

# Calcul scientifique

## CM 1

Uli Fahrenberg

Université Paris-Saclay

2025-6

# Aperçu

# Calcul scientifique ?

On veut

- prédire la météo
- prédire une réaction chimique
- simuler un système complexe

mais comment ?

Google sait

- donner de l'importance à des sites web

mais comment ?

# Calcul scientifique

- Méthodes itératives pour simulation numérique
- Résolution de systèmes d'équations linéaires à échelle
- Résolution des équa diff
- ...

# La programmation pour calcul scientifique

- FORTRAN (!)
- Matlab, Mathematica, Maple
- C, C++
- R
- Julia
- Python

# Infos pratiques

# Le cours

- ① Introduction & rappel algèbre linéaire
- ② jupyter, numpy, linalg
- ③ Transformations linéaires, vecteurs propres
- ④ Systèmes d'équations, décompositions
- ⑤ Méthodes itératives, simulation numérique
- ⑥ Méthode du gradient
- ⑦ Recuit simulé
- ⑧ CM 8 – TP 4 – CM 9 – TP 5

# Le cours

1 Introduction & rappel algèbre linéaire

2 jupyter, numpy, linalg

Devoir maison : programmation python & numpy

3 Transformations linéaires, vecteurs propres

TP 1 : Vecteurs propres

4 Systèmes d'équations, décompositions

TP 2 : Systèmes d'équations, conditionnement

5 Méthodes itératives, simulation numérique

Partiel : épreuve sur ordinateur

6 Méthode du gradient

7 Recuit simulé

TP 3 : Itération

8 CM 8 – TP 4 – CM 9 – TP 5

Examen : épreuve écrite

# Les notes

① Introduction & rappel algèbre linéaire

② jupyter, numpy, linalg

Devoir maison : programmation python & numpy

10 %

③ Transformations linéaires, vecteurs propres

TP 1 : Vecteurs propres

④ Systèmes d'équations, décompositions

TP 2 : Systèmes d'équations, conditionnement

⑤ Méthodes itératives, simulation numérique

Partiel : épreuve sur ordinateur

40 %

⑥ Méthode du gradient

⑦ Recuit simulé

TP 3 : Itération

⑧ CM 8 – TP 4 – CM 9 – TP 5

Devoir maison facultatif non-noté : préparation épreuve écrite

Examen : épreuve écrite

50 %

# Les profs



Alexis Aune  
TP G1



Uli Fahrenberg  
<https://ulifahrenberg.github.io/>  
uli@lmf.cnrs.fr  
CM, TP G5



Camille de Amorim  
TP G2



Thibaut Benjamin  
TP G3, G4

# La communication

- ecampus
  - forum Annonces
  - forum Discussion

# Programme d'aujourd'hui (double CM)

- ➊ Calcul scientifique : quoi ? pourquoi ? comment ?
- ➋ Petit rappel algèbre linéaire
- ➌ jupyter, numpy, linalg

# Calcul scientifique

# Calcul scientifique

C'est quoi **calcul scientifique** ??

# Calcul scientifique

C'est quoi **calcul scientifique** ??

- simulation numérique
- calcul grande échelle
- modélisation – analyse – calcul
- résolution des équa diff
- résolution de systèmes d'équations linéaires
- évaluer des probabilités
- ...

# Calcul scientifique & applications

Quelques **applications** du calcul scientifique ??

# Calcul scientifique & applications

Quelques **applications** du calcul scientifique ??

- prédire la météo (ou le climat !)
- finance (prédire les marchés !)
- chimie numérique
- biologie numérique
- systèmes complexes
- ...

# Ce cours

- Une grande partie : de l'algèbre linéaire
- Résolution de systèmes d'équations linéaires à échelle
- Méthodes itératives pour simulation numérique
- Optimisation
- ...

# Petit rappel algèbre linéaire

# Matrices

Qu'est-ce qu'une **matrice** ?

# Matrices

Qu'est-ce qu'une **matrice** ?

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & \dots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \dots & \dots & a_{mn} \end{bmatrix}$$

- un tableau de nombres (ici  $m \times n$ )
- un objet algébrique
- une application linéaire

# Matrices

Qu'est-ce qu'on peut **faire** avec des matrices ?

- les additionner : 
$$\begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 4 & 5 & 6 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 5 & 0 & 5 \\ 3 & -5 & 3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 6 & 2 & 8 \\ 7 & 0 & 9 \end{bmatrix}$$

- les multiplier : 
$$\begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 4 & 5 & 6 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \\ 5 & 6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 22 & 28 \\ 49 & 64 \end{bmatrix}$$

# Matrices

Qu'est-ce qu'on peut **faire** avec des matrices ?

- les additionner : 
$$\begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 4 & 5 & 6 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 5 & 0 & 5 \\ 3 & -5 & 3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 6 & 2 & 8 \\ 7 & 0 & 9 \end{bmatrix}$$
  - commutatif, associatif, élément neutre **0**
  - définit que si la même taille :  $(m \times n) + (m \times n)$
  
- les multiplier : 
$$\begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 4 & 5 & 6 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \\ 5 & 6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 22 & 28 \\ 49 & 64 \end{bmatrix}$$
  - associatif, pas commutatif, élément neutre **I**
  - définit que si tailles compatibles :  $(m \times n) \cdot (n \times p)$

# Matrices

Qu'est-ce qu'on peut **faire** avec des matrices ?

- les multiplier avec des vecteurs :

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11}v_1 + a_{12}v_2 + a_{13}v_3 \\ a_{21}v_1 + a_{22}v_2 + a_{23}v_3 \end{bmatrix}$$

- résoudre des systèmes linéaires :  $Ax = b$
- les invertir :  $Ax = b \iff x = A^{-1}b$ 
  - toujours une bonne idée ?

# Vecteurs

Qu'est-ce qu'un **vecteur** ?

# Vecteurs

Qu'est-ce qu'un **vecteur** ?

- une flèche qui indique une direction et dont la longueur mesure une intensité
- un tableau de nombres
- un objet algébrique

# Pour encore plus de rappel

Youtube 3blue1brown **Essence of linear algebra**

[https://youtu.be/fNk\\_zzaMoSs?si=jIEdOawPGzmxmmmm](https://youtu.be/fNk_zzaMoSs?si=jIEdOawPGzmxmmmm)

jupyter, numpy, linalg

# Jupyter notebooks

- ① Rappels sur les matrices
- ② Jupyter
- ③ Numpy
- ④ Linalg pour le calcul matriciel
- ⑤ Filtres
- ⑥ Manipulations

*That's all Folks!*