : une implantation libre et très performante des BLAS, indépendante de la machine.

Clusters de
Calcul &
bibliothèques.

Des bibliothèques
pour quoi faire ?

Structure d'un
code de calcul

Classification des
bibliothèques :

Du point de vue
applicatif
Du point de vue
de la disponibilité
Du point de vue
des langages
Licences

Un exemple
type : Lapack &
Atlas

Installations

Bibliothèques
packagées
Installation à
partir du source
Cas particuliers .

Kit de survie

Bibliothèques packagées : exemple des systèmes “Debian like”.

DEUX packages :

- le package binaire, utilisée par ld.
- le package dev, utilisé dans les codes en développement (.h à inclure).

Clusters de
Calcul &
bibliothèques.

Des bibliothèques
pour quoi faire ?

Structure d'un
code de calcul

Classification des
bibliothèques :

Du point de vue
applicatif
Du point de vue
de la disponibilité
Du point de vue
des langages
Licences

Un exemple
type : Lapack &
Atlas

Installations

**Bibliothèques
packagées**
Installation à
partir du source
Cas particuliers .

Kit de survie

Bibliothèques packagées : exemple des systèmes “Debian like”.

DEUX packages :

- le package binaire, utilisée par ld.
- le package dev, utilisé dans les codes en développement (.h à inclure).

Exemple : apt-cache search superlu :

```
libsuperlu3 libsuperlu3.dev
```

Clusters de
Calcul &
bibliothèques.

Des bibliothèques
pour quoi faire ?

Structure d'un
code de calcul

Classification des
bibliothèques :

Du point de vue
applicatif
Du point de vue
de la disponibilité
Du point de vue
des langages
Licences

Un exemple
type : Lapack &
Atlas

Installations

**Bibliothèques
packagées**
Installation à
partir du source
Cas particuliers .

Kit de survie

Bibliothèques packagées : exemple des systèmes “Debian like”.

DEUX packages :

- le package binaire, utilisée par ld.
- le package dev, utilisé dans les codes en développement (.h à inclure).

Exemple : apt-cache search superlu :

```
libsuperlu3 libsuperlu3.dev
```

Clusters de
Calcul &
bibliothèques.

Des bibliothèques
pour quoi faire ?

Structure d'un
code de calcul

Classification des
bibliothèques :

Du point de vue
applicatif
Du point de vue
de la disponibilité
Du point de vue
des langages
Licences

Un exemple
type : Lapack &
Atlas

Installations

**Bibliothèques
packagées**
Installation à
partir du source
Cas particuliers .

Kit de survie

Bibliothèques packagées : exemple des systèmes “Debian like”.

DEUX packages :

- le package binaire, utilisée par ld.
- le package dev, utilisé dans les codes en développement (.h à inclure).

Exemple : apt-cache search superlu :

```
libsuperlu3 libsuperlu3.dev
```

la bibliothèque binaire va dans /usr/lib et le “dev” dans /usr/include.

Clusters de
Calcul &
bibliothèques.

Des bibliothèques
pour quoi faire ?

Structure d'un
code de calcul

Classification des
bibliothèques :

Du point de vue
applicatif
Du point de vue
de la disponibilité
Du point de vue
des langages
Licences

Un exemple
type : Lapack &
Atlas

Installations

**Bibliothèques
packagées**
Installation à
partir du source
Cas particuliers .

Kit de survie

Bibliothèques packagées

Attention : compilation indépendante de l'architecture :

Clusters de
Calcul &
bibliothèques.

Des bibliothèques
pour quoi faire ?

Structure d'un
code de calcul

Classification des
bibliothèques :

Du point de vue
applicatif

Du point de vue
de la disponibilité

Du point de vue
des langages

Licences

Un exemple
type : Lapack &
Atlas

Installations

**Bibliothèques
packagées**

Installation à
partir du source

Cas particuliers .

Kit de survie

Bibliothèques packagées

Attention : compilation indépendante de l'architecture : pas toujours optimale.

Clusters de
Calcul &
bibliothèques.

Des bibliothèques
pour quoi faire ?

Structure d'un
code de calcul

Classification des
bibliothèques :

Du point de vue
applicatif

Du point de vue
de la disponibilité

Du point de vue
des langages

Licences

Un exemple
type : Lapack &
Atlas

Installations

**Bibliothèques
packagées**

Installation à
partir du source

Cas particuliers .

Kit de survie

Bibliothèques packagées

Attention : compilation indépendante de l'architecture : pas toujours optimale.

Cas typique : ATLAS. Recompiler !

Clusters de
Calcul &
bibliothèques.

Des bibliothèques
pour quoi faire ?

Structure d'un
code de calcul

Classification des
bibliothèques :

Du point de vue
applicatif

Du point de vue
de la disponibilité

Du point de vue
des langages

Licences

Un exemple
type : Lapack &
Atlas

Installations

**Bibliothèques
packagées**

Installation à
partir du source

Cas particuliers .

Kit de survie

Installation à partir du source

- fichier tar.gz

Clusters de
Calcul &
bibliothèques.

Des bibliothèques
pour quoi faire ?

Structure d'un
code de calcul

Classification des
bibliothèques :

Du point de vue
applicatif

Du point de vue
de la disponibilité

Du point de vue
des langages

Licences

Un exemple
type : Lapack &
Atlas

Installations

Bibliothèques
packagées

**Installation à
partir du source**

Cas particuliers .

Kit de survie

Installation à partir du source

- fichier tar.gz
- configure, make, make install

Clusters de
Calcul &
bibliothèques.

Des bibliothèques
pour quoi faire ?

Structure d'un
code de calcul

Classification des
bibliothèques :

Du point de vue
applicatif

Du point de vue
de la disponibilité

Du point de vue
des langages

Licences

Un exemple
type : Lapack &
Atlas

Installations

Bibliothèques
packagées

**Installation à
partir du source**

Cas particuliers .

Kit de survie

Installation à partir du source

- fichier tar.gz
- configure, make, make install
autre outils possibles : cmake par exemple.

Clusters de
Calcul &
bibliothèques.

Des bibliothèques
pour quoi faire ?

Structure d'un
code de calcul

Classification des
bibliothèques :

Du point de vue
applicatif

Du point de vue
de la disponibilité

Du point de vue
des langages

Licences

Un exemple
type : Lapack &
Atlas

Installations

Bibliothèques
packagées

**Installation à
partir du source**

Cas particuliers .

Kit de survie

Installation à partir du source

- fichier tar.gz
- configure, make, make install
autre outils possibles : cmake par exemple.
- à la main (il y a quand même en général un Makefile) :
 - définition des options du compilateur

Clusters de
Calcul &
bibliothèques.

Des bibliothèques
pour quoi faire ?

Structure d'un
code de calcul

Classification des
bibliothèques :

Du point de vue
applicatif
Du point de vue
de la disponibilité
Du point de vue
des langages
Licences

Un exemple
type : Lapack &
Atlas

Installations

Bibliothèques
packagées
**Installation à
partir du source**
Cas particuliers .

Kit de survie

Installation à partir du source

- fichier tar.gz
- configure, make, make install
autre outils possibles : cmake par exemple.
- à la main (il y a quand même en général un Makefile) :
 - définition des options du compilateur
 - lieu d'installation (/usr/local/lib, /usr/local/include)
 - création des bibliothèques statiques et/ou dynamiques
 - ajout éventuel de chemin à ld.

Clusters de
Calcul &
bibliothèques.

Des bibliothèques
pour quoi faire ?

Structure d'un
code de calcul

Classification des
bibliothèques :

Du point de vue
applicatif
Du point de vue
de la disponibilité
Du point de vue
des langages
Licences

Un exemple
type : Lapack &
Atlas

Installations

Bibliothèques
packagées
**Installation à
partir du source**
Cas particuliers .

Kit de survie

Atlas

La procédure d'installation calibre la bibliothèque pour l'architecture donnée (taille des caches).

Clusters de
Calcul &
bibliothèques.

Des bibliothèques
pour quoi faire ?

Structure d'un
code de calcul

Classification des
bibliothèques :

Du point de vue
applicatif

Du point de vue
de la disponibilité

Du point de vue
des langages

Licences

Un exemple
type : Lapack &
Atlas

Installations

Bibliothèques
packagées

Installation à
partir du source

Cas particuliers .

Kit de survie

Atlas

La procédure d'installation calibre la bibliothèque pour l'architecture donnée (taille des caches).
Suivre la *longue* procédure d'installation automatique.

Clusters de
Calcul &
bibliothèques.

Des bibliothèques
pour quoi faire ?

Structure d'un
code de calcul

Classification des
bibliothèques :

Du point de vue
applicatif
Du point de vue
de la disponibilité
Du point de vue
des langages
Licences

Un exemple
type : Lapack &
Atlas

Installations

Bibliothèques
packagées
Installation à
partir du source
Cas particuliers .

Kit de survie

Boost

Extensions de la STL.

Clusters de
Calcul &
bibliothèques.

Des bibliothèques
pour quoi faire ?

Structure d'un
code de calcul

Classification des
bibliothèques :

Du point de vue
applicatif

Du point de vue
de la disponibilité

Du point de vue
des langages

Licences

Un exemple
type : Lapack &
Atlas

Installations

Bibliothèques
packagées

Installation à
partir du source

Cas particuliers .

Kit de survie

Boost

Extensions de la STL.

Procédure très complexe. Vive les packages !

Clusters de
Calcul &
bibliothèques.

Des bibliothèques
pour quoi faire ?

Structure d'un
code de calcul

Classification des
bibliothèques :

Du point de vue
applicatif

Du point de vue
de la disponibilité

Du point de vue
des langages

Licences

Un exemple
type : Lapack &
Atlas

Installations

Bibliothèques
packagées

Installation à
partir du source

Cas particuliers .

Kit de survie

Boost

Extensions de la STL.

Procédure très complexe. Vive les packages !

Inconvénients des packages : *aucun* (.h).

Clusters de
Calcul &
bibliothèques.

Des bibliothèques
pour quoi faire ?

Structure d'un
code de calcul

Classification des
bibliothèques :

Du point de vue
applicatif
Du point de vue
de la disponibilité
Du point de vue
des langages
Licences

Un exemple
type : Lapack &
Atlas

Installations

Bibliothèques
packagées
Installation à
partir du source
Cas particuliers .

Kit de survie

Le minimum à installer

- Lapack, ATLAS, SuperLU.
- FFTW, fftpack (licence ?)
- hdf5
- mpi
- vtk.

Clusters de
Calcul &
bibliothèques.

Des bibliothèques
pour quoi faire ?

Structure d'un
code de calcul

Classification des
bibliothèques :

Du point de vue
applicatif
Du point de vue
de la disponibilité
Du point de vue
des langages
Licences

Un exemple
type : Lapack &
Atlas

Installations

Bibliothèques
packagées
Installation à
partir du source
Cas particuliers .

Kit de survie