



# Méthodes numériques pour la chimie théorique



Niveau d'étude  
BAC +5



ECTS  
4 crédits



Composante  
Faculté des  
Sciences

## En bref

- › **Date de début des cours:** 1 sept. 2021
- › **Langue(s) d'enseignement:** Français
- › **Méthode d'enseignement:** En présence
- › **Organisation de l'enseignement:** Formation initiale
- › **Ouvert aux étudiants en échange:** Non

- développer des outils numériques pour la chimie
- utiliser le système Linux
- exprimer diverses méthodes numériques sous forme d'algorithme
- convertir un algorithme en un langage de programmation
- savoir lesquels de ces méthodes et outils sont utilisés dans d'autres domaines extérieurs à la chimie
- concevoir et développer des outils informatiques en autonomie, depuis un cahier des charges jusqu'à la réalisation de l'outil final

## Présentation

### Description

Au cours de cet enseignement, les étudiants verront les principales méthodes numériques utilisées dans les logiciels scientifiques et plus particulièrement dans les programmes de chimie théorique.

**Volumes horaires\* :**

CM : 21

TD : 9

### Objectifs

- travailler en autonomie : établir des priorités, gérer son temps

### Pré-requis nécessaires

Bases de programmation impérative et procédurale, langage de programmation pour le calcul scientifique (Fortran 95 par exemple).

### Contrôle des connaissances

Contrôle continu intégral (3 projets).

### Syllabus

- 1 .Interpolation, Extrapolation
- 2 .a) Interpolation globale (polynômes de Lagrange, polynôme quotient, trigonométrie et générale par une fonction analytique)



- 1 .b) Interpolation locale (splines naturelles)
- 2 .c) Interpolation multidimensionnelle (bilinéaire et bicubique, splines) - Intégration (quadratures, analytique, multidimensionnelle)

- 1 .Intégration et dérivation d'une fonction
- 2 .a) Méthodes simples
- 3 .b) Méthode des quadratures
- 4 .c) Intégrales multidimensionnelles
- 5 .d) Dérivation numérique
- 6 .Systèmes Linéaires, Racines et Extrema
- 7 .a) Résolution de systèmes linéaires (matrice tridiagonale, décomposition LU, méthode itérative de Gauss-Seidel)

- 1 .b) Racines (méthode de la bisection, Newton-Raphson)
- 2 .c) Extrema (à une dimension, méthode de Powell, recuit simulé, algorithmes génétiques)
- 3 .Diagonalisation : Propriétés des équations aux valeurs propres
- 4 .a) Réduction de Householder
- 5 .b) Diagonalisation d'une matrice tridiagonale (algorithme QL, bisection)
- 6 .c) Vecteurs propres par itération inverse
- 7 .d) Méthode de Lanczos
- 8 .e) Méthode de Davidson
- 9 .Ajustement d'un Modèle
- 10a) Principe des moindres carrés
- 11b) Méthode linéaire générale
- 12c) Décomposition en valeurs singulières
- 13d) Modèle non linéaire (Levenberg-Marquardt)
- 14 Méthodes Spectrales et Pseudo-spectrales
- 15a) Transformée de Fourier (transformée discrète, FFT)
- 16b) Méthodes pseudo-spectrales

---

## Informations complémentaires

### Contact(s) administratif(s) :

Secrétariat Master Chimie

<https://master-chimie.edu.umontpellier.fr/>

## Infos pratiques

---

### Contacts

Responsable pédagogique

Christophe RAYNAUD

✉ [christophe.raynaud1@umontpellier.fr](mailto:christophe.raynaud1@umontpellier.fr)

---

### Lieu(x)

➤ Montpellier - Triolet