Conceptos de Algoritmos, Datos y Programas 2022

Ejercicio adicional



Objetivo

Esta actividad presenta un problema del mundo real, desarrollado de manera simplificada para poder realizarse en un tiempo acotado. El objetivo del ejercicio es aplicar varios de los conceptos que se ven a lo largo del curso de nivelación y de la materia CADP, entre los que se encuentran:

- Análisis de problemas: comprender un problema propio de un contexto <u>no habitual</u> para un analista. Se deberán identificar los elementos y sus relaciones dentro de un problema dado
- Abstracción: una vez comprendido el problema, deberán identificarse aquellos aspectos relevantes del problema y analizar su representación con las herramientas vistas
- Modularización: resolver las distintas partes del problema siguiendo un esquema top-down, maximizando el reuso de módulos y minimizando el acoplamiento entre los mismos

Consigna:

La actividad se realizará de manera secuencial: a medida que se incorporan nuevos conceptos semana tras semana, se podrá avanzar con la resolución de los ejercicios. Los ejercicios se organizan en 3 grupos:

- 1) Ejercicios para trabajar los temas de registros y modularización
- 2) Ejercicios para trabajar con vectores
- 3) Ejercicios para trabajar con listas

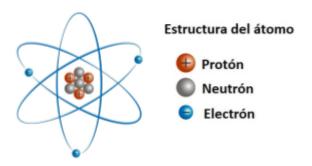
Enunciado

Un centro de investigación necesita un software que le permita agilizar cálculos y estudios que realizan en sus proyectos. El centro se dedica a investigación sobre la estructura de la materia, y en concreto requiere un sistema dedicado a procesar información sobre átomos y moléculas.

Información importante que el desarrollador debe conocer para resolver este problema:

De manera simplificada, un átomo se compone de **electrones** que orbitan un núcleo compuesto de **protones** y **neutrones**. Los protones poseen una masa de **1,0 uma** (unidad de masa atómica), los electrones una masa de **0,000555556 uma** y los neutrones de **1,0005 uma**.

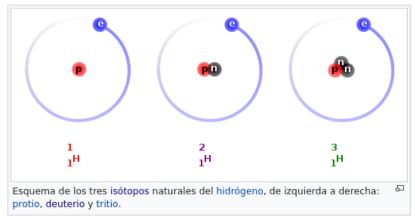
Los protones tienen carga positiva (1), los electrones carga negativa (-1) y los neutrones no poseen carga (0, son *neutros*).



El mundo de los átomos se rige por algunas reglas que, simplificadas, podrían resumirse en:

- <u>Número atómico</u>: Indica a qué elemento químico corresponde el átomo. Se define por la cantidad de protones que posee el átomo y puede variar entre 1 y 119. El número atómico se representa con la letra **Z**. Este valor determina el orden de los distintos elementos de la tabla periódica. Por ejemplo:
 - Hidrógeno: Z = 1 (posee 1 protón)
 - Helio: Z=2 (posee 2 protones)
 - Boro: Z=5 (posee 5 protones)
 - Potasio: Z=19 (posee 19 protones)
- Número másico: el número másico de un átomo es la suma de sus protones y neutrones, y se lo representa con la letra A
- Masa: La masa de un átomo se calcula como la suma de la masa de todos sus protones, neutrones y electrones.
- Carga:
 - o Carga neutra: Si un átomo tiene igual cantidad de protones que de electrones
 - o lones: si la carga no es neutra, se los conoce como iones
 - Cationes (o iones positivos): si posee más protones que electrones, su carga será positiva. A estos iones se los llama cationes o iones positivos

- Aniones (o iones negativos): si posee más electrones que protones, su carga será negativa. A estos iones se los conoce como aniones, o iones negativos
- <u>Isótopos</u>: los isótopos son átomos de un mismo elemento químico (mismo Z) pero cuyos núcleos tienen diferente número de neutrones. Todos los elementos tienen un isótopo con la configuración natural más habitual, y varios isótopos con configuraciones menos frecuentes (naturales y artificiales)¹. Por ejemplo, si se trata de un átomo de Hidrógeno (Z = 1), podemos encontrar en la naturaleza los siguientes isótopos:
 - Protio o hidrógeno-1, no posee neutrones (A=1). Esta es la configuración natural más habitual de este elemento en la naturaleza (99,98%).
 - Deuterio o hidrógeno-2, posee un neutrón (A=2). Esta configuración se encuentra entre el 0,0026 % y el 0,0184 % de los átomos de Hidrógeno.
 - Tritio o hidrógeno-3 (A=3), posee dos neutrones y es muy poco habitual en la naturaleza (ya que se desintegra de manera espontánea en algo más de 12 años).



• Molécula: una molécula es una agrupación de dos o más átomos. Algunas moléculas son más simples, como por ejemplo una molécula de agua (H₂O) que posee sólo dos átomos de hidrógeno y un átomo de oxígeno, mientras que otras moléculas son más complejas, como por ejemplo la Glucosa (C₆H₁₂O₆). Existen moléculas de decenas, cientos o miles de átomos².



Una molécula de Isoleucina (un aminoácido esencial para el ser humano) posee 6 átomos de Carbono, 13 átomos de Hidrógeno, 1 átomo de Nitrógeno y 2 átomos de Oxígeno

¹ Un átomo puede ser a la vez un ión y un isótopo (fuente)

² Un fullereno puede tener hasta 60 átomos (<u>fuente</u>), y la molécula artificial PG5 posee miles de átomos (<u>fuente</u>)

Ejercicios

1. Ejercicios para trabajar los temas de registros y modularización

- 1. Defina un tipo de datos apropiado para representar un átomo de cualquier elemento
- 2. Realice un módulo que permita ingresar y almacenar un átomo leído por teclado. De cada átomo se lee su nombre, y la cantidad de protones, electrones y neutrones
- 3. Realice un módulo que reciba un átomo y retorne su masa
- 4. Realice un módulo que reciba un átomo y retorne su carga (positiva, negativa o neutra)
- 5. Realice un módulo que reciba un átomo y retorne su número másico
- 6. Realice un módulo que reciba un átomo A y un átomo B y retorne si B es isótopo de A o si se trata de otro elemento.

Utilizando los módulos ya definidos, realice un programa que lea la información de 30 átomos e imprima:

- La cantidad de átomos que son iones positivos y la cantidad que son iones negativos
- El nombre de los dos átomos de mayor masa
- La información (nombre, protones, electrones y neutrones) del átomo con menor número másico

2. Ejercicios para trabajar con vectores

- 1. Defina un tipo de datos apropiado para representar la tabla periódica de los elementos.
- 2. Realice un módulo que retorne la tabla periódica de los elementos. Dicha tabla debe incluir los 119 elementos químicos en sus configuraciones naturales más habituales. La información de los 119 elementos se lee por teclado sin ningún orden, y se debe almacenar en una estructura de datos eficiente para su búsqueda.
- 3. Realice un módulo que reciba una cantidad de protones y retorne la información del elemento guímico que le corresponde.
- 4. Realice un módulo que reciba un átomo y la tabla periódica de los elementos, y retorne verdadero si se trata de un elemento en su configuración natural más habitual, o falso si se trata de un isótopo del dicho elemento.
- 5. Realice un módulo que reciba la información de un átomo leída por teclado, lo busque en la tabla periódica y retorne las diferencias entre el átomo leído y el elemento químico de la

- tabla periódica correspondiente a dicho átomo. Considere que el átomo leído podría tratarse tanto de un isótopo como también de un ión.
- 6. Realice un módulo que lea de teclado una secuencia de átomos hasta que se ingresa un átomo con 0 protones y retorne la cantidad de veces que aparece cada átomo. Considere que la información de los átomos se ingresa ordenada por la cantidad de protones.
- 7. Realice un módulo que lea de teclado una secuencia de átomos hasta que se ingresa un átomo con 0 protones y retorne la cantidad de veces que aparece cada átomo. Considere que la información de los átomos se ingresa SIN ningún orden en particular

3. Ejercicios para trabajar con listas

- 1. Defina un tipo de datos apropiado para representar una molécula.
- Realice un módulo que lea el nombre y todos los átomos que componen una molécula, y los almacene en una estructura de datos adecuada. La lectura de átomos de la molécula finaliza al ingresar un átomo sin protones.
- 3. Realice un módulo que retorne la masa total de una molécula, calculada (de manera simplificada) como la suma de las masas de todos sus átomos
- 4. Realice un módulo que reciba una molécula M y un elemento químico E, e indique la cantidad de veces que el elemento E aparece en la molécula M.
- 5. Realice un módulo que reciba una molécula y retorne la cantidad de veces que se repite cada elemento. Por ejemplo, si se ingresa una molécula de agua, debería retornar (en una estructura de datos adecuada) que el hidrógeno está dos veces, y el oxígeno una vez.
- 6. Realice un módulo que reciba dos moléculas A y B, y retorne una nueva molécula, resultante de la unión de A y B (macromolécula).
- 7. Realice un módulo que reciba una molécula M y un elemento E, y retorne la molécula M a la que se le han quitado todos los átomos de E.
- 8. Realice un módulo que reciba una molécula M y un elemento E, y retorne una copia de la molécula M (o sea, una nueva molécula M2 o submolécula) con una copia de todos los átomos de M hasta el elemento E inclusive. El elemento E podría no existir.