

Aula 25: Trabalho Prático de Prolog

Prof.: Paulo Roberto Nunes de Souza

Trabalho Prático de Prolog

Você e, no máximo, mais dois colegas constituem uma equipe de uma empresa de Desenvolvimento de Software sob encomenda. Sua empresa recebeu a encomenda de um programa de identificação e nomenclatura de compostos da química orgânica. O seu gerente passou para sua equipe a responsabilidade de desenvolver o módulo que irá identificar a função química principal, as funções químicas secundárias e o sufixo a ser utilizado pelo módulo de nomenclatura.

Módulo

O módulo deverá ser desenvolvido em Prolog, seguindo uma exigência do cliente. O módulo receberá como informação o grafo representando uma estrutura molecular, conforme detalhes a seguir, e um código para molécula e apresentar como resultado:

- grupo funcional principal;
- sufixo do grupo principal;
- os nomes dos grupos secundários presentes.

Dados da Molécula

A molécula será definida a partir de dois predicados:

- atomo(MOLECULA,ATOMO,ELEMENTO);
- ligacaosimples(MOLECULA,ATOMO1,ATOMO2).
- ligacaodupla(MOLECULA,ATOMO1,ATOMO2).
- ligacaotripla(MOLECULA,ATOMO1,ATOMO2).

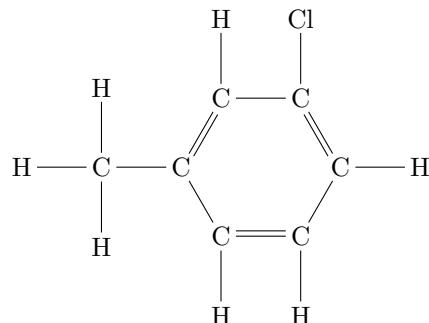
O predicado "atomo" possui 3 termos: MOLECULA indica o código de identificação da molécula, ATOMO indica o código de identificação do átomo e ELEMENTO indica o elemento químico do átomo. O elemento químico deve ter a grafia conforme os exemplos a seguir:

- bromo;
- carbono;
- cloro;
- fluor;
- hidrogenio;
- iodo;
- nitrogenio;

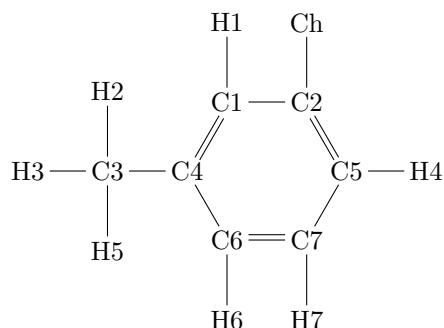
- oxigenio;

Os predicados "ligacaosimples", "ligacaodupla" e "ligacaotripla" também possuem 3 termos: MOLECULA indica o código de identificação da molécula e ATOMO1 e ATOMO2 indicam o código de identificação dos átomos que estão ligados.

Por exemplo, a molécula química:



Para ela ser representada deve ser dado um nome para a molécula e um nome para cada átomo, todos estes nomes diferentes dentre si. Após isso a molécula pode ser vista desta forma:



Desta forma, a codificação da molécula será:

```
%Átomos da Molécula m1
atomo(m1,h1,hidrogenio).
atomo(m1,h2,hidrogenio).
atomo(m1,h3,hidrogenio).
atomo(m1,h4,hidrogenio).
atomo(m1,h5,hidrogenio).
atomo(m1,h6,hidrogenio).
atomo(m1,h7,hidrogenio).
atomo(m1,c1,carbono).
atomo(m1,c2,carbono).
atomo(m1,c3,carbono).
atomo(m1,c4,carbono).
atomo(m1,c5,carbono).
atomo(m1,c6,carbono).
atomo(m1,c7,carbono).
atomo(m1,ch,cloro).

%Ligações Químicas da Molécula m1
ligacaosimples(m1,h1,c1).
ligacaosimples(m1,h2,c3).
```

```

ligacaosimples(m1,h3,c3).
ligacaosimples(m1,h4,c5).
ligacaosimples(m1,h5,c3).
ligacaosimples(m1,h6,c6).
ligacaosimples(m1,h7,c7).
ligacaosimples(m1,c1,c2).
ligacaodupla(m1,c1,c4).
ligacaosimples(m1,c2,ch).
ligacaodupla(m1,c2,c5).
ligacaosimples(m1,c3,c4).
ligacaosimples(m1,c4,c6).
ligacaosimples(m1,c5,c7).
ligacaodupla(m1,c6,c7).

```

Grupos funcionais

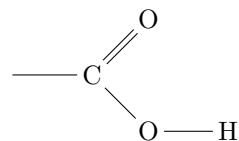
O módulo a ser implementado deve ser capaz de identificar qualquer um dos seguintes grupos funcionais, em ordem decrescente de prioridade:

- Ácido Carboxílico;
- Aldeido;
- Cetona;
- Amina;
- Álcool;
- Haleto.

6.0.1 Ácido Carboxílico

Este é o grupo funcional com maior prioridade, logo uma estrutura que seja caracterizada como tal, receberá a nomenclatura de um ácido.

A estrutura que caracteriza um ácido carboxílico é a **carboxila**, cujo diagrama é o seguinte:

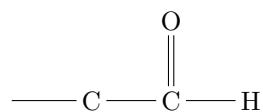


O sufixo de um ácido carboxílico, para fins de nomenclatura, é **oico**. Devido à sua prioridade ser a maior, o ácido carboxílico não atua como função secundária.

6.0.2 Aldeido

Uma estrutura que tenha a característica de aldeido, receberá este nome se ela não for caracterizada também como ácido carboxílico.

A estrutura que caracteriza um aldeido é a **carbonila primária**, cujo diagrama é o seguinte:

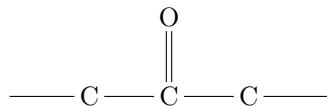


O sufixo de um aldeido, para fins de nomenclatura, é **al**. Quando atua como função secundária a carbonila primária é chamada de **oxo**.

6.0.3 Cetona

Uma estrutura que tenha a característica de cetona, receberá este nome se ela não for caracterizada também como ácido carboxílico nem aldeido.

A estrutura que caracteriza uma cetona é a **carbonila secundária**, cujo diagrama é o seguinte:

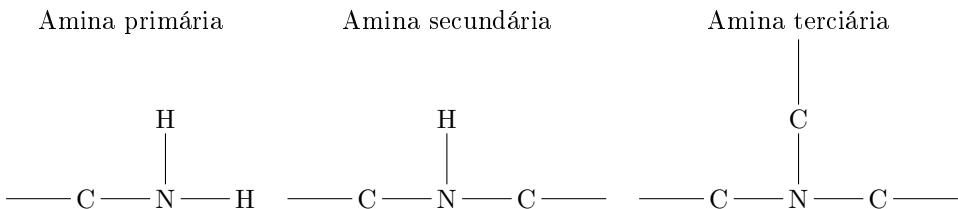


O sufixo de uma cetona, para fins de nomenclatura, é **ona**. Quando atua como função secundária a carbonila secundária é chamada de **oxo**.

6.0.4 Amina

Uma estrutura que tenha a característica de amina, receberá este nome se ela não for caracterizada também como ácido carboxílico, nem aldeido, nem cetona.

Uma amina pode ser caracterizada por três estruturas, são elas a **amina primária**, **amina secundária** e **amina terciária**, cujos diagramas são os seguintes:



O sufixo de uma amina, para fins de nomenclatura, é **amina**. Quando atua como função secundária a carbonila secundária é chamada de **amino**.

6.0.5 Álcool

Uma estrutura que tenha a característica de álcool, receberá este nome se ela não for caracterizada também como ácido carboxílico, nem aldeido, nem cetona, nem amina.

A estrutura que caracteriza um álcool é a **hidroxila**, cujo diagrama é o seguinte:



O sufixo de um álcool, para fins de nomenclatura, é **ol**. Quando atua como função secundária a hidroxila é chamada de **hidroxi**.

6.0.6 Haleto

Uma estrutura que tenha a característica de haleto, receberá este nome se ela não for caracterizada como nenhuma das apresentadas anteriormente.

Um haleto é caracterizado pela presença de átomos de **fluor F**, **cloro Cl**, **bromo Br** ou **iodo I**.

O sufixo de um haleto, para fins de nomenclatura, é **eto**. Quando atua como função secundária o haleto é chamado pelo nome do átomo que o caracteriza, **fluor**, **cloro**, **bromo** ou **iodo**.

Prazo de Entrega

Os códigos fonte do módulo, junto com um pequeno tutorial para a execução do mesmo, deverão ser enviados ao responsável pela verificação de qualidade, no e-mail **paulonunes@cca.ufes.br** até dia **25/04/2013**.