

Química Computacional (2022-2023)

Trabalho Prático 1: Programação em PYTHON

Considere a equação da reta:

$$y = m \cdot x + b \quad (1)$$

onde x e y são variáveis independentes e dependentes, m é o declive da reta, e b a ordenada na origem. O ajuste de um conjunto de n pontos (x,y) à equação (1) pode ser realizado pelo método dos mínimos quadrados recorrendo as seguintes equações:

$$m = \frac{n \sum_{i=1}^n x_i y_i - \sum_{i=1}^n x_i \sum_{i=1}^n y_i}{n \sum_{i=1}^n x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^n x_i \right)^2} \quad (2)$$

$$b = \frac{\sum_{i=1}^n y_i - m \sum_{i=1}^n x_i}{n} \quad (3)$$

Escreva um programa em Python que permita resolver as equações (2) e (3), e que obedeça aos seguintes pressupostos:

- (i) Deve funcionar com um número variável de pontos introduzidos pelo utilizador;
- (ii) Deve apresentar os resultados no terminal;
- (iii) Deve gravar um ficheiro com 20 pares de valores (x, y) obtidos com base na equação da reta, e compreendidos no intervalo de valores de x introduzidos.

Para testar o código, considere os valores na tabela seguinte:

x	y
1	1
4	6
5	7.2
6	8
7	11

No final, represente graficamente os valores usados no ajuste e no ficheiro. Para racionalizar o desenvolvimento da aplicação, escreva inicialmente um fluxograma onde as diferentes etapas do programa estão planeadas.

A avaliação do trabalho será realizada com base no fluxograma e no programa. Devem incluir ainda um ficheiro PDF com a representação gráfica produzida.

ATENÇÃO: No programa tenham em atenção que qualquer pessoa deve conseguir utilizá-lo facilmente. Assim, sempre que o utilizador tem de interagir com o programa, este deve ser informado de como o fazer.