

Química Computacional (2021-2022)

Trabalho Prático 1: Programação em PYTHON

- 1) Escreva um programa que permita realizar as funções de uma calculadora. No programa deve ter em consideração os seguintes pontos:
 - Deve suportar as seguintes operações: adição, subtração, multiplicação, divisão, raiz quadrada de um número, e o inverso de um número.
 - Deve solicitar um ou dois números reais ao utilizador, de acordo com o tipo de operação a ser realizada.
 - Deverá reconhecer a introdução de números que podem causar um potencial erro no programa. Nestes casos, uma mensagem deve ser apresentada indicando que os dados introduzidos não são válidos.
 - Escreva um fluxograma onde as diferentes etapas de cálculo do programa são descritas.

- 2) Escreva um programa que permita calcular o valor máximo, mínimo, média, e o desvio padrão, de um número variável de números reais introduzidos pelo utilizador. Como primeiro passo, escreva um fluxograma onde as diferentes etapas de cálculo são descritas. Para calcular o desvio padrão considere:

$$\sigma = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (x_i - \mu)^2} \quad (1)$$

em que N é o número de pontos x_i , e μ é a média dos valores dada por:

$$\mu = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i \quad (2)$$

ATENÇÃO: Todos os programas devem ter em atenção que qualquer pessoa deve conseguir utilizá-los facilmente. Assim, sempre que o utilizador tem de interatuar com o programa, este deve ser informado de forma clara sobre o que tem de fazer.