

# Objektorientering

## Programmering og modellering

### Innlevering

Lever oppgava som en Jupyter Notebook med lenke i ITL. Dette er siste innlevering, og den kan telle på standpunkt. Frist: 8. juni. Velg mellom én av oppgavene nedenfor.

## 1 Grunnstoffer og bindingstyper

Bindingstypen mellom to atomer kan grovt sett klassifiseres ut fra forskjellen i elektronegativitet ( $\Delta$ ):

Forskjell i elektronegativitet	Type binding
$\Delta \geq 2.0$	Ionisk
$2.0 > \Delta > 1.6$	Mellom ionisk og polar kovalent
$1.6 \geq \Delta \geq 0.5$	Polar kovalent
$0.5 > \Delta > 0.3$	Mellom polar og upolar kovalent
$0.3 \leq \Delta$	Upolar kovalent

- Lag en klasse `Grunnstoff` med klassevariablene `a_num` som er atomnummeret, `sym` som symbolet, `navn` som er navnet, `masse` som er atommassen i u og `el_neg` som er elektronegativiteten.
- Lag karbon, litium, fluor, brom, klor, kalium, oksygen og hydrogen ved å lage objekter (instanser) av klassen.
- Lag en funksjon `bindingstype(grunnstoff1, grunnstoff2)` som tar to objekter fra klassen `Grunnstoff` og returnerer en tekststreng med bindingstypen.
- Bruk funksjonen `bindingstype` til å finne ut hva slags binding det er i LiF, BrCl, K<sub>2</sub>O og CH<sub>4</sub> (metan).

## 2 Derivasjon

Det finnes mange måter å tilnærme den deriverte på numerisk:

Tilnærming	Operasjon
Framoverdifferanse	$f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x)}{h}$
Bakoverdifferanse	$f'(x) \approx \frac{f(x) - f(x-h)}{h}$
Sentraldifferanse	$f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h}$
Firepunktsdifferanse	$f'(x) \approx \frac{-f(x+2h) + 8f(x+h) - 8f(x-h) + f(x-2h)}{12h}$

- Lag en klasse `Diff` med en funksjon  $f$  som parameter. Implementer de fire ulike tilnærmingene til derivasjon ovenfor som metoder til klassen.
- Lag et objekt (en instans av klassen) ved å benytte  $f(x) = \sin(2\pi x)$ .
- Visualiser forskjellen mellom metodene ved å plote den deriverte for  $x \in [-1, 1]$  og sammenlikne med den analytiske verdien,  $f'(x) = 2\pi \cos(2\pi x)$ . Lag et plott for ulike verdier av  $h$  (velg verdiene 0.9, 0.6, 0.3 og 0.1 – totalt fire plott).