ΑΝΤΙΚΕΙΜΕΝΟΣΤΡΑΦΗΣ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑΤΙΣΜΟΣ

Χειμερινό εξάμηνο ακ. έτους 2016-2017 Α΄ ομάδα ασκήσεων

Άσκηση 1: Η παρούσα άσκηση σκοπό έχει να σας εξασκήσει στις συναρτήσεις κατασκευής - καταστροφής στην περίπτωση που έχουμε σύνθεση κλάσεων και στην προσβασιμότητα και εμβέλεια μεταξύ των μελών των κλάσεων.

Υλοποιήστε σε C++ μια απλοϊκή προσομοίωση του ατόμου των ισοτόπων του άνθρακα (C), άνθρακας-12, άνθρακας-13 και άνθρακας-14 ($^{12}C,^{13}C,^{14}C$). Στην απλουστευμένη αυτή εκδοχή, ισχύουν τα παρακάτω.

Τα άτομα των στοιχείων, γενικά, είναι οργανωμένα ως εξής. Ένα άτομο (atom) αποτελείται από τον πυρήνα του (nucleus) κι ένα αριθμό ηλεκτρονίων (electrons). Ο πυρήνας του ατόμου ενός στοιχείου αποτελείται από ένα αριθμό πρωτονίων (protons) κι ένα αριθμό νετρονίων (neutrons). Στην περίπτωση ενός μη ιονισμένου (μη φορτισμένου) ατόμου, ο αριθμός των ηλεκτρονίων του είναι ίσος με τον αριθμό των πρωτονίων. Ο αριθμός των νετρονίων μπορεί να διαφέρει και με τον τρόπο αυτό καταλήγουμε να έχουμε για το ίδιο στοιχείο διαφορετικά ισότοπα.

Για τα ισότοπα του άνθρακα έχουμε για τον άνθρακα-12, 6 πρωτόνια και 6 νετρόνια, για τον άνθρακα-13, 6 πρωτόνια και 7 νετρόνια και για τον άνθρακα-14, 6 πρωτόνια και 8 νετρόνια.

Ένα άτομο έχει μαζικό αριθμό (mass number) που υπολογίζεται ως ο συνολικός αριθμός πρωτονίων και νετρονίων του πυρήνα του. Ο συνολικός αριθμός των πρωτονίων του αποτελεί τον ατομικό αριθμό του (atomic number). Επίσης, ένα άτομο έχει ηλεκτρικό φορτίο (electric charge) που προκύπτει από τη διαφορά του συνολικού ηλεκτρικού φορτίου των ηλεκτρονίων του από το συνολικό ηλεκτρικό φορτίο των πρωτονίων του. Όταν δημιουργείται ένα άτομο, του ανατίθεται ο αριθμός των πρωτονίων και των νετρονίων. Επίσης, εκτυπώνεται το μήνυμα "An atom has been constructed" ακολουθούμενο από τους αριθμούς αυτούς. Όταν καταστρέφεται ένα άτομο εκτυπώνεται το μήνυμα "An atom will be destroyed" ακολουθούμενο από τον ατομικό και το μαζικό αριθμό του. Για ένα άτομο μπορούμε να υπολογίσουμε τον ατομικό αριθμό του (get_atom_number), τον μαζικό αριθμό του (get_mass_number) καθώς και το συνολικό ηλεκτρικό φορτίο του (get_electric_charge). Επίσης, μπορούμε να εκτυπώσουμε (print) όλη την πληροφορία που το αφορά, δηλαδή, τον ατομικό και το μαζικό αριθμό του, το φορτίο του και ότι μπορεί να εκτυπωθεί από τα συστατικά του.

Ένα πρωτόνιο αποτελείται από τρία quarks, 2 up quarks και 1 down quark, και τρία γκλουόνια (gluons). Ένα πρωτόνιο έχει μάζα (mass) ίση με (περίπου) 1.007 u, ιδιοστροφορμή (spin) ίση με $\frac{1}{2}$, ηλεκτρικό φορτίο $(electric\ charge)$ ίσο με +1e κι υπακούει στην στατιστική (statistics) Fermi-Dirac. Όταν δημιουργείται ένα πρωτόνιο, του ανατίθεται η τιμή της μάζας του, η ιδιοστροφορμή του, το ηλεκτρικό φορτίο του και το είδος της στατιστικής στο οποίο υπακούει. Επίσης, εκτυπώνεται το μήνυμα "A proton has been constructed". Όταν καταστρέφεται ένα πρωτόνιο εκτυπώνεται το μήνυμα "A proton will be destroyed". Για ένα πρωτόνιο μπορούμε να εκτυπώσουμε (print) όλη την πληροφορία που το αφορά, δηλαδή, τη τιμή της μάζας του, την ιδιοστροφορμή του, το ηλεκτρικό φορτίο του και το είδος της στατιστικής στο οποίο υπακούει καθώς και ότι μπορεί να εκτυπωθεί από τα συστατικά του.

Ένα νετρόνιο αποτελείται από τρία quarks, $2\ down\ quarks$ και $1\ up\ quark$, και τρία γκλουόνια (gluons). Ένα νετρόνιο έχει μάζα (mass) ίση με $(\pi epiπου)\ 1.0085$ u, ιδιοστροφορμή (spin) ίση με $\frac{1}{2}$, ηλεκτρικό φορτίο $(electric\ charge)$ ίσο με 0e κι υπακούει στην στατιστική (statistics) Fermi-Dirac. Όταν δημιουργείται ένα νετρόνιο, του ανατίθεται η τιμή της μάζας του, η ιδιοστροφορμή του, το ηλεκτρικό φορτίο του και το είδος της στατιστικής στο οποίο υπακούει.

Επίσης, εκτυπώνεται το μήνυμα "A neutron has been constructed". Όταν καταστρέφεται ένα νετρόνιο εκτυπώνεται το μήνυμα "A neutron will be destroyed". Για ένα νετρόνιο μπορούμε να εκτυπώσουμε (print) όλη την πληροφορία που το αφορά, δηλαδή, τη τιμή της μάζας του, την ιδιοστροφορμή του, το ηλεκτρικό φορτίο του και το είδος της στατιστικής στο οποίο υπακούει καθώς και ότι μπορεί να εκτυπωθεί από τα συστατικά του.

Ένα up quark έχει ηλεκτρικό φορτίο (electric charge) ίσο με $+\frac{2}{3}e$, μάζα (mass) ίση με (περίπου) $2.01~{\rm MeV/c^2}$, ιδιοστροφορμή (spin) ίση με $\frac{1}{2}$ κι υπακούει στην στατιστική (statistics) Fermi-Dirac. Όταν δημιουργείται ένα up quark, του ανατίθεται η τιμή της μάζας του, η ιδιοστροφορμή του, το ηλεκτρικό φορτίο του και το είδος της στατιστικής στο οποίο υπακούει. Επίσης, εκτυπώνεται το μήνυμα "An up quark has been constructed". Όταν καταστρέφεται ένα up quark εκτυπώνεται το μήνυμα "An up quark will be destroyed". Για ένα up quark μπορούμε να εκτυπώσουμε (print) όλη την πληροφορία που το αφορά, δηλαδή, τη τιμή της μάζας του, την ιδιοστροφορμή του, το ηλεκτρικό φορτίο του και το είδος της στατιστικής στο οποίο υπακούει.

Ένα down quark έχει ηλεκτρικό φορτίο (electric charge) ίσο με $-\frac{1}{3}e$, μάζα (mass) ίση με (περίπου) 4.7 MeV/c², ιδιοστροφορμή (spin) ίση με $\frac{1}{2}$ κι υπακούει στην στατιστική (statistics) Fermi-Dirac. Όταν δημιουργείται ένα down quark, του ανατίθεται η τιμή της μάζας του, η ιδιοστροφορμή του, το ηλεκτρικό φορτίο του και το είδος της στατιστικής στο οποίο υπακούει. Επίσης, εκτυπώνεται το μήνυμα "A down quark has been constructed". Όταν καταστρέφεται ένα down quark εκτυπώνεται το μήνυμα "A down quark will be destroyed". Για ένα down quark μπορούμε να εκτυπώσουμε (print) όλη την πληροφορία που το αφορά, δηλαδή, τη τιμή της μάζας του, την ιδιοστροφορμή του, το ηλεκτρικό φορτίο του και το είδος της στατιστικής στο οποίο υπακούει.

Ένα γκλουόνιο έχει μάζα (mass) ίση με 0, ηλεκτρικό φορτίο (electric charge) ίσο με 0e, ιδιοστροφορμή (spin) ίση με 1 κι υπακούει στην στατιστική (statistics) Bose-Einstein. Όταν δημιουργείται ένα γκλουόνιο, του ανατίθεται η τιμή της μάζας του, η ιδιοστροφορμή του, το ηλεκτρικό φορτίο του και το είδος της στατιστικής στο οποίο υπακούει. Επίσης, εκτυπώνεται το μήνυμα "A gluon has been constructed". Όταν καταστρέφεται ένα γκλουόνιο εκτυπώνεται το μήνυμα "A gluon will be destroyed". Για ένα γκλουόνιο μπορούμε να εκτυπώσουμε (print) όλη την πληροφορία που το αφορά, δηλαδή, τη τιμή της μάζας του, την ιδιοστροφορμή του, το ηλεκτρικό φορτίο του και το είδος της στατιστικής στο οποίο υπακούει.

Ένα ηλεκτρόνιο έχει ηλεκτρικό φορτίο (electric charge) ίσο με -1e, μάζα (mass) ίση με $5.48579909070 \times 10^{-4}$ u, ιδιοστροφορμή (spin) ίση με $\frac{1}{2}$ κι υπακούει στην στατιστική (statistics) Fermi-Dirac. Όταν δημιουργείται ένα ηλεκτρόνιο, του ανατίθεται η τιμή της μάζας του, η ιδιοστροφορμή του, το ηλεκτρικό φορτίο του και το είδος της στατιστικής στο οποίο υπακούει. Επίσης, εκτυπώνεται το μήνυμα "An electron has been constructed". Όταν καταστρέφεται ένα ηλεκτρόνιο εκτυπώνεται το μήνυμα "An electron will be destroyed". Για ένα ηλεκτρόνιο μπορούμε να εκτυπώσουμε (print) όλη την πληροφορία που το αφορά, δηλαδή, τη τιμή της μάζας του, την ιδιοστροφορμή του, το ηλεκτρικό φορτίο του και το είδος της στατιστικής στο οποίο υπακούει.

Υλοποιήστε τα παραπάνω, μέσω των κατάλληλων κλάσεων, ορίζοντας τα μέλη-δεδομένα που χρειάζονται και τις συναρτήσεις-μέλη που υλοποιούν την παραπάνω συμπεριφορά. Υλοποιήστε επίσης μια συνάρτηση main στην οποία:

- 1. Να δημιουργεί ένα τυχαίο αριθμό ατόμων ισοτόπων άνθρακα, επιλέγοντας τυχαία το είδος τους
- 2. Για καθένα από αυτά, να εκτυπώνει τις πληροφορίες του
- 3. Να υπολογίζει το σύνολο των πρωτονίων που έχουν δημιουργηθεί
- 4. Να υπολογίζει το σύνολο των νετρονίων που έχουν δημιουργηθεί
- 5. Να υπολογίζει το συνολικό φορτίο που έχει δημιουργηθεί

Άσκηση 2: Όπως ξέρετε από τη Χημεία του Λυκείου, άτομα άνθρακα συνενώνονται με άλλα άτομα άνθρακα ή άλλων στοιχείων, μέσω κοινών (ζευγαριών) ηλεκτρονίων προκειμένου να συμπληρωθεί η εξωτερική στοιβάδα του καθενός, και σχηματίζουν ενώσεις. Το κοινό ζεύγος ηλεκτρονίων μεταξύ των ατόμων αποτελεί δεσμό. Μεταξύ των ατόμων, μπορεί να σχηματιστούν απλοί, διπλοί ή τριπλοί δεσμοί κατά τους οποίους τα άτομα μοιράζονται ένα, δύο ή τρία ζευγάρια ηλεκτρονίων.

Οι υδρογονάνθρακες είναι μια κατηγορία ενώσεων ατόμων άνθρακα με άτομα υδρογόνου. Στην περίπτωση που τα άτομα άνθρακα συνενώνονται έτσι ώστε να δημιουργείται μια μη-κυκλική αλυσίδα, αυτοί λέγονται μη-κυκλικοί υδρογονάνθρακες. Τα αλκάνια, τα αλκένια και τα αλκίνια είναι κατηγορίες μη-κυκλικών υδρογονανθράκων. Τα αλκάνια έχουν γενική μορφή μοριακού τύπου: $C_{\nu}H_{2\nu+2}$, $\nu \geq 1$, τα αλκένια έχουν γενική μορφή μοριακού τύπου: $C_{\nu}H_{2\nu-2}$, $\nu \geq 2$ και τα αλκίνια έχουν γενική μορφή μοριακού τύπου: $C_{\nu}H_{2\nu-2}$, $\nu \geq 2$.

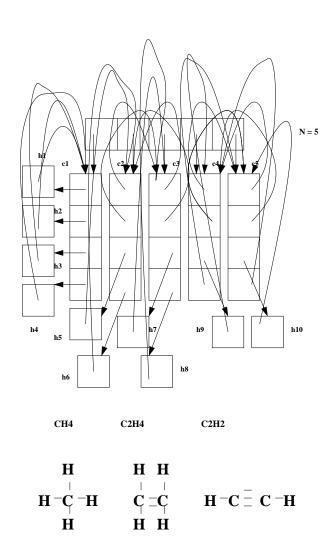
Αφού αποφασίσετε μια αναπαράσταση των ατόμων του άνθρακα και του υδρογόνου στη C++ ώστε να μπορεί να χρησιμοποιηθεί για την αναπαράσταση των υδρογονανθράκων, να υλοποιήσετε σε C++ μια συνάρτηση main που να κάνει τα παρακάτω:

- 1. Για ένα τυχαίο N, να δημιουργούνται N άτομα άνθρακα
- 2. Για καθένα άτομο από αυτά, να δημιουργούνται δεσμοί, τυχαία, είτε με υπάρχοντα άτομα άνθρακα, αν είναι δυνατό, είτε να δημιουργούνται άτομα υδρογόνου και να συνδέονται με αυτά έως ότου όλα τα ηλεκτρόνια να ζευγαρώσουν
- 3. Να εκτυπώνονται οι ενώσεις των ατόμων
- 4. Με βάση τους παραπάνω γενικούς τύπους, να γίνεται αναγνώριση της ένωσης ή των ενώσεων που δημιουργήθηκαν και να εκτυπώνεται η κατηγορία της/του

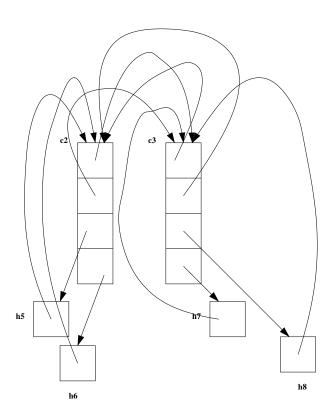
Η διαδικασία αυτή να επαναλαμβάνεται K φορές, όπου το K να δίδεται από τη γραμμή εντολής. Σημείωση: Για διευκόλυνση της υλοποίησης των παραπάνω ενεργειών, στα άτομα μπορείτε να δίδετε μια ταυτότητα. Κατόπιν, για την εκτύπωση, αρκεί να εκτυπώνετε ποιο άτομο είναι συνδεδεμένο με ποια άλλα. Σε περίπτωση διπλών ή τριπλών δεσμών, η εκτύπωση θα το εμφανίζει ρητά.

Παράδειγμα για N=5 κατά το οποίο δημιουργήθηκε ένα αλκάνιο (CH_4) , ένα αλκένιο (C_2H_4) κι ένα αλκίνιο (C_2H_2) .

Οι άνθρακες πρέπει να "ζευγαρώσουν" 4 ηλεκτρόνια. Γι' αυτό και στο σχήμα έχουμε τέσσερα "κουτάκια" (δείκτες) στο κάθε άτομο άνθρακα ώστε να γνωρίζουμε με ποιο άτομο μοιράζονται το κάθε ηλεκτρόνιο. Αντίστοιχα στα υδρογόνα έχουμε ένα κουτάκι που δείχνει με ποιο άτομο μοιράζεται το ηλεκτρόνιό του. Καθότι ένα άτομο άνθρακα μοιράζεται τέσσερα ηλεκτρόνια, τέσσερα άλλα άτομα πρέπει να "δείχνουν" σε αυτό. Οπότε έχουμε συσσώρευση δεικτών στο κάθε άτομο άνθρακα κι έτσι καταλήγουμε σε μια τόσο "μπερδεμένη" εικόνα.



Απομονώνοντας το αλχένιο (C_2H_4) του παραπάνω σχήματος, αυτό αναπαριστάνεται ως εξής:



$$\begin{array}{cccc} \mathbf{H} & \mathbf{H} \\ \begin{matrix} & & \\ & & \\ \end{matrix} & \begin{matrix} & \\ & \end{matrix} \\ \mathbf{C} & \begin{matrix} & \\ & \end{matrix} \\ \mathbf{C} \\ \end{matrix}$$

Η εκτύπωση των ενώσεων του παραδείγματος μπορεί να είναι:

```
comp([c1(h1,h2,h3,h4)])
comp([c2(c3(double),h5,h6),c3(c2(double),h7,h8)])
comp([c4(c5(triple),h9),c5(c4(triple),h10)])
```