

Calculation methods applied to chemistry

(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
 - 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 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
- 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 (english)

Mathematical prerequisites

Programming bases

Fundamental numerical methods

- Systems of linear equations
 - Diagonalisation and triangularisation
 - LU decomposition : factorization in triangular matrices
- Numerical intégration (integrals)
 - Simpson method and gaussian quadratures
- Root findings : equations $f(x) = 0$
 - Polynomial equations
 - Dichotomy

- Secant method, Regula falsi
- Newton-Raphson method

Classical numerical methods

Ordinary differential equations (ODE)

Numerical solutions of 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

Partial differential equations (PDE)

Numerical solutions of PDE

- 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

Eigenvalues and eigenvectors

Eigenvalues and eigenvectors

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

Non-linear systems of equations

- Newton-Raphson method

Linear and non-linear least squares approximations

Application to deconvolution (Levenberg–Marquardt algorithm)

Chebyshev approximation

Molecules modelisation and visualization

Minimization

Conformational problems

Additional subjects

- Bioinformatics and related algorithm (biochemistry, mass spectrometry,...)
- Chemistry
 - quantum calculations, optimization, molecular mechanics
 - visualization, virtual reality
- Data science, statistics (Python modules : Scipy, Pandas,...)
 - Time series analysis
 - Machine learning (Scikit-learn,...)
- Data visualization
 - boxplot, 3D, animations, graphs,...
- Sensors and interfaces, Arduino, Raspberry Pi, IoT
- Simulations
 - Agent base modelling and complex systems
 - cellular automaton
 - Simpy,...
- Digital image processing, image recognition
 - particle tracking,...

Références

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

Books

- [Solving Differential Equations in R](#), chez Springer, et en version électronique sur [SpringerLink](#)
 - ...
-

Synopsis (français)

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 Tchébytchev

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 (librairie Python Pandas,...)
 - Time series analysis
 - Machine learning (Scikit-learn,...)
- Data visualization
 - boxplot, 3D, animations, graphes,...
- Capteurs et interfacing, 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](#)
- Arduino
 - [Fabrication of an Economical Arduino-Based Uniaxial Tensile Tester](#), Julien H. Arrizabalaga, Aaron D. Simmons, and Matthias U. Nollert, J. Chem. Educ., 2017, 94 (4), pp 530-533 DOI: 10.1021/acs.jchemed.6b00639

Livres

- [Solving Differential Equations in R](#), chez Springer, et en version électronique sur [SpringerLink](#)
- ...

From:

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

Permanent link:

<https://dvillers.umons.ac.be/wiki/teaching:methcalchim:start?rev=1492073914>

Last update: **2017/04/13 10:58**

