

**Stage LIESSE «Capacités numériques pour la physique et la chimie de
1ère année CPGE MPSI, MPII, PCSI, PTSI, TSI, TPC en Python»
Ecole des Mines de Saint-Etienne – les 25 et 26 octobre 2021**

Le stage proposé par l'École des Mines de Saint-Étienne (EMSE) s'est déroulé sur deux journées. Elles ont permis d'aborder une partie des capacités numériques introduites depuis la rentrée scolaire 2021 dans les programmes de première année de CPGE scientifique, dans un cadre général de résolution numérique d'équations différentielles dans un premier temps, puis plus appliqué à des thèmes du programme (chimie, mécanique et électronique).

Ordre du jour :

- Résolution numérique d'équations différentielles : Euler explicite, implicite, Crank-Nicolson ;
- **Chimie** : étude cinétique d'une réaction comprenant deux actes élémentaires successifs;
- **Mécanique** : représentation de la trajectoire d'un point matériel soumis à un champ de force centrale, trajectoire d'un point matériel en chute avec frottements linéaires ou quadratiques, non-isochronisme des oscillations d'un pendule simple,
- **Électronique** : effet d'un filtre passe-bande sur des signaux triangulaire et créneau.

/ Lundi 25 octobre

A. Matinée (9h-12h)

La matinée a commencé par un mot de M. LOWYS, professeur honoraire de l'EMSE, qui a présenté l'école et ses thématiques principales, dont la santé (avec la double compétence ingénieur/médecin possible pour les étudiants de l'EMSE) et l'énergie. Puis M. AOUIFI, ingénieur de recherche au Laboratoire CNRS Georges Friedel et formateur pendant ces deux journées, a réalisé un rapide tour de table pour connaître les participants au stage. Il a ensuite présenté les problématiques relatives à la résolution numérique des équations différentielles et les domaines d'application prévus durant cette formation : chimie (cinétique), mécanique (équations du mouvement, représentation de trajectoires) et électronique (filtrage).

Le choix pédagogique effectué par M. AOUIFI est le suivant : une partie des codes Python a déjà été rédigée par ses soins et nécessite d'être analysée, tandis qu'une autre partie sera à rédiger par nous-mêmes. Ce format hybride permet de varier les activités et facilite les interactions entre nous et avec le formateur. Le début de cette formation a donc commencé par la distribution d'une clé USB contenant les codes Python et le support de cours au format pdf, ainsi que le même support de cours format papier. Un utilitaire d'installation d'une version de Python est également fourni, mais nous avons déjà tous un éditeur Python installé sur nos ordinateurs personnels. Nous avons également accès à Internet via le réseau wifi de l'établissement.

La suite de la matinée a été consacrée à la rédaction des codes nécessaires à la résolution d'un système d'équations différentielles linéaires (EDL) selon trois schémas : Euler explicite, Euler implicite et Crank-Nicolson, et d'aborder les notions de stabilité et de précision. M. AOUIFI s'est montré particulièrement prévenant et s'est adapté à nos questions en ajoutant « au pied levé » la rédaction d'un code permettant d'évaluer l'influence du pas de discrétisation temporelle sur la stabilité du schéma Euler explicite, ce qui s'est révélé particulièrement formateur et adapté à la suite de la matinée.

L'exemple choisi, dont la courbe solution est un cercle de rayon constant $R^2 = x^2(t) + y^2(t)$, présente un avantage pédagogique important : il permet de montrer les limites des schémas d'Euler explicite et implicite et la plus grande stabilité apportée par un schéma de Crank-Nicolson.

B. Après-midi (14h-17h)

Nous avons poursuivi la journée par l'analyse d'un ensemble d'instruction permettant de résoudre un autre système d'équations différentielles, mais cette fois non linéaires : le modèle de Lotka-Volterra (ou modèle proie-prédateur). Ce fut l'occasion d'analyser les trois schémas de résolution étudiés le matin même, en ajoutant une difficulté supplémentaire : les équations étant non linéaires, les schémas d'Euler implicite et de Crank-Nicolson demandent l'utilisation d'une méthode d'évaluation des termes suivants des fonctions x et y dite méthode des points fixes. La comparaison de ces trois méthodes avec la fonction « odeint » déjà implémentée dans Python a permis de mettre en évidence la puissance de cette dernière.

Nous avons terminé cette journée par l'analyse de la cinétique d'une réaction chimique constituée de deux actes élémentaires successifs : $A \rightarrow B \rightarrow C$ avec les constantes de réaction k_1 et k_2 respectivement. Il s'agissait une fois encore d'analyser le code fourni, et de comprendre les critères de stabilité des schémas d'Euler explicite et implicite implémentés. L'avantage de cette étude est la généralisation de la résolution d'un système d'équations différentielles à N fonctions (trois ici), au lieu des deux fonctions étudiées jusqu'à présent, ce qui rentre dans le cadre des programmes de PCSI et TPC : « À l'aide d'un langage de programmation ou d'un logiciel dédié, et à partir de données expérimentales, tracer l'évolution temporelle d'une concentration, d'une vitesse volumique de formation ou de consommation, d'une vitesse de réaction et tester une loi de vitesse donnée ».

/ Mardi 29 octobre

A. Matinée (9h-12h)

Cette demi-journée est consacrée à la mécanique du point. Nous avons commencé par la représentation de la trajectoire d'un point mobile soumis à un champ de force central, répulsif ou attractif, en se basant sur les équations de trajectoire en coordonnées polaires obtenues par la résolution du principe fondamental de la dynamique. Ce fut l'occasion de créer une animation permettant de montrer l'influence de l'excentricité sur la forme de la trajectoire de la particule.

L'analyse de la chute d'un point matériel avec frottements linéaires ou quadratiques a été l'occasion de travailler sur une équation différentielle d'abord linéaire, puis non linéaire, et encore une fois d'analyser la stabilité de la résolution, la discussion mêlant à la fois aspect physique et numérique (influences de la vitesse initiale et du pas de discrétisation), ces échanges ayant été très riches d'enseignement.

Enfin, l'analyse du non-isochronisme des oscillations d'un pendule, explicitement aux programmes, a été abordée via l'exemple d'un pendule simple.

B. Après-midi (13h30-15h)

La dernière partie de ce stage porte sur la création d'un programme permettant d'illustrer l'influence d'un filtre passe-bande d'ordre 2 sur un signal d'entrée de forme triangulaire ou en créneau. Cela nous a permis de revoir les notions acquises durant les deux jours de formation et rentre dans le cadre du BO : « mettre en œuvre la méthode d'Euler à l'aide d'un langage de programmation pour simuler la réponse d'un système linéaire du premier ordre à une excitation de forme quelconque ». Le choix d'un filtre d'ordre 2 et non d'ordre 1 était de notre demande.

/ Remerciements

Nous tenons à remercier très chaleureusement M. ROELENS pour la logistique et l'excellente organisation de ces deux journées, et M. AOULFI, pour la qualité du contenu de la formation, les échanges fructueux et la bonne humeur dispensée pendant ces deux jours. Ces deux journées ont été travaillées de manière à nous donner des clés et des pistes de réflexion dans le cadre de l'introduction des capacités numériques dans les programmes de 1ère année de CPGE scientifique, et cette formation a répondu à nos attentes. L'accueil de l'EMSE a été apprécié de manière unanime. Il est à noter que l'ENSM a pris entièrement à sa charge les repas des deux journées de formation, dont un repas en ville le lundi soir. Cette chaleureuse attention a été remarquée.