

Modélisation Numérique en Physique (MNP)

UE LU2PY(2-4)22

Pacôme Delva

Sorbonne Université

22 septembre 2020



Responsable

Pacôme DELVA (`pacome.delva@sorbonne-universite.fr`)

Tél. 01 40 51 22 86

Gestionnaire pédagogique

Corinne Sandanassamy

(`corinne.sandanassamy@sorbonne-universite.fr`)

Couloir 23/33 – Étage 1 – Porte 112

Tél. 01 44 27 89 98

Un enjeu économique, scientifique et industriel

- **La météorologie** : un des utilisateurs civils les plus importants : les prévisions–recherches sur le réchauffement climatique
- **La matière condensée**, les matériaux et les nanosciences en physique et en chimie : une variété incroyable de problèmes mettant en jeu un grand nombre d'atomes.
- **Les sciences de la vie** : au niveau microscopique - molécules énormes, extraordinairement complexes.
- **Les sciences de l'ingénieur** : les simulations aérodynamiques pour prévoir–optimiser les caractéristiques d'un avion. EDF développe des calculs souvent très lourds.
- **La finance** : recrute des scientifiques capables de modéliser sur ordinateur.

C'est quoi un modèle ?

Un cadre représentatif, **idéalisé** et ouvert, reconnu **approximatif** et schématique mais jugé fécond par rapport à un but donné : prévoir, agir sur la nature, la connaître mieux, etc...

Exemple :

- **Modèle de Maxwell** (gaz parfait) : gaz = composé de petites sphères rigides qui s'entrechoquent comme des boules de billards, et dont le mouvement peut être décrit grâce aux lois de Newton (température, pression)
- **Fluide visqueux et conducteur de chaleur** : on prend en compte la taille des molécules et leurs collisions (viscosité, diffusivité)
- **Changement de phase gaz-liquide** : interactions entre molécules (van der Waals, 1873) (évaporation, condensation, ébullition)

Remarques sur les modèles

- Basés sur des **simplifications** des faits
- Étape clé dans la modélisation : **choix des objets**
- **Domaine de validité limité**
- Pas forcément correspondance entre éléments du modèle et faits observés (molécules idéalisées de Maxwell)
- **Modèle + mathématiques = prédictions quantitatives** de faits virtuels
- Les modèles complexes nécessitent un très grand nombre d'opérations, et de résoudre des équations qui n'ont pas de solution analytique \Rightarrow **méthodes numériques**

Objectifs d'apprentissage de l'UE

Science des données

- Les bases de Python
- Python intermédiaire

Modélisation

- Représentation numérique
- Modèle numérique
- Méthodes numériques

Gestion de projet

- Organisation
- Relationnel
- Communication

4 enseignant-chercheurs, 5 groupes de TP

Moodle

<https://moodle-sciences.upmc.fr/moodle-2020/course/view.php?id=2841>

Salles de Capsule : Bâtiment de l'Atrium

<http://www.capsule.sorbonne-universite.fr/fr/sallesequipees>

Attention : Vérifiez votre salle sur le planning, elle peut changer d'une séance à l'autre

https://moodle-sciences.upmc.fr/moodle-2020/pluginfile.php/377007/mod_resource/content/1/EdT_detaillées_2020_2021_Salles.pdf

Groupe	Enseignant	Horaires
PM1	Olivier MARTINEAU	Lundi 9h00-12h00 Mardi 14h00-17h00 2h de travail à la maison
PM2	Johan BISCARAS	
PM3	Pacôme DELVA	
PM4	Nicolas RAMBAUX	Mardi 9h00-12h00 Mercredi 9h00-12h00 2h de travail à la maison
PM5	Pacôme DELVA	

Organisation de l'UE

Le langage Python (2 semaines)

- Fondamentaux du langage et de quelques modules scientifiques : Numpy, Pandas et Matplotlib
- Très peu de physique, du cours, des exercices corrigés très simple et beaucoup d'autoévaluation

Modélisation numérique en physique (6 semaines)

- 6 thématiques de physique numérique (1/semaine)
- illustrations tirées de la physique de L1 et L2
- 1 partie cours/exercices, 1 partie mini-projet

Projet (5 semaines)

Un projet numérique très libre en équipe



Python : c'est quoi ?

Python est un langage portable, extensible, gratuit, qui permet différentes approches de la programmation. Python est développé depuis 1989 par Guido van Rossum et de nombreux contributeurs bénévoles.

- Python est **portable** : on peut l'installer sur beaucoup de systèmes d'exploitation différents
- Python est **gratuit** : cependant on peut l'utiliser dans des projets commerciaux
- Python convient pour de petits scripts (=programmes) aussi bien que pour des programmes très complexes
- La syntaxe de Python est **simple** et utilise des types de données évoluées → programmes compacts et lisibles
- Python est **extensible** : facilement interfaçable avec des programmes d'autres langages (C, Fortran, ...)
- De **nombreuses bibliothèques** de programmes ou **modules** sont développés pour différents domaines (plusieurs milliers !)

Modules d'apprentissage (semaines 1 et 2)

Suite de 11 modules de $\sim 1h30$, sous la forme de Notebooks Jupyter, contenant du cours, des illustrations, et des petits exercices.

Les bases de Python

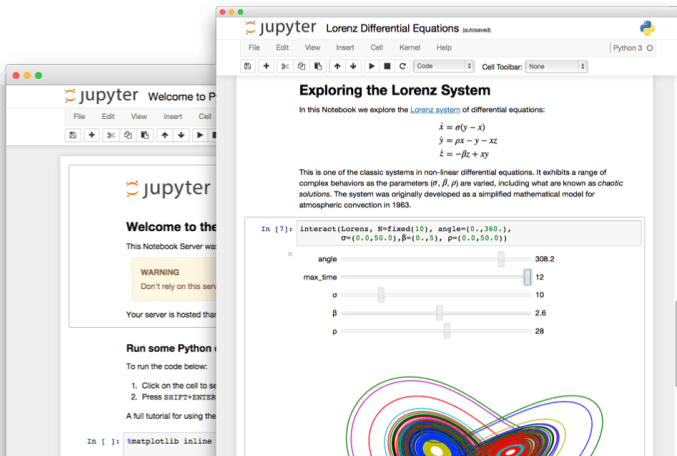
- Première prise en main de Python
- Les listes Python
- Fonctions et modules
- Le module Numpy
- Les fonctions de Numpy
- Le module Matplotlib

Python intermédiaire

- Dictionnaires et Pandas
- Logique, structures de contrôle et filtrage
- Itération
- Fonctions
- Entrées-sorties

Jupyter Notebooks

*Jupyter permet de réaliser des calepins ou **notebooks**, c'est-à-dire des programmes contenant à la fois du texte et du code informatique. Ces calepins sont utilisés en science des données pour explorer et analyser des données.*



Comment utiliser Jupyter Notebook ?

Dans les salles Capsule

Ouvrir une session Windows : dans *Outils*, choisir *Jupyter Notebooks* ou bien *Jupyter Lab*

À la maison

- Avec le bureau virtuelle de Capsule, vous avez accès à votre environnement et vos fichiers comme en salle de cours :
<https://lutes.upmc.fr/bdl-ext.php>
- Vous pouvez installer *Jupyter Notebooks* sur votre ordinateur personnel. Cependant, il vous faut un moyen d'accéder à vos fichiers (Moodle, SSH, clé USB, etc. . .) → pour utilisateur avancé

Télécharger les calepins de l'UE

- Vous pouvez **télécharger tous les calepins de l'UE en une fois**, au début de l'année, avec le lien suivant
<https://github.com/phys-mod/site/tree/master/source/notebooks/notebooks.zip>
- Ces calepins ne contiennent pas les solutions aux exercices
- Ce sont dans ces calepins que vous travaillerez et que vous sauverez votre travail
- **Ces calepins sont personnels** et non évalués par l'enseignant

Corrections des calepins

- Les **corrections des calepins** sont disponible sur le site internet :
<https://phys-mod.readthedocs.io>
- Ces corrections vous servent, une fois que vous avez réaliser les exercices, à vous **auto-évaluer**

La gestion de votre apprentissage

Gestion des tâches et du progrès : Trello

- Vous progressez à votre rythme !
- L'enseignant accompagne votre apprentissage grâce à un tableau *Trello* : <https://trello.com/b/agvt2Cmq>

Apprentissage du cours

- Les calepins permettent de garder la trace de votre travail cependant...
- Comment retrouver rapidement les concepts et les fonctions appris pendant l'UE ?
 - Notes de cours écrites (cahier, répertoire, ...)
 - Notes de cours électroniques (Boostnote, ...)
 - Carte mentale (Mindmeister, ...)

Evaluation

Pendant la 3ème semaine de cours, **vous serez évalué sur les outils mis en place** pour gérer votre apprentissage :

- Utilisation de Trello
- Notes de cours

grille d'évaluation

Modélisation numérique en physique (1)

Suite de 6 séquences de physique numérique de $\sim 8h$ (semaines 3 à 8)

- ① La démarche de modélisation en physique
- ② Suites et relations de récurrence
- ③ Ajuster un modèle aux données expérimentales
- ④ Dérivation et intégration numérique
- ⑤ Systèmes d'équations différentielles linéaire
- ⑥ Systèmes d'équations non-linéaires

Cours (1h)

- concepts, syntaxe, méthodologie avec des illustrations simples sur Jupyter notebook
- Cours inversé à faire seul à la maison
- Reprise des notions en cours avec l'enseignant si nécessaire

Modélisation numérique en physique (2)

Entraînement (3h)

- **suite d'exercices** pour s'entraîner après le cours sur les notions du module sur Jupyter Notebook

Mini-projet individuel (4h)

- résolution de problème sur un sujet physique concret
- préparation de la physique du problème à la maison (1h)
- rédaction d'un compte-rendu à rendre sur Moodle
- pas de corrigé type
- **Le compte-rendu est évalué, il est individuel.** Un algorithme permet de détecter les similarités et les copier-coller entre tous les groupes et toutes les années de l'UE.

Évaluation formative

- Les **corrections des calepins** sont disponible sur le site internet : <https://phys-mod.readthedocs.io>
- Note de gestion du temps d'apprentissage

Évaluation certificative

- Notes d'implication dans les mini-projet (6 projets)

Chaque semaine l'enseignant fait un point avec l'étudiant sur l'avancement de son apprentissage ($\lesssim 30$ mn / étudiant) : ce qu'il a fait pendant la semaine écoulée et ce qu'il compte faire la semaine qui vient, quelles difficultés il rencontre, ...

Projet en équipe

Projet (semaines 9 à 12 ~ 35h de travail par étudiant)

- projet numérique mené par un groupe d'étudiants
- sujet libre (propositions si certains manquent d'inspiration)
- gestion de projet : objectifs explicités et suivi actif de l'enseignant

Évaluation

- grille d'évaluation avec objectifs détaillés par semaine
- présentation finale avec évaluation par les pairs

Exemples :

- entrée d'un météoroïde dans l'atmosphère terrestre
- théorie de Landau
- propagation d'une épidémie
- Automate cellulaire "jeu de la vie"
- Modélisation des bouchons
- Réaction chimique
- Collisions

- Chaque note est formée avec une **Grille d'évaluation**, disponibles sur Moodle
- Note de **contrôle continu (40/100)**
 - Note de gestion de l'apprentissage (10)
 - Notes de mini-projets ($30 = 6 \times 5$)
- Note de **projet (60/100)**
 - Organisation
 - Relationnel
 - Communication
 - Contenu
- **Seconde chance** : à la fin de l'année, une épreuve de seconde chance viendra remplacer la note de contrôle continu (si elle est meilleure)

Résumé des outils et supports

Jupyter Notebooks

- **Site internet** avec les calepins (avec les corrections) :
<https://phys-mod.readthedocs.io/>
- **Session Windows** en salle Capsule : *Jupyter Notebook* ou *Jupyter Lab*
- Session Windows avec le bureau virtuelle de Capsule :
<https://lutes.upmc.fr/bdl-ext.php>

Moodle

- **devoirs** : pour récupérer les mini-projets, retour de l'enseignant
- **forum** : problème avec le cours ou les outils
- **annonces** : communication avec les étudiants

Trello

- Gestion du **temps de l'apprentissage**
- Gestion du **projet**

À faire avant le prochain cours

- Créer mon compte Trello et rejoindre mon équipe (lien vers la notice)
- Choix d'un outil pour la prise de note
- Faire le 1er calepin *Première prise en main de Python* grâce au bureau virtuel de Capsule
- Si j'ai un problème, demander de l'aide sur le Forum Moodle

