

# Calculation methods applied to chemistry

(Méthodes de calcul appliqué à la chimie)

- Learning outcomes teaching unit (UE):
  - Apply standard numerical methods or existing software to solve numerical problems related to scientific research activities
  - Be active in the search for existing numerical methods adapted to problems encountered by chemists
- Content of the UE:
  - widespread methods : linear systems, numerical integration, root findings
  - Ordinary differential equations (numerical solutions, kinetic applications,...)
  - Partial differential equations (finite differences, diffusion problems)
  - Nonlinear systems of equations (Newton-Raphson method)
  - Eigenvalues eigenvectors problems (applications to relaxation and population problems)
  - Approximation by linear and non-linear least squares methods (maximum likelihood, application to deconvolution)
  - Chebyshev approximation
  - Molecular modeling and visualization
  - Minimization and conformational problems
- Prerequisite skills
  - Basic knowledge of a programming language
  - Basics of Mathematics
- Exercises and applications: codes written in or mainly written in Python, with the general libraries matplotlib, numpy, scipy, pandas as well as other specialized libraries, especially in chemistry
- Types of evaluations: Oral examination based on an in-depth study on one of the chapters of the course or an additional theme
- 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 (english)

### Mathematical prerequisites

### Programming bases and tools

- Python programming language
-  [Anaconda Python distribution](https://www.anaconda.com/download/) (64 bits, with Python 3.x) :  
<https://www.anaconda.com/download/>
  - Includes these tools :
    - Jupyter notebook (interactive web-based environment)
    - qtconsole (high level Python console with graphics & colors)
    - spyder (powerful Python IDE)
  - includes lot of Python libraries : matplotlib, numpy, scipy, pandas,...
  - package management system (conda), virtual environments
  - Anaconda Navigator includes extensive documentation (on anaconda website and dedicated websites)
- GNU/Linux OS (preferred)
- Jupyter introductions, tutorials, ...
  - [Jupyter Notebook Tutorial](#), par Den Kasyanov (Medium)
  - [Jupyter official documentation](#)
  - [Jupyter DataCamp Cheat Sheet](#)

The Microsoft Azure Notebooks environment can be used to execute sample codes, using a professional, personal or student login/account (i.e. student login from UMONS). The following public sample notebooks are then available to test Jupyter text and coding features : <https://notebooks.azure.com/linusable/libraries/samples-public>

- Python scientific libraries (official websites including tutorials and documentation)
- cf. [this](#) (french)
- [Matplotlib](#) (scientific graphs)
- [NumPy](#) (array manipulations, linear algebra, Fourier transforms, random numbers,...)
- [SciPy](#) numerical methods (integrations, ODE, PDE,...)
- [SymPy](#) symbolis maths
- [Pandas](#), data analysis
- Pylab, combine Matplotlib, NumPy and SciPy
- [Scikit-learn](#), machine learning

Some MOOCs to help learning :

- [Introduction to Python: Absolute Beginner](#) (edX)
- [DataCamp MOOCs](#) on data science with Python



## 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
  - chemical informations on structures and reactions
- 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,...

## References

- Bioinformatics
  - [Biopython](#)
  - [Rosalind.info](#), learning bioinformatics by problem solutions
- Machine Learning
  - Scikit-learn
  - [12 Algorithms Every Data Scientist Should Know](#)
- Deep Learning
  - TensorFlow
  - [Keras Tutorial: Deep Learning in Python](#)
- 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
- PCA (principal component analysis)
  - [Learning Principal Component Analysis by Using Data from Air Quality Networks](#), Luis Vicente Pérez-Arribas, María Eugenia León-González, and Noelia Rosales-Conrado, J. Chem. Educ., 2017, 94 (4), pp 458–464 DOI: 10.1021/acs.jchemed.6b00550
  - [Principle Component Analysis in Python](#)
- K-Means
  - [K-means Clustering in Python](#)
- Applications (suggestions, examples,...)
  - [2D Ising Model in Python](#)
- chemistry
  - misc docs :
    - [Extraction of chemical structures and reactions from the literature](#)

## Books

- [Solving Differential Equations in R](#), chez Springer, et en version électronique sur [SpringerLink](#)
- [Numerical Methods in Engineering with Python 3](#) 3rd Edition, Jaan Kiusalaas, 2013, Cambridge University Press, isbn: 9781107033856
- ...

## Jupyter notebooks

- [Jupyter notebooks and other materials developed for the Columbia course APMA 4300](#)
- [A Concrete Introduction to Probability \(using Python\)](#)

## MOOCs

- [Practical Numerical Methods with Python](#)

## Miscellaneous

- [Practical Numerical Methods with Python](#)
- <https://github.com/cfgnunes/numerical-methods-python> (?)
- [Presenting Code Using Jupyter Notebook Slides](#)
- <https://choosealicense.com>
- <https://creativecommons.org/choose/?lang=en>
- Published applications
  - [Introduction to Stochastic Simulations for Chemical and Physical Processes: Principles and Applications](#) Charles J. Weiss, Journal of Chemical Education 2017 94 (12), 1904-1910 DOI: 10.1021/acs.jchemed.7b00395

---

## 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 moindres 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,...

From:

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

Permanent link:

<https://dvillers.umons.ac.be/wiki/teaching:methcalchim:start?rev=1519643794>

Last update: **2018/02/26 12:16**

