

Prática 2 – Laboratório de Química Tecnológica

Viscosidade e Tensão Superficial da Água – Ajuste de Dados Experimentais por Regressão Não Linear Usando Python

Todas as questões, gráficos e outros parâmetros, deverão ser apresentados num documento pdf no final deste bloco de aulas da disciplina. Esta Prática tem 2 questões.

1. Executa uma Regressão Não-Linear Usando um Script em Python para Ajustar a Viscosidade Experimental da Água

Vamos repetir o ajuste dos dados de viscosidade (e mais tarde da tensão superficial da água) da P1 usando um “script” em Python. Vamos construir um ficheiro chamado: **Viscosity_Water.dat**, usando, por exemplo, o editor **notepad** (ou o **Sublime** ou o **VSCode**), com os dados de temperatura e viscosidade em duas colunas e uma linha de cabeçalho: **Temperature Viscosity**; este ficheiro vai ser dado na aula para poderes verificar se construiste o ficheiro correctamente. Depois vamos executar um “script” em Python chamado: **python_non_linear_fit.py**

No entanto para executar o script em Python em Windows temos de ter o Python e as bibliotecas necessárias instaladas. Para isso vamos primeiro instalar um **ambiente virtual**, em particular, o miniconda.

(a) Install miniconda

Faz download do ficheiro Miniconda3-latest-Windows-x86_64.exe do seguinte link:

<https://www.anaconda.com/download/success>

ou

<https://docs.anaconda.com/miniconda/>

Instala o miniconda com os “defaults”.

(b) Para abrir o terminal Anaconda

Escrever **Anaconda Prompt** na barra de procura do Windows e abrir:

Anaconda Prompt (miniconda3)

(c) Criar Ambiente no Conda para as Aulas de LQT

Na **prompt** deverão ter algo assim:

(base) C:\Users\username> {significa que estão no **ambiente base**}

Vamos criar um ambiente específico designado de **lqt (laboratório de química tecnológica)** onde vamos instalar o Python3 (versão 3.12) e as bibliotecas necessárias para correr o script de regressão não-linear. Vamos necessitar de instalar as seguintes livrarias (bibliotecas) de Python (**see Python Libraries Sections**): Numpy, Pandas, Scipy, and Matplotlib

Nota: *Ctrl c (copy) e Ctrl v (paste) funcionam na Prompt*

Fazer os seguintes passos no terminal (prompt) do conda:

Escrever: **conda create -n lqt python=3.12**

Escrever: **conda activate lqt** (ou apenas **activate lqt**)

Escrever: **pip install numpy pandas scipy matplotlib**

Nota: Para saírem do **ambiente lqt** e voltar ao **ambiente base**:

Escrever: **deactivate**

Nota: Para regressarem ao **ambiente lqt** a partir do **ambiente base**:

Escrever: **activate lqt**

Vamos sempre trabalhar dentro do **ambiente lqt**

Nota: Para verem o que está instalado no vosso **ambiente virtual lqt**:

Escrever: conda list -n lqt

(d) Executar o “Script”

Navegar no Windows Explorer até ao “folder” onde têm o script e o ficheiro de input com os dados de viscosidade em função da temperatura. Copiar o path (Ctrl C) e fazer paste (Ctrl V) no terminal do conda utilizando o comando “cd” que significa **change directory**.

Exemplo: O script (**python_non_linear_fit.py**) e o ficheiro de dados (**Viscosity_Water.dat**) encontram-se em: \username\Lab_Quim_Tecnologica\P2_Python

Na prompt do conda fazer:

Escrever: cd \username\Lab_Quim_Tecnologica\P2_Python

Escrever: dir {lista todos os **diréctorios** e ficheiros no “path” actual}

***Escrever:* python python_non_linear_fit.py**

Alternativamente podem procurar o caminho para o folder através da linha de comandos usando apenas o comando `cd` (change directory).

Note: Para navegar os comandos básicos são:

`dir` (list the files and folders in the current **directory**)

`cd {name of the directory}` (change **directory**) (here the tab button helps you - tab completion can be used to complete a partially typed piece of text)

`cd ..` (muda para a directoria abaixo)

Deves obter a seguinte curva:

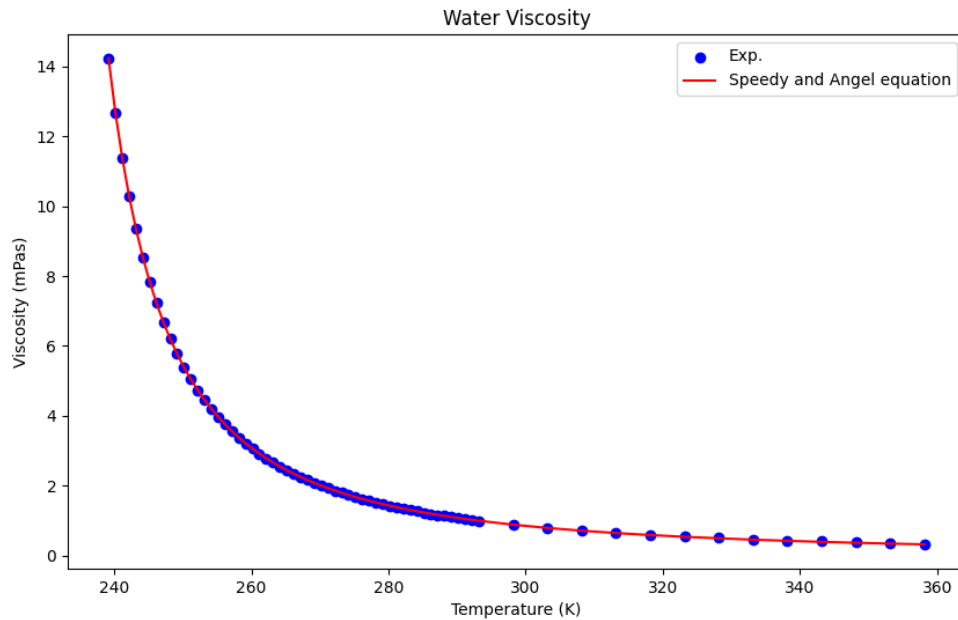


Figura 1 - Viscosidade experimental da água. Ajuste da equação de Speedy e Angel através de uma regressão não linear obtida através do script `python_non_linear_fit.py`.

Questão 1: Compara os valores dos parâmetros até à terceira casa decimal do ajuste com o script de **Python** e o ajuste executado com o **Solver** e apresenta-os na forma de uma **Tabela**. Apresenta ainda o coeficiente de correlação (R) encontrado pelo **Python** e com o **SOLVER** bem como o gráfico obtido com os dados experimentais e a equação de Speedy e Angel ajustada com o script de python.

Edita agora o script **python_non_linear_fit.py**. Para isso convém termos um editor que identifique o código **Python**. Vamos instalar o editor chamado Sublime (ou o VSCode) para Windows.

Faz download do Sublime neste link:

<https://www.sublimetext.com/download>

Instala o editor. Podes depois clicar com o botão do lado direito do rato no script **python_non_linear_fit.py** e escolher abrir com o editor **Sublime**.

Existem muitas outros editores onde poderás editar o script:

Notepad++ (<https://notepad-plus-plus.org/downloads/>)

VSCode (<https://code.visualstudio.com/download#>)

Se tiveres algum destes (ou outro) editores instalado não necessitas de instalar o Sublime.

Verifica agora no script o nome e extensão do ficheiro de input, procura onde está definida a equação de Speedy e Angel, o valor dos parâmetros iniciais, as cores escolhidas para o gráfico, as legendas, etc.

2. Modifica o Script em Python para Ajustar a Tensão Superficial da Água

Terás de construir um ficheiro de input, por exemplo, com o **Sublime** ou o **notepad**, com extensão .txt ou .dat com os dados de tensão superficial.

Renomeia o script, por exemplo, para **python_non_linear_fit_ST.py**, e/ou, preferencialmente trabalha numa pasta diferente para a tensão superficial.

No script altera o nome/extensão do ficheiro de input (dados de tensão superficial), a equação, o número de parâmetros, as legendas da figura etc, de modo a poderes ajustar a equação proposta por Vargaftik-Volkov-Voljak (1983),

$$\sigma = B \left(\frac{T_c - T}{T_c} \right)^\mu \left(1 + b \left(\frac{T_c - T}{T_c} \right) \right)$$

Tenta otimizar os quatro parâmetros usando para isso valores iniciais para os parâmetros a ajustar. Para facilitar o processo de modificação da equação no script re-escreve esta equação usando como parâmetros ajustáveis as letras a, b, c, d correspondendo, por exemplo, a B, T_c , μ e b.

$$y = a \left(\frac{b-x}{b} \right)^c \left(1 + d \left(\frac{b-x}{b} \right) \right)$$

Nota: *Como podes verificar no script original um valor x elevado a y , i.e., x^y representa-se por $x^{**}y$.*

Modifica a cor dos dados experimentais para vermelho e o fit para preto na secção do script:

Plot the data and the fitted curve

Questão 2: Apresenta o script modificado, o gráfico com os dados de tensão superficial e a equação ajustada, compara os parâmetros otimizados com os obtidos com o Solver numa Tabela, e o coeficiente de correlação do ajuste.

LIVRARIAS de PYTHON

- 1. NumPy** (short for **Numerical Python**) is a library in Python for numerical computing. It provides support for arrays, matrices, and a large collection of mathematical functions to operate on these data structures.
- 2. Pandas** is an open-source Python library used for data manipulation and analysis.
- 3. SciPy** is an open-source Python library used for scientific and technical computing. It builds on the capabilities of NumPy by adding a large collection of higher-level functions for mathematical, scientific, and engineering computations.
- 4. Matplotlib** is a Python library used for creating static, interactive, and animated visualizations.