

Læringsmål

IN-KJM1900

Høst 2019

Velkommen til programmering for kjemikere! I dette emnet skal dere lære programmering som et verktøy for å utforske og løse fenomener fra kjemi. Første del av emnet er felles med IN1900, og vil gi en innføring i grunnleggende programmering. I andre del av emnet ser vi på hvordan vi kan benytte denne programmeringen, sammen med numerisk matematikk, til å løse kjemiske problemer. Her er en generell oversikt over de overordnede læringsmålene i emnet. For detaljert oversikt over pensum til midtveis og avsluttende eksamen, se semester-sidene.

Grunnleggende programmering:

Gjennom første del av emnet skal du lære å beherske følgende momenter:

1. Bruke variabler direkte og ved input.
2. Bruke variablsamlinger (lister, arrayer, tupler og dictionaries).
3. Bruke beslutninger (if-tester) og nøstede beslutninger.
4. Bruke løkker og nøstede løkker (while og for).
5. Bruke funksjoner til å strukturere kode.
6. Plotte diskrete data og kontinuerlige funksjoner.
7. Lese data fra fil og skrive data til fil.
8. Utføre strengoperasjoner.
9. Bruke og importere biblioteker.
10. Gjennomføre selvstendig feilsøking av programmer, og bruke feilhåndtering (try/except).
11. Lage hensiktsmessige kommentarer i programmer.
12. Programmere og plotte Taylor-polynomer som tilnærminger til funksjoner.
13. Løse differenslikninger numerisk.
14. Lage sammensatte programmer.
15. Vurdere og tolke programkode.

Anvendelser i kjemi:

Gjennom andre del av emnet skal du lære å beherske følgende momenter:

1. Lese og plotte data fra kjemiske eksperimenter.
2. Utføre statistiske operasjoner på data fra kjemiske eksperimenter.
3. Bruke numerisk derivasjon til å tolke kjemiske data.
4. Bruke interpolasjon til å skaffe nye datapunkter gitt utilstrekkelige eksperimentelle data.
5. Bruke regresjon til å tilpasse funksjoner til diskrete data, og vurdere gyldighetsområdet til modellen.
6. Bruke numerisk løsning av likninger til å løse og tolke kjemiske modeller og kjemiske data.
7. Bruke numerisk løsning av differensiallikninger til å simulere kjemiske prosesser, spesielt innenfor reaksjonskinetikk.
8. Forklare og implementere numeriske metoder for derivasjon (Newtons kvotient), likningsløsning (Newtons metode) og løsning av differensiallikninger (Forward Euler).
9. Bruke tilfeldige tall til simulering av ulike fenomener.
10. Anvende problemløsningsstrategiene du bruker i emnet på nye problemstillinger.