Calculation methods applied to chemistry

Synopsis (english)

Mathematical prerequisites

Programming bases and tools

- Python programming language
  - LearnPython.org interactive tutorial with code execution
  - DataCamp free course "Intro to Python for Data Science"
  - Python 3 Tutorial, interactive, with code use in web browser
  - MOOCs (massive open online courses) :
    - An Introduction to Interactive Programming in Python (Beginners) (Coursera)
    - Introduction to Computer Science and Programming Using Python (edX)
- Anaconda Python distribution (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 professionnal, personnal 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
>   - *e.g.* : https://notebooks.azure.com/linusable/libraries/samples-public/html/notebooks/second_degree_polynomial_and_roots-01.ipynb (Second degree polynomial and roots)

- 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

Fundamental numerical methods

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

Learning outcomes :

- Systems of linear equations
  - failing of the theoretical way to solve a linear system using determinant and cofactors (np complexity)
  - triangularisation and diagonalisation principles : algorithm and complexity
  - “divide by zero” errors and pivot solutions
  - extension towards the matrix inversion
  - lower-upper LU decomposition and complexity (N^3 for the decomposition step and N^2 for substitution step). How to solve systems with varying independant vectors
  - special matrix require special algorithms : tridiagonal matrix algorithm (Thomas algorithm)
- Root findings
  - Bisection method (dichotomy) : simple and robust algorithm, invariant loop, slow convergence
  - iterative transformation x = f(x), convergence and divergence situations
  - secant and regula falsi methods, Convergence Criterion of the Fixed Point Method
  - Newton-Raphson method (use of derivatives), quadratic convergence, failure, tolerance and stop condition
  - Van Wijngaardeb-Dekker-Brent method (“black box” in numerical packages)
  - Roots of polynomials and Bairstow's method
- Numerical intégration
  - Equally Spaced methods (trapezoidal, Simpson), accuracy, error dependance,...
  - Gaussian Quadratures and orthogonal polynomials (special integrals, scale transformations, error estimates,...)

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)
- Références :
  - An Open-Source, Cross-Platform Resource for Nonlinear Least-Squares Curve Fitting Andreas Möglich, J. Chem. Educ., 2018, 95 (12), pp 2273–2278 DOI: 10.1021/acs.jchemed.8b00649

Chebyshev approximation

+ discussion of some approximations like Bhaskara I's sine approximation formula

- https://twitter.com/fermatslibrary/status/1267450081151782913

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, active matter simulations...
- Digital image processing, image recognition
  - particle tracking,...
  - Voronoi diagrams, Delaunay triangulation,... (ref1)

References

- Gradient descent optimization
  - How to Implement Gradient Descent Optimization from Scratch By Jason Brownlee on April 16, 2021
  - Implementing Gradient Descent in Python from Scratch Vatsal Sheth, Medium, 18/02/2022
- Bioinformatics
  - Biopython
  - Rosalind.info, learning bioinformatics by problem solutions
- Machine Learning
  - Scikit-learn
    - Linear Regression in 6 lines of Python (using 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
  - K Means Clustering in Python Rohit Raj, Medium, 02/03/2022
  - Classification Algorithms in Python Rohit Raj, Medium, 15/03/2022
- Applications (suggestions, examples,...)
  - 2D Ising Model in Python
- chemistry
  - misc docs :
    - Extraction of chemical structures and reactions from the literature
  - Animating Schrodinger Wave Function(ψ) of a Particle Using Python (with full code) - Solving Particle in a Box Using Crank-Nicolson Method, Kowshik chilamkurthy, Medium, 02/03/2021
- Blog articles
  - Simple Linear Regression Explained With Python - Explained in details which are easy to understand Arjan de Haan, Medium, Jan 23 (+ jupyter notebook)
  - simpy : Simulate Real-life Events in Python Using SimPy by Khuyen Tran, May, 2021, Medium, Towards Data Science
  - Active matter simulations (Vicsek, 1995) :
    - Create Your Own Active Matter Simulation (With Python) Philip Mocz, The Startup, Medium 2021 + https://github.com/pmocz/activematter-python
  - Fourier transforms : Fourier Transforms: An Intuitive Visualisation - An intuitive visualization of discrete Fourier transforms applied to simple time-series data Diego Unzueta, Towards Data Science, Medium, 17/09/2021
  - Monte-Carlo simulations : Monte Carlo Simulation — a practical guide - A versatile method

    - for parameters estimation. Exemplary implementation in Python programming language Robert Kwiatkowski, Medium, 31/01/2022
    - régression logistique : https://mlu-explain.github.io/logistic-regression/
    - Cubic Splines: The Ultimate Regression Model - Why cubic splines are the best regression model out there Brendan Artley, Medium, 27/07/2022

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
- An overview of the Gradient Descent algorithm
- Building A Logistic Regression in Python, Step by Step
- Building Linear Regression in Python
- 17 types of similarity and dissimilarity measures used in data science : explains various methods for computing distances and showing their instances in our daily lives. Additionally, it will introduce you to the pydist2 package. Mahmoud Harmouch, Medium, 14/03/2021
- Pythonic Perambulations de Jake VanderPlas

Synopsis (français)

(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 eignevectors 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 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

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 (librairie 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=1661158139

Last update: **2022/08/22 10:48**