

Funktioner og arrays

Table of contents

Funktioner	1
Opgave 1	2
Arrays	2
Opgave 2	3
Array operationer	3
Opgave 3	3
Array indeksering	3
Opgave 4	4
Opgave 5	4

```
try:
    import fysisk_biokemi
    print("Already installed")
except ImportError:
    %pip install -q "fysisk_biokemi[colab] @ git+https://github.com/au-mbg/fysisk-biokemi.git"
```

```
import numpy as np
```

Funktioner

Forrige gang så vi på funktioner, vi vil fortsætte med det denne gang. Husk at en funktion er en opskrift der beskriver hvordan en beregning skal foretages som kan genbruges mange gange.

En funktion defineres med `def` hvorefter dens navn bliver sat og i paranteserne sættes dens parametre (også kaldet argumenter).

```
def min_funktion(a, b):
    resultat = a * b
    return resultat
```

Funktionen bliver først udført når den bliver kaldt, i dette tilfælde f.eks.

```
mit_resultat = min_funktion(6, 7)
print(mit_resultat)
```

42

Hvor vi så har outputtet af funktionen i variabelen `mit_resultat`.

Opgave 1

Tablene nedenfor viser radius af forskellige celler typer

Celle type	Radius
Mycoplasma	~0,2–0,3 μm
Typisk bakterie	~1–2 μm
Gærcele (S. cerevisiae)	~5–7 μm
Røde blodlegemer (menneske)	~7–8 μm
Lymfocyt (hvidt blodlegeme)	~8–10 μm
Typisk dyrecelle	~10–20 μm
Typisk plantecelle	~20–100 μm
Menneskelig ægcelle (oocyt)	~120–140 μm
Neuron (cellekrop)	~10–100 μm

Vi har tidligere beregnet volumen af cellerne ved at antage at de er kugleformede, hvorved at volumen er givet ved

$$V(r) = \frac{4}{3}\pi r^3$$

Skriv en funktion den tager radius r som argument og beregner volumen - husk at du kan bruge np.pi istedet for at skrive π ind selv!

```
def ... # Erstat med din kode
    ... # Erstat med din kode
```

Kald funktionen med nogle af de forskellige radius fra tablen

```
mycoplasma_volume = ... # Erstat med din kode
print(mycoplasma_volume)
# Gør det samme for nogle af de andre celle typer
...
```

Arrays

Vi har tidligere set nogle af forskellige datatyper i Python

- Integers (Heltal) int
- Floats (Kommatal) float
- Strings (Tekst) str

Men der er mange andre typer der kan være hjælpesomme i forskellige sammenhæng. En sådan type er numpy arrays, et eksempel på et numpy array er vist nedenfor

```
A = np.array([1.0, 2.5, 3.5])
```

Noget af det smarte med arrays er at vi kan lave operationer på alt indeholdet på engang

```
B = 2 * A
print(B)
```

```
[2. 5. 7.]
```

Opgave 2

Lav et array der indeholder de angivne celle radii og brug din volumen funktion til at beregne volumen af alle celler på engang

```
radii = np.array([...]) # Erstat ... med din kode
```

```
celle_volumner = ... # Erstat ... med din kode.
print(celle_volumner)
```

Array operationer

Der er mange andre operationer vi kan lave på arrays, som f.eks. at finde det største eller mindste tal

Vi kan finde celle-typen med den største volumen som

```
np.max(celle_volumner)
```

```
np.float64(9202772.0799157)
```

Den tilsvarende funktioner for at finde det mindste tal hedder `np.min`.

Opgave 3

Cellen nedenfor laver et array med 1000 tal

```
array_med_tal = np.random.rand(1000) * np.exp(3.737669)
```

Brug `np.max` til at finde det største tal i `array_med_tal`

```
største_tal = ... # Erstat ... med din kode
print(største_tal)
```

Array indeksering

Nogle gange er vi interesserede i specifikke indgange i et array, så vi skal også kunne trække data ud af et array. Dette er "indexing" (indeksering), f.eks. hvis vi har et array

```
mit_array = np.array([0, 2, 4, 6, 8, 10, 12, 14, 16, 18, 20])
```

Kan vi bruge trække det fjerde tal ud sådan

```
fjerde_tal = mit_array[3]
```

!Vigtigt

I Python starter man med at tælle fra 0, så det fjerde tal findes på plads 3.

Opgave 4

Brug indexing til at regne summen af

- Det sidste tal (Plads 10)
- Det andet tal (Plads 1)
- Det fjerde tal (Plads ??)
- Det ottende tal (Plads ??)

```
sum_af_tal = ... # Erstat med din kode  
print(sum_af_tal)
```

Opgave 5

I molekylær biologi arbejder vi ofte med spektra, hvor akserne f.eks. er

- x : Bølgelængde målt i nm
- y : Absorptions koefficient

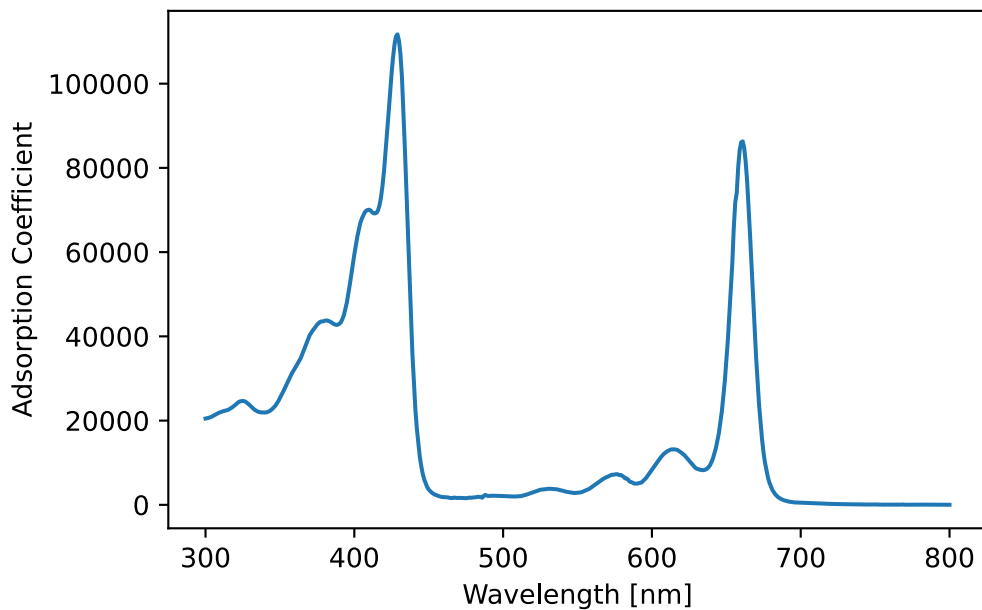
```
from fysisk_biokemi import load_dataset  
  
df = load_dataset("chlorophyll")  
print(df)  
  
bølgelængder = df['Wavelength(nm)'] # Et array med 501 indgange  
adsorption = df['AdsorptionCoefficient'] # Et array med 501 indgange
```

	Wavelength(nm)	AdsorptionCoefficient
0	300	20487.000
1	301	20547.000
2	302	20642.000
3	303	20767.000
4	304	20899.000
..	...	...
496	796	26.665
497	797	15.556
498	798	29.164
499	799	21.473
500	800	18.396

[501 rows x 2 columns]

```
import matplotlib.pyplot as plt
fig, ax = plt.subplots()
ax.plot(bølgelængder, adsorption)
ax.set_xlabel('Wavelength [nm]')
ax.set_ylabel('Adsorption Coefficient')
```

```
Text(0, 0.5, 'Adsorption Coefficient')
```



Vi vil gerne bruge NumPy til at finde hvad den maksimale adsorptions koefficient er, og ved hvilken bølgelængde det forekommer.

Start med at finde den maksimale adsorptions koefficient ved brug af `np.max`

```
max_adsorption = ... # Erstat ... med din kode
print(max_adsorption)
```

Vi kan bruge en anden funktion fra NumPy til at finde den bølgelængde hvor adsorptions koefficienter har sit maxima

```
index_max_ads = np.argmax(adsorption)
```

i Note

`np.argmax` finder indekset af det **argument** som indeholder **max** værdien.

Brug nu `index_max_ads` til at trække den pågældende bølgelængde ud af `bølgelængder`

```
bølgelængde_max_ads = ... # Din kode her
```

```
import matplotlib.pyplot as plt
fig, ax = plt.subplots()
ax.plot(bølgelængder, adsorption)
ax.axvline(bølgelængde_max_ads, color='red')
ax.set_xlabel('Wavelength [nm]')
ax.set_ylabel('Adsorption Coefficient')
```