

Objectifs

Les calculs numériques sur ordinateur sont, depuis déjà plusieurs décennies, incontournables pour les physiciens que ce soit les simulations Monte-Carlo ou de dynamique moléculaire, les calculs quantiques de types divers, ou les simulations de milieux continus. Il ne s'agit toutefois ni d'informatique à proprement parler, ni de mathématiques appliquées ou d'algorithmique, mais d'une démarche spécifique consistant à cerner les limites d'une solution analytique à un problème de physique donné, le reformuler en un problème susceptible d'une solution numérique, obtenir cette solution, évaluer la pertinence et la fiabilité du résultat, et enfin, tenter d'en tirer des conclusions physiques pertinentes. Ainsi, cette UE vise à rendre les étudiants autonomes dans la résolution numérique de problèmes physiques a priori non résolubles analytiquement. Les sujets sont choisis dans différents domaines d'une physique aussi contemporaine que possible.

Compétences attendues à la fin de l'UE :

Mise en œuvre numérique d'un problème physique

Thèmes abordés / Notions et contenus

- **Rappels pratiques** sur le système Unix/Linux, langage (Fortran/Python), édition/compilation/exécution, ainsi que :
 - Méthodes de recherche des zéros d'une fonction : application à l'étude des transitions de phase du 1er et 2e ordre (modèle de Landau).
 - Équations différentielles ordinaires : pendule forcé, chaîne de pendules. Illustration d'effets non-linéaires et de chaos déterministe.
 - Nombres et marches aléatoires, méthode Monte-Carlo. Application à divers problèmes physiques.

Prérequis

Il est souhaitable d'avoir déjà utilisé un langage de programmation ou d'avoir quelques notions d'algorithmique.

Niveau en physique et mathématiques normal en M1 :

Mécanique du point, énergie. Optique géométrique et interférentielle, électromagnétisme des diélectriques. Physique quantique, équation de Schrödinger. Équations différentielles, séries et transformées de Fourier, calculs matriciels, valeurs propres, matrices hermitiques.

Informations pratiques

Crédits

3 ECTS

Modalités d'enseignement

L'UE est enseignée à distance au premier semestre. Elle équivaut à 12h de cours et 16h de TP (numériques, à distance).

Modalités d'évaluation

- au cours du semestre, trois compte-rendus de TP, de moyenne TP
- un examen sur machine, de note E1

La note finale de l'UE est $N = 0,3*TP + 0,7*E1$.

En seconde session, une épreuve E2 remplace la note E1 dans la formule précédente.

Responsables de l'UE

Guillaume Ferlat / Simon Huppert

Adresse : Campus Pierre et Marie Curie, IMPMC, 23-24, 4^{ème} étage / INSP, 12-22, 5^{ème} étage

Tél : 01 44 27 98 22 / 01 44 27 28 55

Courriel : guillaume.ferlat@sorbonne-universite.fr / huppert@insp.jussieu.fr