PHY 3075 – Modélisation numérique en physique (3 crédits)

Normand Mousseau

Hiver 2024

Mis à jour le 4 décembre 2023

Horaire du cours

Mardi	15h30 – 16h20	A-2521.1, Complexe des sciences
Mercredi	10h30 – 12h20	B-2061, Complexe des sciences

Contact

Normand Mousseau	normand.mousseau@umontreal.ca	B-4415	514-343-6614
Aynour Koshravi	aynour.khosravi@umontreal.ca	B-4302-10	auxiliaire d'enseignement

Objectifs

La modélisation numérique joue un rôle essentiel en science, en général, et en physique, en particulier. De la physique de matière condensée à la théorie des cordes, en passant par l'astronomie, la physique des plasmas et la biophysique, la modélisation représente un outil indispensable qui permet de comprendre les expériences, expliciter les résultats théoriques et repousser les limites de nos connaissances.

Ce cours vous permettra d'apprendre à approcher et à résoudre un problème par la voie de la modélisation. Pour cela, vous verrez comment formuler une question de manière à l'approcher numériquement, vous apprendrez à maîtriser des techniques de base en solution d'équations différentielles, optimisation, simulation et apprentissage automatique, et à les appliquer à divers problèmes en physique.

Structure du cours

Ce cours, de trois crédits, consiste en deux cours en présentiel (pour un total de 3 heures), qui incluent présentations magistrales et discussion d'aspects techniques de programmation liés aux travaux et devoirs.

Ceux-ci incluront des problèmes spécifiques à résoudre et des projets qui s'étendront sur une ou deux semaines, selon le cas, afin de vous exposer à divers aspects de la modélisation.

Format du cours

Le cours est donné à raison de 3 heures par semaine et sera avant tout théorique. Les applications se feront par l'intermédiaire des travaux personnels.

Il y aura 4 devoirs/mini-projets à faire durant le cours en plus d'un projet final, bien plus élaboré et qui devra rassembler plusieurs éléments vus en classe. Ce projet sera évalué en deux parties.

Langage de programmation

Les codes utilisés dans ce cours seront développés par les étudiants, dans le langage de leur choix.

Contenu

Ce cours s'adresse à des étudiants ayant déjà une formation de base en programmation, tel que le cours PHY 1234. Il a pour but de familiariser les étudiants aux techniques d'analyse numérique et de simulation de base telles que

1. Différentiation et intégration
2. La résolution d'équations différentielles
3. La solution d'équations au dérivées partielles
4. Les approches Monte Carlo
5. Chaînes de Markoff et simulations Monte Carlo
6. La dynamique moléculaire,
7. Les méthodes d'optimisation
8. Ajustement de courbes et de données
9. Les méthodes d'apprentissage automatique, incluant réseaux de neurone

En parallèle, les étudiants apprendront à développer, tester et corriger un programme de modélisation ainsi qu'à analyser les résultats.

Manuels et notes de cours

Manuels recommandés

— Morten Hjorth-Jensen, *Computational physics*, Université d'Oslo (2015) (Ces notes de cours sont disponibles en ligne et sur Studium).
— Tao Pang, *An introduction to computational physics*, deuxième édition, Cambridge University Press (2006).

Manuel de référence

— Paul Charbonneau, *Notes de cours - modélisation numérique en physique*, janvier 2021. (sur Studium)
— W.H. Press, B.P. Flannery, S.A. Teukolsky and W.T. Vetterling, *Numerical Recipes, the art of scientific computing*, 3e édition, Cambridge University Press (2007). (Disponible entièrement en ligne - voir `http://numerical.recipes`)

Évaluation

De manière préliminaire, l'évaluation sera basée sur quatre composantes :

Participation au cours		5 %
Mini-projets et devoirs		45 %
Projet final	première partie	10 %
	deuxième partie	35 %
Présentation du projet final	5 %	

Le plagiat à l'Université de Montréal est sanctionné par le Règlement disciplinaire sur la fraude et le plagiat concernant les étudiants. Pour plus d'informations, voir le site `www.integrite.umontreal.ca`.