

UN NOUVEAU CONCEPT EN LICENCE-MAITRISE DE PHYSIQUE : LES TRAVAUX D'EXPERIMENTATION NUMERIQUE

Daniel ANDRE, Nicolas BILLY, Daniel BORGIS*, **Maria CHAMARRO,**
Marc CONDAT, Dominique DELANDE**, **Marie-Pierre GAIGEOT,**
Olivier HARDOUIN-DUPARC⁺, Laurent HILICO, Stéphanie MENARD⁺⁺,
Pascal MONCEAU, Pierre NEDELLEC, Valia VOLIOTIS

*Département de Physique et Modélisation,
Université d'Evry - Val d'Essonne
91025 Evry Cedex*

** Laboratoire de Physique Théorique des Liquides (Paris 6)*

*** Laboratoire Kastler Brossel (Paris)*

+ Laboratoire des Solides Irradiés (CEA/CNRS, Palaiseau)

++ IPN (Orsay)

1. Introduction

L'informatique et la télématique ont pénétré, ces dernières années, d'une manière surprenante notre vie de tous les jours ainsi que notre vie professionnelle. Le scientifique se trouve au centre de ce phénomène car, comme l'apprenti sorcier, présent aux premiers balbutiements de l'ordinateur (à la fin de la seconde guerre mondiale) puis participant à l'explosion de la micro-informatique, il doit faire face maintenant à une réflexion sur un emploi judicieux de l'ordinateur.

On se rend compte aisément, au niveau des tâches à réaliser dans notre milieu de travail, que l'utilisation de l'ordinateur n'est pas aussi innée que nous aimerions l'espérer. Comme la langue d'Esope, l'ordinateur peut cacher les deux aspects du bien et du mal, de l'efficacité et du temps perdu. Que ce soit au niveau de l'acquisition des données ou du contrôle d'une expérience, la mise en place d'une modélisation, le traitement des données, l'ordinateur oblige toujours son utilisateur à reprendre les problèmes d'une manière systématique et fait appel à des connaissances incluant l'informatique et l'analyse numérique. Le développement d'un programme de modélisation fera appel à une bonne analyse du problème physique (au risque d'un résultat biaisé), sa réduction cohérente à un ensemble de lois mathématiques respectant la réalité physique, la mise en équation, la résolution numérique et l'écriture du programme. L'analyse des données fait également appel à un ensemble de démarches qui s'appuie sur différentes connaissances même si, parfois, cela revient à développer des méthodes de traitement standards. L'utilisation de l'ordinateur, pour être efficace, doit se faire avec une démarche nouvelle pour aborder les problèmes.

Nous présentons une expérience commencée voici trois ans qui couple l'utilisation de l'outil informatique avec l'enseignement de la physique. Cette nouvelle démarche introduit les *travaux d'expérimentation numérique* (T.E.N.)

2. Une nouvelle réflexion

A l'Université d'Evry, créée lors du plan des Universités 2000, nous avons eu l'opportunité de mettre en place ex nihilo des enseignements de licence et de maîtrise en Physique, ce qui est apparu comme une circonstance très favorable pour innover. Ces dernières années, pour prendre en compte le rôle croissant de l'ordinateur, les enseignements dans les licences-maîtrises de physique dégagent un espace pour un module traitant des aspects de traitement numérique, d'acquisition de données. Dans notre réflexion, il nous est apparu qu'il fallait développer une culture de l'utilisation de l'ordinateur dans les sciences et que par ailleurs l'ordinateur offre d'autres possibilités essentiellement liées à l'apprentissage du phénomène physique. Il peut devenir un moyen complémentaire des méthodes pédagogiques habituelles pour découvrir la réalité physique et, par ses possibilités graphiques de représenter les phénomènes, il introduit l'aspect ludique que l'on retrouve dans l'utilisation de beaucoup de supports visuels.

Notre enseignement de la physique se démarque des enseignements traditionnels par l'introduction du concept T.E.N. La licence-maîtrise se compose de plusieurs modules et, dans chaque module, l'étudiant trouve, en plus de la structure classique du cours magistral et des travaux dirigés, le T.E.N. Dans leur conception initiale, les T.E.N. sont conçus comme des travaux pratiques, au nombre de deux ou trois par module ; ils se déroulent dans une salle équipée de stations de travail (sous UNIX) et d'une imprimante. Chaque machine possède divers utilitaires : environnement de développement, éditeur, graphisme, accès au réseau. Un T.E.N. dure en moyenne douze heures, par séances de trois heures. Les étudiants sont accompagnés par un enseignant mais ils ont également un libre accès aux outils informatiques au moins une demi-journée par semaine. Les T.E.N. sont développés soit autour d'un thème, soit restreints à un problème bien particulier. Dans la démarche demandée aux étudiants, il existe une certaine similitude entre les T.E.N. et les T.P. classiques. Un dossier est distribué aux étudiants pour chaque T.E.N. : il décrit le problème physique étudié, son approche théorique puis l'analyse numérique proposée (c'est l'instrument qu'utilisera l'étudiant) ; il guide sur la production des résultats et propose des directions pour leurs interprétations.

La méthodologie proposée aux étudiants n'est pas unique car elle doit s'adapter aux thèmes, aux connaissances demandées, aux modules dans lesquels les T.E.N. s'insèrent : ceci explique la diversité de ces derniers. Le prérequis en informatique est une connaissance minimale d'un langage de programmation (en l'occurrence le langage C) ainsi que les bases pour accéder au monde UNIX sur une station de travail. Cette mise à niveau est réalisée au début des enseignements de licence.

3. Les premières observations

Nous pouvons d'ores et déjà extraire quelques grandes idées de notre expérience des T.E.N. Le premier point à souligner est l'acquisition d'une méthode de travail pour les étudiants. En effet, la démarche proposée nécessite le passage par des étapes bien précises :

- 1) l'analyse quantitative du problème permet de revoir les concepts abordés lors des enseignements magistraux en obligeant l'étudiant à être actif et rigoureux,
- 2) l'étude numérique du problème, la programmation (souvent cette étape se réduira à l'écriture d'un nombre limité de lignes, l'accent étant plutôt mis sur la compréhension des algorithmes que l'écriture elle-même),
- 3) la représentation des données et leur analyse.

Le second point est le développement de la curiosité. L'étudiant procède à des expériences puisque l'ordinateur intervient comme un montage expérimental mais avec la possibilité d'utiliser des représentations inhabituelles (par exemple, l'espace des phases, la visualisation de certains mécanismes microscopiques). Enfin, le troisième point concerne la manipulation des données pour trouver les paramètres pertinents, confronter les résultats aux hypothèses, chercher des lois de variation.

4. Quelques exemples de T.E.N.

Les sujets proposés aux étudiants sont nombreux puisqu'ils sont développés autour des thèmes abordés dans les différents modules de la licence et de la maîtrise. Sans vouloir être exhaustif, nous pouvons citer : l'étude de condensateur (concentrique, plan, ...), le pendule de Foucault, la marche aléatoire et la diffusion, le modèle en couches des noyaux nucléaires, l'électron dans un réseau périodique à une dimension, le modèle d'Ising, l'étude d'un liquide par la dynamique moléculaire, la diffraction optique.

Développons plus particulièrement les deux exemples suivants :

4.1 Oscillateurs et effets anharmoniques

Ce T.E.N est directement lié au cours de mécanique analytique de licence. La première approche des mouvements oscillants se fait dans le cadre de l'approximation harmonique. Par le biais du T.E.N., l'étudiant aborde dans un cadre plus vaste les mouvements périodiques. Il s'agit d'étudier dans un premier temps des oscillateurs classiques monodimensionnels. La résolution des équations du mouvement est l'occasion de détailler le fonctionnement des algorithmes d'Euler et de Runge-Kutta et de se familiariser avec les problèmes les plus couramment rencontrés au cours de leur utilisation : échantillonnage, stabilité, évolution de l'erreur en fonction du pas et de l'intervalle d'intégration. Après une brève manipulation des codes dans le cas de l'oscillateur harmonique, l'accent est mis sur la résolution d'équations

non linéaires, comme celle du pendule pesant $\ddot{\theta} + \omega_0^2 \sin \theta = 0$ et sur les effets des anharmonicités de degré 3 et 4 en potentiel : $\ddot{x} + \omega_0^2 (x - sx^2) = 0$ et $\ddot{\theta} + \omega_0^2 \left(\theta - \frac{\theta^3}{3!} \right) = 0$

La transformée de Fourier discrète est introduite pour analyser les résultats ; c'est l'occasion de prendre conscience à la fois de ses limites (critère de NYQUIST) et de sa puissance. Elle illustre par ailleurs de manière très concrète le cours de mathématiques ("pour physiciens"). Quelques points importants sont :

- la relation entre la largeur d'un pic dans l'espace de Fourier et la durée temporelle d'un signal,
- l'étude de l'apparition d'harmoniques en présence d'anharmonicités,
- l'étude quantitative du non isochronisme du pendule pesant.

La figure 1 montre le module de la transformée de Fourier discrète (non normalisée) de la position $x(t)$ dans le cas d'un potentiel anharmonique de degré 3 ; l'apparition d'une composante continue et d'un harmonique à une pulsation double de celle du fondamental y sont clairement visibles.

Dans un second temps, les étudiants sont alors en mesure de mettre en œuvre l'algorithme de Runge-Kutta et l'analyse de Fourier pour étudier un problème à plusieurs degrés de liberté (au sens classique du terme) : le pendule de Foucault.

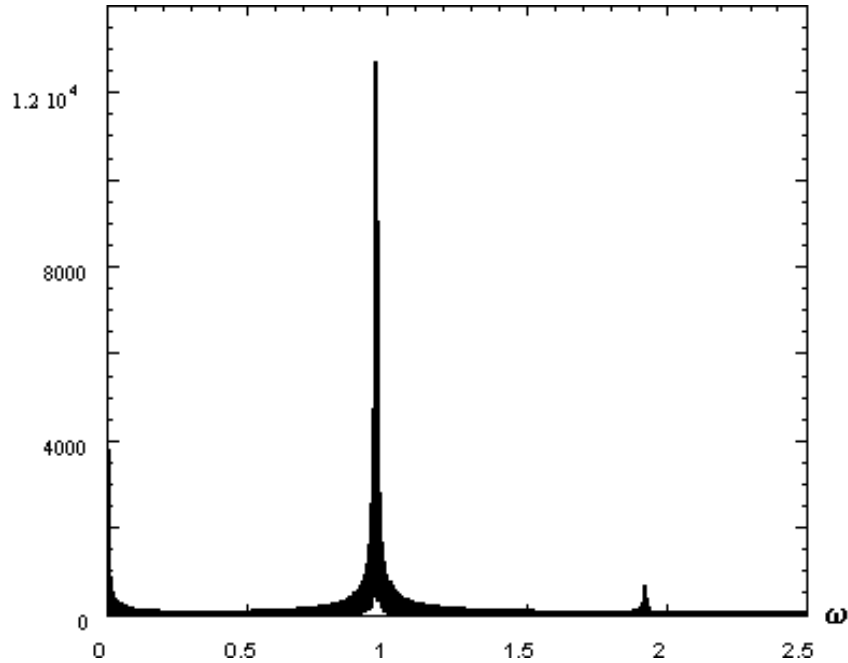


Figure 1

4.2 Propagation de paquets d'ondes

La résolution de l'équation de Schrödinger dépendante du temps $i\hbar \frac{d\psi}{dt} = H\psi$ permet d'introduire les méthodes de différences finies. La propagation de paquets d'ondes gaussiens dans un potentiel uniforme sert tout d'abord de support à une étude des problèmes numériques que posent ces méthodes : choix des pas spatial et temporel, stabilité, précision sur la conservation de la norme et de l'énergie¹. L'élargissement du paquet d'ondes avec le temps est ensuite étudié quantitativement dans l'espace direct : la figure 2 montre l'évolution de la densité de probabilité de présence $|\psi|^2$ associée à la fonction d'onde $\psi(x)$ au cours du temps. L'évolution temporelle de la largeur des gaussiennes et de la position du pic peuvent être étudiées de façon quantitative. Corrélativement, le calcul de la transformée de Fourier de la fonction d'onde à différents instants montre que le spectre en p reste invariant, permettant ainsi une illustration du principe de Heisenberg et une familiarisation avec les représentations r et p .

La panoplie de problèmes qui peuvent ensuite être étudiés est très large : marches de potentiel, puits de potentiel, effet tunnel, états cohérents. Les réactions des étudiants face à ces expérimentations montrent qu'elles constituent un complément efficace du cours de mécanique quantique : ils sont amenés à prendre une part active à la simulation d'effets dont l'appréhension intuitive ne leur est pas familière, sans être pour autant obnubilés par la maîtrise d'un formalisme nouveau pour eux.

¹ [A. Goldberg, & al. American Journal of Physics, 1967]

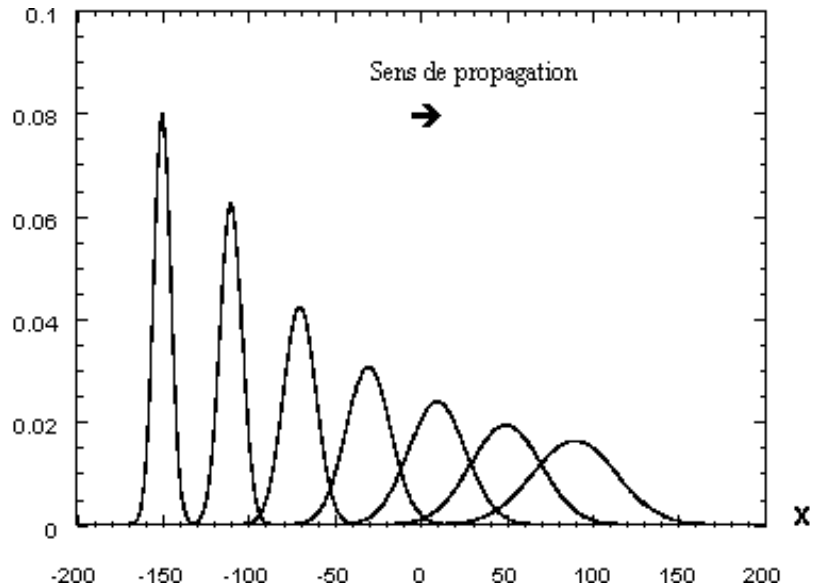


Figure 2

5. Conclusion

Trois points importants ressortent de notre expérience des T.E.N. :

- Désacralisation de l'informatique : face à sa station de travail, l'étudiant est tenu d'être actif ; à travers la maîtrise qu'il acquiert par lui-même du monde UNIX, du langage C et du graphisme, celle-ci devient son outil pour faire de la physique "en direct".
- Développement d'un sens critique approprié à ce type d'expérimentation : malgré un canevas commun (document distribué en début de T.E.N.), les étudiants sont amenés à individualiser leur démarche. Ils sont donc constamment invités à jeter un regard critique sur leurs résultats et l'interprétation qu'ils en font : «la méthode numérique est-elle adaptée à ce cas ? Pourquoi une variation du paramètre X a-t-elle un effet sur Y,...».
- Modification du point de contact entre le raisonnement physique et l'expérience : la simulation d'un phénomène permet une maîtrise complète de tous les paramètres qui entrent en jeu ; on peut ainsi étudier individuellement (ou successivement) leurs effets, ce qui n'est généralement pas possible lors d'un T.P. "classique".

Ces observations devraient permettre d'ouvrir un débat sur la comparaison entre les qualités pédagogiques des T.E.N. et des T.P.