# Skilaverkefni06. Stærð- og Reiknifræði REI201G

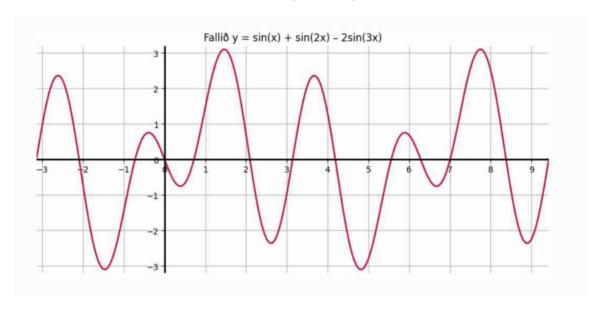
#### Donn Eunice Bartido deb5@hi.is

febrúar 2023

## Verkefni 22. Sínussveiflur

Teiknið góða mynd af fallinu  $f(x) = \sin x + \sin 2x - 2\sin 3x$  á bilinu  $[-\pi, 3\pi]$ 

• sbr. dæmi V17. Hér er dæmi um slíka mynd með ýmsum fídusum.

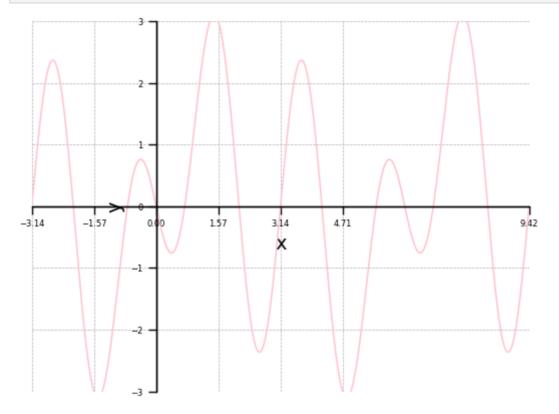


#### Lausn

```
In [19]:
         import numpy as np
          import matplotlib.pyplot as plt
          # Skilgreinum fallið f(x)
         def f(x):
             return np.sin(x) + np.sin(2*x) - 2*np.sin(3*x)
         # Teiknum fallið á bilinu [-\pi, 3\pi]
         x = np.linspace(-np.pi, 3*np.pi, 500)
         y = f(x)
         fig, ax = plt.subplots()
         ax.plot(x, y, linewidth=1, color='pink')
          # Setjum stikana og ramma
         ax.set xlim(-np.pi, 3*np.pi)
         ax.set ylim(-3, 3)
         ax.set_xticks([-np.pi, -np.pi/2, 0, np.pi/2, np.pi, 3*np.pi/2, 3*np.pi])
         ax.set_yticks([-3, -2, -1, 0, 1, 2, 3])
         ax.spines['right'].set visible(False)
         ax.spines['top'].set_visible(False)
```

```
ax.spines['bottom'].set_linewidth(1)
ax.spines['left'].set_linewidth(1)
ax.tick_params(axis='both', which='major', labelsize=6, length=6, width=1)
ax.tick_params(axis='both', which='minor', labelsize=6, length=4, width=1)
ax.grid(True, linestyle='--', linewidth=0.5)
ax.axvline(0, color='black', linewidth=1)
ax.axhline(0, color='black', linewidth=1)
ax.set_xlabel('x', fontsize=14)
ax.set_ylabel('y', fontsize=14)

# Setjum ásamerkingarnar við ásana sjálfa
for s in ['left','bottom']:
    plt.gca().spines[s].set_position('zero')
```



## Verkefni 23. Málmavinnsla

Í lotukerfinu hefur hvert frumefni sætistölu (atomic number), lotu (period) og flokk (group). Sætistalan gefur fjölda rafeinda (electrons) eða róteinda (protons) í óhlöðnu atómi, lotan segir til um hve mörg hvel (atomic orbitals) af rafeindum óhlaðið atóm hefur, en flokkurinn gefur til kynna fjölda rafeinda á ytri hvelum.

- Fyrir utan helíum eru F
- rafeindir á ysta hveli í atómum í flokki F,
- fyrir *F*=1,2 og *F*-10
- rafeindir eru þar ef 11≤F≤18
- Í flokkum 3–10 er fjöldinn 1–2, oftast 2.

Ysta hvel telst fullskipað ef þar eru 8 rafeindir (2 fyrir helíum). Ef þær eru 1–3 myndar atómið gjarna jákvæða jón, t.d.

Na+

- Ca2+
- Al3+ ef þær eru 5-7 verður jónin neikvæð, t.d.
- CI-
- N3-

. Frumefni með fullskipað ysta hvel, helíum, neon, argon o.s.frv. nefnast eðallofttegundir (noble gases).

## 1. Sætistölur eðallofttegunda

Hægt er að reikna sætistölu eðallofttegundar nr. k, sk, með eftirfarandi formúlu:

$$\begin{split} s_k = \left( (k+1)(k+2)(k+3) \right) + \left( s_k - 2 \right) +$$

Skrifið fall sem reiknar skv. þessari formúlu og prófið það fyrir k=1,2,...,7. Ath. að allar deilingar ganga upp svo gott er að nota // virkjan svo útkoman verði af heiltölutagi.

#### Lausn við 1.

```
In [41]:
    def saetistala(k):
        if k % 2 == 0: # Ef k er slétt tala
            return ((k+1)*(k+2)*(k+3)) // 6 + (k//2 - 1)
        else: # Ef k er oddatala
            return ((k+1)*(k+2)*(k+3)) // 6 - 2
    for k in range(1, 8):
        print(f's({k}) = {saetistala(k)}')

s(1) = 2
    s(2) = 10
    s(3) = 18
    s(4) = 36
    s(5) = 54
    s(6) = 86
    s(7) = 118
```

## 2. Lotur og Flokkar

Skrifið föll lota(s) og flokkur(s) sem ákvarða lotu og flokk frumefnis með sætistölu s\*\*

. Prófið með a.m.k. fjórum frumefnum, þar á meðal einhverjum af sjaldgæfu jarðmálmunum, sem hafa sætistölur á bilinu 57–71 og eru í lotu 6 og flokki 3 skv. lotukerfinu á mynd 23.1. Leiðbeining: Lotuna má finna með while-lykkju og fallinu úr lið 1. Til að finna flokkinn er gott að nota if-elif-else.

#### Lausn við 2

```
k = lota(s)
   skil = 0
   if s <= saetistala(k-1) + 2:</pre>
       skil = s - saetistala(k-1)
   else:
        skil = 18 + s - saetistala(k)
   if k in range(3, 11):
       if skil == 1:
            return 1
        elif skil == 2:
            return 2
   return skil
# Prófið með fjórum frumefnum
elements = {"Hg": "Mercury", "Pb": "Lead", "Lu": "Lutetium", "Pt": "Platinum
for symbol, name in elements.items():
   s = frumefni[symbol]
   print(f"{name} ({symbol}) er i lotu {lota(s)} og flokki {flokkur(s)}")
```

```
Mercury (Hg) er í lotu 6 og flokki 12
Lead (Pb) er í lotu 6 og flokki 14
Lutetium (Lu) er í lotu 6 og flokki 3
Platinum (Pt) er í lotu 6 og flokki 10
```

## 3. Íslensk og ensk málmanöfn.\*\*

Íslensk og ensk málmanöfn. Með NumPy skipununum í kafla 10.6.4 má lesa skrána https://cs.hi.is/python/allir-malmar.txt inn í vigra efnatákn, nafn, sætistala, eðlisþyngd, bræðslumark og enskt\_nafn. Gerið það og búið í framhaldi til uppflettitöflu milli nafnanna með aðstoð dict og zip eins og gert er í sýnidæminu aftast í kafla 8.2 og í verkefni 21c. Náið líka í fallið íslenska úr sama verkefni og notið töfluna og þetta fall til að prenta út orðalista með íslenskum málmanöfnum í stafrófsröð ásamt enskum þýðingum.

verkefni skipt niður:

- a) Ná í gögnin frá vefsíðunni með urllib.request pakkanum.
- b) Skipta textanum í línuum og búa til lista sem heldur utan um hverja línu.
- c) Búa til tóma vigrana fyrir öll gögnin sem verið er að lesa úr skránni.
- **d)** Fara í gegnum hverja línu í skránni og skipta línu í parta með tab (\t) sem aðgreinara. Bæta hverjum part í tilsvarandi vigrar í listanum í skrefi 3.
- e) Nota dict og zip til að búa til orðalisti sem tengir saman íslensk og ensk nöfn á málmanum.
- **f)** Búa til fall sem raðar íslenskum og enskum nöfnum í stafrófsröð og prenta út orðalista með nöfnunum.

### Lausn við 3.

```
import numpy as np
import urllib.request

# lesa gögn frá url
with urllib.request.urlopen('https://cs.hi.is/python/allir-malmar.txt') as r
```

```
data = response.read().decode('utf-8')

# Skipta niður gögn niður í línu og búa til fylki
lines = data.strip().split('\n')
elements = np.empty((len(lines) - 1, 2), dtype=object)
for i in range(1, len(lines)):
    parts = lines[i].split(';')
    elements[i-1, 0] = parts[1] # Icelandic name
    elements[i-1, 1] = parts[5] # English name

# raða ísl nöfnum í stafrófsröð
icelandic_names = sorted(elements[:,0], key=str.lower)

# ná tilsvarandi ensk nöfn
english_names = [elements[i, 1] for i in range(len(icelandic_names))]

# Prenta röðuð lista af íslenskum og enskum nöfnum
for icelandic, english in zip(icelandic_names, english_names):
    print(f"Íslenska: {icelandic}, Enska: {english}")
```

Íslenska: aktín, Enska: Lithium Íslenska: barín, Enska: Beryllium Íslenska: beryllín, Enska: Sodium Íslenska: bismút, Enska: Magnesium Íslenska: blý, Enska: Aluminum Íslenska: dysprósín, Enska: Potassium Íslenska: erbín, Enska: Calcium Íslenska: evrópín, Enska: Scandium Íslenska: fransín, Enska: Titanium Íslenska: gadólín, Enska: Vanadium Íslenska: gallín, Enska: Chromium Íslenska: gull, Enska: Manganese Íslenska: hafnín, Enska: Iron Íslenska: hólmín, Enska: Cobalt Íslenska: indín, Enska: Nickel Íslenska: iridín, Enska: Copper Íslenska: járn, Enska: Zinc Íslenska: kadmín, Enska: Gallium Íslenska: kalsín, Enska: Rubidium Íslenska: kalín, Enska: Strontium Íslenska: kopar, Enska: Yttrium Íslenska: króm, Enska: Zirconium Íslenska: kvikasilfur, Enska: Niobium Íslenska: kóbalt, Enska: Molybdenum Íslenska: lantan, Enska: Technetium Íslenska: litín, Enska: Ruthenium Íslenska: lútetín, Enska: Rhodium Íslenska: magnesín, Enska: Palladium Íslenska: mangan, Enska: Silver Íslenska: mólýbden, Enska: Cadmium Íslenska: natrín, Enska: Indium Íslenska: neptún, Enska: Tin Íslenska: neódým, Enska: Cesium Íslenska: nikkel, Enska: Barium Íslenska: níóbín, Enska: Lanthanum Íslenska: osmín, Enska: Cerium Íslenska: palladín, Enska: Praseodymium Íslenska: platína, Enska: Neodymium Íslenska: plúton, Enska: Promethium Íslenska: praseódým, Enska: Samarium Íslenska: prometín, Enska: Europium Íslenska: prótaktín, Enska: Gadolinium Íslenska: pólon, Enska: Terbium Íslenska: radín, Enska: Dysprosium Íslenska: renín, Enska: Holmium Íslenska: ródín, Enska: Erbium Íslenska: rúbidín, Enska: Thulium Íslenska: rúþen, Enska: Ytterbium Íslenska: samarín, Enska: Lutetium Íslenska: serín, Enska: Hafnium Íslenska: sesín, Enska: Tantalum Íslenska: silfur, Enska: Tungsten Íslenska: sink, Enska: Rhenium Íslenska: sirkon, Enska: Osmium Íslenska: skandín, Enska: Iridium Íslenska: strontín, Enska: Platinum Íslenska: tantal, Enska: Gold Íslenska: teknetín, Enska: Mercury Íslenska: terbín, Enska: Thallium Íslenska: tin, Enska: Lead Íslenska: títan, Enska: Bismuth Íslenska: túlín, Enska: Polonium Íslenska: vanadín, Enska: Francium Íslenska: volfram, Enska: Radium

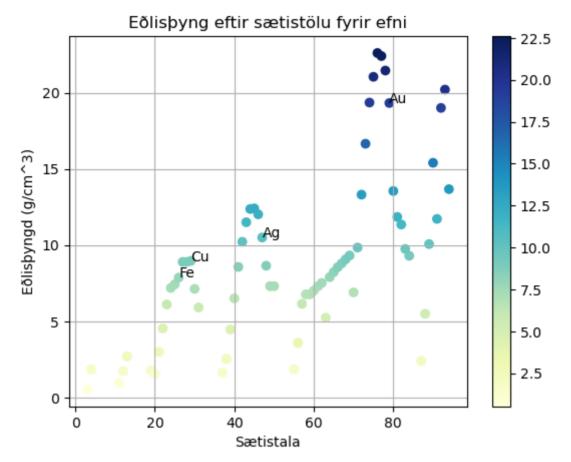
```
Íslenska: ytterbín, Enska: Actinium
Íslenska: yttrín, Enska: Thorium
Íslenska: ál, Enska: Protactinium
Íslenska: úran, Enska: Uranium
Íslenska: þallín, Enska: Neptunium
Íslenska: þórín, Enska: Plutonium
```

## 4. Eðlisþyngd eftir sæti

 Eðlisþyngd eftir sæti. Teiknið punktarit af sætistölu og eðlisþyngd sem er litað með lotu í lotukerfinu (sbr. verkefni 19 – ath. að Matplotlib getur teiknað hvort sem er lista af tölum eða NumPy vigra). Veljið hæfilega punktastærð, bætið colorbar við myndirnar, stillið ásamerkingar eftir smekk, setjið texta við ása og bætið við rúðuneti (grid).

#### Lausn við 4.

```
In [43]: import numpy as np
         import matplotlib.pyplot as plt
         import urllib.request
         # ná í gögn frá vefslóð
         with urllib.request.urlopen('https://cs.hi.is/python/allir-malmar.txt') as r
             data = response.read().decode('utf-8')
         # Skipta gögn nipur í línur og setja í fylki
         lines = data.strip().split('\n')
         elements = np.empty((len(lines) - 1, 3), dtype=object)
         for i in range(1, len(lines)):
             parts = lines[i].split(';')
             elements[i-1, 0] = parts[1] # Icelandic name
             elements[i-1, 1] = float(parts[3].replace(',',','.')) # Density
             elements[i-1, 2] = int(parts[2]) # Atomic number
         # Raða efnum eftir sætistölu
         elements = elements[np.argsort(elements[:, 2])]
         # Teikna scatter plot
         plt.scatter(elements[:, 2], elements[:, 1], c=elements[:, 1], cmap='YlGnBu')
         # bæta colorbar
         plt.colorbar()
         # Ásamerkingar og titil á myndina
         plt.xlabel('Sætistala')
         plt.ylabel('Eŏlisþyngd (g/cm^3)')
         plt.title('Eðlisþyng eftir sætistölu fyrir efni')
         # Texta við hvert efni
         plt.text(26, 7.9, 'Fe')
         plt.text(29, 8.96, 'Cu')
         plt.text(47, 10.5, 'Ag')
         plt.text(79, 19.3, 'Au')
         # Bæta grid
         plt.grid(True)
         # Sýna mynd
         plt.show()
```



## 5. Fleiri myndir Teiknið samskonar myndir af sætistölu og bræðslumarki.

```
In [46]: import numpy as np
         import matplotlib.pyplot as plt
         import urllib.request
         # Lesum gögn af vefslóð
         with urllib.request.urlopen('https://cs.hi.is/python/allir-malmar.txt') as r
             data = response.read().decode('utf-8')
         # Skiptum gögnum í línu og búum til fylki
         lines = data.strip().split('\n')
         elements = np.empty((len(lines) - 1, 2), dtype=float)
         for i in range(1, len(lines)):
             parts = lines[i].split(';')
             elements[i-1, 0] = float(parts[2]) # Sætistala
             elements[i-1, 1] = float(parts[4].replace(',', '.')) # Bræðslumark
         # Raða eftir sætistölu
         elements = elements[np.argsort(elements[:, 0])]
         # Teiknum punktarit
         plt.scatter(elements[:, 0], elements[:, 1])
         # ásmerkingar og titil á myndina
         plt.xlabel('Sætistala')
         plt.ylabel('Bræðslumark (K)')
         plt.title('Bræðslumark eftir sætistölu fyrir efni')
         # Texta við hvert efni
         plt.text(26, 7.9, 'Fe')
         plt.text(29, 8.96, 'Cu')
```

```
plt.text(47, 10.5, 'Ag')
plt.text(79, 19.3, 'Au')

# Grid
plt.grid(True)

# Sýnum mynd
plt.show()
```

