

# 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 Tchébyshev
    - 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 de base

- [Systèmes d'équations linéaires](#)
  - Diagonalisation et triangularisation
  - Décomposition LU en matrices triangulaires
- [Intégration numérique](#)
  - Simpson et quadratures gaussiennes
- [Résolutions d'équations du type  \$f\(x\) = 0\$](#) 
  - Équations polynomiales
  - Recherche dichotomique
  - Méthode de la sécante
  - Méthode de Newton-raphson

## 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
  - Équation logistique
    -  [Modèle de Verhulst](#),  [dynamique des populations](#) et non-linéarité
    - Bifurcation, doublements de périodes et transition vers le chaos
  - Réactions chimiques oscillantes : Belousov-Zhabotinsky, Brusselator, Oregonator
  - Modèle proie-prédateur
  - Attracteur étrange, modèle atmosphérique de Lorenz

### Équations aux dérivées partielles

#### Résolutions numériques des équations aux dérivées partielles

- Domaine d'application des équations : équation de diffusion, équation d'ondes, équations de Navier-Stokes
- Types de traitements numériques
- Différences finies et problèmes de diffusion
- Schémas classiques de différences finies
  - Résolutions stationnaires
  - Résolutions dépendantes du temps
- Méthodes explicites, critère de (ou d'in)stabilités et méthodes implicites

### Problèmes aux valeurs propres

#### Valeurs propres et vecteurs propres

applications à des problèmes de relaxation et de population, analyse de modes normaux de vibration, PCA (principal component analysis),...

### Systèmes d'équations non linéaires

Méthode de Newton-Raphson

## Approximation par moindre carrés linéaires et non-linéaires

application à la déconvolution

## Approximations 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=1480066987>

Last update: **2016/11/25 10:43**

