



# Méthodes numériques pour la chimie théorique



Niveau d'étude  
BAC +5



ECTS  
4 crédits



Structure de  
formation  
Faculté des  
Sciences

## En bref

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

## 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
- 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

---

## Heures d'enseignement

Méthodes numériques pour la chimie théorique - CM	Cours Magistral	21h
Méthodes numériques pour la chimie théorique - TD	Travaux Dirigés	9h

---

## Pré-requis obligatoires

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 bissection, 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