

Méthodes de calcul appliqué à la chimie

- Acquis d'apprentissage UE :
 - Appliquer des méthodes numériques standards ou des logiciels existant pour résoudre des problèmes fondamentaux ou annexes, liés à des activités de recherche scientifique
 - Etre actif dans la recherche de méthodes de résolution numérique existantes et adaptées à des problèmes auxquels les chimistes sont confrontés
- Contenu de l'UE :
 - Equations différentielles ordinaires (résolutions numériques et applications cinétiques)
 - Equations aux dérivées partielles (différences finies, problèmes de diffusion)
 - Systèmes d'équations non linéaires (méthode de Newton-Raphson)
 - Problèmes aux valeurs propres (applications à des problèmes de relaxation et de population)
 - Approximation par moindres carrés linéaires et non-linéaires (application à la déconvolution)
 - Approximation de Tchébychev
 - Modélisation et visualisation de molécules
 - Minimisation et problèmes conformationnels
- Compétences préalables
 - Connaissance de base d'un langage de programmation
 - Bases des mathématiques
- Types d'évaluations : Examen oral sur base d'un travail approfondi sur un des chapitres du cours

From:

<https://dvillers.umons.ac.be/wiki/> - **Didier Villers, UMONS - wiki**

Permanent link:

<https://dvillers.umons.ac.be/wiki/teaching:methcalchim:start?rev=1475076436>

Last update: **2016/09/28 17:27**

