

Specifikace zápočtového programu z Neprocedurálního programování (NPRG005)

programuje Ondřej Profant pod vedením Rudolfa Kryla
na MFF UK

23. května 2011

Cílem je udělat program pro práci s převážně anorganickou chemií. Čili implementovat:

1. periodickou tabulku prvků se základními informacemi o prvcích
2. převod z vzorce na české chemické názvosloví ($\text{CO}_2 \Rightarrow$ oxid uhličitý)
3. převod z českého názvosloví na vzorce (opačný k bodu 2)
4. doplňování možných alternativ ve vzorcích a názvech
5. základy organické chemie

Nazval jsem jej AllCHEMIE.

Obsah

| | | |
|----------|----------------------------------|----------|
| 1 | Implementační detaily | 3 |
| 1.1 | Struktura kódu | 3 |
| 1.2 | Ovládání | 3 |
| 1.3 | Anorganická chemie | 3 |
| 1.4 | Organická chemie | 3 |
| 2 | Uživatelské rozhraní | 4 |
| 3 | Dokumentace | 4 |
| 4 | Literatura a další zdroje | 5 |
| 4.1 | Knižní | 5 |
| 4.2 | Software | 5 |
| 4.3 | Internetové | 5 |

1 Implementační detaily

Implementace bude v jazyku Prolog v dialektu SWI (viz. [4]). Nebudou využívány žádné knihovny 3. stran.

1.1 Struktura kódu

Celý program bude rozdělen do souborů dle logických souvislostí, např. v souboru `periodic.table.pl` bude databáze prvků, predikáty pro dotazování nad prvky, databáze koncovek a dalších zcela základních věcí pro obor chemie.

V dalších souborech budou predikáty pro různé sloučeniny a pravidla jejich převodu, které díky vhodnosti Prologu pro tyto úlohy budou srozumitelné i pro poučeného (snažícího se) laika.

Všechny predikáty budou koncipovány tak, aby šlo kterýkoliv argument vynechat (zapsat jako proměnnou) a tím získat seznam možných sloučenin / názvů / prvků. Tato vlastnost samozřejmě bude využívat základní stavební prvek Prologu a bude tento program odlišovat od obdobných např. webových aplikací.

1.2 Ovládání

Nebude implementovaná diakritika a česká morfologie a program bude výsledky uvádět pouze ve tvaru:

```
oxid uhlik-icity
kyselina dihydrogen sira-ova
```

Pro všechny sloučeniny bude jeden základní predikát, který si sám rozliší o co se jedná, např:

```
vstup(c,o,2). /* dotaz na oxid uhlicity */
vstup(h,2,s,o,4). /* dotaz na kyselinu sirovou */
```

1.3 Anorganická chemie

Z anorganické chemie bude implementována SŠ látka: oxidy, peroxidy, kyslíkaté kyseliny, bezkyslíkaté kyseliny, halogenidy, sloučeniny vodíku, soli.

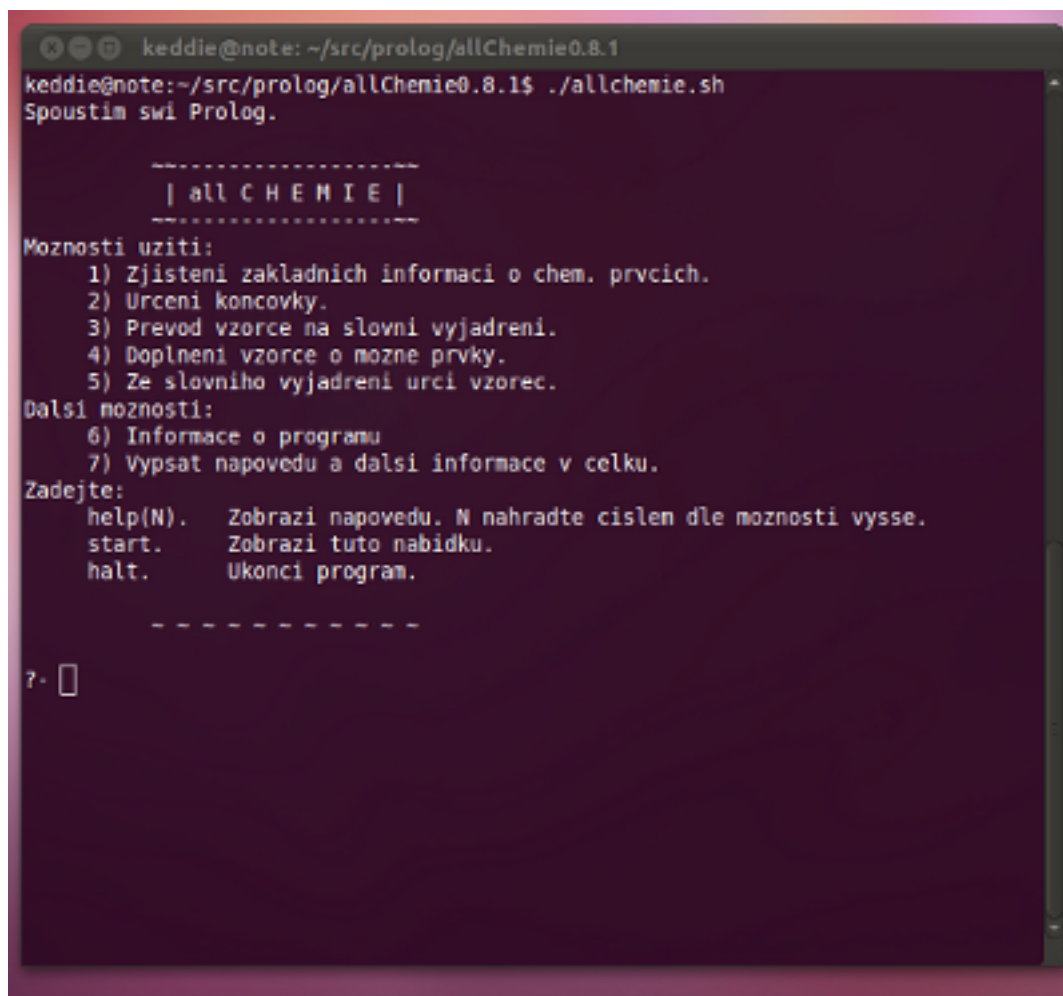
1.4 Organická chemie

Organická chemie je rozsáhlá a vyžaduje mnoho druhů vzorců.¹ Proto z ní implementuji pouze základní lineární řadu s jednoduchými vazbami: metan, propan, butan, ... a jejich uhlíkové zbytky (metyl, propyl, ethyl).

¹[2] udává 6 typů vzorců, některé látky jsou bez správného typu vzorce nerozlišitelné.

2 Uživatelské rozhraní

Uživatelské rozhraní bude interaktivní textové, ovládat se bude dle několika základních predikátů.



```
keddie@note: ~/src/prolog/allChemie0.8.1
keddie@note:~/src/prolog/allChemie0.8.1$ ./allchemie.sh
Spoustim swi Prolog.

-----
| all C H E M I E |
-----

Moznosti uziti:
  1) Zjistení zakladnich informaci o chem. prvcich.
  2) Urceni koncovky.
  3) Prevod vzorce na slovní vyjadrení.
  4) Doplnení vzorce o mozne prvky.
  5) Ze slovního vyjadrení urci vzorec.
Dalsi moznosti:
  6) Informace o programu
  7) Vypsat napovedu a dalsi informace v celku.
Zadejte:
  help(N).   Zobrazí napovedu. N nahradte cislen dle moznosti vysse.
  start.     Zobrazí tuto nabidku.
  halt.      Ukonci program.

-----

?- 
```

Obrázek 1: Předběžná ukázka rozhraní programu

3 Dokumentace

Velký důraz bude kladen na uživatelskou dokumentaci, jelikož program bude pracovat přímo v interaktivním modu Prologu a uživatel ho bude moci ovládat pouze skrz několik málo predikátů.

Přítomná bude rozsáhlá interaktivní nápověda přímo v programu.

Uživatelská příručka bude obsahovat velké množství příkladů, které pomohou k pochopení používání a možností, které program bude nabízet. Samozřejmě je popis instalace a spuštění na několika platformách.

Programátorská dokumentace naopak již bude relativně prostá, neb implementace by měla být přímočará (s žádnými „špeky“ a záhadnými predikáty o kterých nikdo neví, co dělají).

4 Literatura a další zdroje

Vzhledem k převážné odbornosti programu se přímo v kódu odkazují na použité zdroje, např:

```
member(M,[1,2,3,4,5,6,7,8]), /* dle PSCH [1] str. 160 */
```

4.1 Knižní

- [1] Přehled středoškolské chemie, vydalo SPN, Praha 1999 (kolektiv)
- [2] Přehled středoškolského učiva chemie, ing. Ludvík Kosina, ing. Vratislav Šrámek, vydala Albra 1995

4.2 Software

- [3] Gperiodic, GTK periodická tabulka prvků, homepage:
<http://www.frantz.fi/software/gperiodic.php> (odkaz k 6. 5. 2011)
- [4] SWI-Prolog, použitá implementace Prologu, homepage:
<http://www.swi-prolog.org/> (odkaz k 6. 5. 2011)

4.3 Internetové

- [5] Chem-web: <http://www.chem-web.info> (odkaz k 6. 5. 2011)