Fiche du cours

70 h

Titre :

PYS360 - Physique computationnelle (Python, NumPy, Pandas & SciPy)

Description :

Résoudre des problèmes de physique par le calcul numérique avec Python : EDO/EDP (Euler/RK, Crank–Nicolson, Poisson), algèbre linéaire creuse (CG/GMRES), FFT & signal, optimisation & problèmes inverses, Monte Carlo & incertitudes. Côté données : Pandas pour charger/nettoyer/joiner et analyser des séries expérimentales. Deux modules clés complètent le parcours : dynamique moléculaire (MD) avec Lennard-Jones, Velocity-Verlet, PBC, thermostats et observables (g(r), MSD, pression), puis une introduction computationnelle à la matière condensée (bandes E(k) & DOS, Ising 2D, S(k)). Focus qualité & reproductibilité (Jupyter, tests, unités/incertitudes) et figures “publication”. Capstone : simulation + validation d’un système physique réel.

Objectifs :

- Concevoir des modèles numériques stables et accurés et choisir les schémas adaptés (EDO/EDP).
- Manipuler NumPy (vectorisation) et Pandas (IO, nettoyage, séries temporelles) dans un pipeline scientifique.
- Résoudre EDO/EDP avec SciPy ; utiliser des solvers creux (CSR/CSC, CG/GMRES) pour grilles.*
- Analyser des signaux (FFT/filtrage) et résoudre des problèmes inverses (ajustement/régularisation).*
- Mettre en œuvre une MD simple (LJ), mesurer T, P, g(r), MSD/VACF et contrôler NVE/NVT.*
- Explorer des notions de matière condensée : bandes E(k), densité d’états (DOS), Ising 2D, lien g(r) ↔ S(k).*
- Produire un code reproductible (tests, doc, unités), des figures publication et un rapport clair.

Chapitres :

1. Environnement & qualité : conda/venv, Jupyter/VS Code, structure projet, pytest, pint/uncertainties, style “publication”.*
2. NumPy & perf : ndarrays, broadcasting, vectorisation, petit profilage (timeit/line_profiler).*
3. Pandas I : IO (CSV/HDF5), nettoyage (NA/outliers), join/groupby, mise au format.*
4. Pandas II – Séries temporelles : resampling, rolling/fenêtres, agrégations ; figures “publication”.*
5. EDO I : Euler/Heun/RK4, solve_ivp, erreurs locales/globales, choix du pas.*
6. EDO II (systèmes/raideur) : pendule non linéaire, RC/RLC, schémas implicites (aperçu).*

7. EDP I – Chaleur 1D : différences finies, CFL, explicite vs Crank–Nicolson, BC (Dirichlet/Neumann).*

8. EDP II – Poisson 2D & solvers creux : discrétisation, matrices creuses (CSR/CSC), Jacobi/Gauss–Seidel, CG/GMRES (préconditionnement – aperçu).*

9. FFT, signal & image (bases) : spectre, filtrage, convolution rapide ; scikit-image (mesures/segmentation – aperçu).*

10. Dynamique moléculaire (MD) : Lennard-Jones, Velocity-Verlet, PBC & minimum image, listes de voisins, NVE/NVT (thermostats), observables (E/T/P, g(r), MSD→D, VACF).*

11. Matière condensée (intro computationnelle) : réseaux & k-espace, bandes E(k) (tight-binding 1D), DOS(E), Ising 2D (Metropolis : M, χ, C_v), lien g(r) $\rightarrow$ S(k).*

12. Capstone : étude complète (diffusion 1D/2D, oscillateur amorti/forcé, Poisson/onde, ou mini-MD) $\rightarrow$ modèle + données Pandas + validation & rapport.

À la fin :

Vous saurez modéliser, discrétiser et résoudre des problèmes de physique (EDO/EDP), utiliser des solvers creux, traiter des séries expérimentales avec Pandas, construire et analyser une MD simple (LJ, PBC, thermostats, observables), et aborder des notions de matière condensée (bandes, DOS, Ising 2D, S(k)). Vous livrerez une étude reproductible (code testé, unités, figures) — prête pour un portfolio ou pour poursuivre vers PDE avancées / CFD / éléments finis / simulation atomistique.