

ICE 20/21 2º semestre

Trabalho Prático 2

Porosidade de Materiais

(publicado na 2ª feira, 24 de maio; entrega até domingo, 13 de junho, às 23:59)

1. Objetivo do Trabalho

Os materiais porosos permitem a passagem controlada de substâncias dissolvidas num fluido através de uma parede de um compartimento construído com esses materiais. Desta forma podem ser utilizados em várias aplicações nomeadamente no desenvolvimento de membranas que permitam controlar a difusão de uma substância ativa (por exemplo um medicamento) dissolvida numa cápsula, imersa no meio onde se pretende difundir essa substância. Inversamente, pode controlar-se a introdução por difusão de uma substância ativa num compartimento construído com o material poroso.

Para estudar a porosidade de alguns materiais, vão fazer várias experiências em que se imerge num meio aquoso com uma determinada concentração de um soluto, um compartimento contendo inicialmente água sem qualquer presença do soluto. Nas experiências efetuadas, assume-se que a difusão do soluto através das paredes do compartimento pode ser modelada pela equação

$$C = C_0 (1 - e^{-t/k}) \quad (1)$$

onde

- C_0 é a concentração do soluto no meio aquoso em que se imergiu o compartimento poroso;
- C é a concentração do soluto no interior do compartimento, medida t minutos após se ter imergido o compartimento no meio aquoso referido; e
- k é uma constante de tempo que depende da porosidade do material utilizado

O objetivo deste trabalho é criar um programa em Python (e SQL) que facilite a organização de dados sobre a porosidade de vários materiais e a consulta da base de dados para gerar gráficos e relatórios.

2. Descrição do Problema

2.1. Programa

Pretende-se desenvolver um programa cuja função principal tem assinatura:

porosidade(MateriaisBD, FichComandos, FichResultados)

O programa deve ler e executar os comandos descritos no ficheiro com nome **FichComandos** e escrever os resultados obtidos no ficheiro com nome **FichResultados**. Durante a execução será usada uma base de Dados SQLite3, com nome '**MateriaisBD**'.

2.2. Ficheiro de Comandos

O ficheiro de comandos (de nome **FichComandos**) contém um comando por linha, começando por um comando **CRIAR_TABELAS**, seguido de alguns comandos **CARREGAR_ENSAIOS** e terminando com vários comandos **GRAFICO** e **RESUMO**, aparecendo por qualquer ordem. A descrição mais completa dos comandos é apresentada de seguida.

- **CRIAR_TABELAS**

Ao encontrar este comando, o programa deve criar 2 tabelas na base de dados **MateriaisBD**:

- A tabela **Ensaios** tem campos para o **identificador do ensaio** (um número inteiro, único para cada ensaio), o **ano do ensaio** (um número inteiro), o **identificador do material** (uma *string* de 6 caracteres), a **concentração** do soluto inicial na solução aquosa onde se imergiu o compartimento no ensaio (um número real) e a **localização** do laboratório (o nome de um país, representado por uma string).
- Tabela **Resultados** com campos para o **identificador de cada medição** (um número inteiro único para cada medição), o **identificador do ensaio** acima referido (um número inteiro), o **tempo** (em minutos, um número inteiro) e a **concentração** do soluto no compartimento, medida nesse instante (um número real).

Note que a informação acerca de qual o material testado em cada ensaio é guardada na tabela **Ensaios** e não na tabela **Resultados**.

- **CARREGAR_ENSAIO ficheiro**

Na execução deste comando, o programa deve ler o **ficheiro** com o nome indicado e carregar a informação para as tabelas da base de dados **MateriaisBD**. O ficheiro correspondente a cada ensaio tem o seguinte formato (ver exemplo ao lado):

- **Número do ensaio** (primeira linha)
- **País** a que pertence o laboratório (segunda linha)
- **Ano** do ensaio (terceira linha)
- **Código do material** (quarta linha)
- **Concentração** do soluto no meio exterior (quinta linha)

As restantes linhas, formam uma tabela, com o nome dos campos na linha inicial e com os valores desses campos nas linhas seguintes (i.e., o identificador da medição, o tempo em que foi feita a medição e a concentração do soluto medida nesse instante), separados pelos caracteres hífen ("-") e dois pontos (":").

Os valores medidos e os identificadores (da medição e do ensaio) devem ser inseridos na tabela **Resultados**. O identificador do ensaio e a restante informação deve ser inserida na tabela **Ensaios**.

```
1
Portugal
2012
AB7RBA
300.0
medId-tempo:medida
101-53:77.39
102-86:112.99
103-125:155.73
104-184:189.19
105-233:216.69
106-342:258.64
```

- **RESUMO início;fim;país**

Com este comando, o programa deve escrever no ficheiro **FichResultados** os códigos dos materiais para os quais há ensaios no período delimitado pelos valores início e fim (inclusive) feitos em laboratórios do país indicado. Estes três parâmetros estão separados por um ponto e vírgula (";") e qualquer um pode ser substituído pelo carácter *, indicando que deve ser ignorado.

Exemplo de comandos de resumo:

```
RESUMO 2005;2010;*
```

```
RESUMO *;*;*
```

```
RESUMO 2006;*;Portugal
```

O ficheiro **FichResultados** terá várias linhas por cada comando do tipo **RESUMO** que ocorre no ficheiro dos comandos. A cada comando **RESUMO** deverá corresponder uma linha indicando quantos materiais satisfazem as condições e quais as condições impostas, seguido de uma linha com o código de cada material que satisfaz as condições impostas (materiais ordenados alfabeticamente).

Note que pode haver mais do que um comando **RESUMO** e que os resultados de todos os comandos **RESUMO** devem constar no ficheiro com nome **FichResultados**.

O conteúdo esperado do ficheiro **FichResultados** com os dados e comandos fornecidos juntamente com este enunciado é o seguinte:

```
6 materiais entre 2008 e 2012 do pais *:
AB7RBA
CD7T8W
X09TRQ
XC9TRF
YFR45T
Z89KLP
7 materiais entre * e * do pais *:
AB7RBA
BCT9RQ
CD7T8W
X09TRQ
XC9TRF
YFR45T
Z89KLP
4 materiais entre 2008 e * do pais Portugal:
AB7RBA
X09TRQ
YFR45T
Z89KLP
```

- **GRAFICO código**

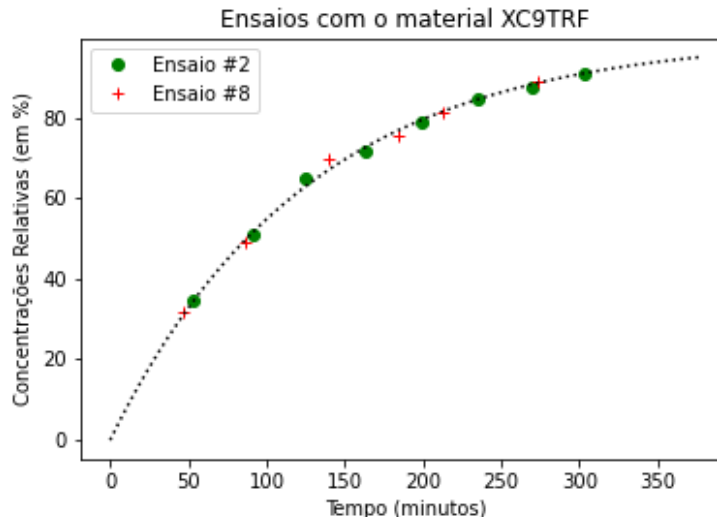
Com este comando pretende-se criar e gravar num ficheiro código.png (Portable Network Graphics) um gráfico com todos os pontos obtidos para o material indicado no código, com símbolos/cores diferentes para ensaios diferentes, identificados na legenda. Os pontos deverão indicar concentrações relativas (i.e. a fração da concentração da solução exterior ao compartimento), normalizadas a 100% (multiplicando por 100 e dividindo pela concentração da solução exterior), de forma que as concentrações dos diferentes ensaios possam ser comparadas.

Deverá ser ainda desenhada uma linha da concentração relativa, calculada pela equação **(1)** da lei da difusão indicada no início, e o eixo das abcissas dever representar o período entre 0 e **3k**. A constante **k** deve ser estimada através da equação **(2)** abaixo, aplicada às **n** medições disponíveis para o material em causa, representando **t_i** o tempo em que foi feita uma medição com concentração relativa **C_i**:

$$k = -\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{t_i}{\ln(1 - C_i/C_o)} \quad (2)$$

A tabela abaixo ilustra (para o material com o código XC9TRF nos ficheiros fornecidos) a normalização das concentrações, convertendo os valores para valores relativos à concentração exterior em cada ensaio, e o gráfico ilustra o resultado esperado.

tempo	concentração	
	absoluta	relativa
53	121.23	34.64
92	178.89	51.11
125	227.67	65.05
163	250.04	71.44
199	275.90	78.83
235	296.68	84.77
270	306.54	87.58
303	318.91	91.12
47	127.17	31.79
87	197.03	49.26
140	278.00	69.50
184	301.76	75.44
213	324.18	81.04
274	355.47	88.87



Nota: O gráfico produzido poderá ser mais simples, nomeadamente não mostrar os pontos separados por ensaios ou não ter o título e as etiquetas dos eixos.

3. Dados do Trabalho

O arquivo tp_dados.zip, disponibilizado no CLIP (e na página da cadeira), contém os ficheiros *ordens.txt* e os ficheiros *ensaio_n.txt*, com **n** variando de 1 a 15, que podem ser usados como exemplos para testar o seu programa.

4. Entrega do Trabalho

O trabalho deve ser entregue até ao final de domingo, dia 13 de junho, seguindo as instruções que serão dadas brevemente.

5. Critérios de Avaliação do Trabalho

De acordo com o Regulamento de Avaliação de Conhecimentos da FCT/UNL¹, os estudantes diretamente envolvidos numa fraude são liminarmente reprovados na disciplina. Em ICE, considera-se que um aluno que dá ou que recebe código num trabalho comete fraude. Os alunos que cometerem fraude num trabalho não obterão frequência.

Os trabalhos serão avaliados de acordo com os seguintes critérios.

- Utilização correta dos elementos básicos da linguagem Python.
- Decomposição adequada do problema em sub-problemas.
- Código legível e bem comentado.
- Criação correta da tabela **Ensaio**s na base de dados **MateriaisBD**.
- Criação correta da tabela **Resultados** na base de dados.
- Inserção correta dos dados dos ficheiros nas tabelas respetivas da base de dados.
- Criação e conteúdo corretos do ficheiro **FichResultados**.
- Cálculo correto da constante de tempo **k**.
- Criação dos gráficos e respetivos ficheiros **.png**.
- Chamada correta da função que resolve o problema com os ficheiros fornecidos.
- Implementação genérica. O programa deve ser capaz de processar os dados mesmo que varie o nome da base de dados, o nome do ficheiro de comandos ou o nome do ficheiro com os resultados. Só deve assumir que:
 - as tabelas da base de dados são **Ensaio**s e **Resultados**, com os campos do enunciado;
 - os comandos a processar são dos tipos indicados;
 - os ficheiros referidos nos comandos **CARREGAR ENSAIO** existem;
 - qualquer comando **GRAFICO** referirá um código de material que existe na base de dados;

A nota do trabalho será um número entre zero e vinte. Para a nota do trabalho ser 20, tudo tem de estar certo. Se o programa for decomposto em funções, a incorreção de uma função não deve impedir a programação das outras. Por exemplo, é preferível:

- Fazer um programa que processe só alguns comandos a não fazer programa nenhum;
- É preferível apresentar um gráfico simplificado a não apresentar gráfico nenhum.

¹ https://www.fct.unl.pt/sites/default/files/regulamento_avaliacao_revisao_julho_2020_versao_final_31-07-2020_alt1_04-11-2020_17-11-2020.pdf