

# 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
    - Être actif dans la recherche de méthodes de résolution numérique existantes et adaptées à des problèmes auxquels les chimistes sont confrontés
  - Contenu de l'UE :
    - Équations différentielles ordinaires (résolutions numériques et applications cinétiques)
    - Équations 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
  - Exercices et applications : codes écrits ou à écrire principalement en Python, avec les librairies générales matplotlib, numpy et scipy, ainsi que d'autres librairies spécialisées, notamment en chimie
  - Types d'évaluations : Examen oral sur base d'un travail approfondi sur un des chapitres du cours ou un thème additionnel
- 

## Synopsis

### Pré-requis mathématiques

### Base de la programmation

### Méthodes numériques usuelles

### Équations différentielles ordinaires

#### Résolutions numériques des ODE

- Principe de discrétisation, méthode d'Euler
- Améliorations et méthodes de Runge-Kutta
- Runge-Kutta d'ordre 4
- Contrôle du pas d'intégration
- Méthodes predictor-corrector

- Méthodes d'extrapolation (Richardson, Burlish-Stoer
- applications :
  - équations de cinétique chimique
  - Modèle proie-prédateur
  - Attracteur étrange (Lorenz,...)
  - Équation logistique

## **Équations 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, PCA (principal component analysis),...

## **Approximation par moindres carrés linéaires et non-linéaires**

application à la déconvolution

## **Approximation de Tchébyshev**

## **Modélisation et visualisation de molécules**

## **Minimisation**

problèmes conformationnels

---

## **Thèmes additionnels**

- Bioinformatique et algorithmes spécifiques
- Chimie
  - calculs quantiques, de minimisation, de mécanique moléculaire
  - représentations
- Data science, statistiques (bibliothèque Python Pandas,...)
  - Time series analysis
  - Machine learning (Scikit-learn,...)

- Data visualization
    - boxplot, 3D, animations, graphes,...
  - Senseurs et interfaçage, Arduino, Raspberry Pi, IoT
  - Simulations
    - Agent base modelling et systèmes complexes
    - Automates cellulaires
    - Simpy,...
  - Traitement d'image
    - particle tracking,...
- 

## Références

- Bioinformatique
  - [Biopython](#)
  - [Rosalind.info](#), plateforme d'apprentissage par la résolution de problèmes
- Machine Learning
  - Scikit-learn
  - [12 Algorithms Every Data Scientist Should Know](#)

From:

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

Permanent link:

<https://dvillers.umons.ac.be/wiki/teaching:methcalchim:start?rev=1476191650>

Last update: **2016/10/11 15:14**

