

4CI302 Chimie et numérique									
Mots clés : modélisation et simulation, bases de données, imagerie, approches stochastiques									
Responsable Hélène Gérard, Pr, Laboratoire de Chimie Théorique, Sorbonne Université									
<i>ECTS</i>	<i>Cours (h)</i>	<i>TD (h)</i>	<i>TP (h)</i>	<i>Tutorat (h)</i>	<i>Ecrit (%)</i>	<i>CC (%)</i>	<i>TP (%)</i>	<i>Oral (%)</i>	<i>Eval. répartie</i>
6		20	20	20	30	10	60		non
<i>Descriptif de l'UE</i>									
<p>Le numérique toujours en expansion ne cesse d'offrir de nouvelles opportunités en terme d'analyse, d'interprétation, de prédiction et d'innovation. Il est devenu un outil incontournable pour la communauté scientifique, y compris celle des chimistes. Cette UE vise à donner aux étudiants une vision transversale des retombées de la révolution numérique sur le travail du chimiste, quel que soit son domaine d'expertise. Bien évidemment essentiel dans tous les aspects de modélisation, le numérique est également devenu incontournable en chimie de synthèse, pour l'analyse et la spectroscopie, ou pour le développement et la caractérisation de nouveaux matériaux. Cette UE, basée sur une approche collaborative par projet et en forte autonomie, sera réalisée majoritairement en non présentielle, avec une large liberté d'organisation laissée à l'étudiant. Elle est donc compatible avec toutes les UE du semestre.</p>									
<i>Objectifs d'apprentissage</i>									
<p>L'étudiant sera capable de différencier les différents types d'approches numériques utilisées pour étudier un système chimique : numérisation de résultats expérimentaux, extraction d'une base de données, modélisation, simulation, extrapolation par approche statistique. Il sera ainsi capable de comprendre les principes des nombreux outils nés de la révolution numérique et de réaliser ainsi des choix parmi les méthodes disponibles pour résoudre un problème chimique concret. Il pourra illustrer ses acquis non seulement au niveau du choix des méthodes mais aussi de l'analyse critique des résultats obtenus sur quelques méthodes abordées dans le cadre des projets.</p>									
<i>Prérequis</i>									
Aucun prérequis lié au numérique n'est demandé.									
<i>Langue⁽¹⁾</i>	<i>Cours, TD, TP</i>							<i>Documents</i>	<i>Bibliographie</i>

(1) D'une manière générale, les documents de cours sont à rédiger en anglais. Les sujets d'examen sont en anglais ou accompagnés d'une explication en anglais s'il y a des étudiants non francophones.

Fonctionnement de l'UE

Cours-TD et tutorat :

- Quels outils numériques pour la chimie ? Panorama de la variété des outils, en termes chimiques et informatiques
 - Les différents types d' « objets » : langages, macros et scripts, logiciels, applis, gratuits – commerciaux – opensource - constructeurs...
 - Les différents types de méthodes : enregistrer, visualiser, exploiter, simuler, modéliser, designer, prédire ...
 - Rédaction d'un sondage sur les outils numériques à réaliser auprès de chimistes
- Modéliser ou comment décrire une molécule avec un ordinateur ?
 - La molécule isolée : catégorisation, composition, structure, propriétés, ...
 - La molécule en interaction : les différents états de la matière, les systèmes supramoléculaires, le solvant
 - La notion d'échelle : adapter l'outil à l'échelle de questionnement
- Applications dans le contexte réel : recherche, industrie, ... conférences, documents, films etc...

Travaux pratiques (mode projet) : sur toute la durée du semestre, les étudiants seront amenés à réaliser deux projets tutorés parmi les sujets suivants (ouverture soumise au nombre d'étudiants postulant, modifications possibles en fonction des années) :

- Modélisation d'une réaction chimique
- Modélisation d'un système étendu
- Initiation aux techniques « d'intelligence artificielle »
- Traitement d'image