

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 équations différentielles
- ...

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



Camille de Amorim
TP G2



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



Thibaut Benjamin
TP G3, G4

La communication

- ecampus
 - forum Annonces
 - forum Discussion

Programme d'aujourd'hui (double CM)

- ① Calcul scientifique : quoi ? pourquoi ? comment ?
- ② Petit rappel algèbre linéaire
- ③ 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 équations 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 inverser : $Ax = b \iff x = A^{-1}b$
 - 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=jlEdOawPGzmxmmmm

jupyter, numpy, linalg

Jupyter notebooks

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

The image features a classic target graphic with concentric circles. The outer rings are a deep red, while the inner rings transition to a lighter red and finally to a solid dark blue center. The text "That's all Folks!" is written in a white, elegant cursive script, slanted diagonally across the center of the target.

That's all Folks!