

Programmation appliquée à la chimie

L'article suivant analyse les contributions à cpython, le cœur du langage Python : <https://lukasz.langa.pl/f15a8851-af26-4e94-a4b1-c146c57c9d20/>. Les deux contributeurs les plus importants (on enlève les bots et les gestionnaires de release) sont Victor Stinner et Serhiy Storchaka.

Aux dernières nouvelles (14/12/2022) Serhiy Storchaka vit toujours en Ukraine, à 20 km de Konotop !!

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)**
 - [User guide](#)
 - **Cf. la page dédiée sur Anaconda**
 3. en salle informatique UMONS : utilisation de Python sous Ubuntu
 4. dans n'importe quel navigateur web, via le site <https://repl.it/languages/python3>
 5. utilisation en mode nomade de la plateforme [Azure](#) avec l'utilisation de vos codes UMONS
 6. via [Colaboratory](#) et l'utilisation d'un compte gmail, cette configuration permettant un partage et une édition en commun
- [Notions fondamentales](#)
- [Les bases d'un interface graphique avec Tkinter](#)

- [Pièges à éviter](#)

Vous serez encouragé à l'utilisation et l'écriture de Jupyter notebooks, via l'utilisation de la distribution Anaconda, soit via [Colaboratory via la plateforme cloud Azure](#).

Cf :

- [ce](#) [Tutoriel Jupyter en Jupyter](#) (fichier compressé dans une archive zip)
- cette [application sur les données des éléments chimiques](#) ( : lien à actualiser)
- [A gallery of interesting Jupyter Notebooks](#)
- ...

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 bibliothèques scientifiques essentielles

- [Les bases de Matplotlib, une bibliothèque 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
- [Pandas](#), pour l'analyse de données
- [Scikit-learn](#), machine learning
- [les bases de Plotly](#), une bibliothèque pour réaliser des graphiques. [plotly](#) est interactif et s'intègre bien dans des navigateurs (*i.e.* Jupyter notebooks)
- [les bases de Pygal](#), une autre bibliothèque graphique, simple (cf. ce [site](#))
- [les bases de Altair](#), une autre bibliothèque graphique, interactive

Des bibliothèques spécifiques en chimie, biochimie,...

- [Mendeleev](#) (données sur les éléments chimiques)

- [RDKit et molécules](#) (représentation,...)
- [Bioinformatique et la librairie Biopython](#) (manipulations de séquences ADN, ARN, protéines,...)
- [OpenBabel et Jmol](#) : format de description de molécules et visualisations
- [ChemSpiPy](#) : utilisation des données de [ChemSpider](#)
- [PubChemPy](#) : interaction avec la base de données PubChem
- [ChemPy](#) : librairie contenant diverse fonctionnalités sur la chimie et les réactions chimiques
- [PyMatGen](#)
- [Chemlab](#)
- [Ase's gui](#)
- [PyMOL](#)
- [pyMolDyn](#)
- [chemview](#)
- ...

De nombreuses librairies, l'utilisation du langage Python, de l'environnement Jupyter,... dans le cadre de la chimie sont évoquées dans le livre de 2021 de Thorsten Gressling (series De Gruyter Textbook) ISBN: 9783110629453 cf. <https://www.degruyter.com/document/doi/10.1515/9783110629453/html>

Notions intermédiaires et avancées

- [Slices sur les listes](#)
- [Lire et écrire des fichiers de données csv](#) (comma separated values)
- [Notions avancées](#)
- [Trucs et astuces](#)
- [Lecture du code source d'une page web via la librairie urllib](#)

Jupyter, IPython Notebooks et JupyterLab

Jupyter

- [Jupyter](#) : introduction, exemples, liens,...
- [Les bases de Bokeh](#), une librairie Python de visualisations interactives pour des représentations dans des navigateurs web. Bokeh est particulièrement indiqué pour une utilisation dans les Jupyter notebooks, et s'installe aisément via Anaconda.
- Références externes :
 - [Scientific Computing for Chemists](#) (pdf et données), cité dans [A Creative Commons Textbook for Teaching Scientific Computing to Chemistry Students with Python and Jupyter Notebooks](#) Charles J. Weiss, J. Chem. Educ. 2021, 98, 2, 489–494 DOI: 10.1021/acs.jchemed.0c01071
 - [Jupyter Notebooks sur Chemistry Libretexts](#)
 - ...

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
- [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](#)
- [Glossaire de chimie](#)
- [Mathématiques et nombres](#)
- [Épidémie du coronavirus COVID-19](#)

Données chimiques disponibles

- Données brutes non triées sur les éléments chimiques (pour usage après restructuration via du code python) :
brute_data.zip
- [Dataset](#) de Kaggle sur les éléments chimiques
- [Explore air pollution data](#) European Environment Agency
- [European Chemicals Agency](#)
- ...

Autres données

- [Brent Oil Prices](#) Daily historical Brent Oil Prices available on the U.S. Energy Information Admin
- Sources de données statistiques, données ouvertes (opendata), statistiques belges
 - OpenData : <http://data.gov.be/fr>
 - statbel : http://www.statbel.fgov.be/home_fr.asp
 - Belgostat online : <http://www.nbb.be/app/cal/F/BelgoHome.htm>
 - CREF : <http://www.cref.be/Statistiques.htm>
- statistiques européennes
 - eurostat : <http://epp.eurostat.ec.europa.eu>
- statistiques internationales
 - OECD : <http://stats.oecd.org/wbos/>
 - UNESCO : <http://www.uis.unesco.org>
 - United Nations : <http://unstats.un.org/unsd/default.htm>
 - World Trade Organization :
http://www.wto.org/english/res_e/statis_e/its2005_e/its05_toc_e.htm

- Nations particulières
 - France :
 - <https://www.data.gouv.fr/fr/>
 - http://www.insee.fr/fr/home/home_page.asp
 - Luxembourg : <http://www.statec.public.lu/en/>
 - UK : <http://www.statistics.gov.uk/>
 - Hollande : <http://www.cbs.nl/en/>
 - Allemagne : http://www.destatis.de/e_home.htm
 - Italie : <http://www.istat.it/English/index.htm>
 - Espagne : <http://www.ine.es/welcoing.htm>
 - Suisse : <http://www.bfs.admin.ch/bfs/portal/en/index.html>
 - Canada : <http://www.statcan.ca/start.html>
 - UK : <http://www.data.gov.uk>
 - Australia : <http://data.gov.au/>
 - USA :
 - <http://www.fedstats.gov/>
 - <http://www.data.gov/> (et pages spécialisées, incluant la science et la recherche)
- Secteurs spécifiques
 - [Economic Data freely available online](#)
- Autres références :
 - <http://www.statista.com/>

Exemples de travaux d'étudiants

Ces travaux peuvent être entièrement originaux, ou se baser sur des éléments de code existants. + page à accès limité : [lien intranet sur les travaux](#)

- [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

Consulter aussi cette [[floss:python#applications_en_chimie](#)liste d'applications et bibliothèques python en chimie]]

- Représentation de fonctions thermodynamiques de deux variables :
 - avec Matplotlib, en incluant des éléments supplémentaires
 - exemple : isothermes de van der Waals
 - Utiliser la bibliothèque 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 lpython 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
- **collisions de particules (sphères ou disques)**
 - [Molecular Dynamics Simulation of Hard Spheres](#) → description générale du problème avec des solutions basées sur les particules ou les événements (hard disc simulation, dynamique moléculaire) :
 - documents de Werner Krauth et al.
 - [Main Page - Werner KRAUTH](#)
 - [Lecture 2: Hard disks: from Classical Mechanics to Statistical Mechanics - Hard disks: From Classical Mechanics to Statistical Mechanics | Coursera](#)
 - [Bernard Krauth 2012 - Werner KRAUTH](#)
 - Event-driven
 - [Event-Driven Simulation](#)
 - [numberset/HardSphereSim: Event driven simulation of hard spheres in python](#)
 - [rajeshrinet/pyedmd: Event-Driven Molecular dynamics simulations](#)
 - [robeme/HardSphereSim: Event driven simulation of hard spheres in python](#)
 - Autres simulations
 - [ideal-gas-simulation/simulation.py at master · labay11/ideal-gas-simulation](#)
 - [gas.py](#)
- 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 .
}
```

- chaînes 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](#) ou [3-D Topo Surface Visualization of Acid-Base Species Distributions: Corner Buttes, Corner Pits, Curving Ridge Crests, and Dilution Plains](#)

- 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
- Créer un nuage de tag | mots ou word cloud à partir de textes publications websites de chimie (utiliser scikit-learn et/ou du "web scrapping",...). Liens : [Word Cloud](#), [PyTagCloud](#), [ref1](#), [ref2](#), [ref3](#),...
- représentations d'orbitales électroniques 1D ou 3D.
 - Cf. par exemple [cet article](#)
 - <http://anguslowe.me/physics/orbitals/>
- Colorimétrie : [Color Space Mathematical Modeling Using Microsoft Excel](#) M. J. Delgado-González, Y. Carmona-Jiménez, M. C. Rodríguez-Dodero, and M. V. García-Moreno, J. Chem. Educ., 2018, 95 (10), pp 1885-1889 DOI: 10.1021/acs.jchemed.7b00681
- Énergie électrique et émission de CO₂, en continu : <https://www.electricitymap.org>
- Données diverses (France) : <http://data.cquest.org/>
- Visualisation de la taille d'effet : cf. <https://rpsychologist.com/d3/cohend/>
- simulation du [Problème de Monty Hall](#) (+ [Monty Hall problem](#), [Paradoxe des prisonniers](#))
 - [Simulate the Famous Monty Hall Problem with Python](#) Ahmed Al-Jaishi, Medium, 25/02/2022
- <https://scipython.com/> : Learning Scientific Programming with Python avec quelques exemples de programme pouvant être à la base de quelques développements
- rebonds, billards,... comme discuté [ici](#)
- ...

Voir aussi :

- [sélection de codes sources ActiveState](#) avec de nombreuses applications scientifiques.
- [ces librairies](#)
- [Utiliser le langage Python dans un contexte de physique-chimie](#) (éduscol, France)

Références générales

- [Coder proprement](#) Robert C. Martin 2019, Eyrolles
- [21 Python Mini Projects With Code - Get a Speed Boost In Your Python Journey By Building These Amazing Projects](#) Abhay Parashar, Medium, 04/01/2021

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

Permanent link:
<https://dvillers.umons.ac.be/wiki/teaching:progappchim:start?rev=1671732590>

Last update: **2022/12/22 19:09**

