NADA, KTH **Betygsgradering:** D-A
2D1312 2006-2007 (python)

179 Vilken molekyl?

Läs anvisningarna på kurshemsidan!!!

Varudeklaration: Filhantering, datastrukturer.

Du ska skriva ett program som, givet en procentuell fördelning mellan olika grundämnen, listar ut vilken molekyl det kan vara.

```
Ge ämne och motsvarande andel i procent.
Ämne och andel: H 11.2
Ämne och andel: O 88.8
Ämne och andel:
Det måste vara H2O.
Vill du analysera ett nytt ämne? nej
```

På filen `avikt` finns alla atombeteckningar med atomvikter lagrade. Kopiera den och studera hur den är upplagd. Programmet ska börja med att läsa in atombeteckningar och atomvikter från filen till en datastruktur och sedan ta emot användarens inmatning och analysera den.

Den molekyl som programmet kommer fram till ska ha så små koefficienter som möjligt (t ex ska inmatningen *H 100* ge svaret H och inte H_2) och du behöver inte kontrollera om molekylen verkligen existerar. Ta också hänsyn till att procentvärdena är avrundade, så att programmet svarar H_2O och inte $H_{1001}O_{500}$ i exemplet ovan.

Tips:

- Dela varje procentsiffra med ämnets atomvikt.
- Normera alla värden du får då genom att dela med det största (så att alla värden blir mindre eller lika med ett).
- Om nu alla värden är ungefär ett vet du att det finns lika mycket av varje ämne.
- Multiplicera annars värdena med två och kontrollera om alla blev ungefär heltal. Om inte, prova att multiplicera med tre osv.
- När du provkör programmet kan du skriva ut värdena för att bedöma när de börjar komma nära heltal, men sedan ska programmet avgöra detta.

Programmet måste kontrollera att bara riktiga grundämnesbeteckningar matas in och att summan av de inlästa procentvärdena blir ungefär 100.

Exempel att provköra med:

- Propadien (C_3H_4) har 89.9% kol och 10.1% väte.
- Vilken molekyl har fördelningen 37.2% kol, 7.8% väte och 54.9% klor?

Extrauppgift, betyg B: Rita upp ett enkelt stapeldiagram över den procentuella fördelningen mellan de ingående ämnena i terminalfönstret.

Extrauppgift, betyg A: Gör ett grafiskt användargränssnitt (GUI).

Datafiler och hjälpfiler: `avikt`