

Programmation appliquée à la chimie

Le cours "Programmation appliquée à la chimie" de bachelier en sciences chimiques (15 H cours et 15 H exercices, bloc2) utilise deux supports :

- Principalement, le présent wiki pour ses avantages techniques (coloration et indentation du code, recherche dans les pages, historique des modifications, ...)
- Parfois, la [plateforme moodle d'enseignement en ligne de l'UMONS](#), pour ses **autres** avantages techniques (authentification, devoirs, forum,...)

Si vous voulez comprendre la nécessité d'une formation informatique incluant l'initiation à l'algorithmique et la programmation, et l'apprentissage pratique via des projets, vous pouvez consulter :

- Le [Rapport de l'Académie des sciences - L'enseignement de l'informatique en France - Il est urgent de ne plus attendre](#) (2013)
- [Computer Science For All](#) (President Obama in his 2016 State of the Union Address)

Notions de base (résumés, exemples de base,...)

- [Présentation et principes de base de la programmation en Python, avec quelques applications + codes](#)
- [Présentation et principes de base de la programmation en Python, avec quelques applications](#) (version wiki)
- [Page avec de nombreuses informations sur Python \(y compris pour l'apprentissage et l'installation\)](#). Modes recommandés :
 1. installation de la version 3 standard via [python.org](#)
 2. **installation de la distribution complète Anaconda (pour votre OS, en version 3 et 64 bits)**
 3. en salle informatique UMONS : utilisation de Python sous Ubuntu
 4. utilisation en mode nomade de la plateforme [Azure](#) avec l'utilisation de vos codes UMONS
- [Notions fondamentales](#)
- [Les bases d'un interface graphique avec Tkinter](#)
- [Pièges à éviter](#)

Algorithmes classiques

- [Calcul de factorielles](#) (pas à pas)
- [Suite de Fibonacci](#) (pas à pas)
- [Manipulation de polynômes](#) (pas à pas)
- [Manipulations de matrices](#)
- [Algorithmes de tri](#)
- [Algorithmes de recherche](#)
- [Algorithmes sur entiers](#), où on parle d'atomes, de molécules, de nombres de nucléons !
- [Algorithmes divers](#)

Les librairies scientifiques essentielles

- [Les bases de Matplotlib, une librairie pour réaliser des graphiques 2D](#)
- [Les bases de NumPy](#) (tableaux numériques, algèbre linéaire, transformées de Fourier, nombres aléatoires)
- [Les bases de SciPy](#) : ajoute à NumPy des fonctionnalités mathématiques (intégration, optimisation, fonctions spéciales, interpolation,...)
- [Pylab](#) : permet de combiner simplement Matplotlib, NumPy et SciPy
- [Scikit-learn](#), machine learning
- [Pandas](#), pour l'analyse de données

Notions intermédiaires et avancées

- [Slices sur les listes](#)
- [Lire et écrire des fichiers de données csv](#) (comma separated values)
- [Notions avancées](#)
- [Trucs et astuces](#)

Applications

- [Marche aléatoire 2D simple](#) : simulation d'une chaîne polymère
- [Flocon de Koch](#) : simulation d'une fractale avec la librairie Turtle
- [Traduction de l'ADN en séquence d'acides aminés \(protéine\)](#) : utilisation d'un dictionnaire (type Python)
- [Utilisation d'une "classe" pour des données de solvants chimiques](#)
- [Représentation du potentiel de Lennard-Jones](#), graphe élémentaire avec Matplotlib, et énergie de cohésion d'un cristal de gaz rare.
- [Modélisation de la diffusion chimique dans un film](#) : technique de différences finies, utilisation de Matplotlib
- [Représentation de la distribution de vitesse de Maxwell-Boltzmann](#) (avec et sans NumPy)
- [Entropie de mélange pour un gaz ou liquide idéal](#)
- [Éléments et molécules](#) : propriétés, masses molaires,...
- [Représentation 3D du pH d'un acide en fonction d'un ajout de base et d'une dilution globale](#)
- [Analyse d'images](#)
- [L'attracteur de Lorenz](#) : équations différentielles ordinaires et comportement chaotique
- [OpenBabel et Jmol](#) : format de description de molécules et visualisations
- [Optimisation de la température caractéristique du diamant suivant le modèle d'Einstein](#) (avec scipy, numpy, matplotlib)
- [Test de Student](#) : exemple technologique (avec scipy, numpy)
- [Interrogation de la base de données géolocalisées OpenStreetMap](#)
- [Bioinformatique](#) (manipulations de séquences ADN, ARN, protéines,...)

Exemples de travaux d'étudiants

Ces travaux peuvent être entièrement originaux, ou se baser sur des éléments de code existants.

- [Jeu de la vie de Conway](#) : automate cellulaire 2D (TkInter)
- [Tableau périodique](#) : tableau avec éléments cliquables pour obtenir les informations (y compris un fichier de données)
- [Régression linéaire](#) : entrée de couples, calcul et affichage de la droite de moindres carrés
- [Ensemble de Mandelbrot](#) : dessin d'une fractale
- [Pavage de Penrose](#)
- [Courbe de Prédominance d'un Acide](#)
- [Création d'une grille et de configurations d'un système binaire modélisé](#)
- [Représentation de pH d'acides et de bases](#)
- [Représentation de molécules](#)
- [Calcul matriciel](#), avec l'interface Tk
- [Conversion de températures](#), avec l'interface Tk
- [pH et courbe de titrage](#), avec l'interface Tk
- [Loi des gaz parfaits](#), avec l'interface Tk
- [Tableau périodique](#) : une autre version, avec l'interface Tk
- [Traduction ADN-ARN-protéine](#), avec l'interface Tk
- [Solubilité en fonction du pH et de la température](#), interface en ligne de commande et graphiques matplotlib
- [Graphiques des pressions partielles de systèmes non-idéaux](#)
- [Vue 3D de l'électronégativité](#) (tableau périodique)

Idées de travaux, projets

- Représentation de fonctions thermodynamiques de deux variables :
 - avec Matplotlib, en incluant des éléments supplémentaires
 - exemple : isothermes de van der Waals
 - Utiliser la librairie Mayavi (3D)
- Représentation des résolutions de Fourier pour la diffusion à 1D, 2D, 3D, en fonction du temps,...
- Résolution de problèmes numériques
 - intégration numérique
 - racines de polynômes, de fonctions générales
 - systèmes d'équations linéaires
 - optimisation de fonction (minimisations)
 - Approximations utilisant la [formule de Stirling](#) pour la factorielle (très utilisée en thermodynamique statistique), avec tabulation, représentations graphiques,...
- Interfacer Python et un tableur (par exemple pouvoir lire des données d'un fichier de tableur à partir d'un programme Python)
- Simulation en chimie :
 - degré de polymérisation comme l'article [Software for Demonstration of Features of Chain Polymerization Processes](#)
- Traitement d'images
- mesurer des temps de réaction (s'inspirer par exemple de fonctionnalités de [ce programme](#))
- générer du son, de la vidéo
- Calcul de la [constante de Madelung](#) (interactions coulombiennes dans un cristal ionique)
- Représentation 3D du pH d'un acide en fonction d'un ajout de base et d'une dilution globale : cf. [cet article](#) : extension de l'exemple montré
- Échelle d'électronégativité, ou autre propriété atomique : représentation à 3D ou via des barres dont la taille est proportionnelle à la valeur, en suivant le schéma général du tableau périodique
- Illustrations graphiques des séries spectrales de l'hydrogène (barres, flèches, anneaux,...)

- Visualisations s'inspirant de sites comme [ChemTube 3D](#), [ChemEd DL](#),...
- Diagramme de Pourbaix à 3D : cf. [cet article](#)
- Outils de base en chimie comme sur le site <http://fr.webqc.org/chemicaltools.php>
- Multiéquilibre (mélange d'acides et bases conjuguées) : cf. [cet article](#)
- Utilisation de régressions non-linéaires pour traiter des données de réactions enzymatiques : cf. [cet article](#)
- Tableau périodique interactif via Ipython et Bokeh (cf. [cette ref](#))
- Simulations de ségrégation, par inspiration de [ces simulations](#), [des travaux de Thomas Schelling](#), et sur base du programme [Mesa](#) (agent-based modelling)
- Équilibre liquide-vapeur à deux constituants, simulation du changement de phase (cf. [cette simulation](#))
- Approximations de la [fonction de Langevin](#) utilisée pour décrire la magnétisation d'un matériau paramagnétique : représentation de la fonction et de ses approximations, des erreurs relatives,...
- graphiques polaires et cartésiens :
 - <http://lucasvb.tumblr.com/post/42881722643/the-familiar-trigonometric-functions-can-be>
 - Illustration dynamique de séries de Fourier, comme [ici](#)
- Évolution de population suivant le modèle de la [matrice de Leslie](#) avec représentation de la [pyramide des ages](#) (cf [ce lien](#))
- Créer des structures de données pour gérer les étiquettes de produits chimiques : pictogrammes, mentions de danger (Hxxx et EUHxxx), de prudence (Pxxx), codes produits,...
- Rotamères : étude simplifiée et représentation graphique (cf. [cet exemple](#))
- Décomposition spinodale (modèle de Cahn-Hilliard), (cf. [cet exemple](#))
- Programme basé sur une de ces librairies :
 - [pyEQL](#), librairie pour gérer des solutions aqueuses d'électrolytes
 - [chemlab](#), librairies incluant la visualisation et la manipulation de données sur les structures chimiques
 - [chempy](#), librairie pour résoudre des problèmes de chimie physique, chimie analytique,...
- [ChEMBL](#) base de donnée chimique
- [ChemSpiPy](#) pour accéder à la base de donnée [ChemSpider](#)
- [Wikipedia chemical structure explorer](#), avec données exploitables via [GitHub](#)
- Charte des nucleides, et diverses représentations des instabilités. cf. [Live Chart of Nuclides](#) et les données sources indiquées
- Event-Driven hard disc simulation (dynamique moléculaire) :
 - <http://introcs.cs.princeton.edu/java/assignments/collisions.html> + [ici](#)
 - https://statmechalgcomp.wikispaces.com/Hard_Spheres_MD_MC
- Exploitation de données chimiques de wikidata.org [query](#) (> 20000 composés),

```
PREFIX wdt: <http://www.wikidata.org/prop/direct/>
SELECT ?compound WHERE {
    ?compound wdt:P31 wd:Q11173 .
}
```

- chaines de Markov sur des séquences peptidiques
- Simulation électrochimique comme dans [cet article](#)
- Splitting en RMN du proton, comme [cet article](#)
- Catalyse biochimique (Michaelis-Menten) : représentation et calcul des constantes comme dans [cet article](#)
- Simulation de l'expansion irréversible d'un gaz mono-atomique, comme dans [cet article](#)
- représentation de liaisons, densités de charge, comme dans [cet article](#)
- simulation du modèle d'Ising : <http://rajeshrinet.github.io/blog/2014/ising-model/>

- visualisation comme dans l'article [Visualization of Buffer Capacity with 3-D “Topo” Surfaces: Buffer Ridges, Equivalence Point Canyons and Dilution Ramps](#)
- sur base de [A Python Program for Solving Schrödinger’s Equation in Undergraduate Physical Chemistry](#)
- programmes en version python analogues aux applications en chimie de l'article [The Development of Computational Thinking in a High School Chemistry Course](#) Paul S. Matsumoto and Jiankang Cao, J. Chem. Educ., 2017, 94 (9), pp 1217–1224 DOI: 10.1021/acs.jchemed.6b00973
- programmes inspirés de [Teaching the Growth, Ripening, and Agglomeration of Nanostructures in Computer Experiments](#) Jan Philipp Meyburg and Detlef Diesing, J. Chem. Educ., 2017, 94 (9), pp 1225–1231 DOI: 10.1021/acs.jchemed.6b01008
- ...

Voir aussi la [sélection de codes sources ActiveState](#) avec de nombreuses applications scientifiques.

Voir aussi [ces librairies](#).

From:

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

Permanent link:

<https://dvillers.umons.ac.be/wiki/teaching:progappchim:start?rev=1517492625>

Last update: **2018/02/01 14:43**

