

3C007 : Initiation à la programmation scientifique

(L3, Période P1 et P2)

Parcours monodisciplinaire, bidisciplinaire majeure chimie - mineure physique
et double majeure chimie - physique

Responsables :

Rodolphe VUILLEUMIER, Professeur
Laboratoire PASTEUR (CNRS-ENS-UPMC UMR 8640)
Département de chimie de l'ENS
24 rue Lhomond, 75005 Paris
Tél.: 0144323324 Mel : rodolphe.vuilleumier@ens.fr

Johannes RICHARDI (Maître de Conférences)
Laboratoire MONARIS (Sorbonne UMR CNRS-UPMC 8233)
Campus JUSSIEU, Batiment F, Porte 631, Boîte courrier 52, 4 place Jussieu,
75252 Paris Cedex 05
Tél.: 0144272573 Mel. : johannes.richardi@upmc.fr

Secrétariat : Christine ALBERT,
Campus JUSSIEU, Bâtiment F, 6ème étage, pièce 14b, Boîte courrier 66,
4, Place Jussieu, 75252 PARIS Cedex 05,
Tél.: 01 44 27 31 83 Mel. : christine.albert@upmc.fr

1. Descriptif de l'UE Volumes horaires globaux : **CM 12h, TP 15h**
Nombre de crédits de l'UE : **3 ECTS**
Barème total/100 : **TP/40 (Projet), CC/40, Oral/20**

2. Présentation pédagogique de l'UE

a) Objectifs de l'UE :

- Initier les étudiants à la programmation scientifique
- Réaliser un projet consistant à résoudre numériquement un problème en chimie
- Rédiger un manuel d'utilisation et un compte-rendu incluant l'analyse et la visualisation des données

b) Thèmes abordés :

- Architecture des ordinateurs, systèmes d'exploitation
- Structure d'un programme, compilateurs, éditeurs, bibliothèques
- Algorithmique
- Eléments de la programmation en Python (définition des variables, représentation des nombres, opérateurs, entrées-sorties écran, branchements, boucles, tableaux, traitement de fichiers)
- Problème de la précision numérique
- Notion des familles de langages de programmation (scripts, langages orientés objet, calcul formel)
- Conception et réalisation des programmes en TP
- Représentation et visualisation de structures moléculaires
- Représentation graphique de données

Prérequis :

Les exercices proposés en TP sont adaptés aux connaissances acquises pendant le L1 et le L2 de chimie, notamment :

- Chimie : chimie des solutions, structure des solides, atomistique et liaison chimique, cinétique formelle et thermodynamique.
- Mathématiques : vecteurs et matrices, intégration et dérivées (à une et plusieurs variables)
- Physique : thermodynamique & énergie.