

L'IA au service de la recherche en Physique-Chimie

Guillaume CLEUZIQU
Professeur des Universités - Informatique

18 mars 2026



SOMMAIRE

1. Exemple introductif
2. Principe de fonctionnement des IA (machine learning)
3. Cas d'usage en Physique-Chimie
4. Les IA génératives (IAG)
5. Les risques et limites
6. Défi et cadre d'usage en éducation



SOMMAIRE

1. Exemple introductif
2. Principe de fonctionnement des IA (machine learning)
3. Cas d'usage en Physique-Chimie
4. Les IA génératives (IAG)
5. Les risques et limites
6. Défi et cadre d'usage en éducation

Exemple introductif

Bac 2025 Métropole Jour 1

Exercice 3 - Viscosimètre à chute de bille (5 points)

Certains équipements mécaniques, comme les moteurs, nécessitent l'utilisation d'huiles de valeur de viscosité contrôlée pour pouvoir fonctionner correctement.

Le but de cet exercice est d'étudier le principe de fonctionnement d'un viscosimètre à chute de bille permettant de mesurer, à température ambiante, la viscosité d'une huile appelée « huile C ».



Viscosimètre à chute de bille KF40 Brookfields®

La mesure de la viscosité de l'huile C repose sur l'exploitation de la chute verticale d'une bille en acier dans un récipient cylindrique, rempli de cette huile, représenté sur la figure 1. Le mouvement du centre de masse de la bille est étudié dans le référentiel terrestre supposé galiléen, muni d'un repère d'origine O, d'axe vertical (Oz) orienté vers le bas et de vecteur unitaire \vec{k} . La situation est schématisée sur la figure 1.

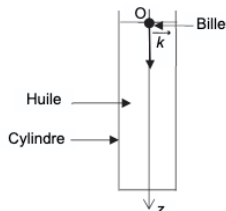


Figure 1. Schéma du dispositif expérimental de mesure

Données :

Les données numériques de cet exercice proviennent de travaux réalisés à l'université de Grenoble.

- masse volumique de l'huile C : $\rho_h = 8,31 \times 10^2 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$;
- masse volumique de la bille : $\rho_b = 1,06 \times 10^3 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$;
- rayon de la bille : $r = 0,993 \text{ mm}$;
- intensité de la pesanteur terrestre : $g = 9,81 \text{ m} \cdot \text{s}^{-2}$;
- volume d'une bille de rayon r : $V_b = \frac{4}{3} \cdot \pi \cdot r^3$;
- pour discuter de l'accord du résultat d'une mesure avec une valeur de référence, on peut utiliser le quotient $\frac{x - x_{\text{ref}}}{u(x)}$ avec x la valeur mesurée, x_{ref} la valeur de référence et $u(x)$ l'incertitude-type associée à la valeur mesurée x .

Lors de sa chute verticale dans l'huile C, la bille de masse m est soumise à trois forces :

- son poids noté \vec{P} ;
- la poussée d'Archimède, exercée par l'huile, d'expression vectorielle $\vec{P}_A = -\rho_h \cdot V_b \cdot g \cdot \vec{k}$;
- la force de frottement exercée par l'huile sur la bille, d'expression vectorielle dans les conditions de l'expérience : $\vec{f} = -\alpha \cdot \eta_C \cdot v \cdot \vec{k}$ avec α une constante homogène à une distance, dépendant des paramètres géométriques du système, η_C la viscosité de l'huile C et v la valeur de la vitesse du centre de masse de la bille. On donne $\alpha = 1,92 \times 10^{-2} \text{ m}$.

Q1. Montrer, à l'aide d'un raisonnement sur les unités, que la viscosité η_C s'exprime en $\text{N} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}$.

À la date $t = 0$, la bille est lâchée avec une vitesse initiale nulle depuis le point O, situé dans l'huile, en haut du récipient cylindrique. Au bout de quelques instants, le mouvement de la bille devient rectiligne uniforme, la bille atteint alors une vitesse limite notée v_{lim} .

Q2. Préciser, en justifiant, si la valeur de la force de frottement \vec{f} augmente ou diminue quand la valeur de la vitesse de la bille augmente.

Q3. Représenter sur un schéma, sans calcul et en justifiant, l'ensemble des forces appliquées au système (bille), lorsque la vitesse limite est atteinte.

Q4. Montrer que la vitesse limite vérifie l'équation :

$$\alpha \cdot \eta_C \cdot v_{\text{lim}} = \frac{4 \cdot \pi \cdot r^3 \cdot g \cdot (\rho_b - \rho_h)}{3}$$

Q5. La valeur limite de la vitesse de la bille vaut $v_{\text{lim}} = 5,37 \text{ mm} \cdot \text{s}^{-1}$. Calculer la valeur de la viscosité η_C de l'huile C.

L'huile C a une viscosité de référence qui vaut $\eta_{\text{ref}} = 0,093 \text{ N} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}$ et l'incertitude-type sur la valeur de la viscosité η_C obtenue vaut $u(\eta_C) = 0,003 \text{ N} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}$.

Q6. Déterminer si la valeur de la viscosité η_C obtenue expérimentalement est en accord avec la valeur de référence.

On souhaite déterminer la durée nécessaire pour que la bille, lâchée avec une vitesse initiale nulle, atteigne sa vitesse limite.

Q7. Le vecteur accélération \vec{a} du centre de masse de la bille s'écrit : $\vec{a} = a \cdot \vec{k}$. À l'aide de la deuxième loi de Newton, montrer que l'accélération a peut s'écrire :

$$a = g \cdot \left(1 - \frac{\rho_h \cdot V_b}{m}\right) - \frac{\alpha \cdot \eta_C}{m} \cdot v \quad \text{où } m \text{ est la masse de la bille}$$

Q8. En déduire que l'évolution de la coordonnée v du vecteur vitesse \vec{v} de chute de la bille au cours du temps obéit à l'équation différentielle suivante :

$$\frac{dv}{dt} + \frac{3 \cdot \alpha \cdot \eta_C}{4 \cdot \rho_b \cdot \pi \cdot r^3} \cdot v = g \cdot \left(1 - \frac{\rho_h}{\rho_b}\right)$$

Si la bille est abandonnée avec une vitesse initiale nulle, la résolution de l'équation différentielle précédente permet d'obtenir l'expression de sa vitesse $v(t)$:

$$v(t) = v_{\text{lim}} \cdot \left(1 - e^{-\frac{t}{\tau}}\right) \quad \text{avec } \tau = \frac{4 \cdot \rho_b \cdot \pi \cdot r^3}{3 \cdot \alpha \cdot \eta_C}$$

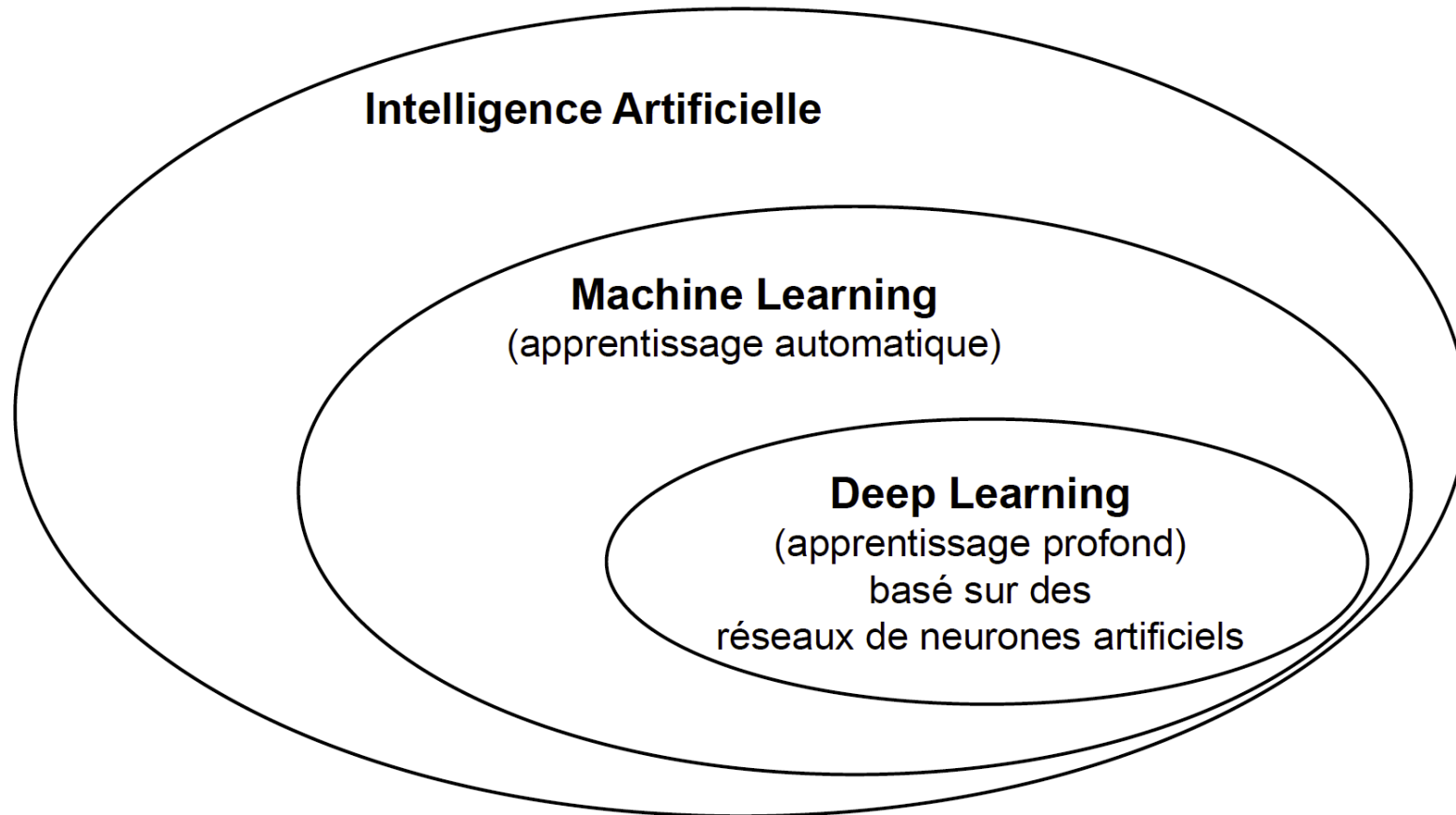
Q9. Calculer la valeur de τ en utilisant la valeur de la viscosité de référence de l'huile étudiée. Justifier que l'on peut considérer que la vitesse de la bille est pratiquement égale à sa valeur limite durant tout le mouvement sachant que le tube du viscosimètre a une hauteur d'environ 15 cm.



SOMMAIRE

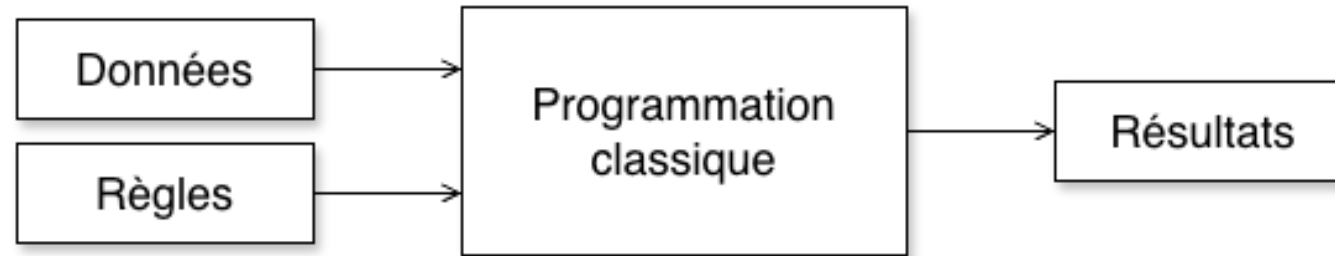
1. Exemple introductif
2. Principe de fonctionnement des IA (machine learning)
3. Cas d'usage en Physique-Chimie
4. Les IA génératives (IAG)
5. Les risques et limites
6. Défi et cadre d'usage en éducation

Principe de fonctionnement des IA



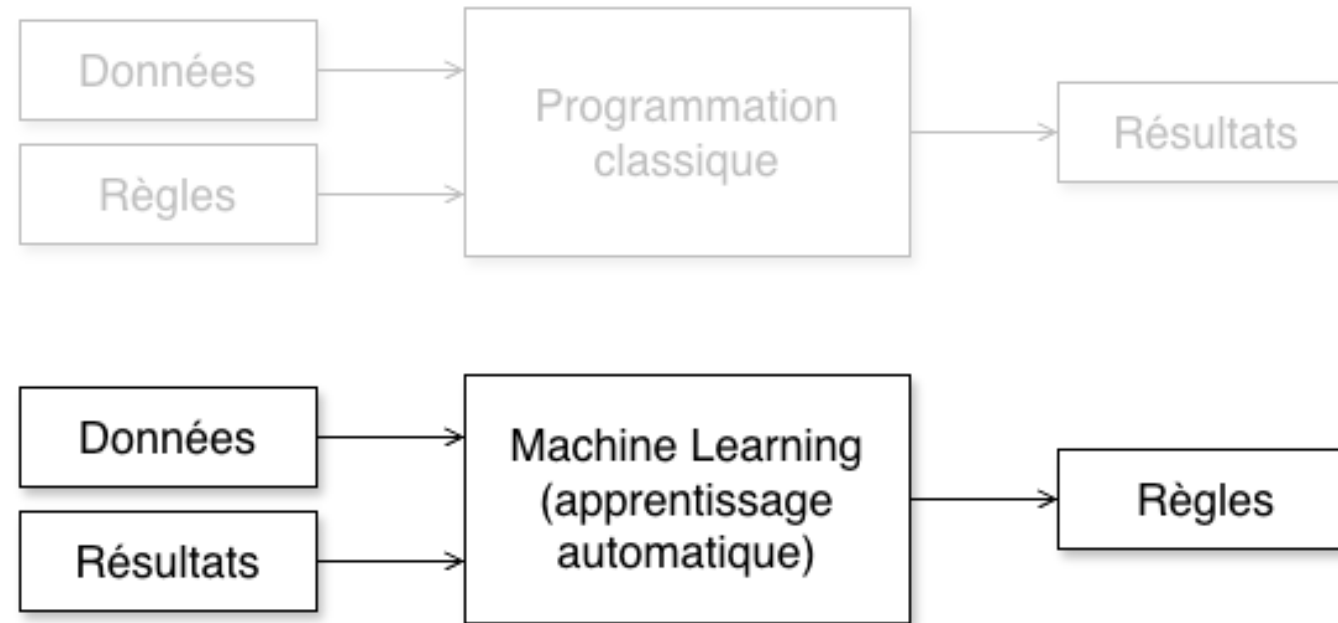
Source : « L'apprentissage profond en Python », F. Chollet (2020)

Principe de fonctionnement des IA



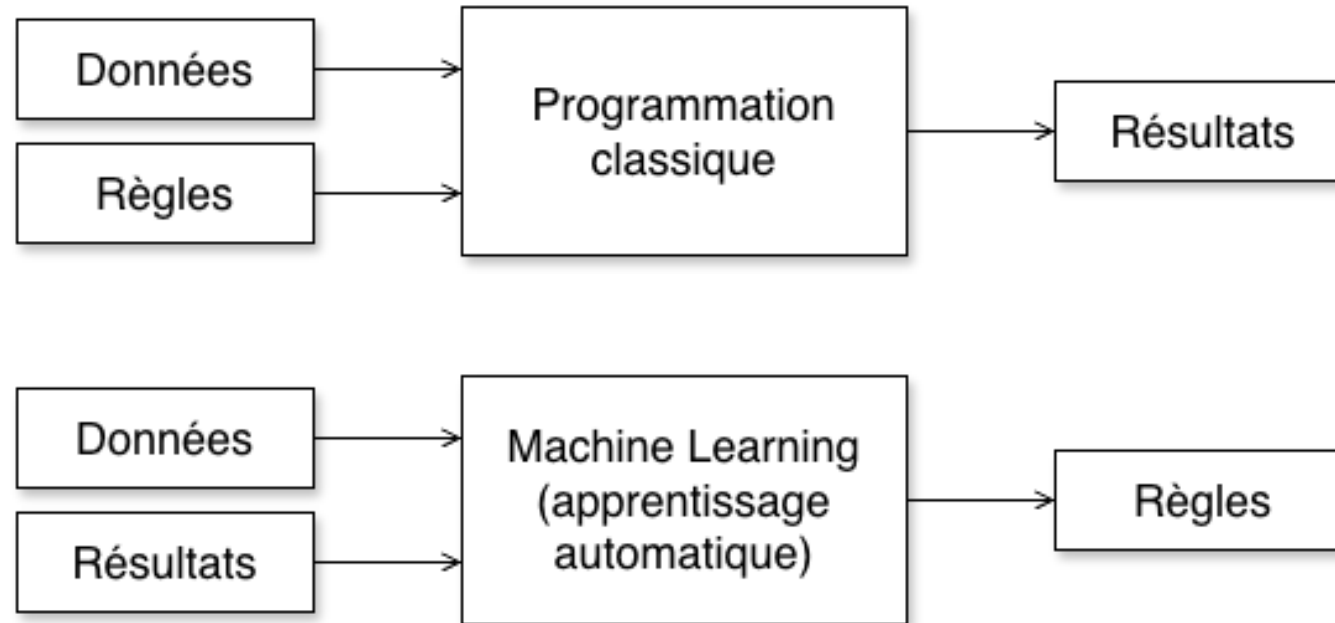
Source : « L'apprentissage profond en Python », F. Chollet (2020)

Principe de fonctionnement des IA

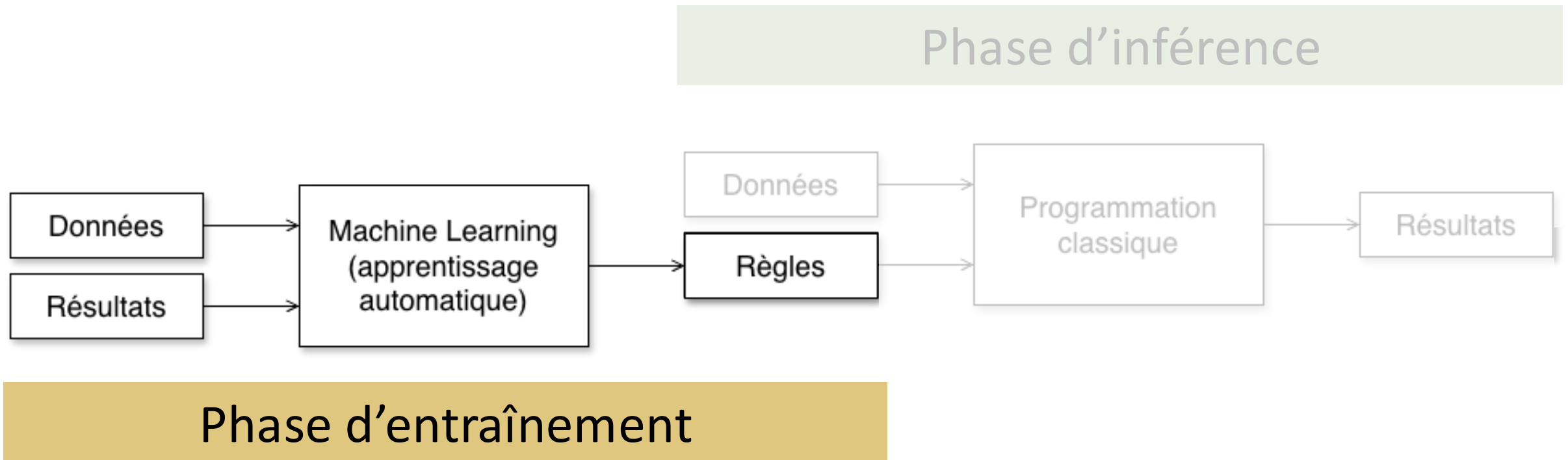


Source : « L'apprentissage profond en Python », F. Chollet (2020)

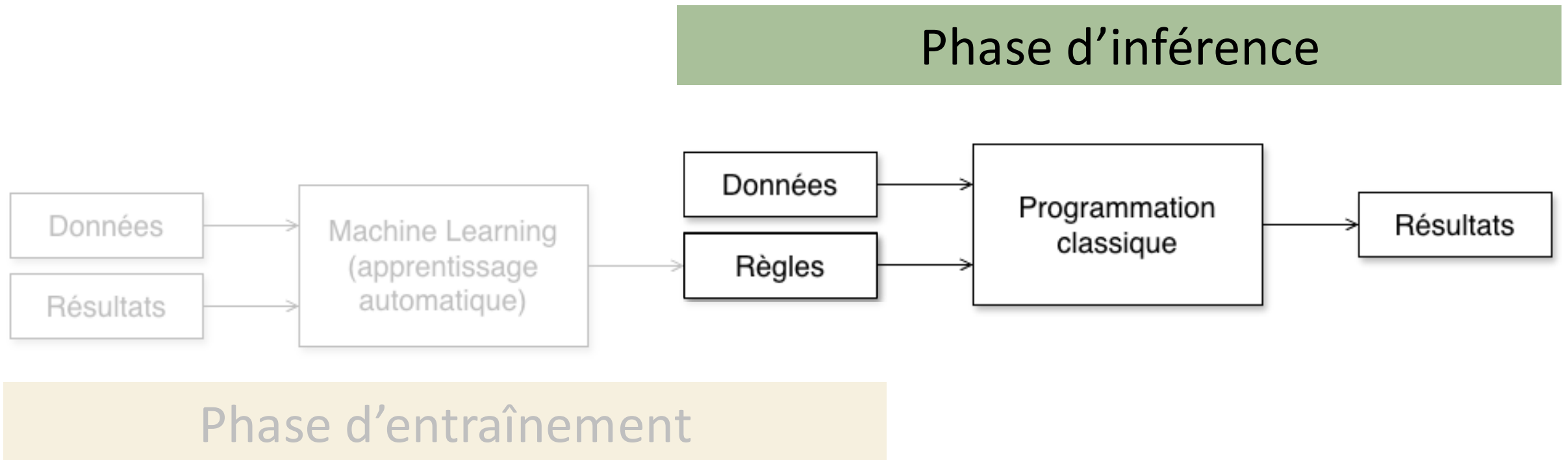
Principe de fonctionnement des IA



Principe de fonctionnement des IA

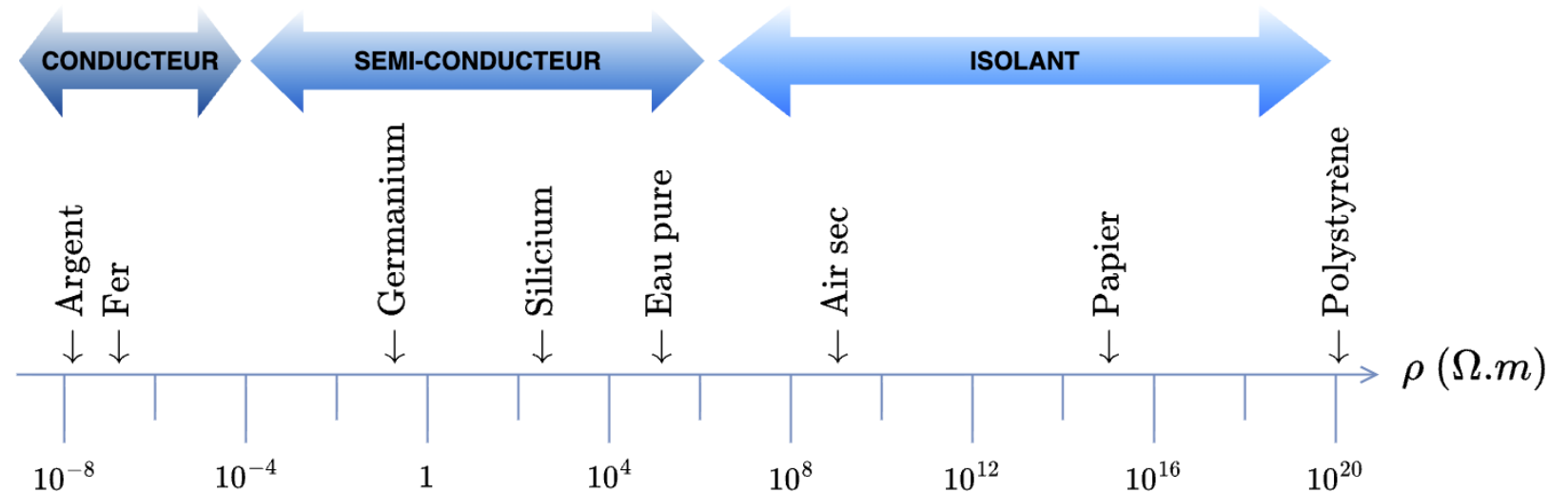


Principe de fonctionnement des IA

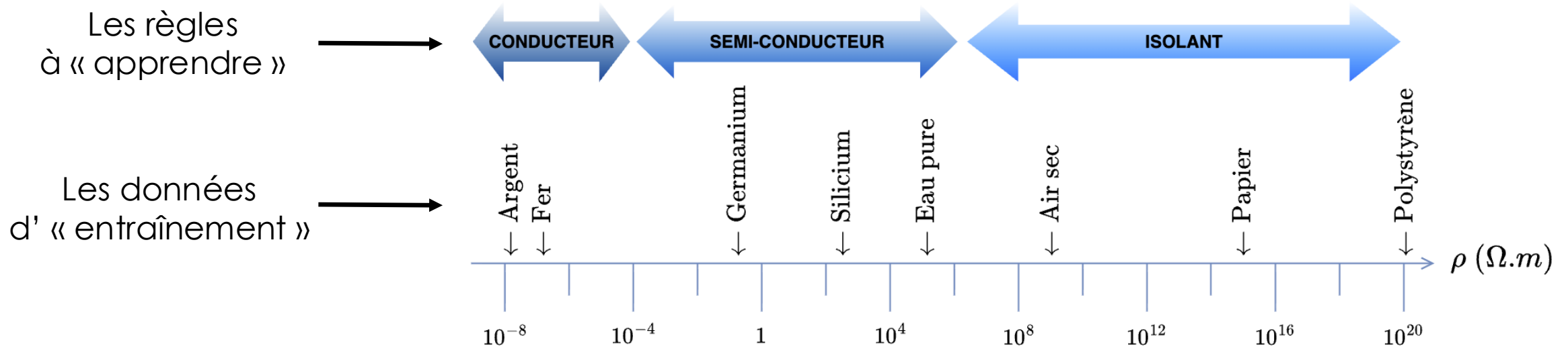


Principe de fonctionnement des IA

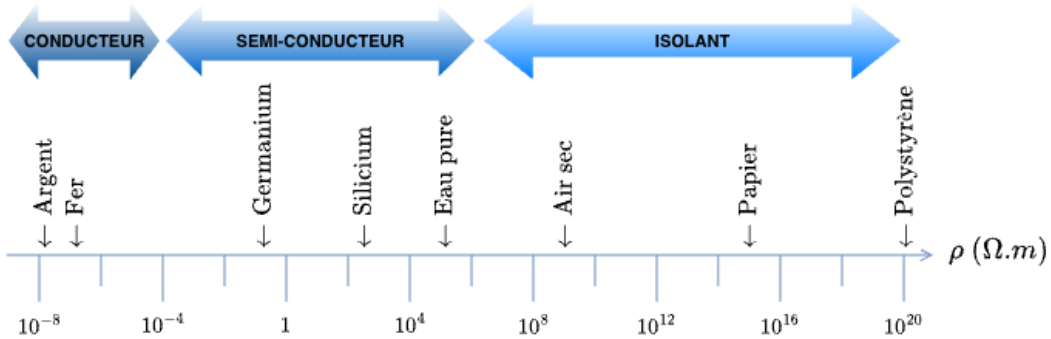
Exemple : la classification des matériaux



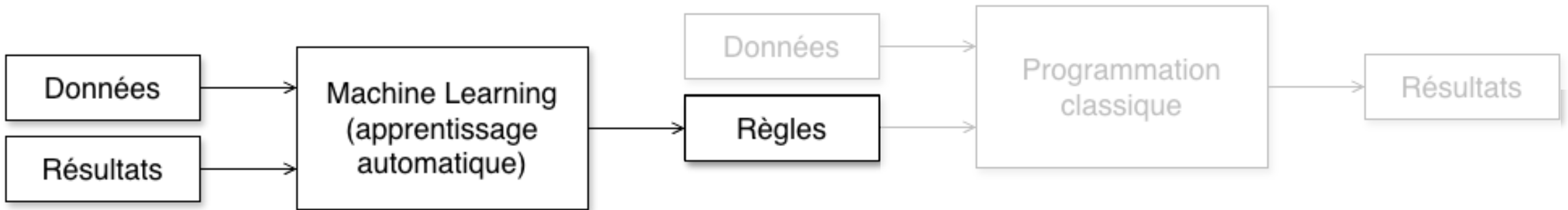
Exemple : la classification des matériaux



Principe de fonctionnement des IA

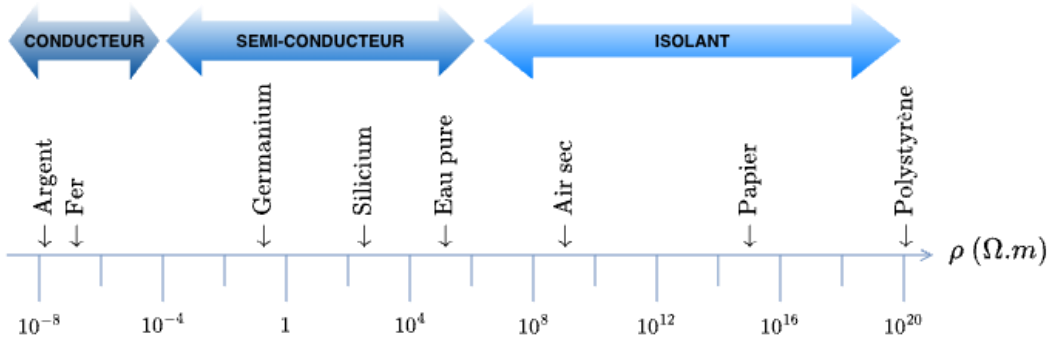


Phase d'inférence

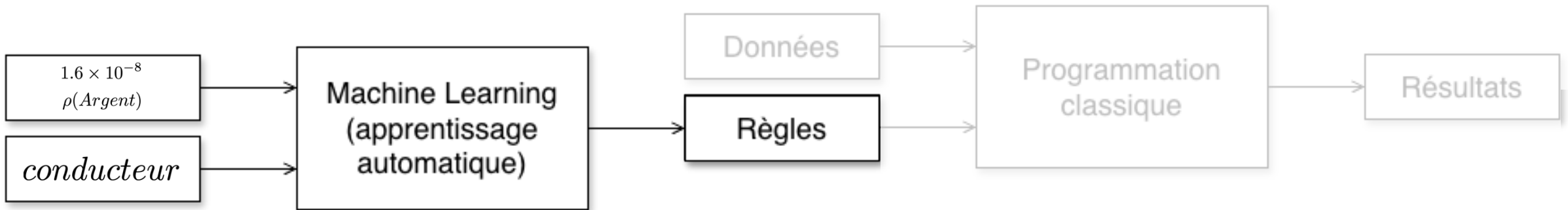


Phase d'entraînement

Principe de fonctionnement des IA

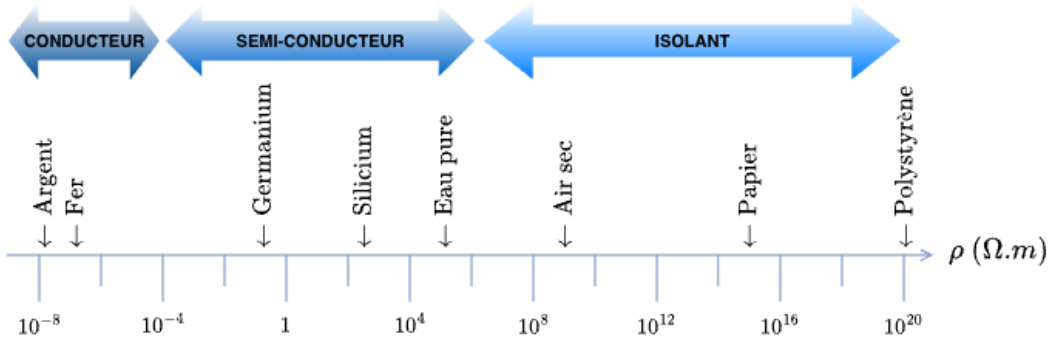


Phase d'inférence

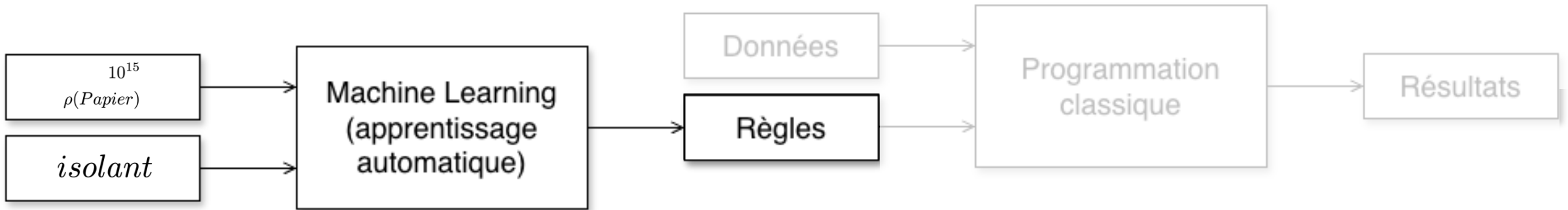


Phase d'entraînement

Principe de fonctionnement des IA

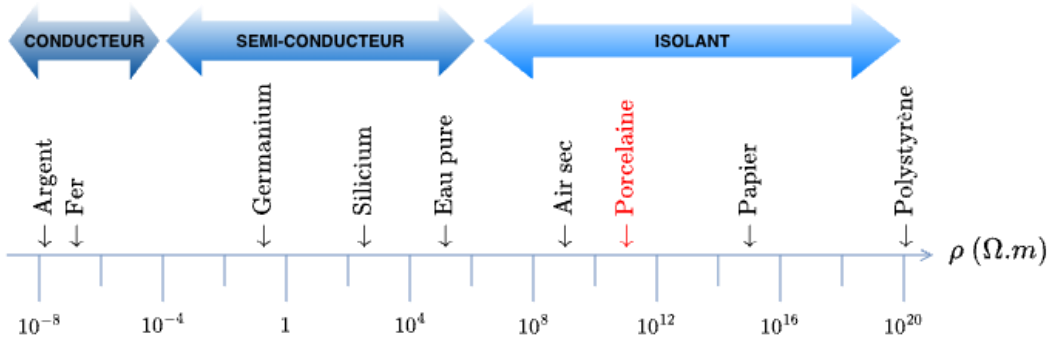


Phase d'inférence

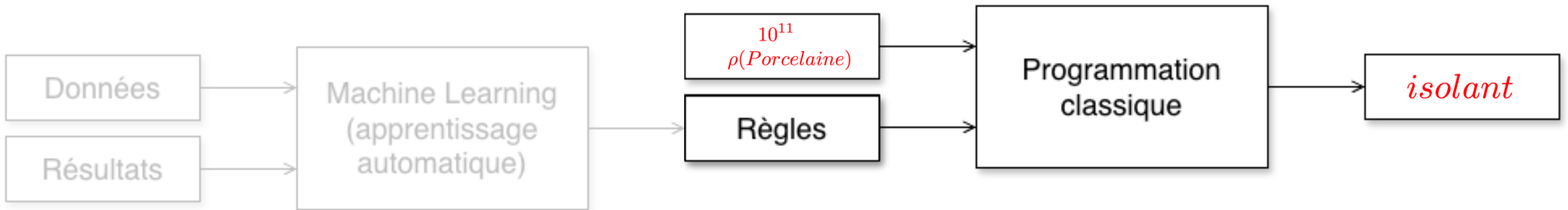


Phase d'entraînement

Principe de fonctionnement des IA



Phase d'inférence

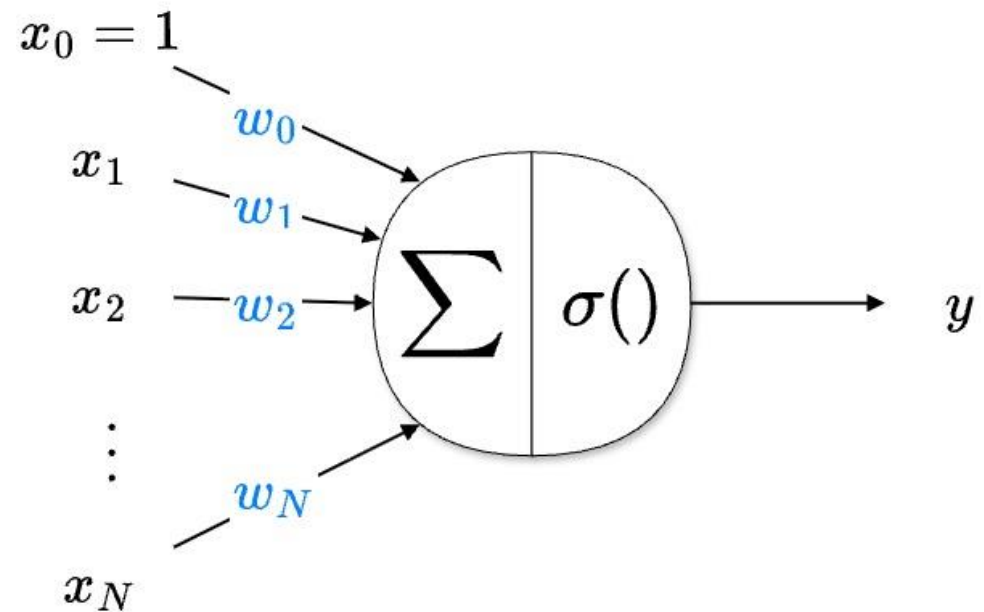


Phase d'entraînement

Principe d'entraînement des IA

Un **neurone artificiel** est une fonction mathématique définie par :

- des paramètres
- une fonction d'activation

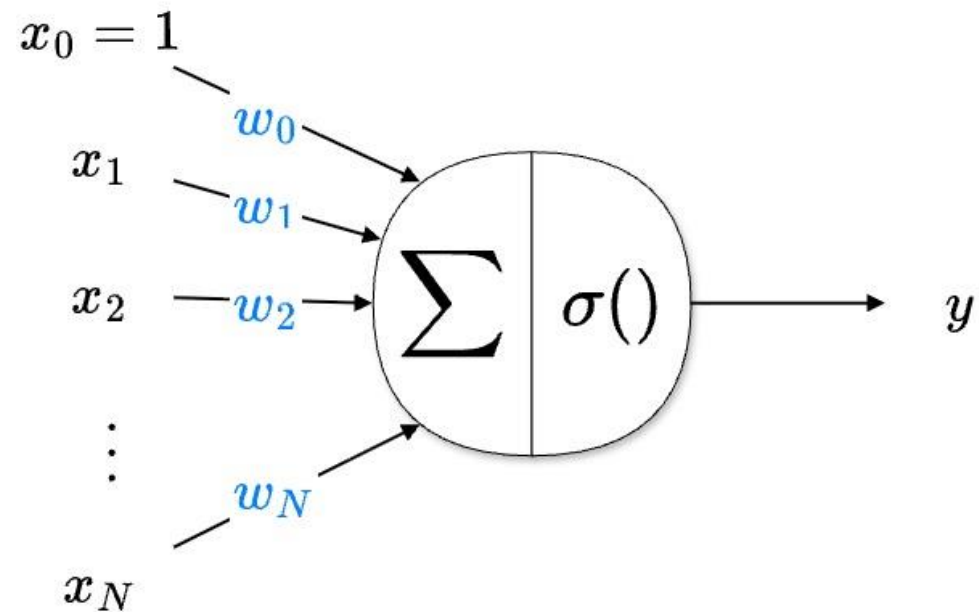
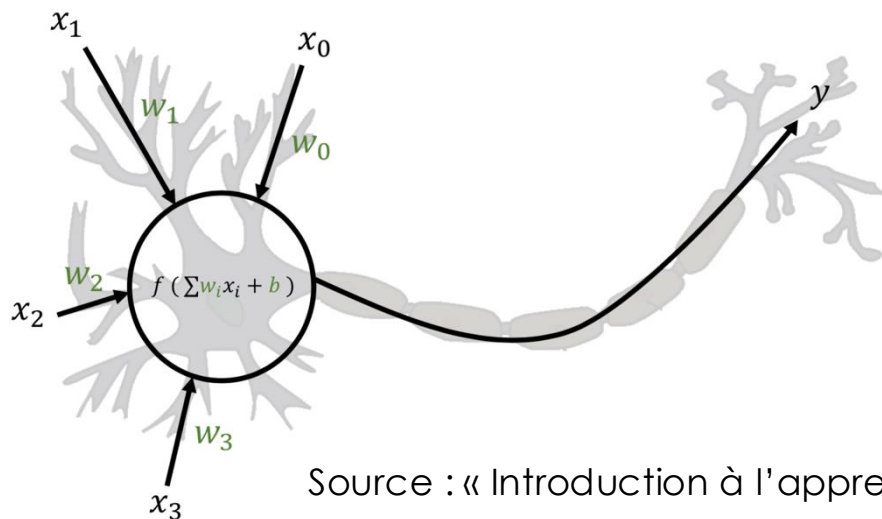


$$f_{\mathbf{w}}(\mathbf{x}) = \sigma\left(\sum_i w_i x_i\right)$$

Principe d'entraînement des IA

Un **neurone artificiel** est une fonction mathématique définie par :

- des paramètres
- une fonction d'activation

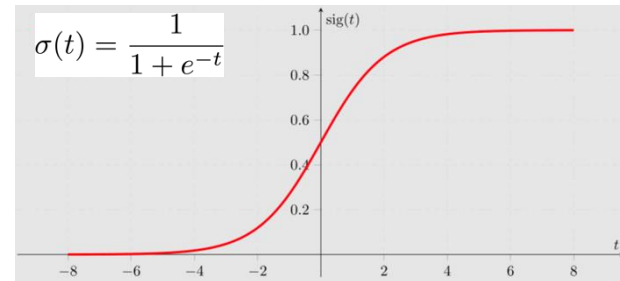
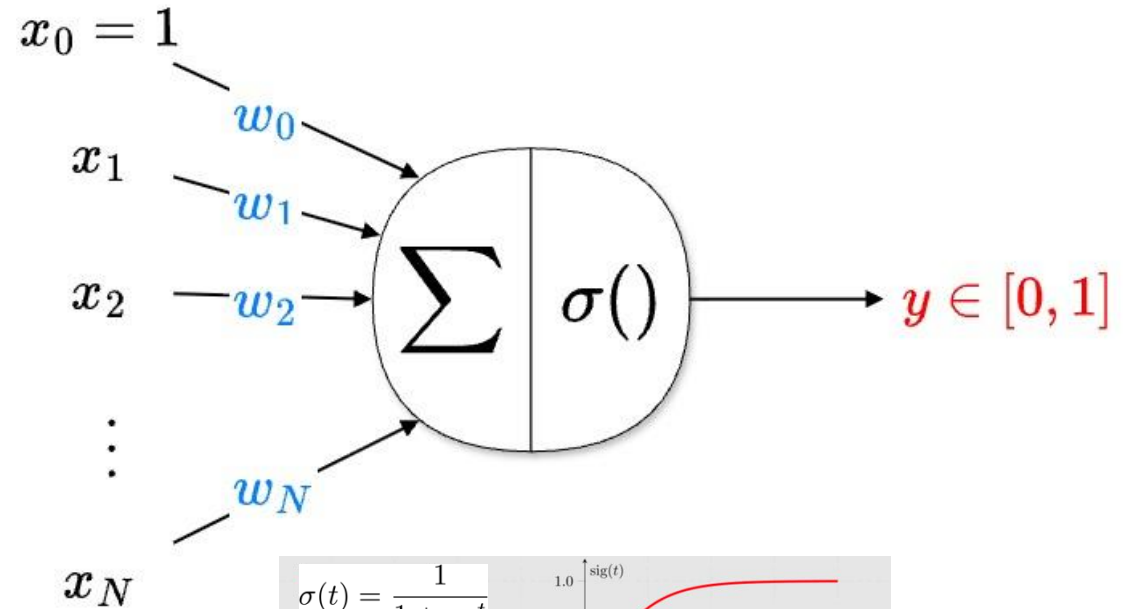
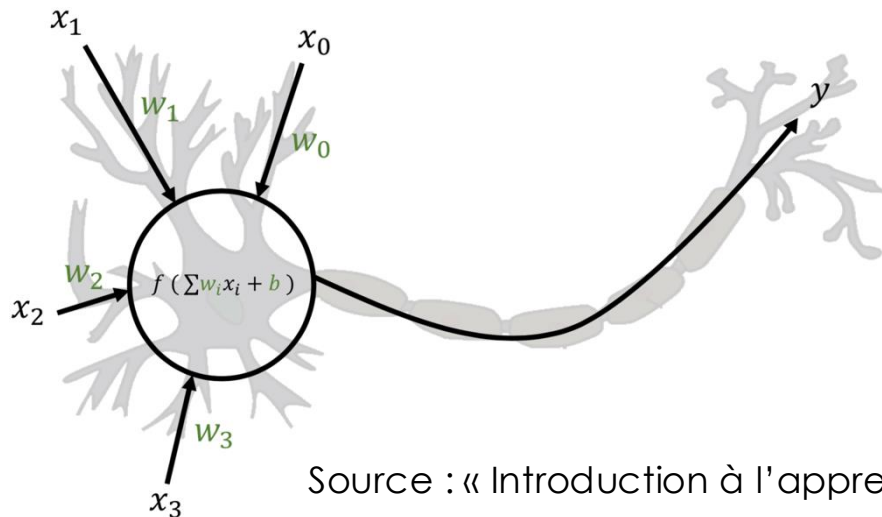


Source : « Introduction à l'apprentissage profond (deep learning) de l'intelligence artificielle », C. Douarre et al. (2021)

Principe d'entraînement des IA

Un **neurone artificiel** est une fonction mathématique définie par :

- des paramètres
- une fonction d'activation

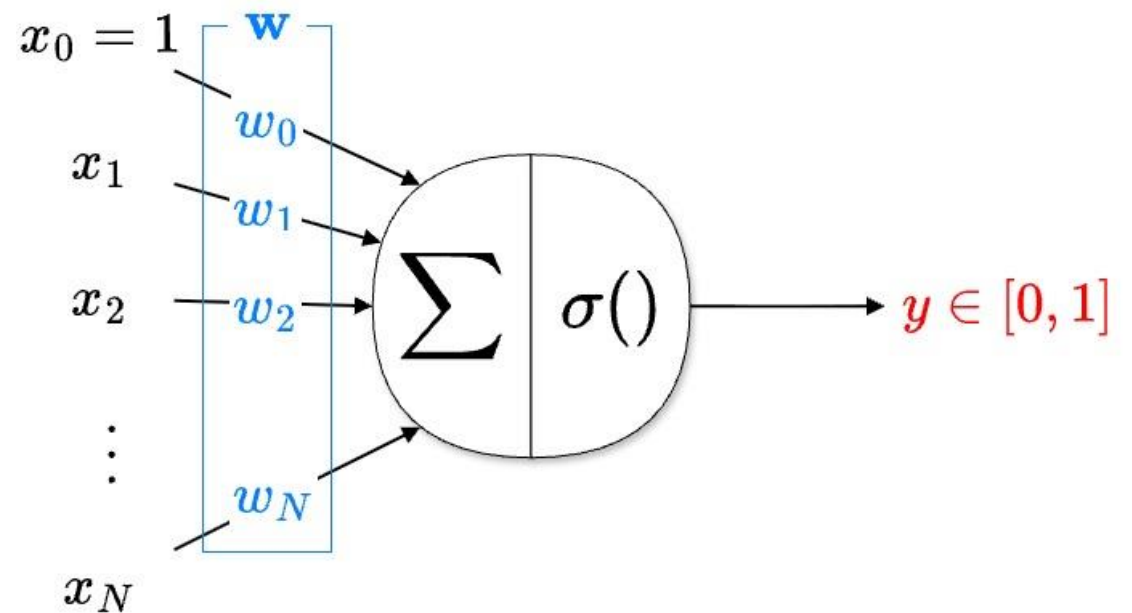
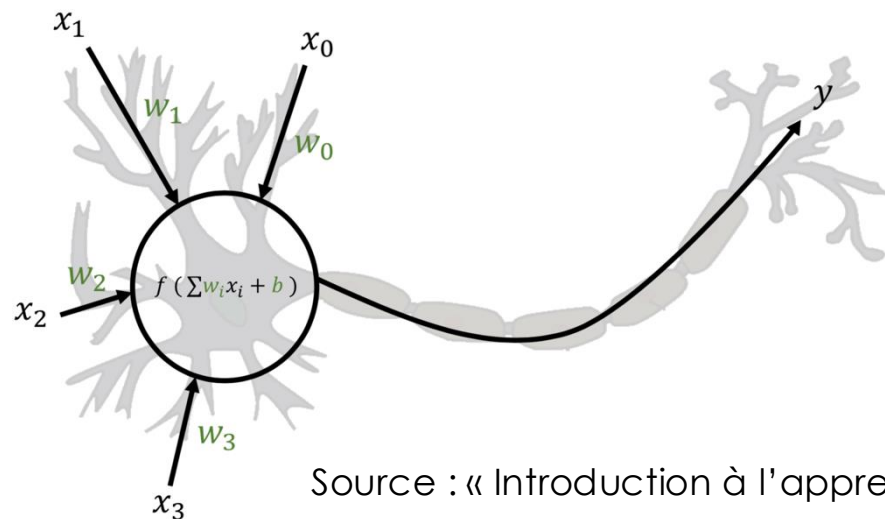


Source : « Introduction à l'apprentissage profond (deep learning) de l'intelligence artificielle », C. Douarre et al. (2021)

Principe d'entraînement des IA

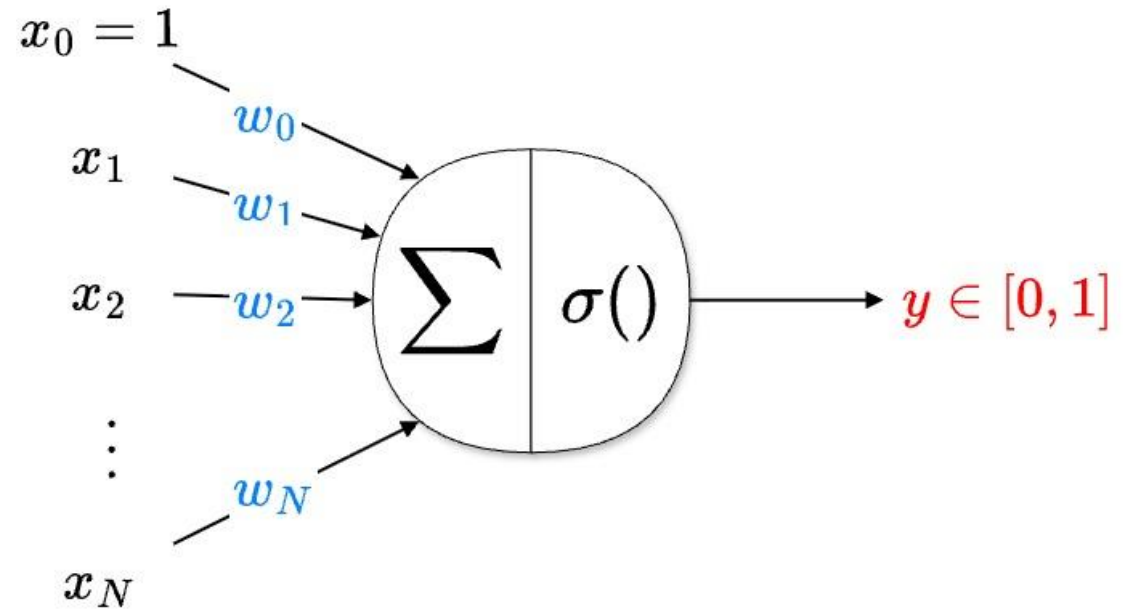
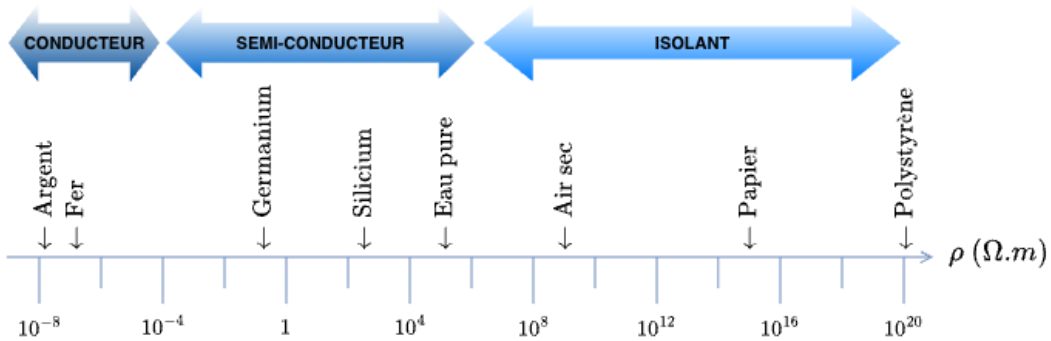
Un **neurone artificiel** est une fonction mathématique définie par :

- des paramètres
- une fonction d'activation

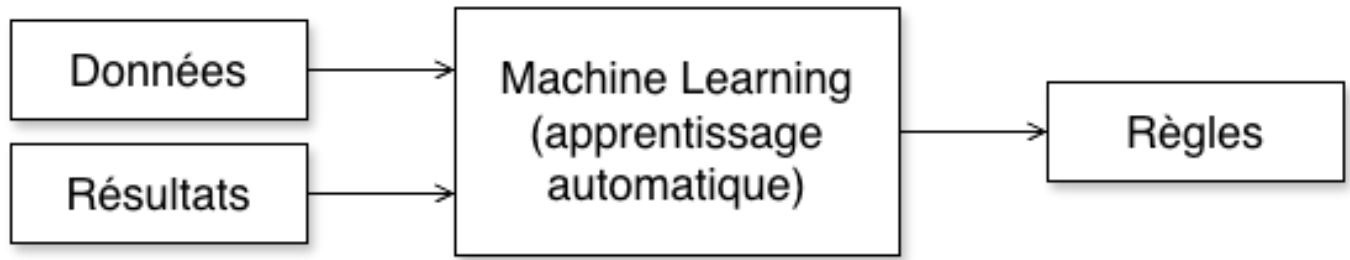
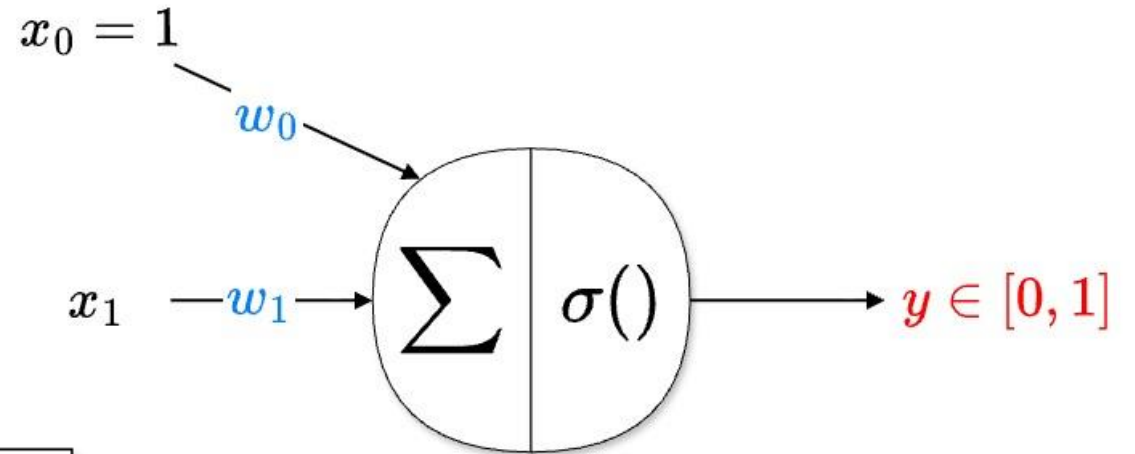
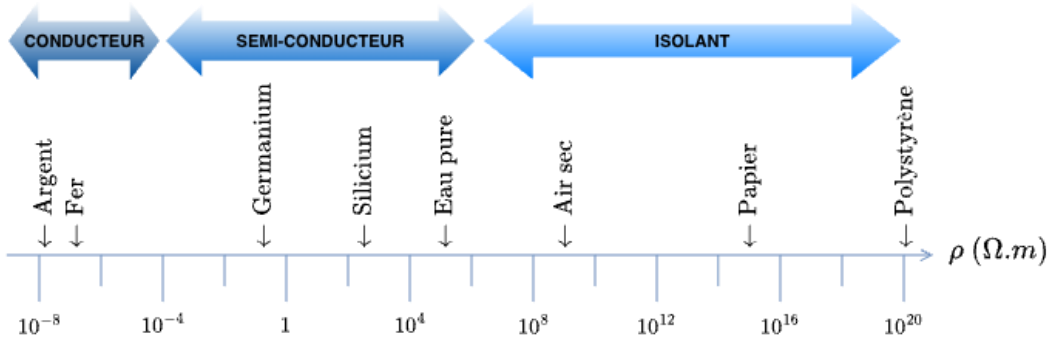


Source : « Introduction à l'apprentissage profond (deep learning) de l'intelligence artificielle », C. Douarre et al. (2021)

Principe d'entraînement des IA

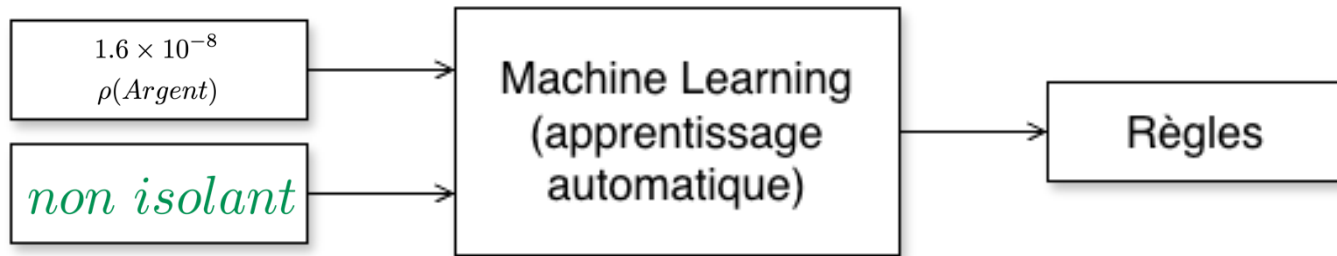
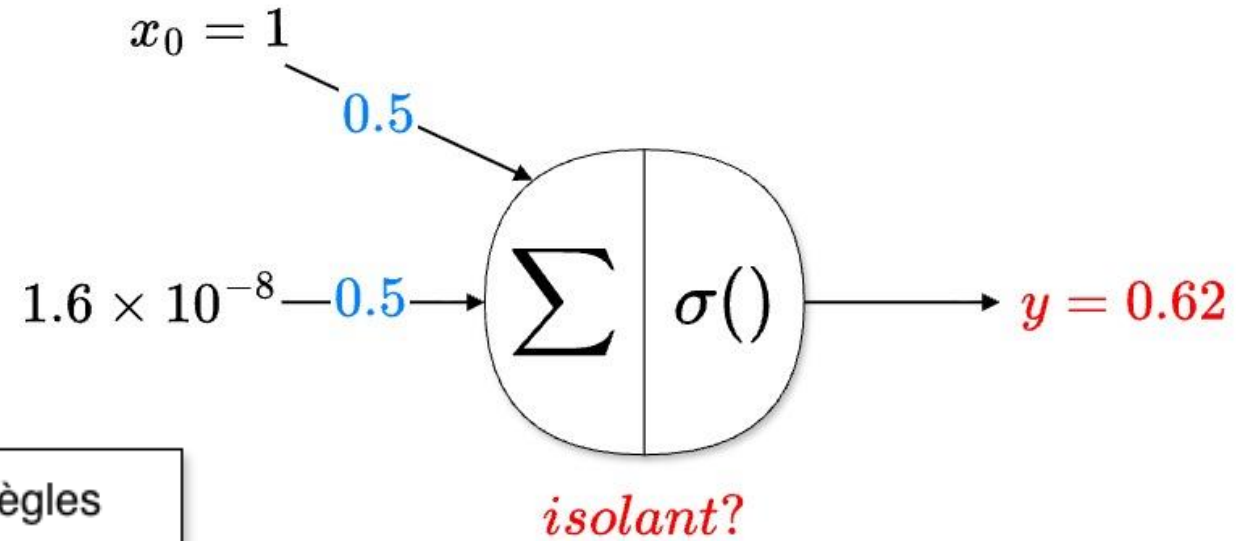
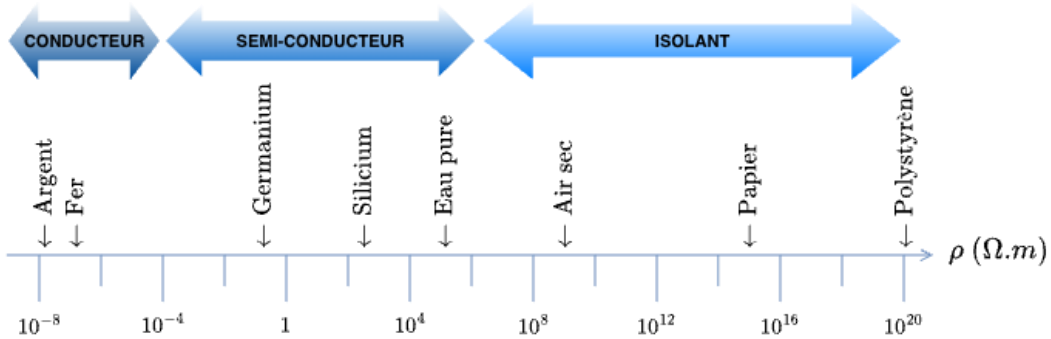


Principe d'entraînement des IA



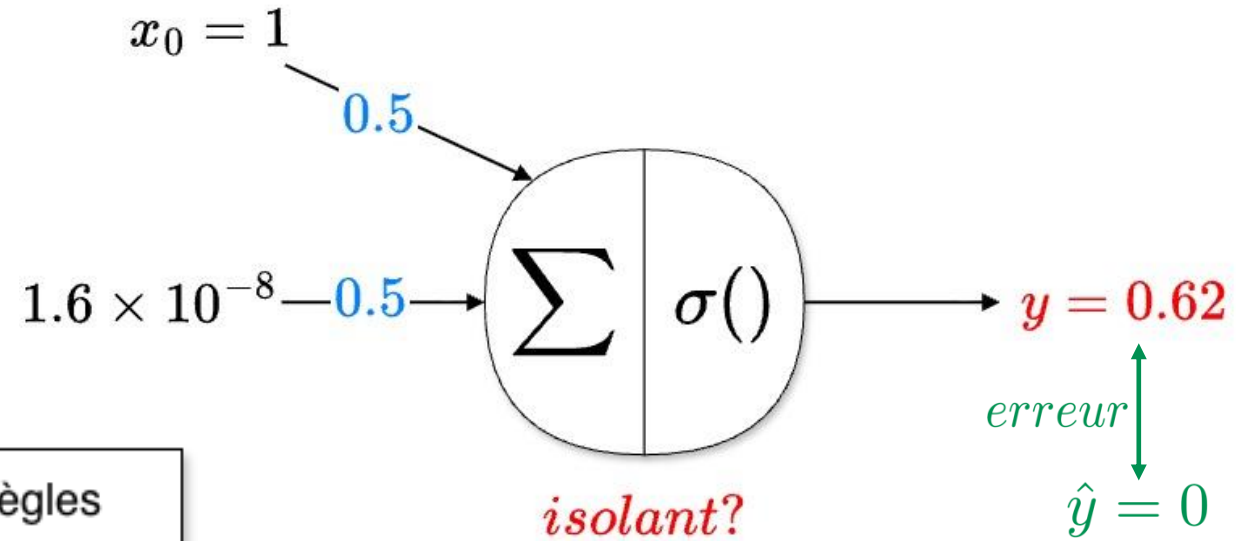
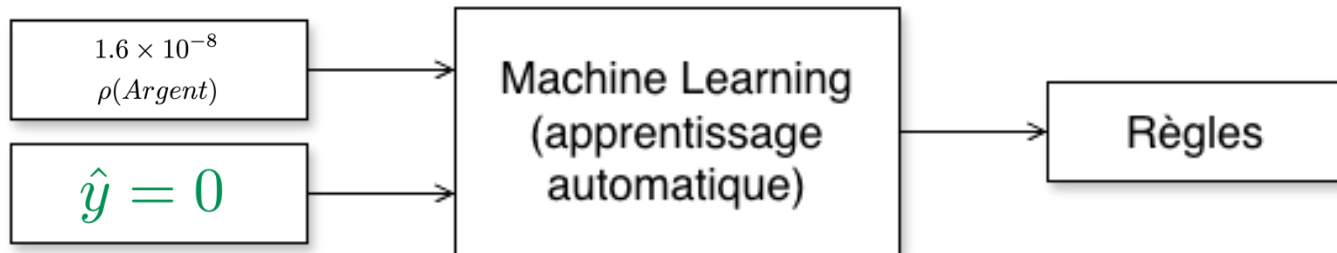
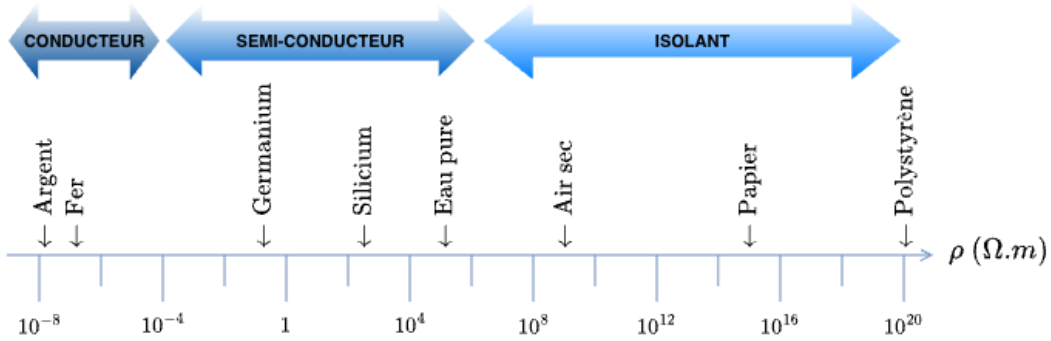
Phase d'entraînement

Principe d'entraînement des IA



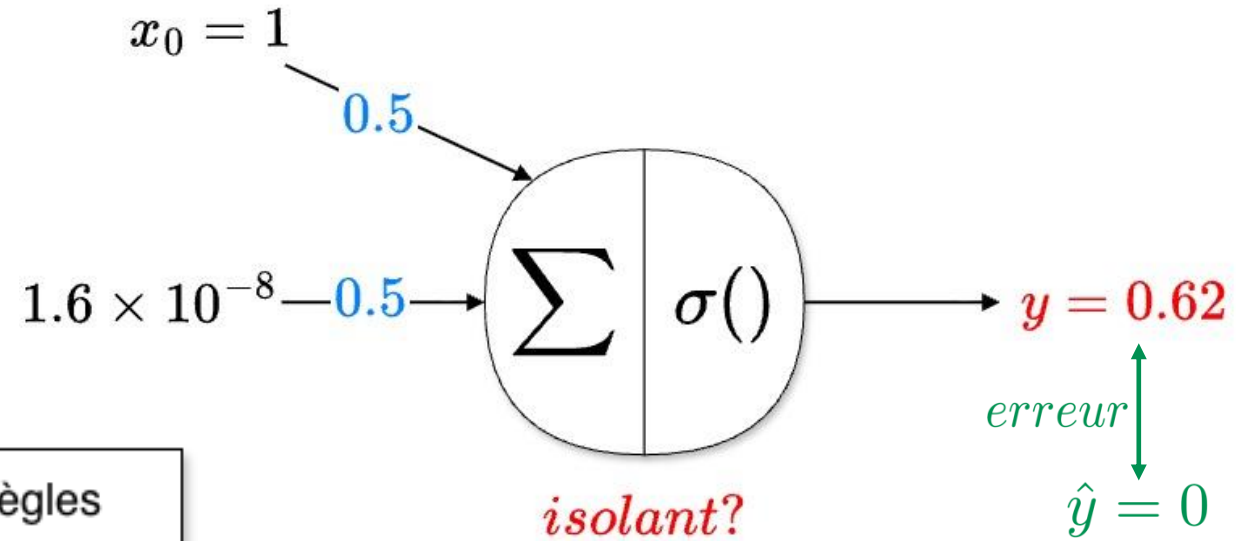
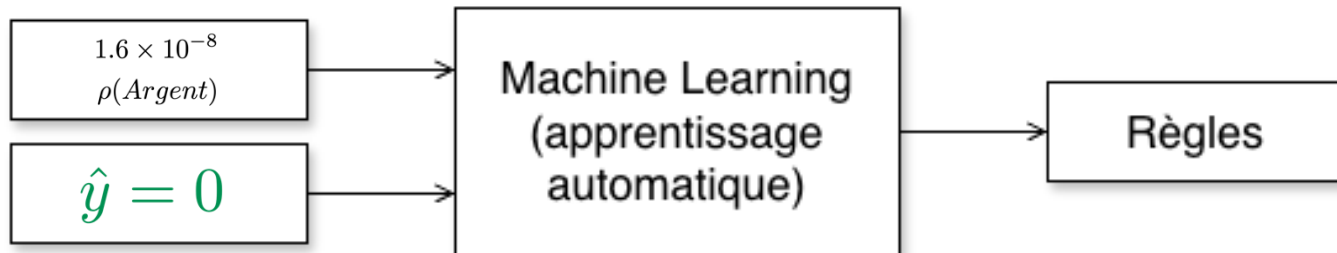
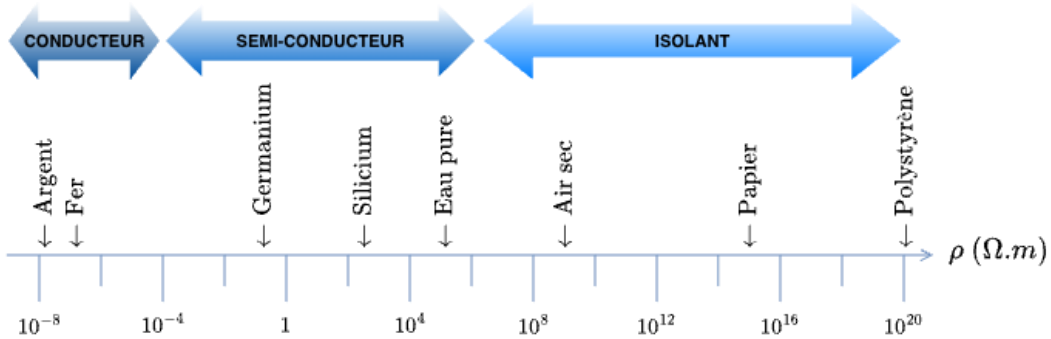
Phase d'entraînement

Principe d'entraînement des IA



Phase d'entraînement

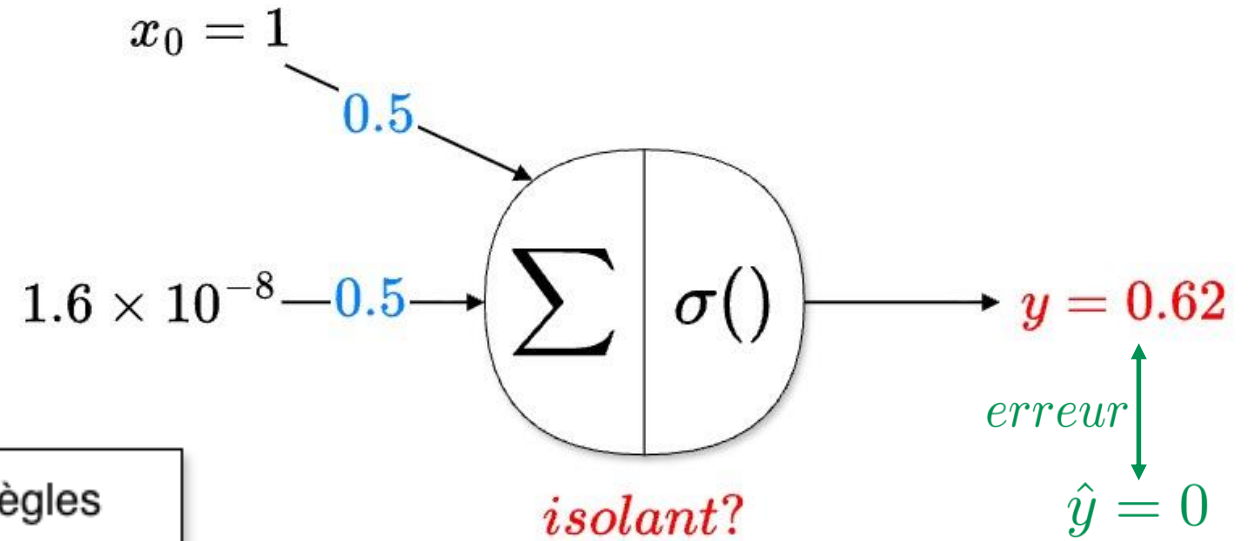
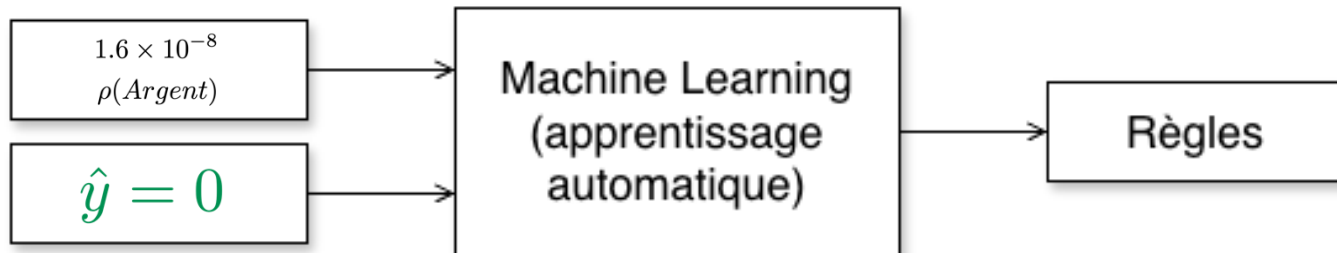
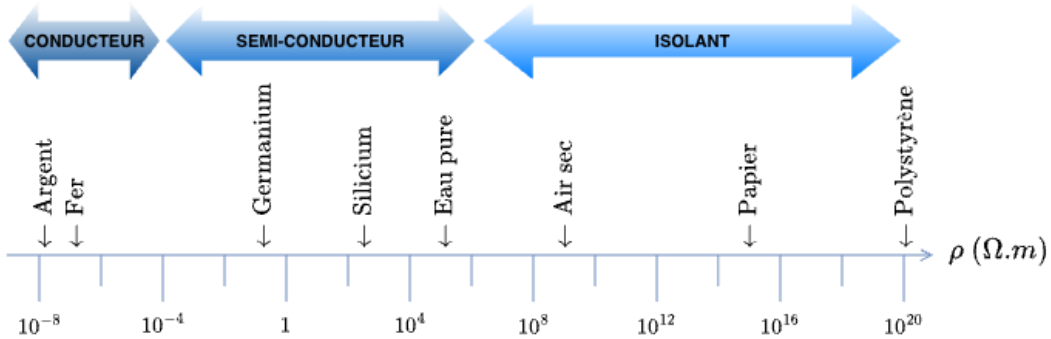
Principe d'entraînement des IA



Phase d'entraînement

$$\mathcal{L} = (y - \hat{y})^2$$

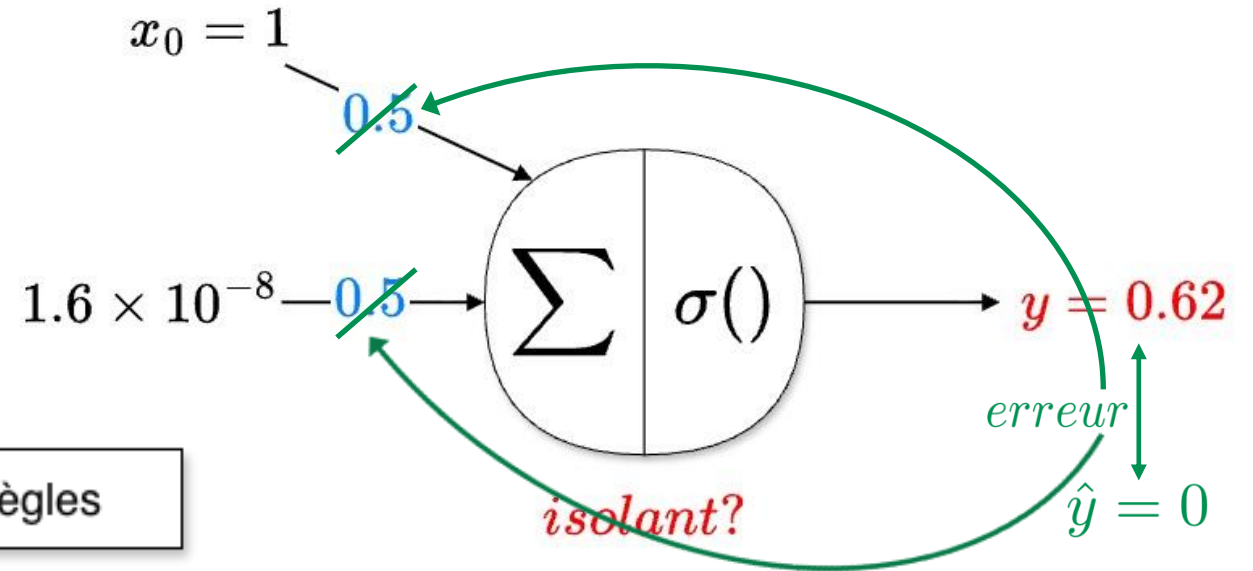
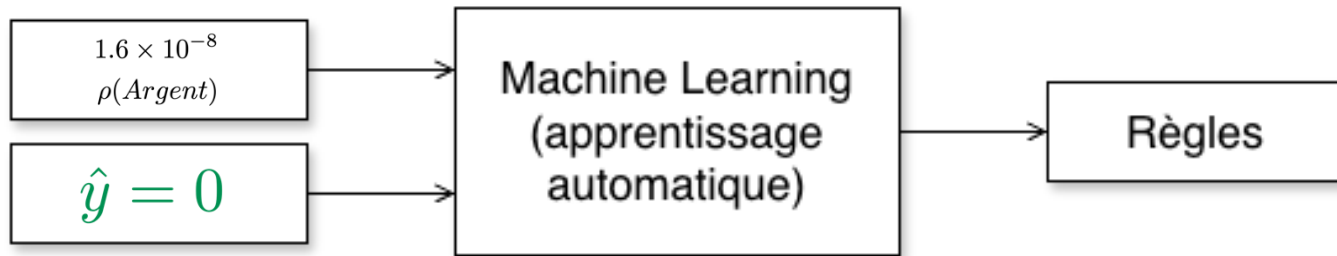
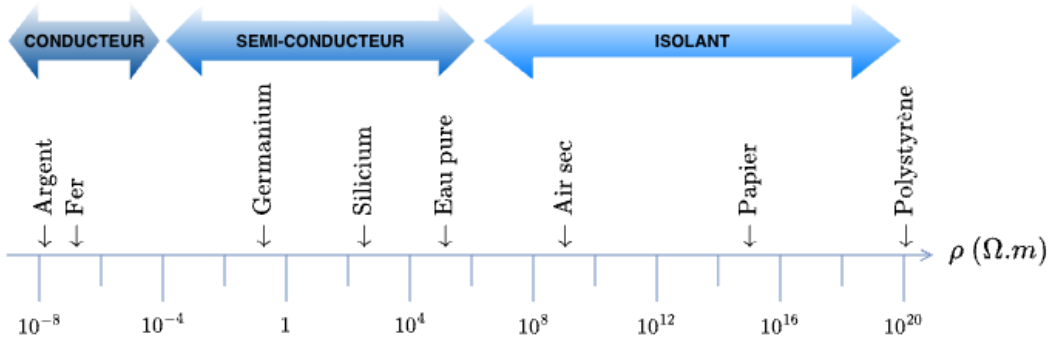
Principe d'entraînement des IA



$$\mathcal{L} = \sum_i (y_i - \hat{y}_i)^2$$

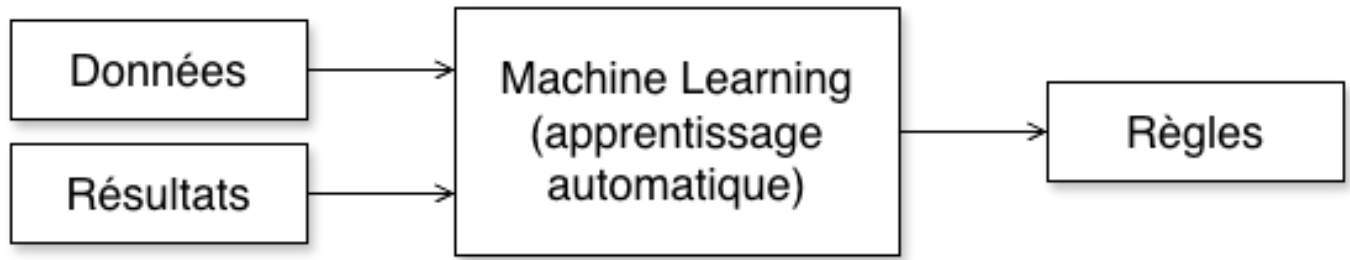
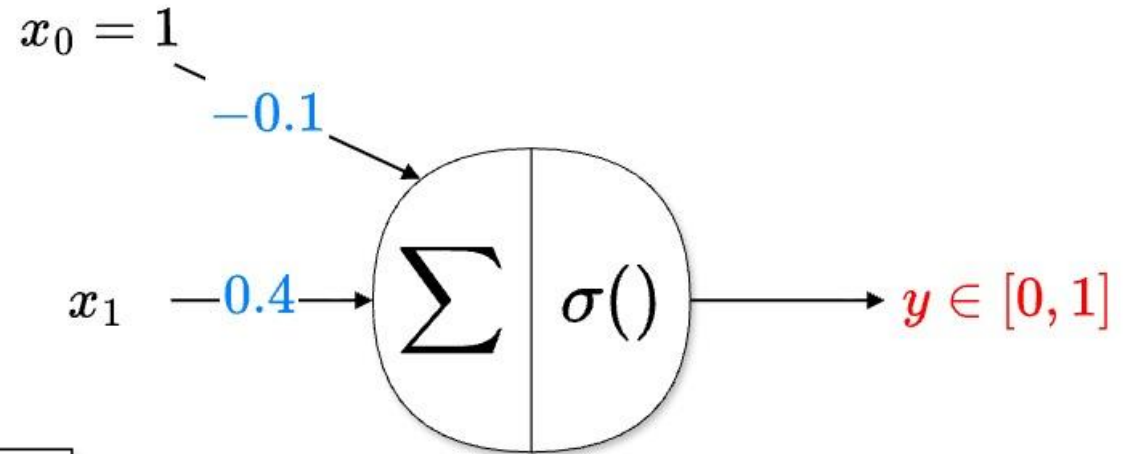
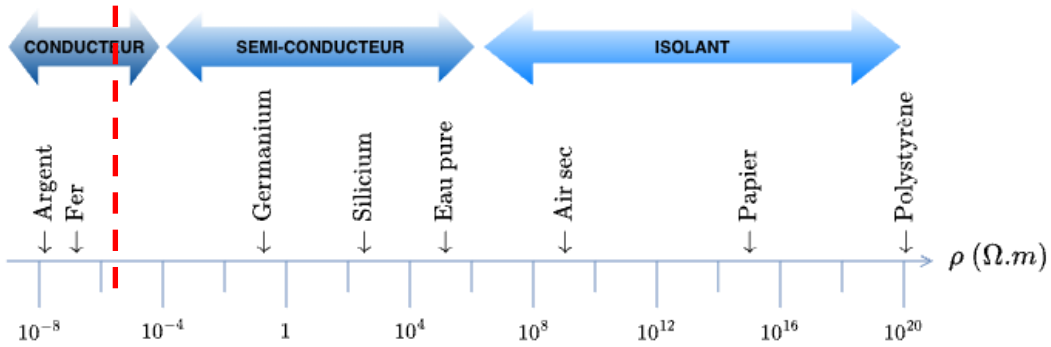
Phase d'entraînement

Principe d'entraînement des IA



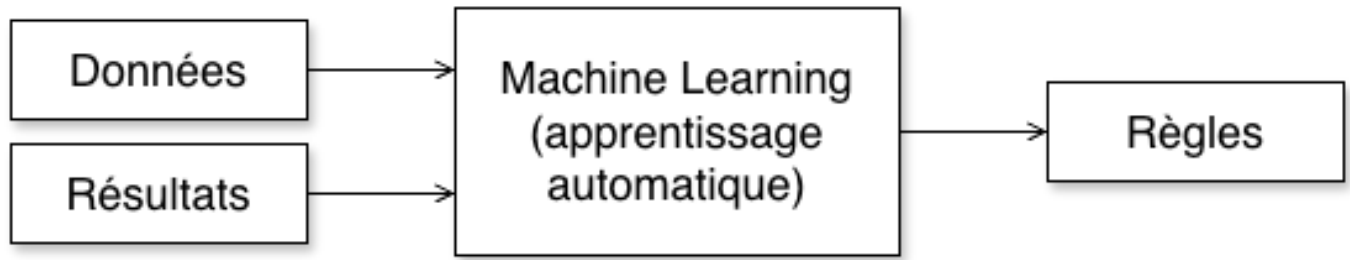
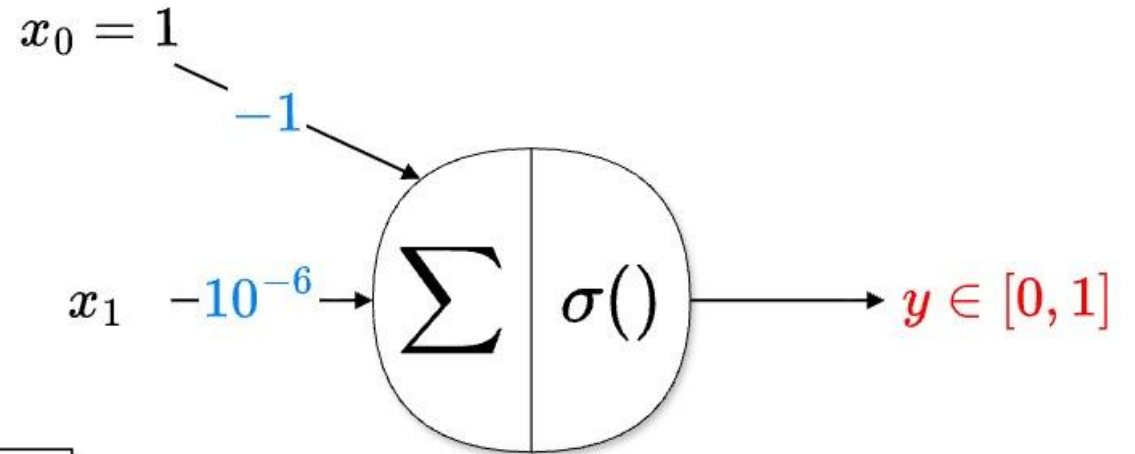
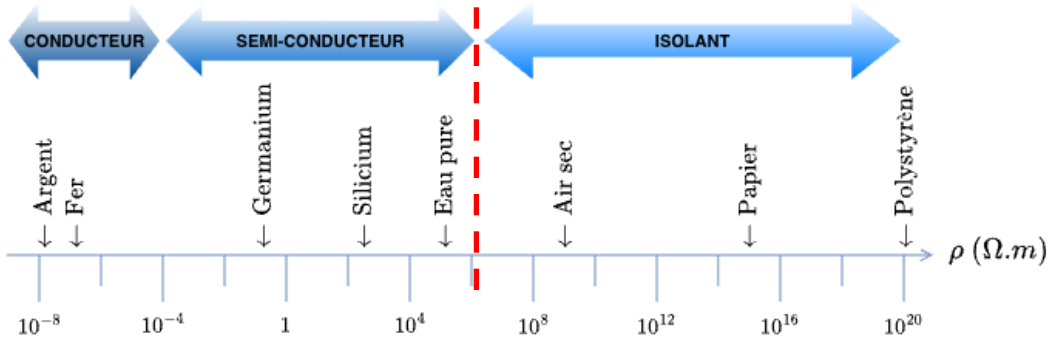
Phase d'entraînement

Principe d'entraînement des IA



Phase d'entraînement

Principe d'entraînement des IA



Phase d'entraînement

La qualité du modèle appris (règles) dépend de :

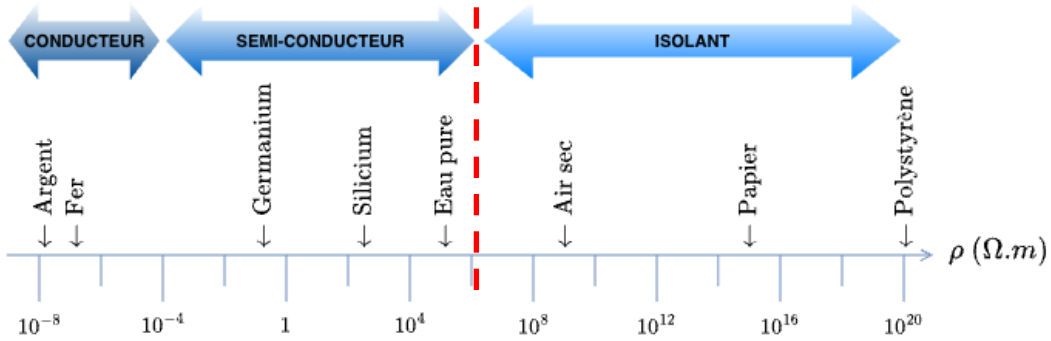
- L'adéquation du modèle à la tâche
- La **quantité** de données d'entraînement (vs. taille du modèle)
- La **qualité** des données d'entraînement (bruit, biais, etc.)

La qualité du modèle appris (règles) dépend de :

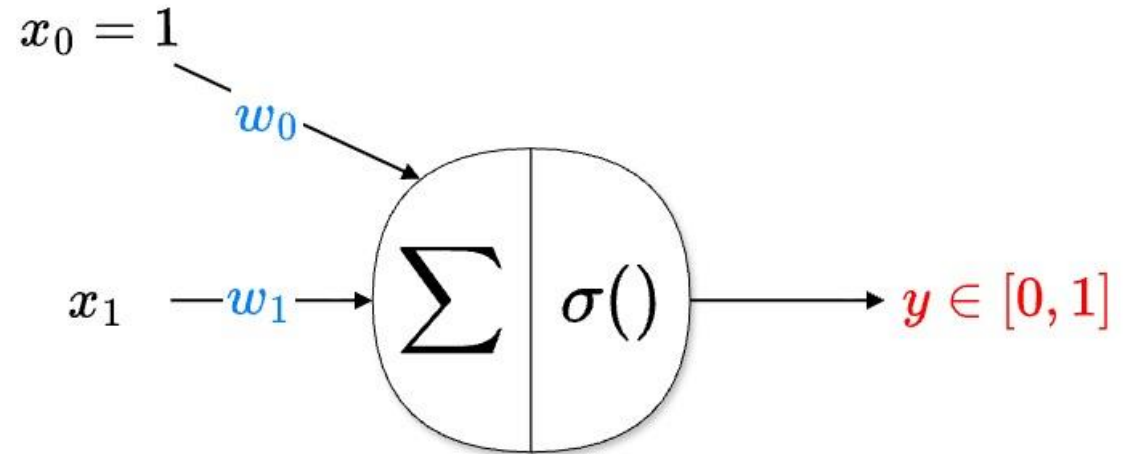
- L'adéquation du modèle à la tâche
- La **quantité** de données d'entraînement (vs. taille du modèle)
- La **qualité** des données d'entraînement (bruit, biais, etc.)

Un modèle n'est jamais fiable à 100%!

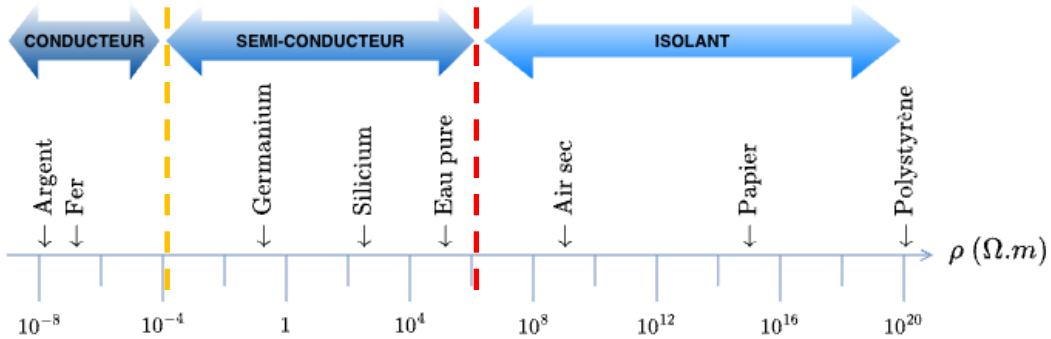
Principe d'entraînement des IA



Evolution multi-classes ?

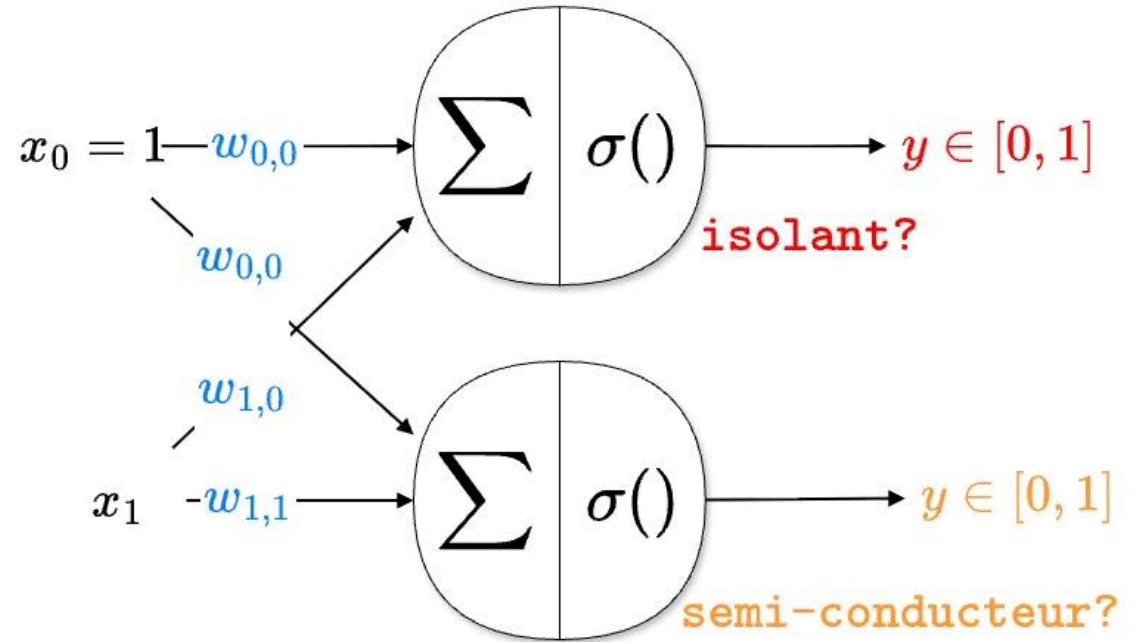


Principe d'entraînement des IA

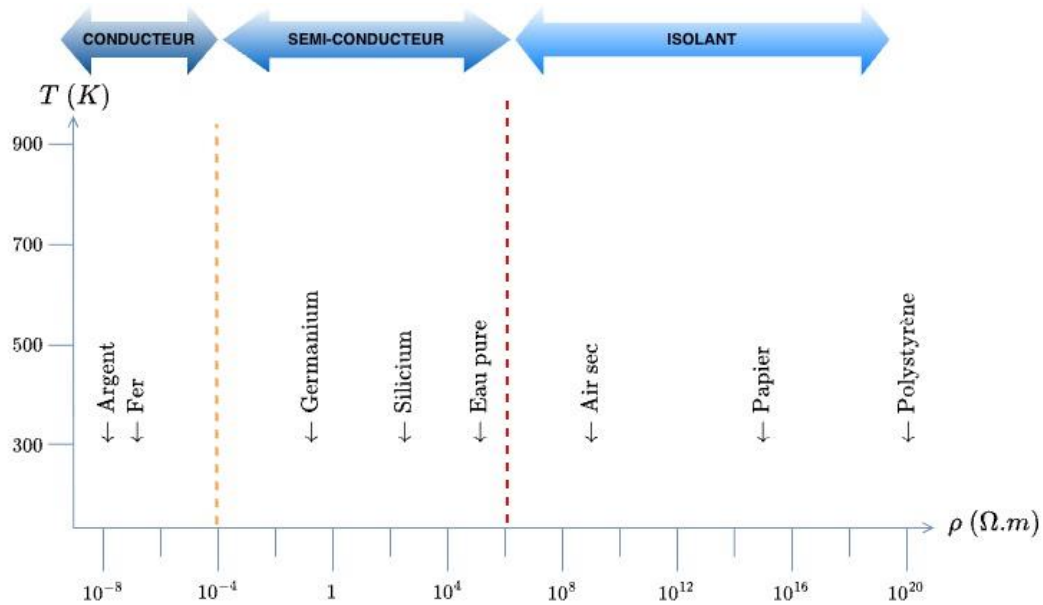


Evolution multi-classes :

- un neurone par classe (simplification)



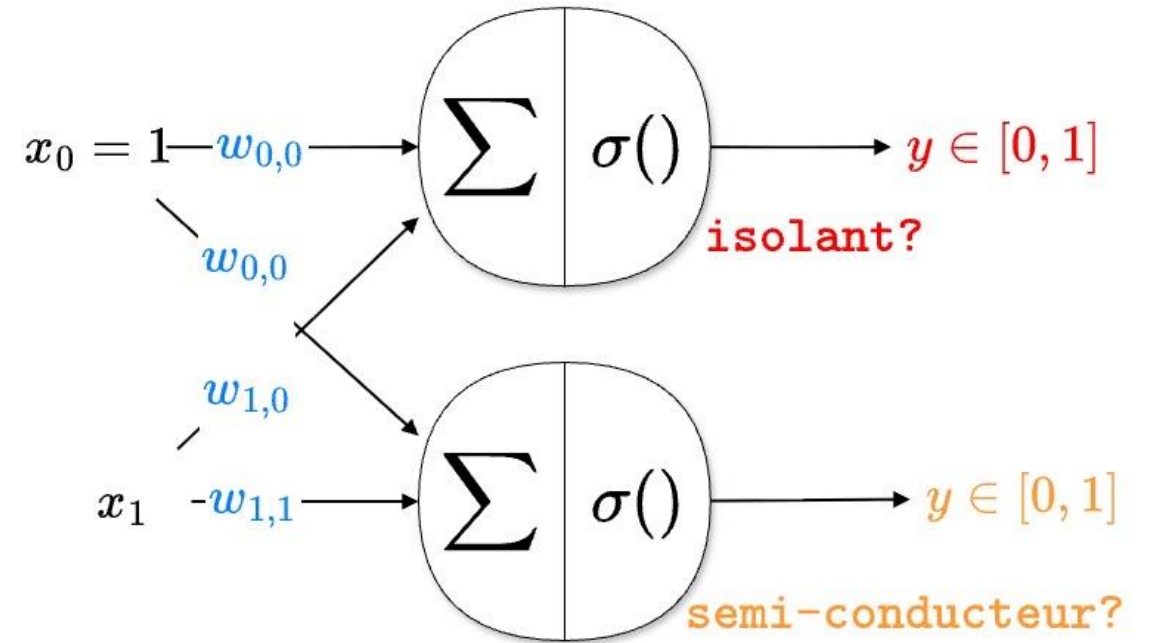
Principe d'entraînement des IA



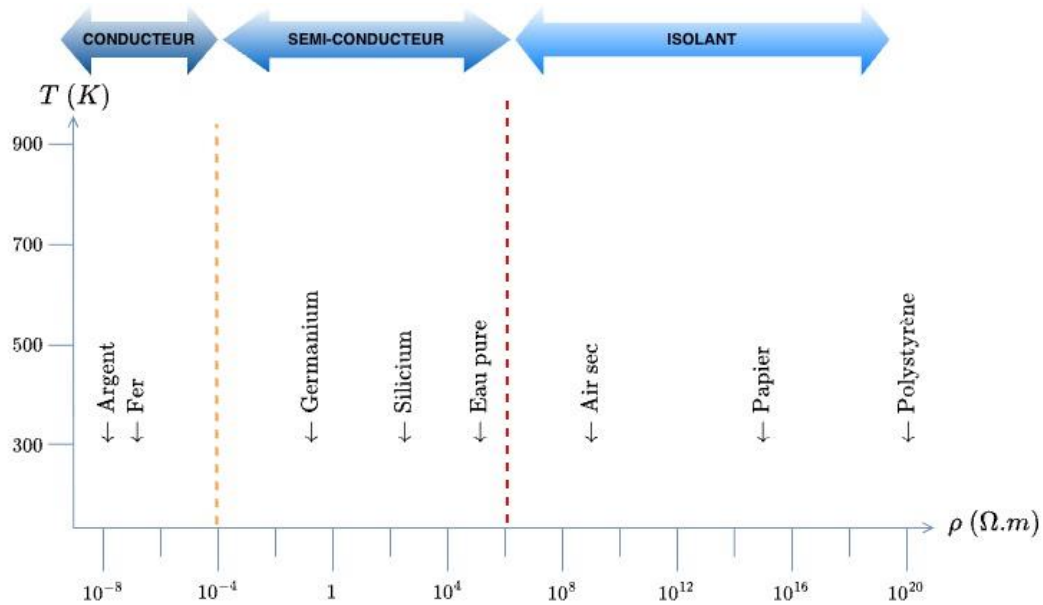
Evolution multi-classes :

- un neurone par classe (simplification)

Evolution multi-dimensionnelle ?



Principe d'entraînement des IA

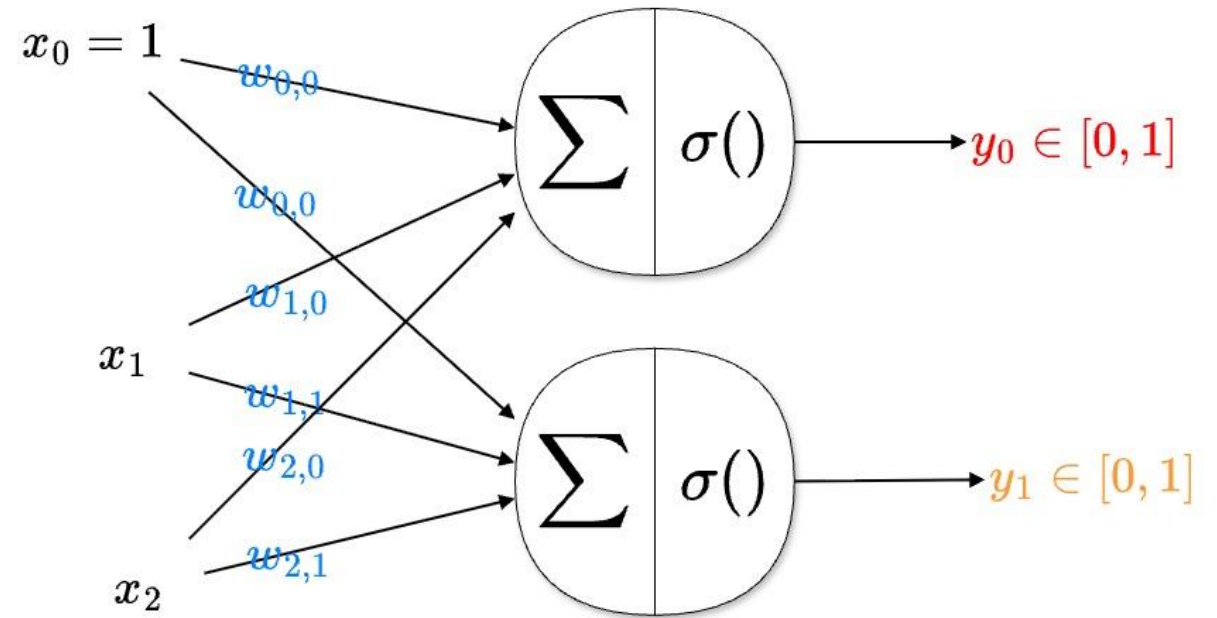


Evolution multi-classes :

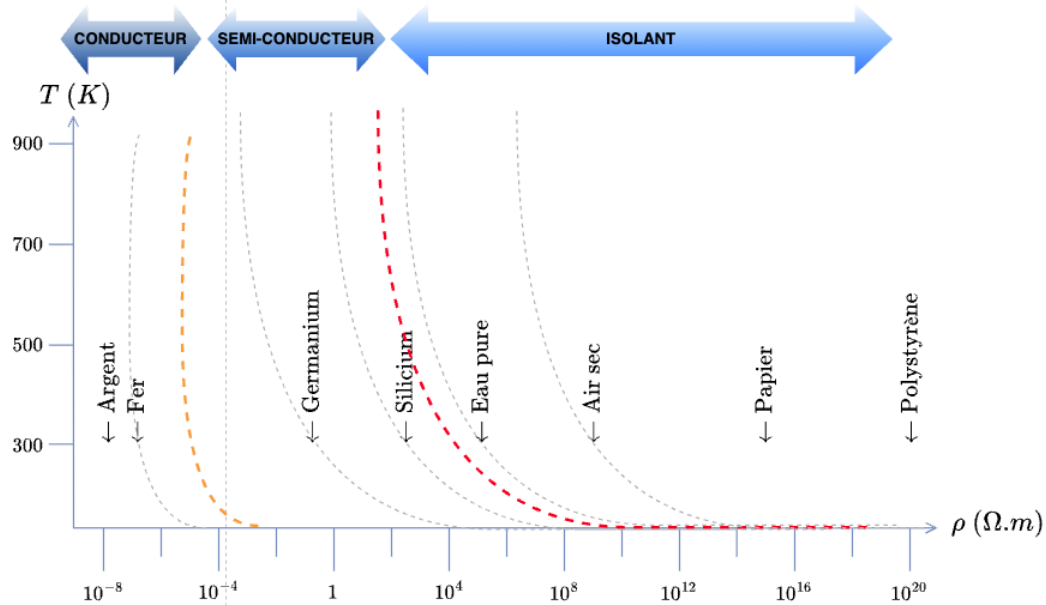
- un neurone par classe (simplification)

Evolution multi-dimensionnelle :

- Entrée multi-dimensionnelle



Principe d'entraînement des IA



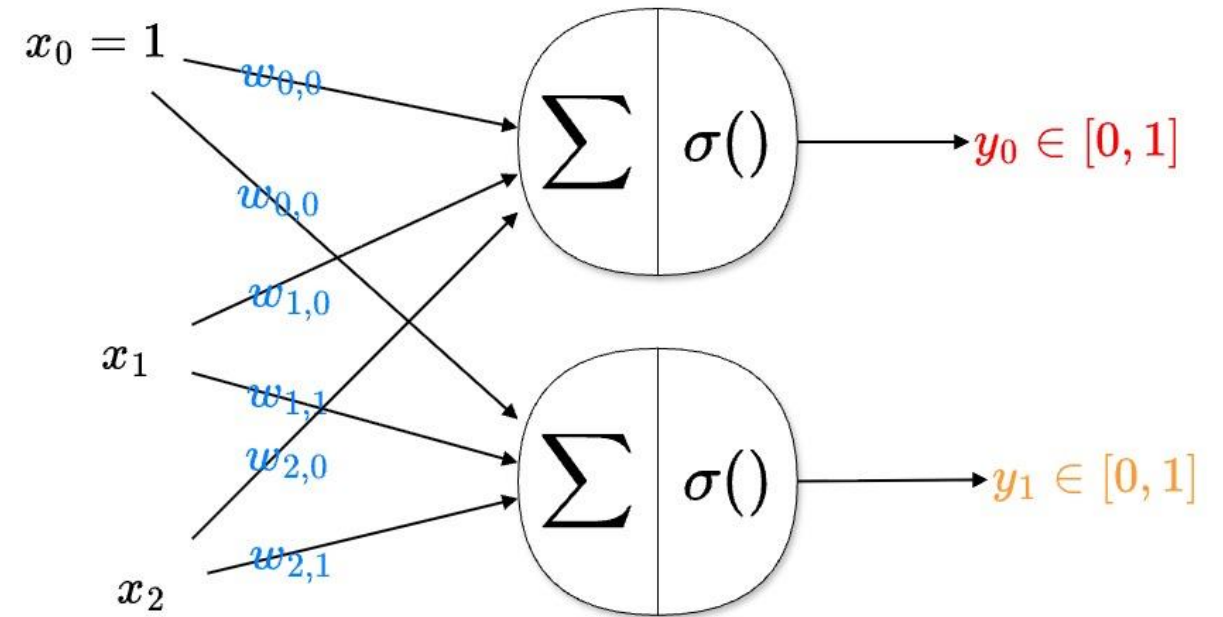
Evolution multi-classes :

- un neurone par classe (simplification)

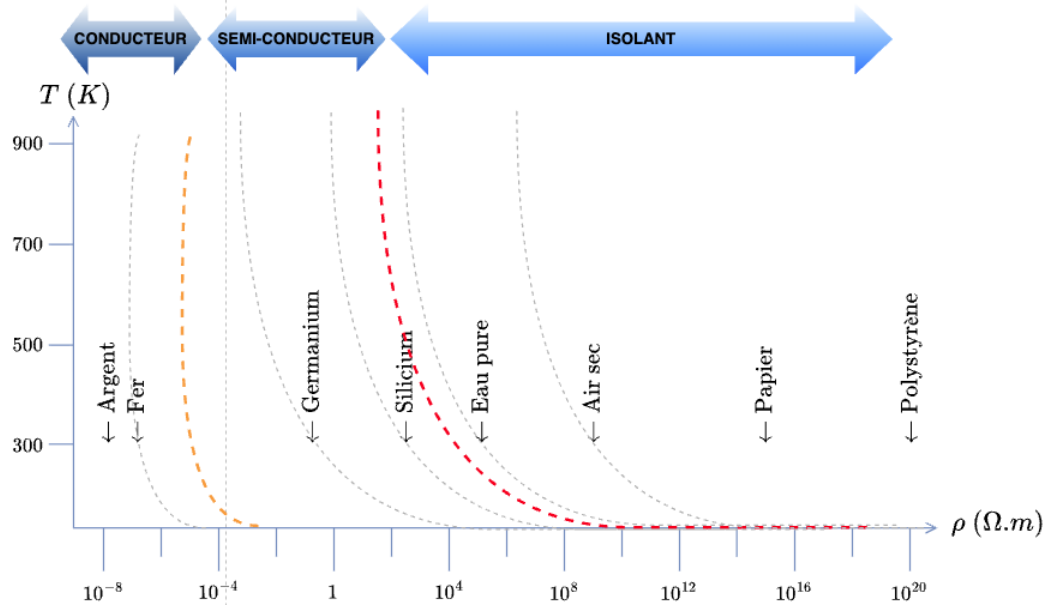
Evolution multi-dimensionnelle :

- Entrée multi-dimensionnelle

Evolution non-linéaire ?



Principe d'entraînement des IA



Evolution multi-classes :

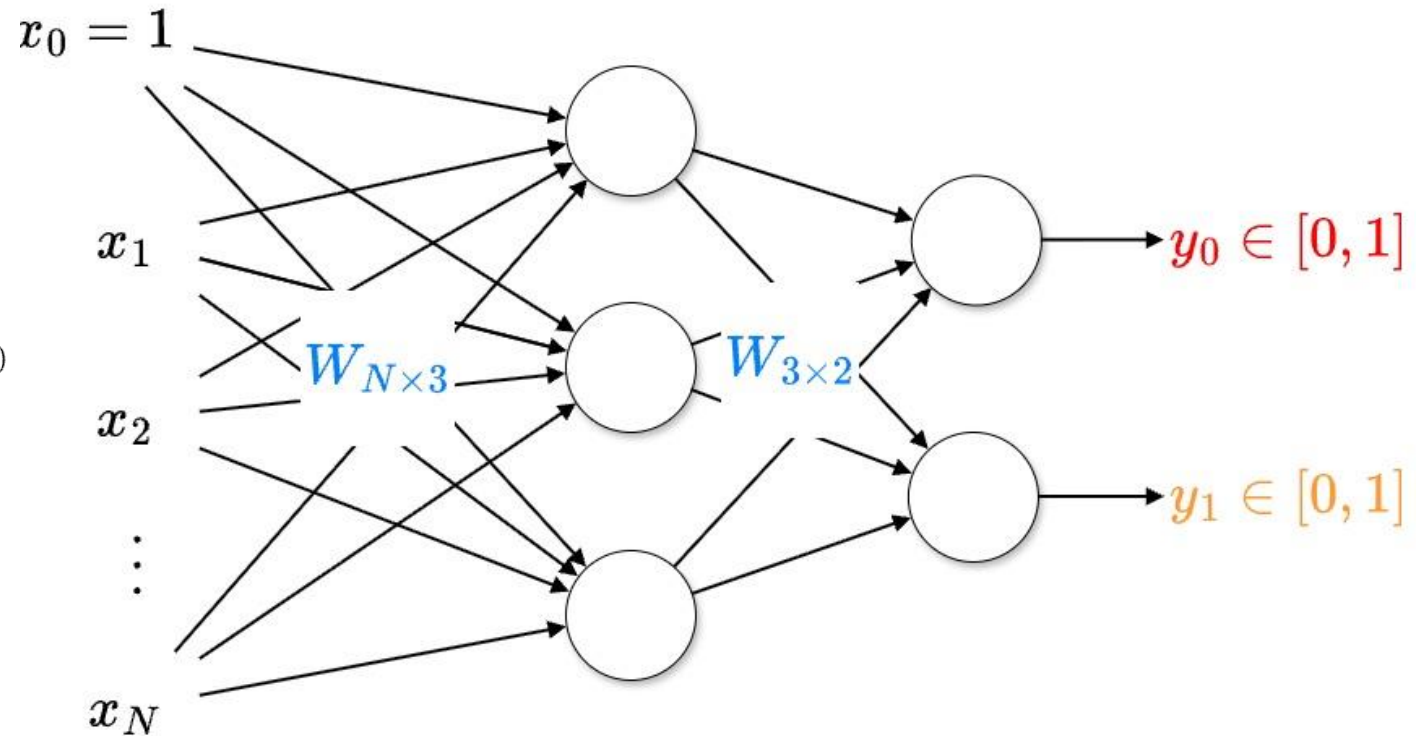
- un neurone par classe (simplification)

Evolution multi-dimensionnelle :

- Entrée multi-dimensionnelle

Evolution non-linéaire :

- Réseau de neurones en couches





SOMMAIRE

1. Exemple introductif
2. Principe de fonctionnement des IA (machine learning)
3. Deux cas d'usage en Physique-Chimie
4. Les IA génératives (IAG)
5. Les risques et limites
6. Défi et cadre d'usage en éducation

Cas d'usage en Chimie

Hadipour et al. *BMC Bioinformatics* 2022, **23**(Suppl 4):132
<https://doi.org/10.1186/s12859-022-04667-1>

BMC Bioinformatics

RESEARCH

Open Access

Deep clustering of small molecules at large-scale via variational autoencoder embedding and K-means

Hamid Hadipour^{1†}, Chengyou Liu^{2†}, Rebecca Davis³, Silvia T. Cardona^{4,5} and Pingzhao Hu^{1,2,6,7*}

From The 20th International Conference on Bioinformatics (InCoB 2021) Kunming, China. 6-8 November 2021

*Correspondence: pingzhao.hu@umanitoba.ca

[†]Hamid Hadipour and Chengyou Liu have contributed equally to this work and co-first author.

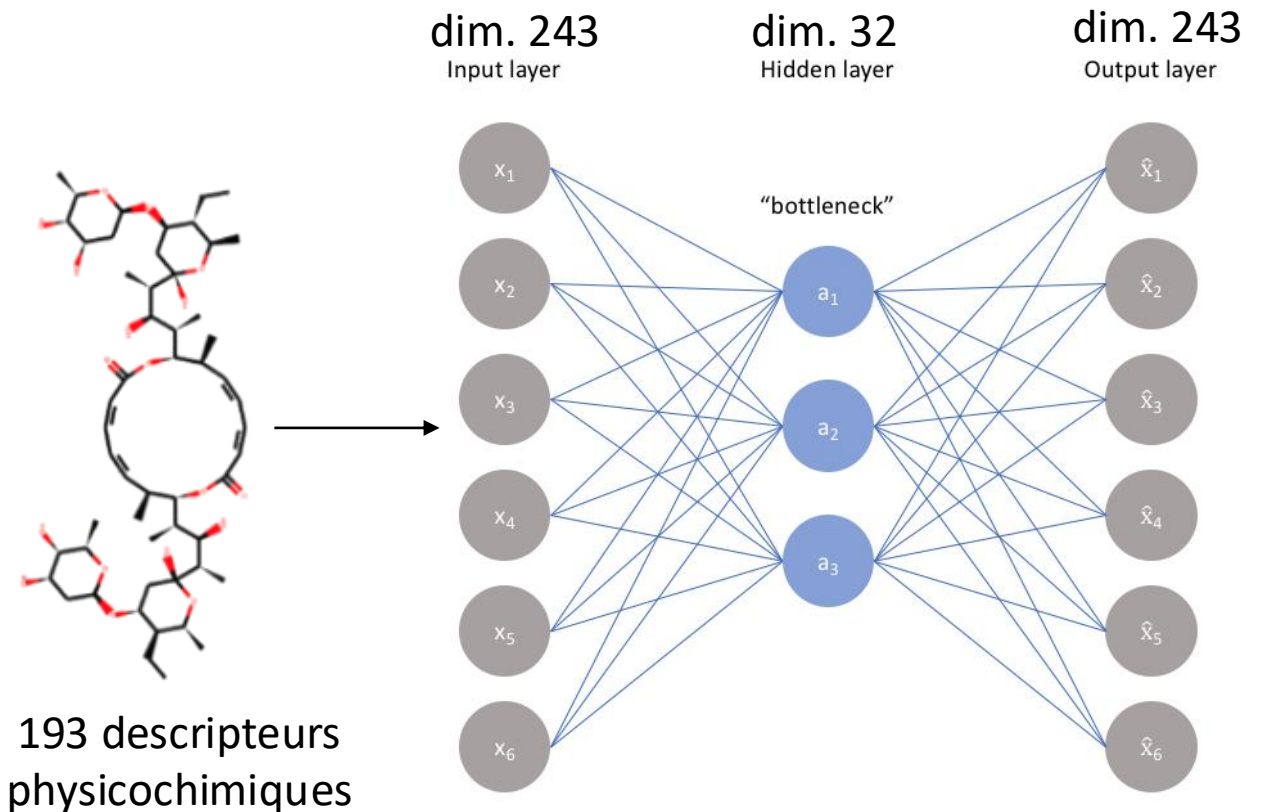
⁶ Department of Biochemistry and Medical Genetics, University of Manitoba, Room 308 - Basic Medical Sciences Building, 745 Bannatyne Avenue, Winnipeg, MB R3E 0J9, Canada

Full list of author information is available at the end of the

Abstract

Background: Converting molecules into computer-interpretable features with rich molecular information is a core problem of data-driven machine learning applications in chemical and drug-related tasks. Generally speaking, there are global and local features to represent a given molecule. As most algorithms have been developed based on one type of feature, a remaining bottleneck is to combine both feature sets for advanced molecule-based machine learning analysis. Here, we explored a novel analytical framework to make embeddings of the molecular features and apply them in the clustering of a large number of small molecules.

Results: In this framework, we first introduced a principal component analysis method encoding the molecule-specific atom and bond information. We then used a



193 descripteurs physicochimiques

+

50 composantes PCA de structure moléculaire

Auto-encodeur

Cas d'usage en Chimie

Hadipour et al. *BMC Bioinformatics* 2022, **23**(Suppl 4):132
<https://doi.org/10.1186/s12859-022-04667-1>

BMC Bioinformatics

RESEARCH

Open Access

Deep clustering of small molecules at large-scale via variational autoencoder embedding and K-means

Hamid Hadipour^{1†}, Chengyou Liu^{2†}, Rebecca Davis³, Silvia T. Cardona^{4,5} and Pingzhao Hu^{1,2,6,7*}

From The 20th International Conference on Bioinformatics (InCoB 2021) Kunming, China. 6-8 November 2021

*Correspondence:
pingzhao.hu@umanitoba.ca

[†]Hamid Hadipour and Chengyou Liu have contributed equally to this work and co-first author.

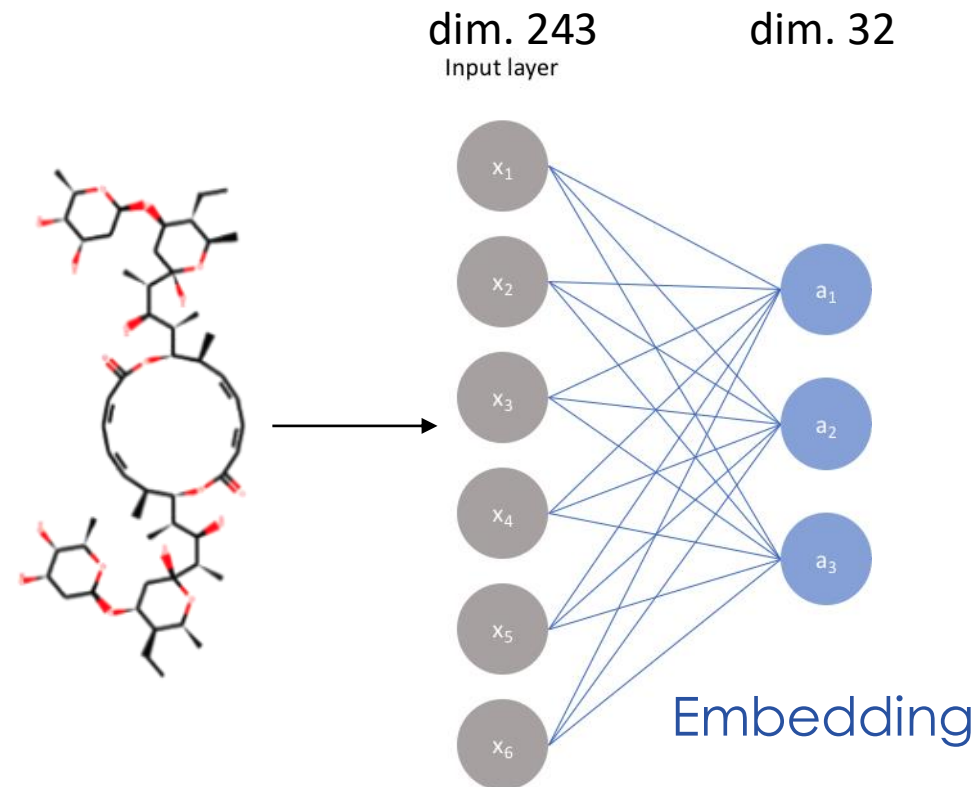
⁶ Department of Biochemistry and Medical Genetics, University of Manitoba, Room 308 - Basic Medical Sciences Building, 745 Bannatyne Avenue, Winnipeg, MB R3E 0J9, Canada

Full list of author information is available at the end of the

Abstract

Background: Converting molecules into computer-interpretable features with rich molecular information is a core problem of data-driven machine learning applications in chemical and drug-related tasks. Generally speaking, there are global and local features to represent a given molecule. As most algorithms have been developed based on one type of feature, a remaining bottleneck is to combine both feature sets for advanced molecule-based machine learning analysis. Here, we explored a novel analytical framework to make embeddings of the molecular features and apply them in the clustering of a large number of small molecules.

Results: In this framework, we first introduced a principal component analysis method encoding the molecule-specific atom and bond information. We then used a



Hadipour et al. *BMC Bioinformatics* 2022, **23**(Suppl 4):132
<https://doi.org/10.1186/s12859-022-04667-1>

BMC Bioinformatics

RESEARCH

Open Access

Deep clustering of small molecules at large-scale via variational autoencoder embedding and K-means

Hamid Hadipour^{1†}, Chengyou Liu^{2†}, Rebecca Davis³, Silvia T. Cardona^{4,5} and Pingzhao Hu^{1,2,6,7*}

From The 20th International Conference on Bioinformatics (InCoB 2021) Kunming, China. 6-8 November 2021

*Correspondence:
pingzhao.hu@umanitoba.ca

[†]Hamid Hadipour and Chengyou Liu have contributed equally to this work and co-first author.

⁶ Department of Biochemistry and Medical Genetics, University of Manitoba, Room 308 - Basic Medical Sciences Building, 745 Bannatyne Avenue, Winnipeg, MB R3E 0J9, Canada

Full list of author information is available at the end of the

Abstract

Background: Converting molecules into computer-interpretable features with rich molecular information is a core problem of data-driven machine learning applications in chemical and drug-related tasks. Generally speaking, there are global and local features to represent a given molecule. As most algorithms have been developed based on one type of feature, a remaining bottleneck is to combine both feature sets for advanced molecule-based machine learning analysis. Here, we explored a novel analytical framework to make embeddings of the molecular features and apply them in the clustering of a large number of small molecules.

Results: In this new framework, we first introduced a principal component analysis method encoding the molecule-specific atom and bond information. We then used a

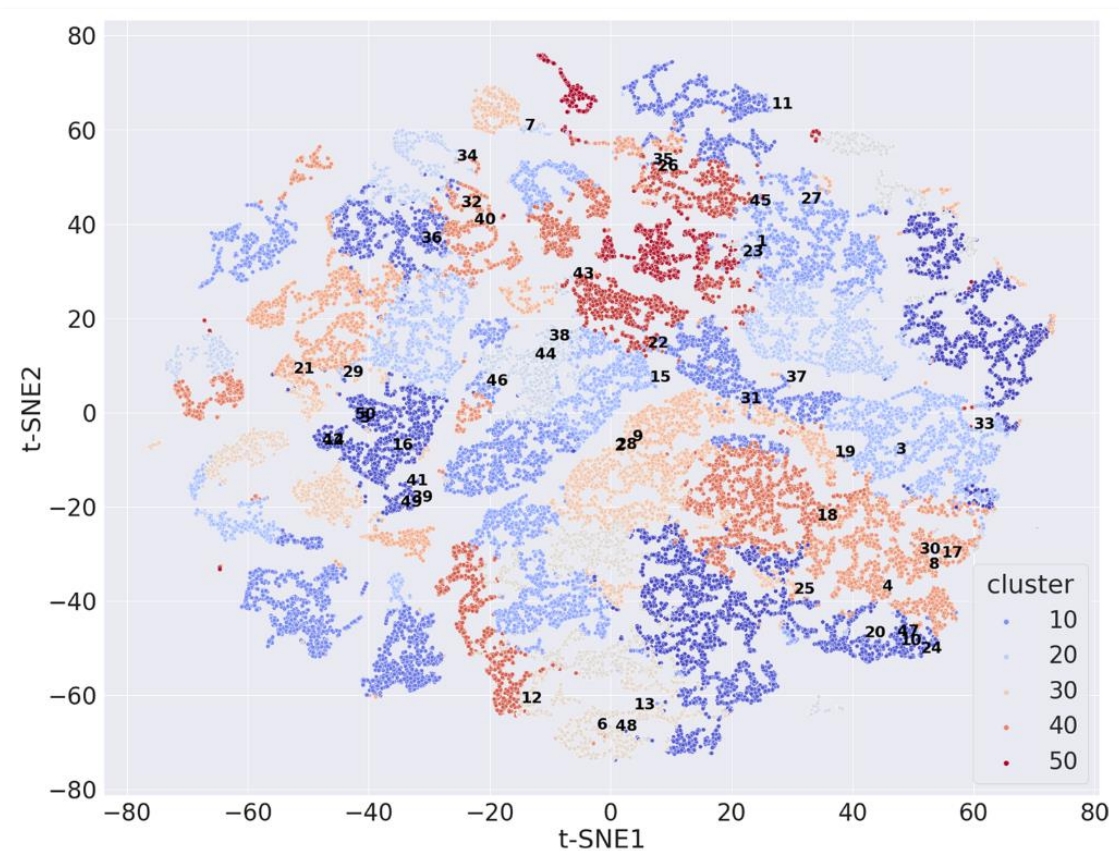


Fig. 5 The t-SNE visualization of the 32 embeddings from the VAE algorithm. The numbers are the cluster IDs from the results of VAE (32) + K-means. The colors represent the t-SNE analysis results

Cas d'usage en Chimie

Hadipour et al. *BMC Bioinformatics* 2022, **23**(Suppl 4):132
<https://doi.org/10.1186/s12859-022-04667-1>

BMC Bioinformatics

RESEARCH

Open Access

Deep clustering of small molecules at large-scale via variational autoencoder embedding and K-means

Hamid Hadipour^{1†}, Chengyou Liu^{2†}, Rebecca Davis³, Silvia T. Cardona^{4,5} and Pingzhao Hu^{1,2,6,7*}

From The 20th International Conference on Bioinformatics (InCoB 2021) Kunming, China. 6-8 November 2021

*Correspondence: pingzhao.hu@umanitoba.ca
[†]Hamid Hadipour and Chengyou Liu have contributed equally to this work and co-first author.

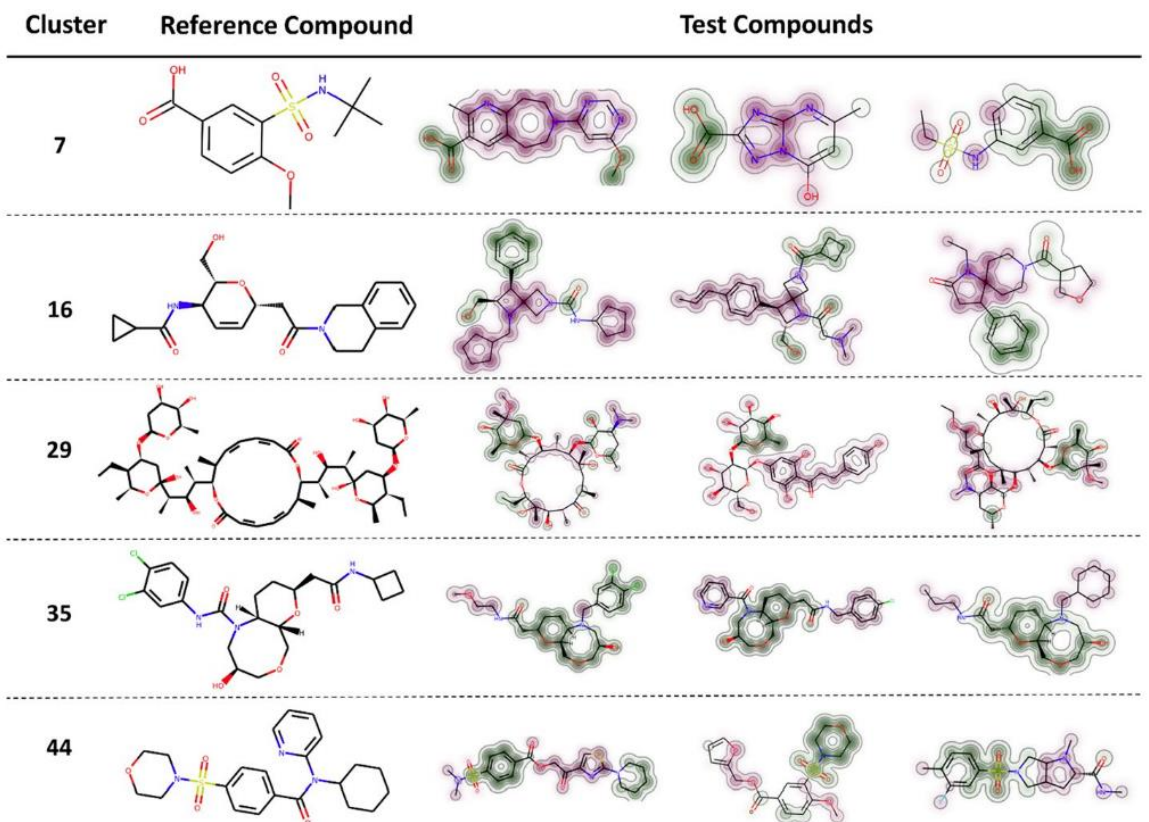
⁶ Department of Biochemistry and Medical Genetics, University of Manitoba, Room 308 - Basic Medical Sciences Building, 745 Bannatyne Avenue, Winnipeg, MB R3E 0J9, Canada

Full list of author information is available at the end of the

Abstract

Background: Converting molecules into computer-interpretable features with rich molecular information is a core problem of data-driven machine learning applications in chemical and drug-related tasks. Generally speaking, there are global and local features to represent a given molecule. As most algorithms have been developed based on one type of feature, a remaining bottleneck is to combine both feature sets for advanced molecule-based machine learning analysis. Here, we explored a novel analytical framework to make embeddings of the molecular features and apply them in the clustering of a large number of small molecules.

Results: In this new framework, we first introduced a principal component analysis method encoding the molecule-specific atom and bond information. We then used a



Les clusters ainsi générés permettent de mettre en évidence des groupes de composés susceptibles de posséder des fonctions biologiques similaires (criblage)

Cas d'usage en Physique

Utiliser l'IA pour identifier les paramètres inconnus d'une équation à partir d'observations partielles de la solution (problème inverse)

Journal of Computational Physics 378 (2019) 686–707



Contents lists available at ScienceDirect

Journal of Computational Physics

www.elsevier.com/locate/jcp



Physics-informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations

M. Raissi^a, P. Perdikaris^{b,*}, G.E. Karniadakis^a

^a Division of Applied Mathematics, Brown University, Providence, RI, 02912, USA

^b Department of Mechanical Engineering and Applied Mechanics, University of Pennsylvania, Philadelphia, PA, 19104, USA

ARTICLE INFO

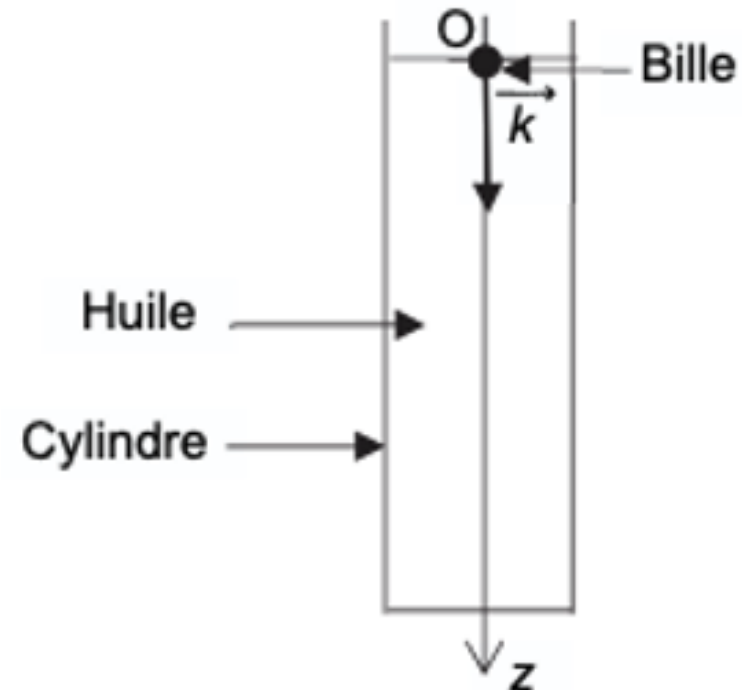
Article history:
Received 13 June 2018
Received in revised form 26 October 2018
Accepted 28 October 2018
Available online 3 November 2018

Keywords:
Data-driven scientific computing
Machine learning
Predictive modeling
Runge–Kutta methods
Nonlinear dynamics

ABSTRACT

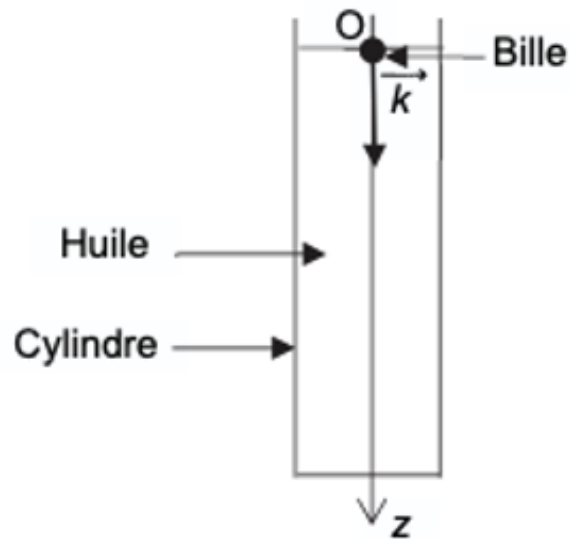
We introduce *physics-informed neural networks* – neural networks that are trained to solve supervised learning tasks while respecting any given laws of physics described by general nonlinear partial differential equations. In this work, we present our developments in the context of solving two main classes of problems: data-driven solution and data-driven discovery of partial differential equations. Depending on the nature and arrangement of the available data, we devise two distinct types of algorithms, namely continuous time and discrete time models. The first type of models forms a new family of *data-efficient* spatio-temporal function approximators, while the latter type allows the use of arbitrarily accurate implicit Runge–Kutta time stepping schemes with unlimited number of stages. The effectiveness of the proposed framework is demonstrated through a collection of classical problems in fluids, quantum mechanics, reaction–diffusion systems, and the propagation of nonlinear shallow-water waves.

© 2018 Elsevier Inc. All rights reserved.



Cas d'usage en Physique

Utiliser l'IA pour identifier les paramètres inconnus d'une équation à partir d'observations partielles de la solution (problème inverse)



Formulation du problème

On sait ...

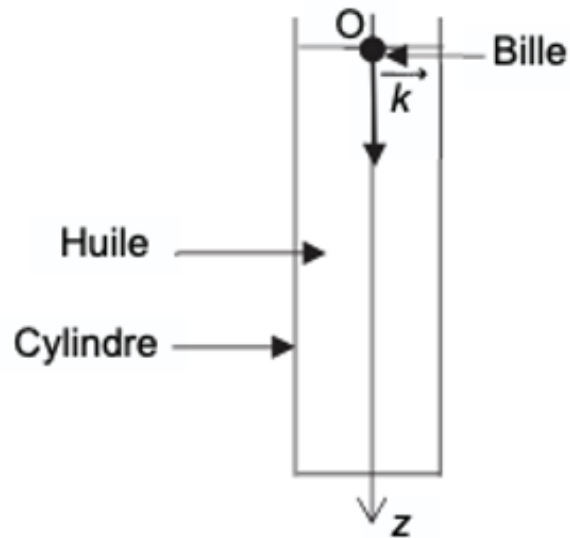
- Que la bille obéit à la loi de Newton :

$$z''(t) = g - \frac{k}{m}z'(t)$$

- Les conditions initiales : $z(0) = 0$ et $z'(0) = 0$
- Les paramètres : m et g

Cas d'usage en Physique

Utiliser l'IA pour identifier les paramètres inconnus d'une équation à partir d'observations partielles de la solution (problème inverse)



Formulation du problème

On sait ...

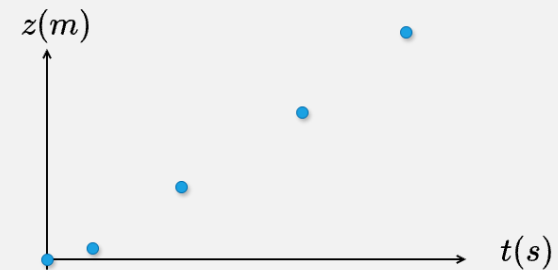
- Que la bille obéit à la loi de Newton :

$$z''(t) = g - \frac{k}{m}z'(t)$$

- Les conditions initiales : $z(0) = 0$ et $z'(0) = 0$
- Les paramètres : m et g

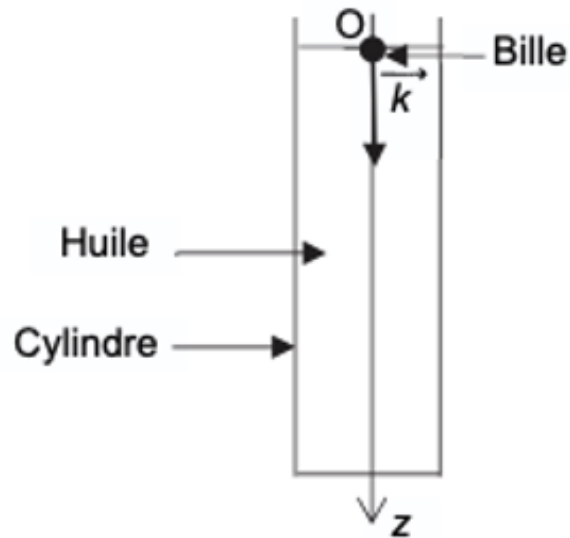
On observe ...

- La position de la bille à quelques instants



Cas d'usage en Physique

Utiliser l'IA pour identifier les paramètres inconnus d'une équation à partir d'observations partielles de la solution (problème inverse)



Formulation du problème

On sait ...

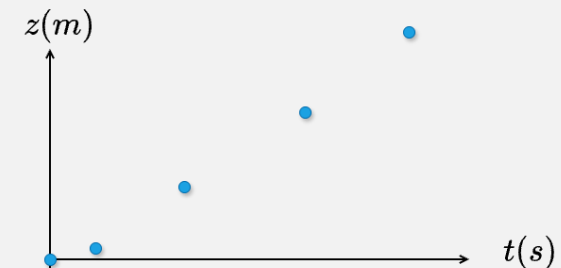
- Que la bille obéit à la loi de Newton :

$$z''(t) = g - \frac{k}{m}z'(t)$$

- Les conditions initiales : $z(0) = 0$ et $z'(0) = 0$
- Les paramètres : m et g

On observe ...

- La position de la bille à quelques instants

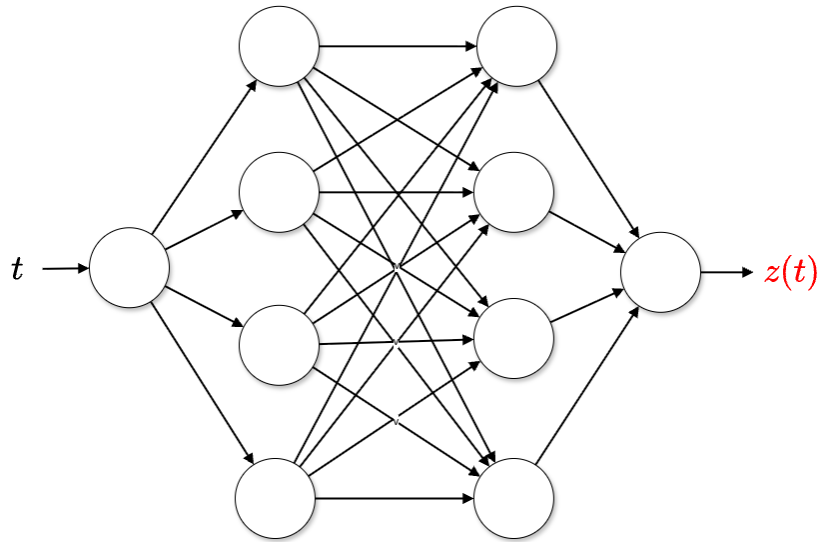


On cherche ...

- le coefficient de frottement visqueux k
- La trajectoire complète $z(t)$

Cas d'usage en Physique

Utiliser l'IA pour identifier les paramètres inconnus d'une équation à partir d'observations partielles de la solution (problème inverse)



Formulation du problème

On sait ...

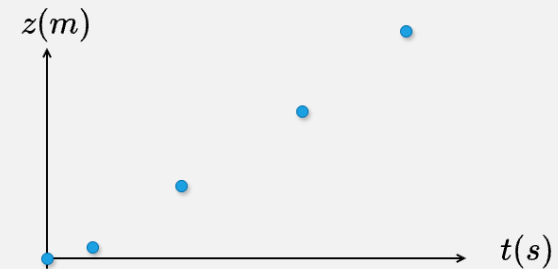
- Que la bille obéit à la loi de Newton :

$$z''(t) = g - \frac{k}{m}z'(t)$$

- Les conditions initiales : $z(0) = 0$ et $z'(0) = 0$
- Les paramètres : m et g

On observe ...

- La position de la bille à quelques instants

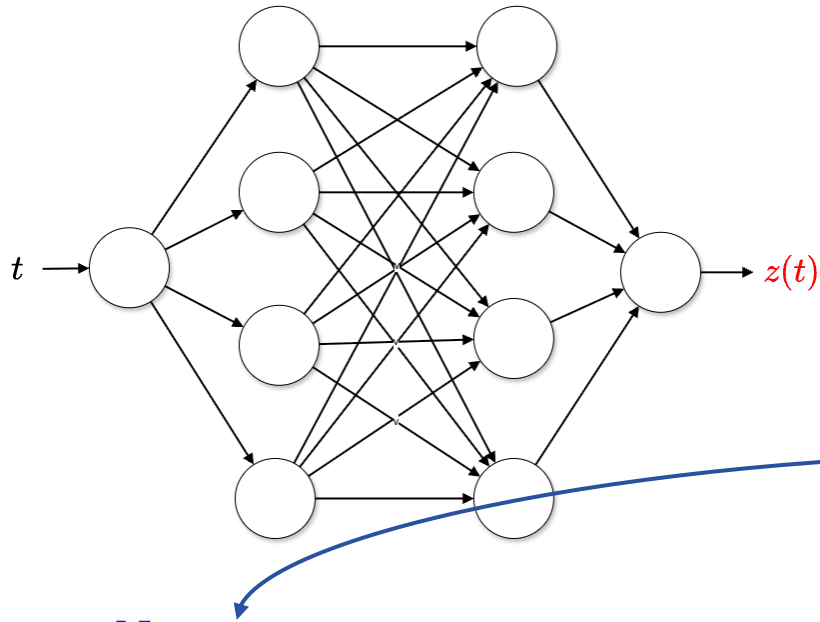


On cherche ...

- le coefficient de frottement visqueux k
- La trajectoire complète $z(t)$

Cas d'usage en Physique

Utiliser l'IA pour identifier les paramètres inconnus d'une équation à partir d'observations partielles de la solution (problème inverse)



$$\mathcal{L} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (z(t_i) - \hat{z}(t_i))^2$$

Formulation du problème

On sait ...

- Que la bille obéit à la loi de Newton :

$$z''(t) = g - \frac{k}{m} z'(t)$$

- Les conditions initiales : $z(0) = 0$ et $z'(0) = 0$
- Les paramètres : m et g

On observe ...

- La position de la bille à quelques instants

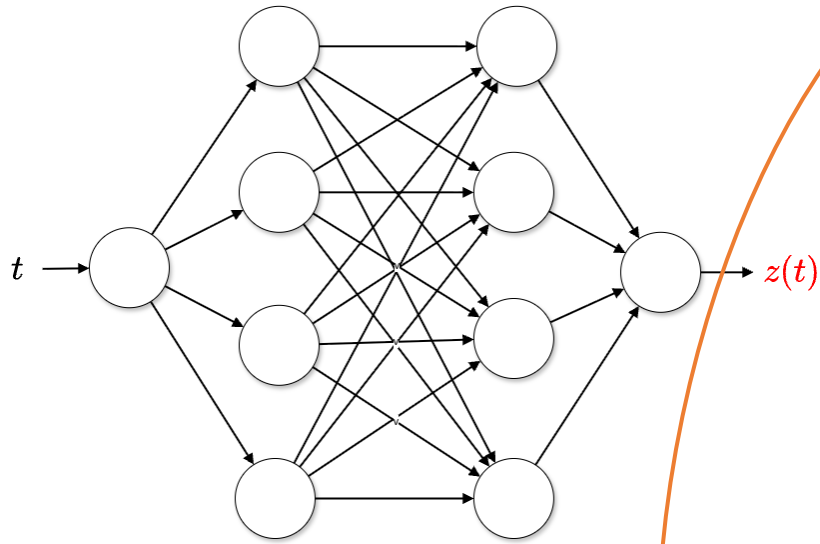


On cherche ...

- le coefficient de frottement visqueux k
- La trajectoire complète $z(t)$

Cas d'usage en Physique

Utiliser l'IA pour identifier les paramètres inconnus d'une équation à partir d'observations partielles de la solution (problème inverse)



$$\mathcal{L} = \mathcal{L}_{obs} + \frac{1}{M} \sum_{j=1}^M \left(z''(t_j) - g + \frac{k}{m} z'(t_j) \right)^2$$

Formulation du problème

On sait ...

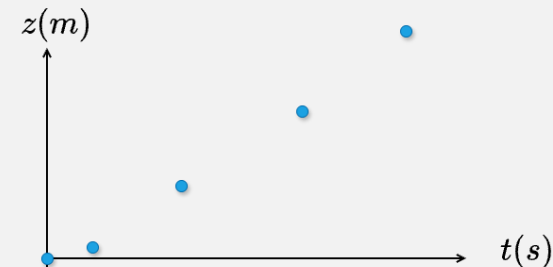
- Que la bille obéit à la loi de Newton :

$$z''(t) = g - \frac{k}{m} z'(t)$$

- Les conditions initiales : $z(0) = 0$ et $z'(0) = 0$
- Les paramètres : m et g

On observe ...

- La position de la bille à quelques instants

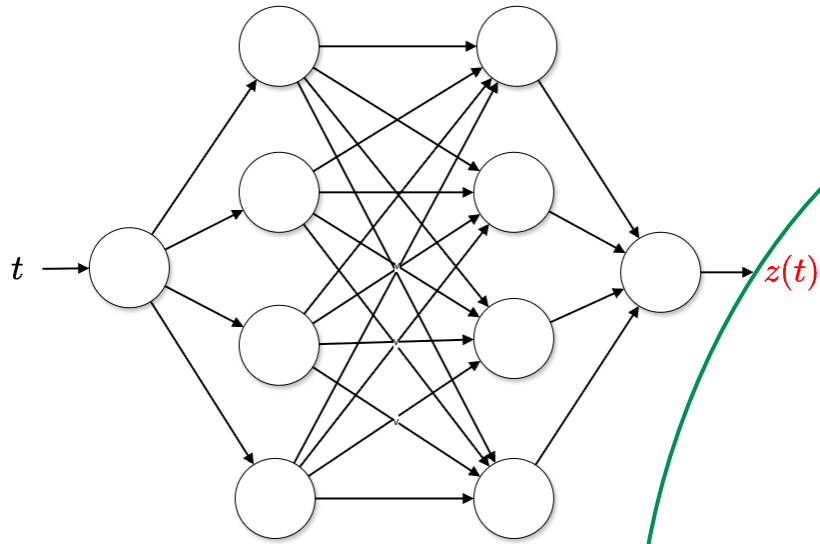


On cherche ...

- le coefficient de frottement visqueux k
- La trajectoire complète $z(t)$

Cas d'usage en Physique

Utiliser l'IA pour identifier les paramètres inconnus d'une équation à partir d'observations partielles de la solution (problème inverse)



$$\mathcal{L} = \mathcal{L}_{obs} + \mathcal{L}_{coll} + z(0)^2 + z'(0)^2$$

Formulation du problème

On sait ...

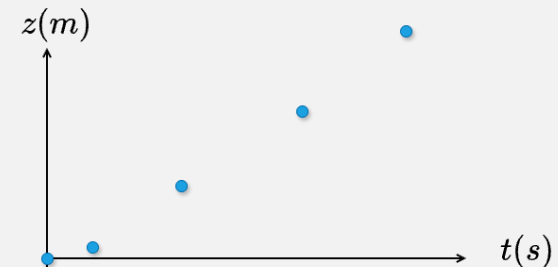
- Que la bille obéit à la loi de Newton :

$$z''(t) = g - \frac{k}{m} z'(t)$$

- Les conditions initiales : $z(0) = 0$ et $z'(0) = 0$
- Les paramètres : m et g

On observe ...

- La position de la bille à quelques instants

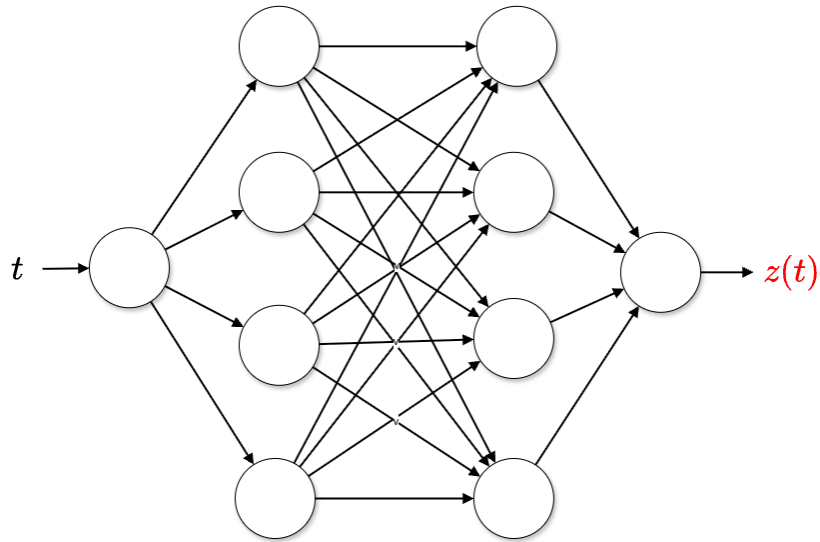


On cherche ...

- le coefficient de frottement visqueux k
- La trajectoire complète $z(t)$

Cas d'usage en Physique

Utiliser l'IA pour identifier les paramètres inconnus d'une équation à partir d'observations partielles de la solution (problème inverse)



$$\mathcal{L} = \lambda_1 \mathcal{L}_{obs} + \lambda_2 \mathcal{L}_{coll} + \lambda_3 \mathcal{L}_{init}$$

Formulation du problème

On sait ...

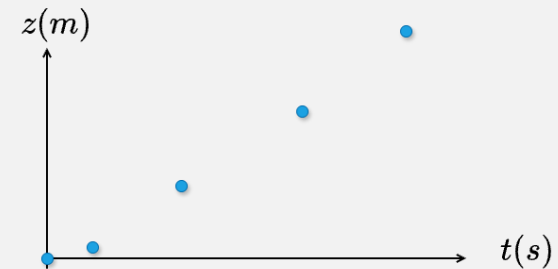
- Que la bille obéit à la loi de Newton :

$$z''(t) = g - \frac{k}{m} z'(t)$$

- Les conditions initiales : $z(0) = 0$ et $z'(0) = 0$
- Les paramètres : m et g

On observe ...

- La position de la bille à quelques instants



On cherche ...

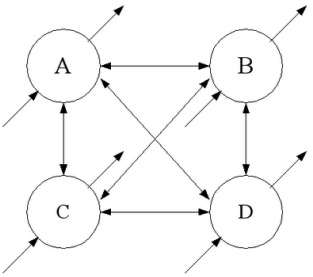
- le coefficient de frottement visqueux k
- La trajectoire complète $z(t)$

Des physiciens qui contribuent à l'IA

Le **réseau de Hopfield** est un modèle de **réseau de neurones récurrents** à temps discret dont la matrice des connexions est symétrique et nulle sur la diagonale et où la dynamique est **asynchrone** (un seul neurone est mis à jour à chaque unité de temps) ou **synchrone** (tous les neurones sont mis à jour en même temps). Il fut inventé par **Shun'ichi Amari** en 1972 et a été popularisé par le physicien **John Hopfield** en 1982¹. Sa découverte a permis de relancer l'intérêt dans les **réseaux de neurones**, qui s'était essoufflé durant les années 1970 à la suite d'un article de **Marvin Minsky** et **Seymour Papert**. Les réseaux de Hopfield entrent dans le cadre des **modèles à base d'énergie**².


Un réseau de Hopfield est une **mémoire adressable par son contenu** : une forme mémorisée est retrouvée par une stabilisation du réseau, s'il a été stimulé par une partie adéquate de cette forme.

Réseau de neurones de Hopfield



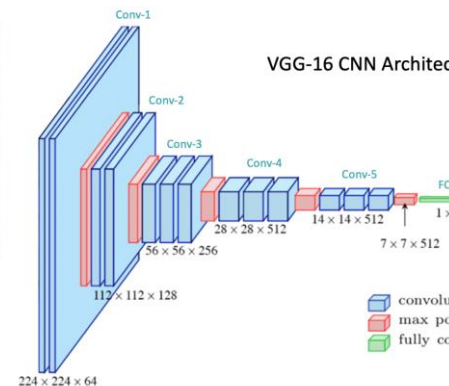
Un réseau de Hopfield à 4 neurones.

Type	Réseau de neurones récurrents, mémoire adressable par contenu
Date d'invention	1974



Pankaj Mehta is an American theoretical **physicist** whose research has involved **biophysics**, **statistical physics**, **machine learning theory**, and **hard condensed matter theory**. He is a professor of Physics at **Boston University**.

Mehta has worked on statistical mechanics tools in **theoretical community ecology**, **biological information processing**, and cell fate development models. In his work on theoretical ecology, Mehta has described **consumer-resource models** and statistical physics-based approaches to **niche** and **coexistence theory**.^{[1][2][3][4]}





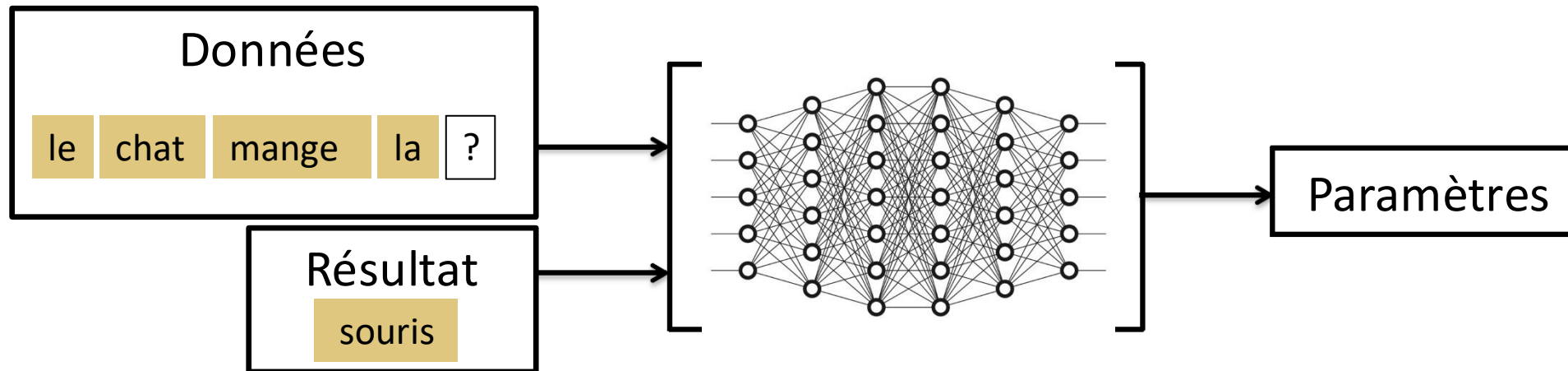
SOMMAIRE

1. Exemple introductif
2. Principe de fonctionnement des IA (machine learning)
3. Cas d'usage en Physique-Chimie
4. Les IA génératives (IAG)
5. Les risques et limites
6. Défi et cadre d'usage en éducation

Principe de fonctionnement des IAG

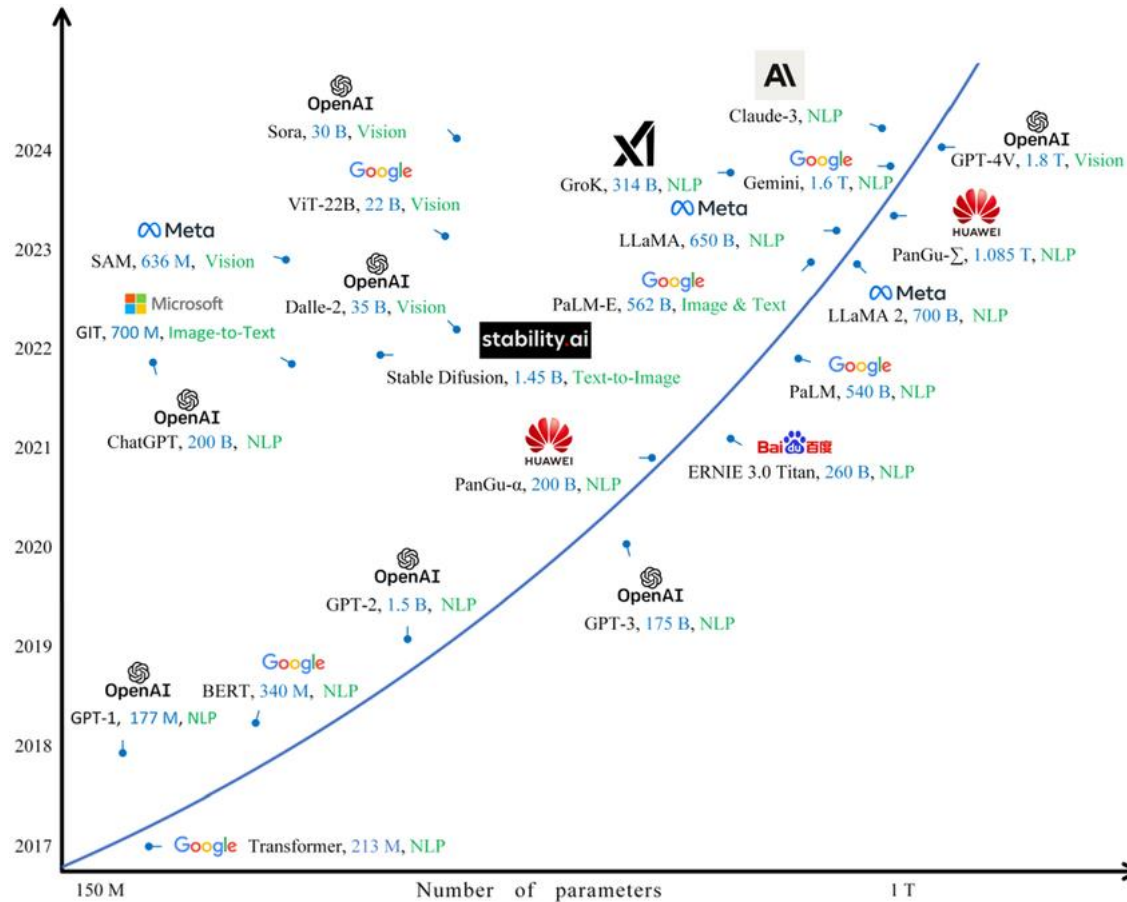
Les modèles d'IAG sont des **réseaux de neurones** (profonds)

L'**entraînement** d'un réseau de neurones consiste à apprendre ses paramètres (étape coûteuse)



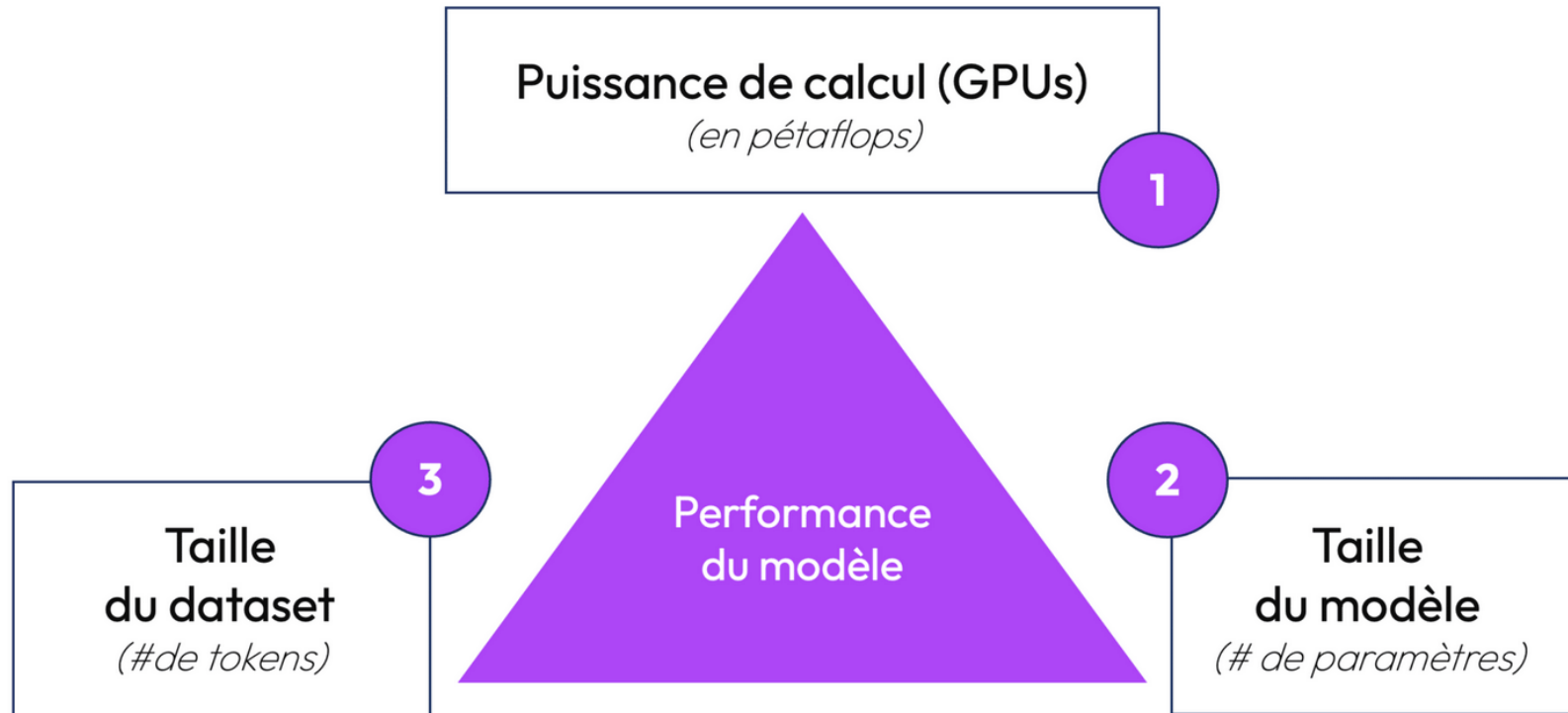
Phase d'entraînement

Principe de fonctionnement des IAG



Source : Tu et al. « An overview of large AI models and their applications ». Visual Intelligence 2024

Principe de fonctionnement des IAG



Source : Thibault Renouf « Performances des LLM : Puissance en GPU, paramètres et dataset ». Tribes 2024

Principe de fonctionnement des IAG

Les **LLM** (*Large Language Model*) sont ces grands réseaux de neurones pré-entraînés notamment à prédire les mots (*tokens*) manquants.

Des étapes de **post-traitement** complètent la mise au point des IAG

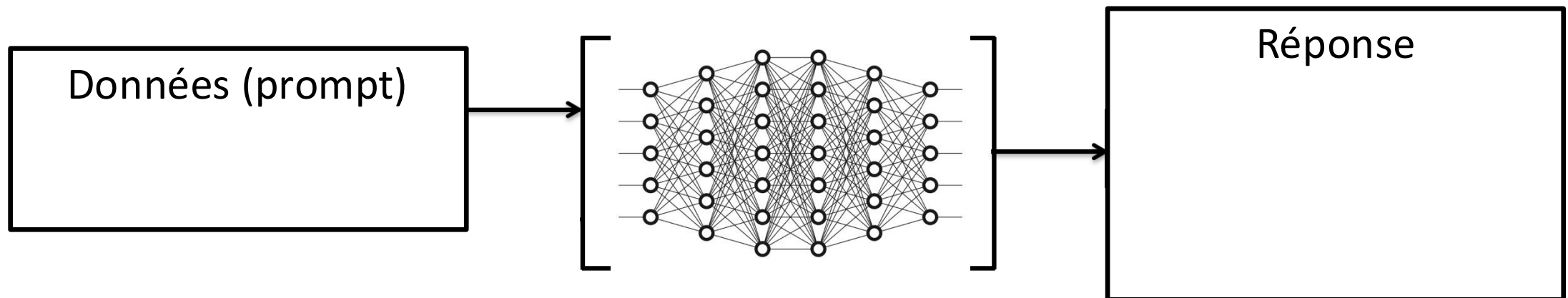


Source : Thibault Renouf « Performances des LLM : Puissance en GPU, paramètres et dataset ». Tribes 2024

Principe de fonctionnement des IAG

Les modèles d'IAG sont des **réseaux de neurones** (profonds)

L'**inférence** consiste à utiliser le modèle entraîné pour prédire (étape moins coûteuse)

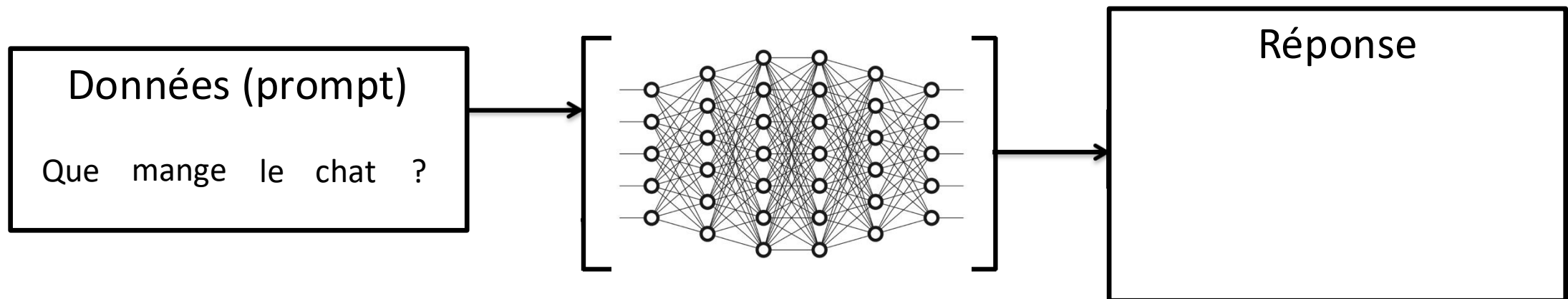


Phase d'inférence

Principe de fonctionnement des IAG

Les modèles d'IAG sont des **réseaux de neurones** (profonds)

L'**inférence** consiste à utiliser le modèle entraîné pour prédire (étape moins coûteuse)

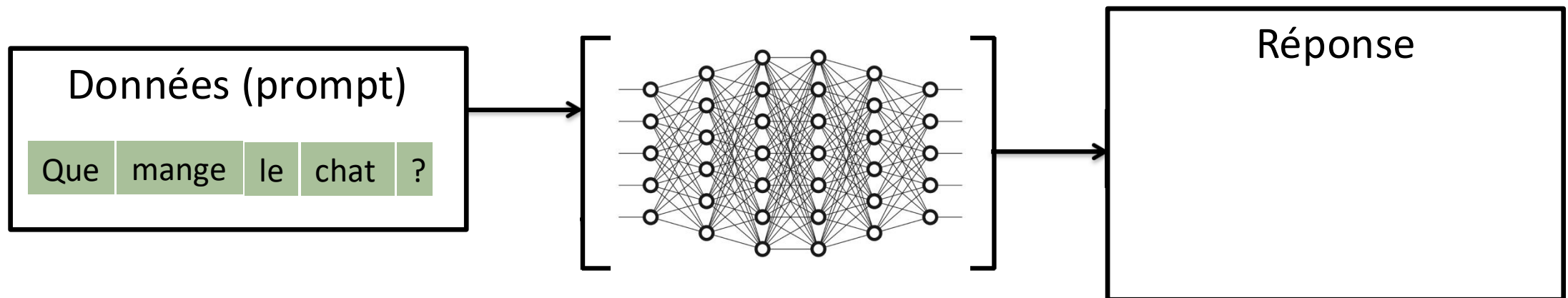


Phase d'inférence

Principe de fonctionnement des IAG

Les modèles d'IAG sont des **réseaux de neurones** (profonds)

L'**inférence** consiste à utiliser le modèle entraîné pour prédire (étape moins coûteuse)

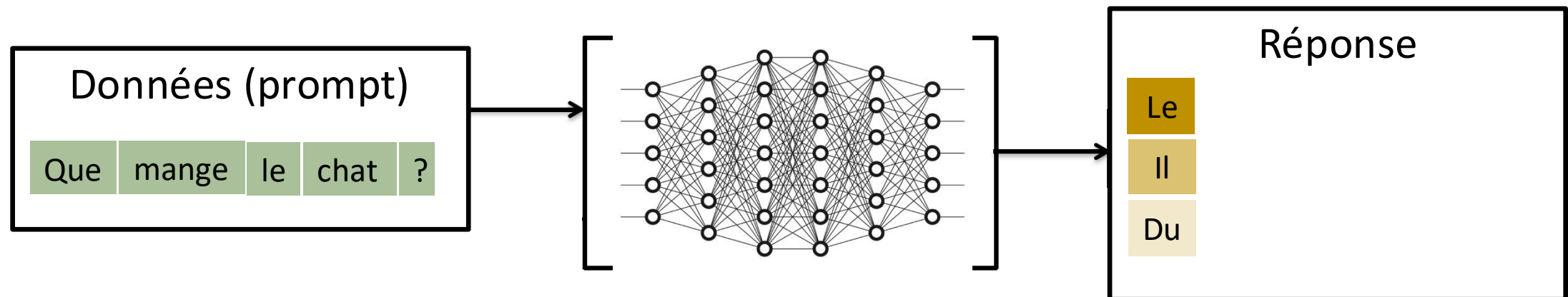


Phase d'inférence

Principe de fonctionnement des IAG

Les modèles d'IAG sont des **réseaux de neurones** (profonds)

L'**inférence** consiste à utiliser le modèle entraîné pour prédire (étape moins coûteuse)

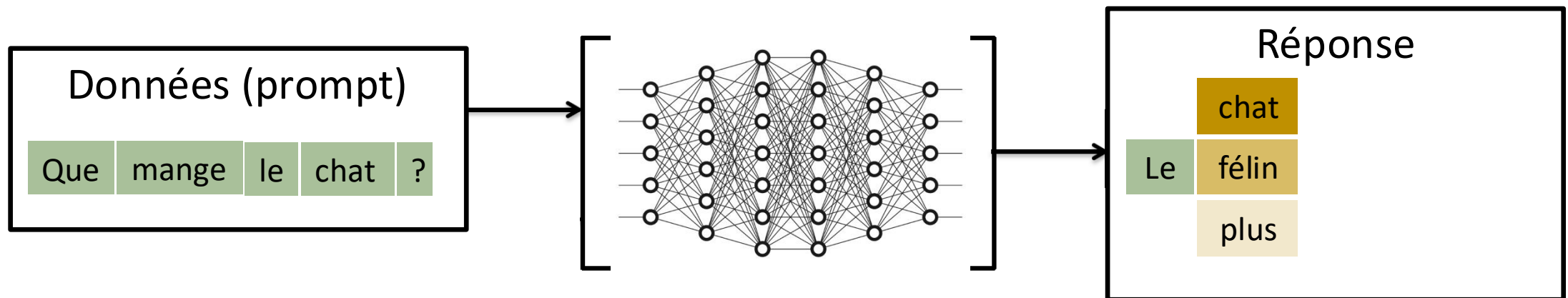


Phase d'inférence

Principe de fonctionnement des IAG

Les modèles d'IAG sont des **réseaux de neurones** (profonds)

L'**inférence** consiste à utiliser le modèle entraîné pour prédire (étape moins coûteuse)



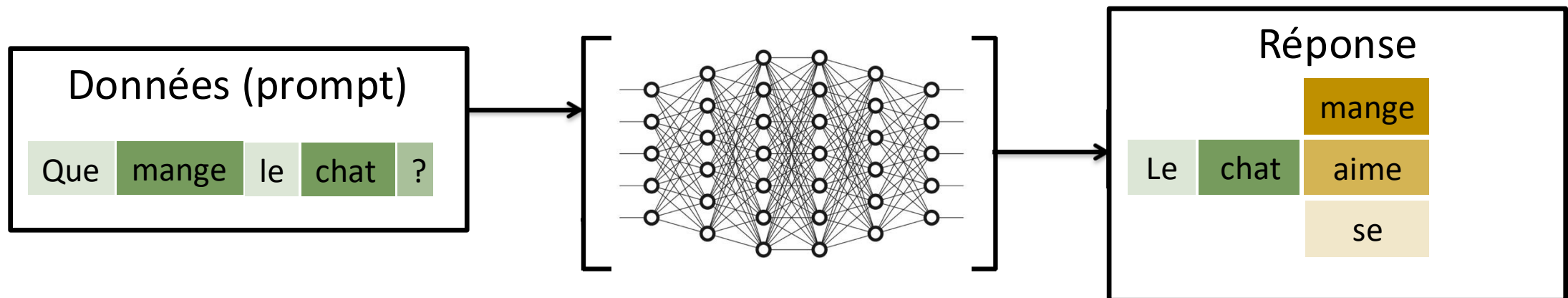
Phase d'inférence

Principe de fonctionnement des IAG

Les modèles d'IAG sont des **réseaux de neurones** (profonds)

L'**inférence** consiste à utiliser le modèle entraîné pour prédire (étape moins coûteuse) :

- En s'appuyant sur les tokens importants du contexte (mécanisme d'« attention »)



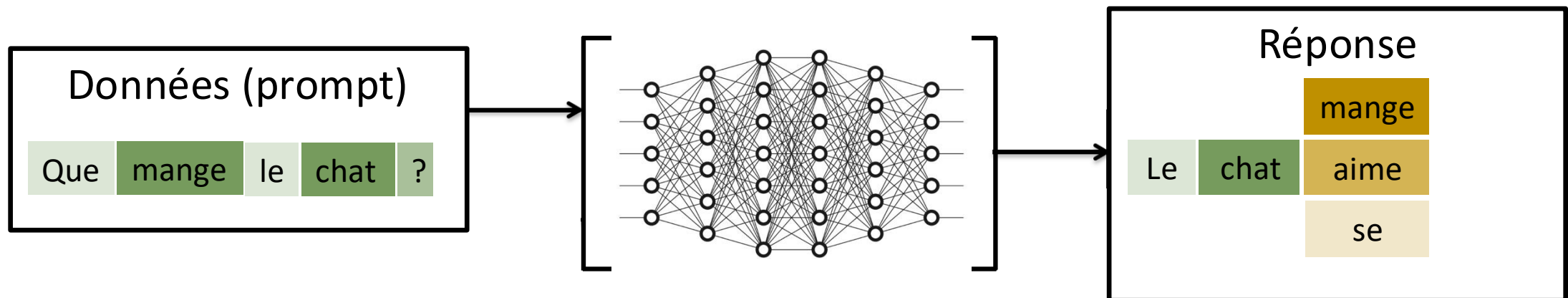
Phase d'inférence

Principe de fonctionnement des IAG

Les modèles d'IAG sont des **réseaux de neurones** (profonds)

L'**inférence** consiste à utiliser le modèle entraîné pour prédire (étape moins coûteuse) :

- En s'appuyant sur les tokens importants du contexte (mécanisme d'« attention »)
- En introduisant une dose d'aléatoire (non-déterminisme)



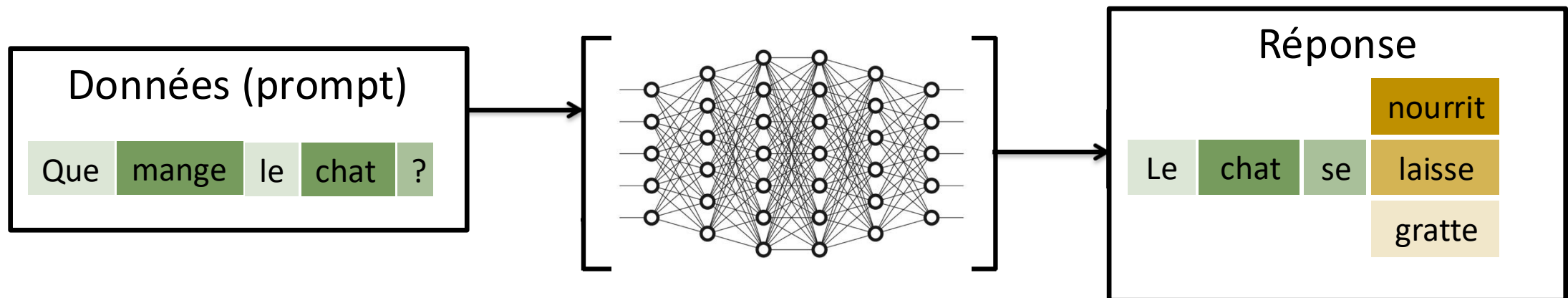
Phase d'inférence

Principe de fonctionnement des IAG

Les modèles d'IAG sont des **réseaux de neurones** (profonds)

L'**inférence** consiste à utiliser le modèle entraîné pour prédire (étape moins coûteuse) :

- En s'appuyant sur les tokens importants du contexte (mécanisme d'« attention »)
- En introduisant une dose d'aléatoire (non-déterminisme)



Phase d'inférence





















Principe de fonctionnement des IAG

APPYLEARNY.FR
v. 01/06/25
Yvan DEMUMIEUX

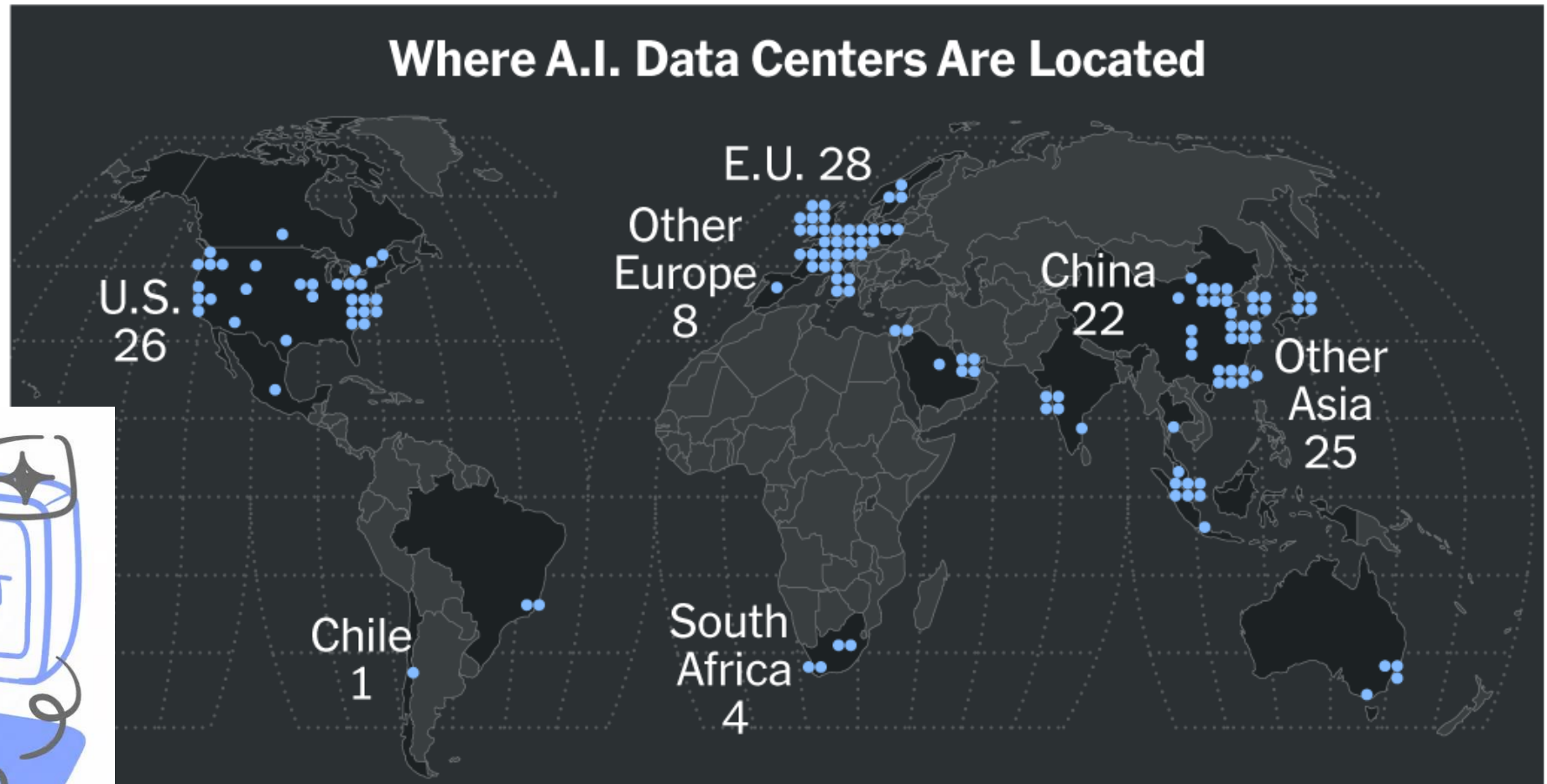
	ChatGPT	Mistral	Claude	Gemini	Perplexity	Grok	DeepSeek	Qwen
 Société	OpenAI 	Mistral 	Anthropic 	Google 	Perplexity 	xAI 	DeepSeek 	Alibaba 
Modèles LLM de référence	O3 / 4.1 / 4.5	Medium3/Devstral	Opus 4	2.5 Pro	Sonar/Llama 3.3	3	V3 / R1-0528	3-32B
Accès aux modèles de pointe	20 / 25 / 200\$/m	15 ou 25\$/m	17 / 25 / 100\$/m	22 € / 249 \$/m	20 \$/m	30 à 40 \$/m	✓ Gratuit	✓ Gratuit
 Open Source (weights)	✗	✓	✗	✗	✗	✗	✓	✓
Fenêtre de contexte (tokens)	200 K	128 K	200 K	1000 K	128 K	128 K	128 K	131 K
Taille (paramètres, Milliards)	XL > 150	S : 13 !	XL ≈ 300	M : 20 à 70	M : 70	XXL : 2700	XL : 671	M>XL : 32 > 235

Principe de fonctionnement des IAG

APPYLEARNY.FR
v. 01/06/25
Yvan DEMUMIEUX

	 ChatGPT	 Mistral	 Claude	 Gemini	 Perplexity	 Grok	 DeepSeek	 Qwen
Société	OpenAI 	Mistral 	Anthropic 	Google 	Perplexity 	xAI 	DeepSeek 	Alibaba 
Raisonnement profond	✓		✓	✓	✗	✓	✓	✓
Génération de voix	✓	✗	✗	✗	✗	✓	✗	✗
Application mobile	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✗
Rapidité (tokens/sec.)	166	1100	70	168	1200	?	58	?
Performances / classement Benchmark Chatbot Arena	 2	5	7	 1	Non classé	 3	 4	6
Taux d'hallucinations (modèle Hughes de Vectara)	o3 mini high : 0.8 % GPT 4.5 : 1.2 % o1 mini : 1.4 %	Small3 : 3.1 % Large2 : 4.1 % Pixtral : 6.6 %	3-5-sonnet : 4.6 % 3-5-haiku : 4.9 % 3-opus : 10.1 %	2.0 Flash 001 : 0.7 % 2.0 Pro Exp : 0.8 % 2.5 Flash Pro : 1.1 %	Non classé	Grok 3 : 2.1 Mini : 3.3	Chat : 2.4 V3 : 3.9 %	2.5 Max : 2.9% 2.5 32B : 3.0 % 2.5 72B : 4.3 %
Fiabilité globale selon Phare leaderboard Giskard AI	GPT-4o : 73 %	Small 3.1 : 69 % Large : 66 %	3-5-sonnet : 76 % 3-5-haiku : 83 % 3.7 sonnet : 75 %	1.5 Pro : 87 % 2.0 Flash : 75 %	Non classé Llama 3.1 : 78 %	Grok 2 : 65 %	V3 : 74 %	2.5 Max : 73 %
Protection / stockage utilisation des données respect RGPD en ligne	★ ★ /5 Confidentialité renforcée en version entreprise	★ ★ ★ ★ /5 Meilleure compatibilité RGPD même en gratuit	★ ★ ★ ★ /5 Confidentialité identique pour tous	★ ★ /5 Confidentialité renforcée en version entreprise	★ ★ /5 Confidentialité renforcée en version entreprise	★ /5 Aucune confidentialité	★ /5 Aucune confidentialité sauf si hébergé en local	★ /5 Aucune confidentialité sauf si hébergé en local
Nombre de données collectées partagées à tiers	10	Non testé	13	22	10	7	11	Non testé
Impact énergétique estimé (Énergie Wh / CO2 émis)	B 16 Wh / 10g	A 9 Wh / 6g	G 81 Wh / 49g	A 6 Wh / 4g	Non testé	Non testé	C / E V3 21 Wh / 14g R1 56 Wh / 56g	A 5 Wh / 3g

Principe de fonctionnement des IAG



Source : Oxford University - Note: Count of data centers in China excludes facilities in Hong Kong and Taiwan.



SOMMAIRE

1. Exemple introductif
2. Principe de fonctionnement des IA (machine learning)
3. Cas d'usage en Physique-Chimie
4. Les IA génératives (IAG)
5. Les risques et limites
6. Défi et cadre d'usage en éducation

Les risques et limites

- Une IAG peut donner des **réponses fausses** (« hallucinations ») ou biaisées, mais de manière très fluide et convaincante!

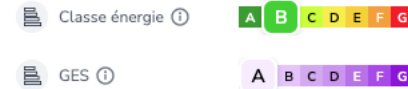
Les risques et limites

- Une IAG peut donner des **réponses fausses** (« hallucinations ») ou biaisées, mais de manière très fluide et convaincante!



Appartement 1 pièce 27 m²
109 000 €

Diagnostics



Les informations clés

Type de bien	Appartement	Surface habitable	27 m ²
Nombre de pièces	1	Nombre de salles d'eau	1
Type de chauffage	Collectif	Étage de votre bien	2
Ascenseur	Oui	Exposition	Nord

[Voir les 3 critères supplémentaires](#)

Description

Appartement 1 pièce 27 m²

À vendre : Appartement T1 (27 m²) lumineux et bien agencé, idéalement situé au cœur de Tours, à deux pas des commodités ! - À VENDRE : Appartement T1 idéal pour un investissement locatif situé en plein cœur de Tours, dans le secteur prisé du centre-ville. Ce bien, construit en 2014, offre une surface habitable de 27 m², avec un espace de vie de 17,81 m², parfaitement agencé pour maximiser le confort et la fonctionnalité.

L'appartement se trouve au deuxième étage d'un immeuble de cinq étages, accessible par un ascenseur, ce qui en fait un choix pratique pour les futurs locataires. La cuisine est séparée et entièrement équipée, offrant un espace agréable pour préparer des repas. La salle d'eau est moderne et bien entretenue, garantissant un cadre de vie agréable.

L'orientation sud de l'appartement permet de bénéficier d'une belle luminosité tout au long de la journée. De plus, le bien est équipé de double vitrage, assurant une bonne isolation phonique et thermique, ce qui est un atout considérable pour un investissement locatif.

Les risques et limites


○ Une IAG peut donner des **réponses fausses** (« hallucinations ») ou biaisées, mais de manière très fluide et convaincante!


○ Ne dispose pas d'une compréhension « humaine »

○ Ce n'est pas une base de données

 Appartement 1 pièce 27 m²
109 000 €

Diagnostics

 Classe énergie ⓘ **A B C D E F G**

 GES ⓘ **A B C D E F G**

Les informations clés

 Type de bien	Appartement	 Surface habitable	27 m²
 Nombre de pièces	1	 Nombre de salles d'eau	1
 Type de chauffage	Collectif	 Étage de votre bien	2
 Ascenseur	Oui	 Exposition	Nord

[Voir les 3 critères supplémentaires](#)

Description

Appartement 1 pièce 27 m²

À vendre : Appartement T1 (27 m²) lumineux et bien agencé, idéalement situé au cœur de Tours, à deux pas des commodités ! - À VENDRE : Appartement T1 idéal pour un investissement locatif situé en plein cœur de Tours, dans le secteur prisé du centre-ville. Ce bien, construit en 2014, offre une surface habitable de 27 m², avec un espace de vie de 17,81 m², parfaitement agencé pour maximiser le confort et la fonctionnalité.

L'appartement se trouve au deuxième étage d'un immeuble de cinq étages, accessible par un ascenseur, ce qui en fait un choix pratique pour les futurs locataires. La cuisine est séparée et entièrement équipée, offrant un espace agréable pour préparer des repas. La salle d'eau est moderne et bien entretenue, garantissant un cadre de vie agréable.

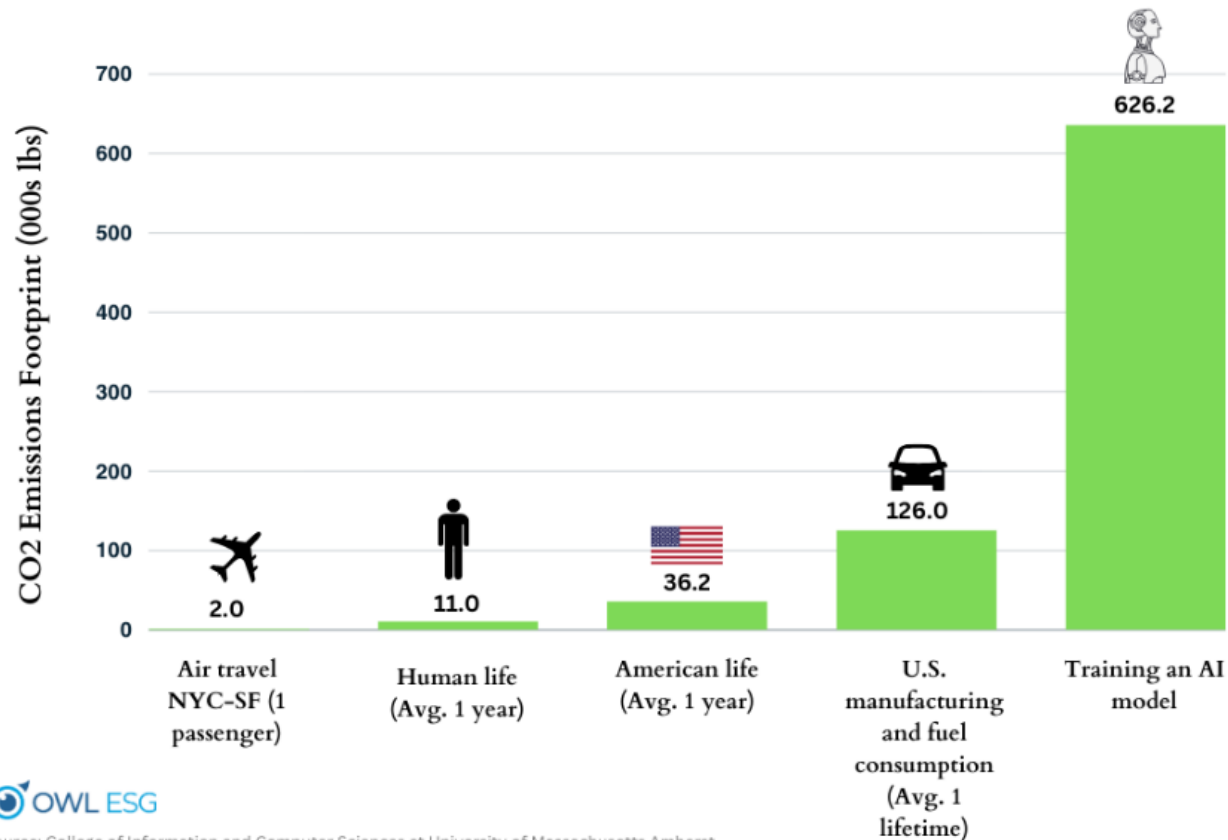
L'orientation sud de l'appartement permet de bénéficier d'une belle luminosité tout au long de la journée. De plus, le bien est équipé de double vitrage, assurant une bonne isolation phonique et thermique, ce qui est un atout considérable pour un investissement locatif.

Coût énergétique

- L'entraînement de LLM peut consommer des quantités significatives d'énergie
- Le coût d'utilisation (inférence) est limité, mais peut augmenter rapidement avec le nombre d'utilisateurs et le type de modèle

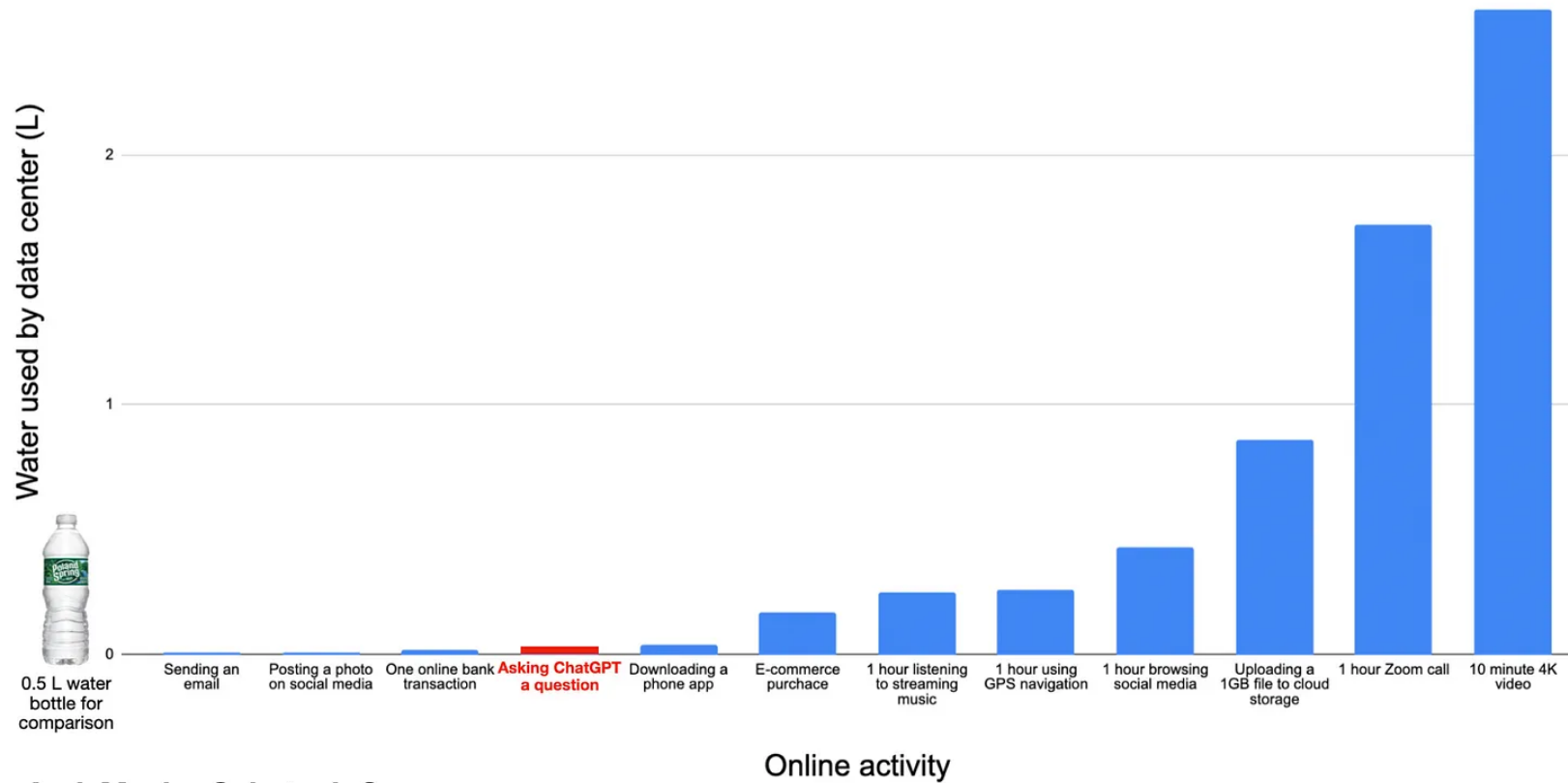
Les risques et limites

CO2 Emissions Benchmarks



Les risques et limites

Water used in data centers for common online activities



AndyMasley.Substack.Com

Les risques et limites



compar:IA

Le comparateur d'IA conversationnelles

Total des votes [Ⓞ] 143 949 Objectif : 150 000

Étape 2/2

Les modèles sont démasqués !

Découvrez l'impact environnemental de vos discussions avec chaque modèle

Nouvelle discussion

Je suis enseignant dans un lycée Français. Propose-moi un plan de cours sur la notion de dérivation en mathématiques, niveau première.



AI Anthropic/Claude 4 Sonnet

PROPRIÉTAIRE TAILLE ESTIMÉE (XL) SORTIE 05/2025

Très grand modèle multimodal et multilingue, très puissant en code, avec deux modalités de réponses: l'utilisateur peut choisir entre un mode de raisonnement, pour des réponses plus approfondies, ou un mode rapide, pour générer directement la réponse finale.

Impact énergétique de la discussion



Ce qui correspond à :



Mistral AI/Mistral Large

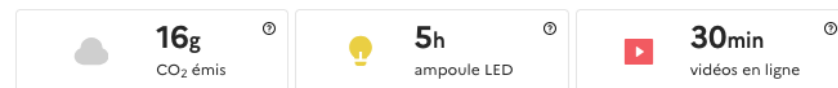
SEMI-OUVERT 123 MDS DE PARAMÈTRES SORTIE 11/2024

Sorti en novembre 2024, ce modèle de la société française Mistral gère l'anglais, le français, l'italien, l'allemand et l'espagnol.

Impact énergétique de la discussion



Ce qui correspond à :



Protection des données

- Collecte et utilisation massive de données personnelles
- Fuite ou reconstruction de données sensibles
- Difficulté à garantir le « droit à l'oubli »
- Partage involontaire d'informations confidentielles (via les prompts)

Protection des données

- Collecte et utilisation massive de données personnelles
- Fuite ou reconstruction de données sensibles
- Difficulté à garantir le « droit à l'oubli »
- Partage involontaire d'informations confidentielles (via les prompts)

Des milliers d'échanges avec ChatGPT se sont retrouvés indexés publiquement sur Google

© 01 août 2025 · 14:50

Une fonctionnalité méconnue de ChatGPT a créé un risque massif pour la vie privée de milliers d'internautes en rendant certaines conversations accessibles depuis une simple recherche Google.



SOMMAIRE

1. Exemple introductif
2. Principe de fonctionnement des IA (machine learning)
3. Cas d'usage en Physique-Chimie
4. Les IA génératives (IAG)
5. Les risques et limites
6. Défi et cadre d'usage en éducation

Questions clés

- Comment utiliser l'IA pour la préparation des activités pédagogiques (présentation, quizz, textes, questions, exercices, podcasts, vidéos, etc.)?
- Comment les élèves utilisent-ils l'IA pour répondre à mes exercices, réviser, apprendre, etc. ?
- Comment évaluer à l'heure de l'IA? Est-ce que j'évalue l'IA, l'élève, ou sa capacité à utiliser l'IA?
- Comment l'IA va-t-elle impacter les métiers visés par mes élèves?
- Comment mettre en place une réflexion critique face à ces outils?

Les détecteurs d'IA fonctionnent-ils?

Les détecteurs d'IA fonctionnent-ils?

"En bref, non. Bien que certains (y compris OpenAI) aient publié des outils prétendant détecter le contenu généré par l'IA, aucun d'entre eux n'a prouvé qu'il pouvait distinguer de manière fiable le contenu généré par l'IA de celui généré par l'homme.

De plus, ChatGPT n'a aucune "connaissance" de ce qui pourrait être généré par l'IA. Il invente parfois des réponses à des questions comme "as-tu écrit cet [essai] ?" ou "cela aurait-il pu être écrit par une IA ?". Ces réponses sont aléatoires et n'ont aucune base factuelle."

Même si ces outils pouvaient identifier avec précision le contenu généré par l'IA, les élèves peuvent effectuer de petites modifications pour échapper à la détection.

Source : <https://help.openai.com/en/articles/8313351-how-can-educators-respond-to-students-presenting-ai-generated-content-as-their-own>

Ressources

- [CREIA](#) : Communauté de Réflexion et de pratiques en Education autour de l'IA
- Regroupement de ressources dédiées à l'IA ([Digipad](#) de Agnès Bourdonneau)
- Plateforme de création de chatbots dédiés à l'éducation :
<https://mizou.com/education>
- Assistant de création de prompt : <https://drne.forge.apps.education.fr/assistant-prompt/>
- ...

Défis et cadre d'usage en éducation



- Renoncez aux IA grand public quand des **données personnelles**, confidentielles ou protégées sont en jeu
- Renoncez à l'IA si une autre solution moins coûteuse **écologiquement** peut répondre à votre besoin (ex. recherche web)
- Renoncez à l'IA si vous ne pouvez pas **évaluer** le résultat

Défis et cadre d'usage en éducation



EN PÉDAGOGIE

- **Adaptez les devoirs et les modalités d'évaluation :**
 - mettez au premier plan le raisonnement et la résolution de problème ;
 - expliquez aux élèves que l'utilisation d'une IA générative pour réaliser un devoir scolaire, sans autorisation explicite et sans travail personnel d'appropriation, constitue une fraude ;
 - évitez d'utiliser des logiciels de détection de contenus générés par l'IA : peu fiables, ils pourraient conduire à pénaliser à tort un élève.
- N'utilisez l'IA que lorsqu'une plus-value pédagogique est avérée.
- **Adaptez les usages de l'IA générative en fonction du niveau :**
 - dès le **premier degré**, les élèves sont sensibilisés aux connaissances de base de l'IA, sans manipuler directement des IA génératives.
 - l'utilisation pédagogique en classe des **IA génératives par les élèves**, limitée, encadrée, expliquée et accompagnée par l'enseignant, est autorisée en classe à partir de la **4^e**.
 - au lycée, les élèves peuvent utiliser les IA génératives de manière autonome dans un cadre d'apprentissage et de formation explicitement défini par l'enseignant.



L'IA au service de la recherche en Physique-Chimie

Guillaume CLEUZIOU

Professeur des Universités – Informatique

guillaume.cleuziou@univ-orleans.fr

18 mars 2026

Charte IA à l'Université d'Orléans (Octobre 2024)

Rentrée 2025 – BUT Informatique (IUT d'Orléans)

➤ **Cadrage**

- Progressivité dans l'usage des IAG (orienté développement informatique)
 - 1^{ère} année → IA pour apprendre (mode « étudier »)
 - 2^{ème} année → Développer son regard critique sur les IA
 - 3^{ème} année → Usage professionnel de l'IA (améliorer/accélérer ses développements)
- Evaluation des projets :
 - On évalue ce que l'étudiant a appris à faire plutôt que ce qu'il a fait

Charte IA à l'Université d'Orléans (Octobre 2024)

Rentrée 2025 – BUT Informatique (IUT d'Orléans)

➤ **Actions**

- Tolérance zéro sur la triche aux évaluations en présentiel
- Communication en début d'année (cadrage)
- Mini-conférence en début d'année : IA, apprentissages et sensibilisations
- Conférence par niveau sur le fonctionnement des IA génératives (spécialiste)
- Dans chaque enseignement : explicitation des règles par l'enseignant
- Expérimentations à l'initiative de chaque enseignant

Conclusion

Messages à retenir :

- Les IAG sont là et les élèves les utilisent
- Il n'existe pas de technique infaillible pour détecter si un texte a été produit par une IA
- Comment évaluer des productions réalisées en dehors d'un cours en présentiel?
- L'interdiction n'a pas de sens, il faut former (élèves, enseignants, chercheurs, citoyens)
- Les avancées pour ces modèles vont TRÈS vite

Merci !