

# Méthodes de calcul appliquée 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 moindre carrés linéaires et non-linéaires (application à la déconvolution)
  - Approximation de Tchébyshev
  - 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**