

Les molécules

TP 4

Objectifs

- ★ Manipulez les conteneurs
- ★ Manipulez les itérateurs

Contraintes

- Indentez vos fichiers.
- La correction tiendra compte de la brièveté des méthodes que vous écrivez (évitiez les fonctions de plus de 25 lignes) ; n'hésitez pas à découper une méthode en plusieurs sous-méthodes (privées) plus courtes.
- Votre code ne doit pas donner d'erreurs avec Valgrind (ni fuite mémoire, ni autres erreurs).
- Vous ne devez pas utiliser de fonction C quand un équivalent C++ existe.
- Pour l'UML, vous pouvez utiliser UMLet ou Umbrello.
- Les noms de classe commencent par une majuscule.
- Les noms de méthodes et d'attributs commencent par une minuscule.
- La convention de nommage des accesseurs est `get_nom_attribut()` et `set_nom_attribut(...)`.
- Vous devez fournir un Makefile qui compile vos fichiers source et contient une règle clean ainsi qu'un programme de test.
- Le **code source et les diagrammes** doivent être *pusher* sur le git du TP

Préparation du TP

- Cloner votre répertoire sur votre compte

```
git clone https://git
```

 l'adresse qui vous a été attribuée.
- Pendant le TP n'oubliez pas de commit régulièrement
- Le répertoire contient un fichier `main.cc` qui vous servira de programme de test.
- N'oubliez pas de pusher l'ensemble

Le dépôt git ne doit pas contenir d'exécutable, ni de fichier objet, ni de fichier temporaire (*.*)

Concept

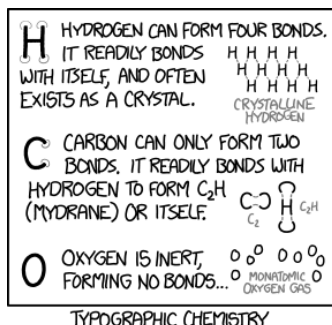


FIGURE 1 – These are all sans-serif compounds. Serif compounds are dramatically different and usually much more reactive.xkcd

1 Normalisation de la forme d'une molécule

Une molécule chimique est un assemblage d'éléments individuels (atome). Chaque molécule peut être écrite sous une forme éclatée : H-O-H , O-Nb-O-Nb-O

ou bien sous forme normale : H_2O , Nb_2O_3

La forme éclatée est donc une suite d'atomes séparés par des tirets. Sous la forme normale, les atomes sont réunis selon leur nom, et classés par ordre alphabétique. Le but de l'exercice est d'écrire une fonction permettant de transformer une forme éclatée en une forme normale.

1. Écrire une classe `Molecule` qui possède un attribut contenant l'ensemble de ses atomes sous forme éclatée.
2. Écrire le constructeur créant, à partir d'une chaîne de caractères représentant une molécule sous forme éclatée, un vecteur de `std::string` représentant la même forme éclatée. Par exemple, la fonction donnera le vecteur `[O;Nb;O;Nb;O]` à partir de la molécule O-Nb-O-Nb-O . Tester cette construction avec les molécules du fichier `"molecules.txt"`.
3. Écrire une méthode `std::string normalise() const` qui crée, à partir du vecteur d'atome, la forme normale de la molécule. Cette fonction devra donc :
 - trier les atomes selon leur nom
 - compter les occurrences de chaque atome dans la molécule
4. Tester cette fonction avec les molécules du fichier `"molecules.txt"`. Afficher le résultat de la forme normalisée de chacune des molécules dans un fichier `res_normalisation.txt`.

2 Normalisation des réactions chimiques

On souhaite maintenant normaliser l'écriture de réactions chimiques données sous forme éclatée. Par exemple, la réaction :

$\text{Na-O-Na} + \text{H-O-H} \rightarrow \text{Na-O-H} + \text{Na-H-O}$ sera normalisée en :

$\text{Na}_2\text{O} + \text{H}_2\text{O} \rightarrow 2 \text{NaOH}$

1. Écrire la classe `Reaction` qui a deux attributs correspondant à l'ensemble des atomes de gauche et l'ensemble des atomes à droite de la réaction.
2. Écrire le constructeur créant, à partir d'une chaîne de caractères représentant une équation sous forme éclatée, deux vecteurs "gauche" et "droite" contenant respectivement la liste des molécules apparaissant à gauche et à droite de la flèche.
3. Écrire une méthode `std::string normalise() const` transformant une réaction donnée sous forme éclatée en une réaction normalisée. Tester votre fonction sur le fichier `"reactions.txt"`. Afficher le résultat de la forme normalisée de chacune des molécules dans un fichier `res_reactions.txt`.

Bonus

Surcharger l'opérateur de flux sortant (`operator<<`) pour les deux classes précédentes.