



ISIS-1221

INTRODUCCIÓN A LA PROGRAMACIÓN

Nivel 1 - Proyecto

Q- π : Calculadora Química

Objetivo general

El objetivo general de este proyecto es que usted practique los conceptos estudiados en el nivel 1 del curso.

Recuerde que este proyecto debe realizarse de forma **completamente individual**.



Objetivos específicos

1. Crear funciones.
2. Llamar funciones con parámetros.
3. Llamar funciones desde otras funciones (composición de funciones).
4. Crear y usar un módulo.
5. Probar las funciones de un módulo.
6. Construir interfaces de usuario basadas en consola.

Para lograr los objetivos anteriores, en este proyecto se creará una aplicación que permita calcular distintas ecuaciones químicas para apoyar a un negocio naciente.

Contexto

Q- π

 Q- π  es una empresa naciente fundada por el retirado inversor Gualtero Blanco, quien ha decidido mejorar sus ganancias para sus años de retiro. Q- π es una empresa de fabricaciones químicas, y se encuentra en la necesidad de volver automáticos algunos procesos por medio de una aplicación. Es por esto que se nos ha pedido desarrollar una aplicación para realizar algunos cálculos y conversiones relacionadas con química, las cuales ayudarán al Señor Blanco no solo en su negocio, sino en algunos aspectos de su vida diaria.

Notación científica

Debido a las unidades y magnitudes que maneja Q- π , es necesario entender un poco la notación científica antes de proceder a explicar las fórmulas solicitadas.

“La **notación científica**, también denominada **patrón** o **notación en forma exponencial**, es una forma de escribir los números que acomoda valores demasiado grandes (100 000 000 000) o pequeños como puede ser el siguiente (0.000 000 000 01) para ser escrito de manera convencional. El uso de esta notación se basa en potencias de 10 (los casos ejemplificados anteriormente en notación científica, quedarían 1×10^{11} y 1×10^{-11} , respectivamente). El módulo del exponente en

el caso anterior es la cantidad de ceros que lleva el número delante, en caso de ser negativo (nótese que el cero delante de la coma también cuenta), o detrás, en caso de tratarse de un exponente positivo.

Siempre el exponente es igual al número de cifras decimales que deben correrse para convertir un número escrito en notación científica en el mismo escrito en notación decimal. Se desplazará a la derecha si el exponente es positivo y hacia la izquierda si es negativo. Cuando se trata de convertir un número a notación científica el proceso es a la inversa."

Tomado de: https://es.wikipedia.org/wiki/Notaci%C3%B3n_cient%C3%ADfica

Los siguientes son dos ejemplos de números escritos con esta notación.

$$5.1 * 10^5 = 510000$$

$$3.2 * 10^{-5} = 0.000032$$

En Python es posible utilizar esta notación utilizando la letra "e", en remplazo de la multiplicación por 10 elevado a una potencia. De esta manera, los números del ejemplo anterior se escribirían 5.1e5 y 3.2e-5. A continuación le mostramos un ejemplo de cómo Python interpreta esta entrada.

```
In [4]: x = 5e-2
In [5]: x
Out[5]: 0.05
```

Es importante que cuando use esta notación para convertir de entrada de texto a número, utilice siempre la conversión a **float**, incluso si el número que usted trata de representar no tiene decimales. Si trata de convertir la entrada a **int**, Python arrojará un error.

```
In [10]: float("2.1e7")
Out[10]: 21000000.0

In [11]: int("2.1e7")
Traceback (most recent call last):

  File "<ipython-input-11-c8ec0ac8f2c2>", line 1, in <module>
    int("2.1e7")
ValueError: invalid literal for int() with base 10: '2.1e7'
```

Moles de una sustancia

El mol es una unidad de medida en química que representa una cantidad específica de átomos, moléculas o partículas en una muestra. Esta unidad es fundamental para relacionar la cantidad de sustancia y la masa en reacciones químicas y cálculos científicos. Cuando el señor Blanco necesita hacer componentes químicos nuevos, como por ejemplo alguna sal de Plata, no puede depender simplemente de la masa, sino que necesita saber la cantidad de moles que se

encuentran en la muestra. Para calcular la cantidad de moles de una sustancia se utiliza la siguiente fórmula:

$$\text{moles} = \frac{\text{masa}}{\text{masa molar}}$$

Donde masa corresponde a la masa de la sustancia en gramos y la masa molar corresponde a la masa molar en gramos/mol

Partículas de una sustancia

Las partículas de una sustancia se refieren a las unidades más pequeñas que componen esa sustancia, ya sea átomos, moléculas o iones. Para calcular la cantidad de partículas en una sustancia se utiliza el número de Avogadro ($6,023 \times 10^{23}$) el cual corresponde a la cantidad de partículas que hay en un mol. Esta fórmula es muy útil cuando el Señor Blanco se encuentra con insomnio y trata de contar los átomos de agua en su vaso. La fórmula para calcular la cantidad de partículas de una sustancia es:

$$\text{partículas} = \text{moles} * 6,023 * 10^{23}$$

Molaridad de una sustancia

La molaridad es una medida de la concentración de una sustancia en una solución y se expresa en moles de soluto por litro de solución. Es una de las formas más comunes de expresar la concentración de solutos en soluciones químicas. El Señor Blanco hace uso de esta fórmula constantemente cuando necesita preparar lejía para limpiar los tanques sucios, o cuando le aplica sal al vaso de agua de su socio para jugarle una broma. Para calcularla se utiliza la fórmula:

$$\text{molaridad} = \frac{\text{moles}}{\text{volumen solución}}$$

El volumen de la solución se mide en litros.

Calcular moles de un gas con la ecuación de los gases ideales

Una de las fórmulas más importantes en la química es la fórmula de los gases ideales. Esta ecuación que relaciona la presión (P), el volumen (V), la cantidad de sustancia en moles (n) y la constante de los gases ($R = 0.0821 \text{ L*atm}/(\text{mol*K})$) de un gas ideal en un sistema. Al despejarla, podemos utilizarla para calcular los moles de un gas de la siguiente forma:

$$n = \frac{PV}{RT}$$

La presión se mide en atmósferas, el volumen en litros y la temperatura en grados Kelvin.

Alquimia de Ajiaco

Mientras cocinaba en los laboratorios de Q- π el Señor Blanco llegó a una idea que revolucionaría el mercado. Ha decidido capturar los vapores producidos por un ajiaco hirviente, y producir a partir de este almacenamiento, lotes de agua embotellada con aroma a Ajiaco. Luego de pensar un rato en su tráiler ha llegado a la conclusión de que, utilizando la fórmula de los gases ideales, puede saber cuantos moles de agua ha capturado, y que utilizando la masa molar del agua (**18.015**) puede saber cuantas botellas completas obtendrá de una recolección de vapores. Como aproximadamente cada gramo de agua equivale a un mililitro, la fórmula para calcular el número de botellas es la siguiente:

$$\text{numero de botellas} = (\text{moles} * \text{masa molar}) // \text{volumen botella}$$

El volumen de la botella se expresa en mililitros.

Nota: Tenga muy presente que la división en la fórmula es una división entera.

Actividad 1 | Preparación del ambiente de trabajo

1. Cree una carpeta para trabajar, poniéndole su nombre o login.
2. Abra Spyder y cambie la carpeta de trabajo para que sea la carpeta que creó.

Actividad 2 | Construir un módulo de química

3. Usando Spyder, cree en su carpeta de trabajo un nuevo archivo con el nombre “**calculadora_quimica.py**”. En este archivo usted va a construir su módulo en el que va a hacer varios cálculos sobre moles, solventes, gases y botellas de agua de un negocio naciente en la industria química. **Los retornos de las funciones deben estar redondeados a tres decimales en caso de ser de tipo float.**
4. Defina e implemente funciones en su nuevo archivo de acuerdo con la siguiente información.
ATENCIÓN: para asegurar que no haya problemas durante el proceso de calificación, usted debe definir las funciones con los nombres, parámetros y tipos exactos que se presentan a continuación. Las funciones deben estar definidas en el mismo orden.

Nombre de la función			calcular_moles_sustancia
Descripción de la función			Calcula la cantidad de moles de una sustancia dada su masa y masa molar.
Parámetros			
Nombre	Tipo	Descripción	
masa_sustancia	float	La masa de la sustancia en gramos.	
masa_molar	float	La masa molar de la sustancia en gramos por mol.	
Retorno	float	Cantidad de moles de una sustancia.	

Nombre de la función			calcular_particulas
Descripción de la función			Calcula la cantidad de partículas de una sustancia dada la masa de la sustancia y la masa molar presentes, utilizando la constante de Avogadro.
Parámetros			
Nombre	Tipo	Descripción	
masa_sustancia	float	La masa de la sustancia en gramos.	
masa_molar	float	La masa molar de la sustancia en gramos por mol.	
Retorno	float	Cantidad de partículas de la sustancia.	

Nombre de la función			calcular_molaridad
Descripción de la función			Calcula la molaridad de una sustancia en una solución, dada la masa de la sustancia en gramos, la masa molar de la sustancia y el volumen de la solución en litros.
Parámetros			
Nombre	Tipo	Descripción	
masa_sustancia	float	La masa de la sustancia en gramos.	
masa_molar	float	La masa molar de la sustancia en gramos por mol.	
volumen_solucion	float	El volumen de la solución en litros.	
Retorno	str	Un texto con la frase “Estos XX gramos diluidos en YY litros de solución, nos dan una molaridad de: ZZ”. Donde XX es la masa de la sustancia, YY el número de litros de la solución y ZZ el cálculo de la molaridad.	

Nombre de la función			calcular_moles_gases_ideales
Descripción de la función			Calcula la cantidad de moles de un gas utilizando la ecuación de los gases ideales.
Parámetros			
Nombre	Tipo	Descripción	
presion	float	Presión del gas en atmósferas	
volumen	float	El volumen del gas en litros	
temperatura	float	La temperatura del gas en grados Kelvin	
Retorno	float	Moles del gas en las condiciones dadas.	

Nombre de la función			alquimia_ajiaco
Descripción de la función			Calcula la cantidad estricta de botellas que es posible llenar a partir de la información del vapor de agua capturado.
Parámetros			
Nombre	Tipo	Descripción	
presion	float	Presión del gas en atmósferas	

volumen	float	El volumen del gas en litros
temperatura	float	La temperatura del gas en grados Kelvin
botella	int	El volumen de las botellas a llenar en mililitros
Retorno	int	El número de botellas del volumen dado que es posible llenar a partir de los moles de agua capturados en el proceso de alquimia. No cuente botellas a medio llenar.

Actividad 3 | Construir interfaces de usuario basadas en consola

En esta actividad usted tiene que construir las interfaces basadas en consola para que el usuario interactúe con la aplicación.

ATENCIÓN: las interfaces basadas en consola deben seguir el estándar de construcción de consolas visto en clase.

5. Construya un nuevo archivo Python para cada uno de los 5 problemas que se resuelven con la aplicación. Los nombres deben ser:

- consola_calculo_moles.py
- consola_calculo_particulas.py
- consola_calculo_molaridad.py
- consola_calculo_moles_gases_ideales.py
- consola_alquimia_ajiaco.py

ATENCIÓN: estos archivos deben ser creados dentro de la misma carpeta donde se encuentra su módulo de química.

6. Los nuevos archivos deben importar su módulo de cálculos químicos para que puedan usar las funciones que definió en el módulo. Por ejemplo, podría usar la siguiente línea para importar el módulo:

```
import calculadora_quimica as cal
```

7. Implemente cada uno de los cinco programas de interfaz por consola. Cada uno de estos debe pedirle al usuario los datos necesarios para resolver el problema y debe informarle de su resultado. A modo de ejemplo, la siguiente imagen muestra lo que podría ser el resultado del ejecutar el programa “**consola_calculo_moles.py**” desde Spyder y desde la consola de Windows.

Desde Spyder:

```
In [1]: runfile('C:/Users/          /consola_calculo_moles.py',
wdir='C:/Users/          )

Ingrese la masa de la sustancia: 32

Ingrese la masa molar de la sustancia: 28.97
El número de moles es: 1.105
```

Desde la consola de Windows:

```
C:\Users\          >python consola_calculo_moles.py
Ingrese la masa de la sustancia: 32
Ingrese la masa molar de la sustancia: 28.97
El número de moles es: 1.105
```

8. Ejecute cada uno de los 5 programas para asegurarse que estén funcionando.

Actividad 3 | Verificar el módulo de química

9. Ejecute cada uno de los 5 programas utilizando los datos que se presentan a continuación y asegúrese que los resultados sean consistentes con lo que se presenta como resultado esperado en la tabla.

Programa	Entradas		Salida
consola_calculo_moles.py	masa_sustancia	32.0	1.105
	masa_molar	28.97	
consola_calculo_moles.py	masa_sustancia	63.5	1.137
	masa_molar	55.8	
consola_calculo_particulas.py	masa_sustancia	32.0	6.655415e+23
	masa_molar	28.97	
consola_calculo_particulas.py	masa_sustancia	63.5	6.854174e+23
	masa_molar	55.8	
consola_calculo_molaridad.py	masa_sustancia	36.46	“Estos 36.46 gramos diluidos en 0.5 litros de solución, nos dan una molaridad de: 2.0”
	masa_molar	36.46	
	volumen_solucion	0.5	
consola_calculo_molaridad.py	masa_sustancia	30.0	“Estos 30 gramos diluidos en 1 litros
	masa_molar	35.5	

	volumen_solucion	1.0	de solución, nos dan una molaridad de: 0.845"
consola_calculo_moles_gases_ideales.py	presion	1.0	0.203
	volumen	5.0	
	temperatura	300.0	
consola_calculo_moles_gases_ideales.py	presion	3.0	1.338
	volumen	10.0	
	temperatura	273.0	
consola_alquimia_ajiaco.py	presion	1.0	0
	volumen	5.0	
	temperatura	300.0	
	botella	250	
consola_alquimia_ajiaco.py	presion	3.0	4
	volumen	500.0	
	temperatura	300.0	
	botella	250	

10. Si alguno de sus programas presenta algún error o si el resultado es diferente al esperado, revise y corrija su módulo de química. Es posible que le aparezcan errores causados por fallos de tecleo en el nombramiento de las funciones, o causados por declarar los parámetros en el orden equivocado. Cada vez que corrija algo, vuelva a realizar las pruebas.

Nota: Las pruebas que está realizando son un mecanismo para identificar posibles problemas con un programa, pero no pueden ser consideradas una garantía de su corrección. Entre más completas estén las pruebas, por ejemplo, verificando casos normales, extremos y anormales, da más indicios de un programa bien construido.

Entrega

11. Comprima la carpeta con su proyecto resuelto. El archivo debería llamarse **N1-PROY-login.zip**, donde login es su nombre de usuario de Uniandes (Por ejemplo: N1-PROY-p.perez123.zip).
12. Entregue el archivo comprimido a través de Bloque Neón en la tarea designada como **Proyecto del Nivel 1**.