

PAINEL 22

Interconectividade em Modelagem Molecular

Marcelo Almeida de Morais
Bolsista de Inic. Científica, Informática, UFRJ

Peter Rudholf Seidl
Orientador, Químico, Ph.D

Márcia Viana de Sá Earp
Co-orientadora, Analista de Sistemas

1. INTRODUÇÃO

Os sistemas em rede oferecem diversos elementos que permitem a comunicação dentro de uma vasta gama de ambientes computacionais. Alguns desses recursos incluem o simples compartilhamento de impressoras e arquivos, acesso a *mainframes*, minicomputadores e ligações remotas com outros PCs e redes. Tais recursos se mostraram essenciais no desenvolvimento da modelagem molecular, uma vez que pode-se usufruir dos recursos de outros locais de trabalho, através de um computador pessoal. (1)

Os benefícios da interconectividade são ilimitados, podendo-se transformar o local de trabalho em um conjunto mais compacto, onde é possível extrair os diversos recursos dos diferentes computadores à disposição, em pró da melhoria das tarefas a serem cumpridas.

A interconectividade na modelagem molecular, tornou tarefas antes feitas através de um processo extenso e dispendioso, num processo simples e rápido apenas lançando-se mão dos recursos adequados que certos computadores do nosso local de trabalho oferecem.

Entretanto, os benefícios da interconectividade não se limitam ao local de trabalho. Com o advento da *Internet* (a "mãe das redes", que em seu nível mais básico, é possível considerá-la como sendo uma imensa coletânea de vastas bibliotecas de informação, todas disponíveis *on-line* para você examinar ou utilizar como quiser) foi possível tornar este trabalho conhecido em qualquer parte do mundo, não importando que computador foi utilizado, além de entrar em contato com outros profissionais da área, agilizando o intercâmbio de informações, que é a base de todo projeto. (2)

2. OBJETIVO

O presente trabalho se propõem a utilizar os recursos dos sistemas em rede, através da interconectividade entre os diferentes computadores, para aperfeiçoar algumas das tarefas necessárias ao desenvolvimento da modelagem molecular, além da criação de uma *home page* (páginas gráficas de acesso à *Internet*, que permitem combinar texto, imagem, vídeo, som e animação) para a divulgação do trabalho de modelagem molecular a qualquer pessoa que disponha de uma conta na *Internet*.

3. METODOLOGIA

Para obter o sucesso desejado no projeto, foi necessário o conhecimento prévio de:

- a) linguagens de programação: *HTML 3.0* e *C*;
- b) sistema operacional: *UNIX*;
- c) sistemas em rede;

d) aplicativos gráficos: *LViewPro*, *WinGif* e *Print Shop Pro*;

e) *browser*: *NetScape*.

Em mãos destas ferramentas, o projeto se desenvolveu em duas etapas: na conectividade dos computadores do local de trabalho e na conexão com outros computadores ligados a uma LAN (*Local Area Network*, uma rede local) através da *Internet*.

Para a conectividade dos computadores do local de trabalho foi utilizado o *file transfer protocol* (protocolo de transferência de arquivos ou *FTP*) e o recurso de *piping* (recurso que torna possível o encadeamento de comandos, também chamado de canalização) usada no ambiente *UNIX*. Com eles foi possível a criação de um *software*, que se conectava a uma *workstation* e dela se retirava os arquivos de moléculas desejáveis para a modelagem molecular. (3)

A idéia foi de redirecionar a saída de cada linha de comando de um arquivo *ASCII* (arquivo texto padrão), através do *piping*, para que cada uma delas executasse uma ação via *FTP* para a transferência de arquivos de um computador a outro.

A integridade dos arquivos transferidos é assegurada pelo uso de um protocolo (de um ponto de vista simplificado, um protocolo é a maneira que duas máquinas possuem para se entenderem entre si) de transferência (*FTP*), garantindo assim um resultado seguro apesar da diferença das plataformas (*PC* e *workstation*) envolvidas no processo.

O ponto chave nessa etapa, foi a descoberta de um parâmetro que foi adicionado à linha de comando do *FTP*, que permite a leitura de arquivos *ASCII* e que, juntamente com os pontos abordados anteriormente tornou possível a conclusão desta etapa do projeto. Tal linha de comando (**FTP -IN**, de *Input*), apesar de ser um comando não especificado nos manuais, foi descoberto graças à troca de informações com outros profissionais de outros países. Tal experiência nos levou à segunda etapa do projeto - a interconectividade entre outros computadores conectados à *Internet*.

A troca de informações com outros profissionais de áreas do interesse da modelagem molecular, ocorreu através das *home pages*. Desenvolveu-se então uma *home page*, com o intuito de divulgar o trabalho de modelagem molecular, criando uma referência para outros profissionais interessados no assunto.

Para a criação de uma *home page* bem elaborada, é necessário responder a algumas perguntas básicas: (4)

Quem é o público alvo?

Qual o objetivo que se deseja alcançar?

De posse das respostas destas perguntas, traçou-se como meta oferecer aos alunos pesquisadores, empresas ou qualquer entidade que utilize a química, a oportunidade de comunicar com os bolsistas de modelagem molecular, com o objetivo de simular estruturas, e dar andamento, ou novos caminhos aos seus temas de pesquisa.

Para a criação da *home page* utilizou-se um *browser* (um programa que permite visualizar documentos gráficos ligados através de todo o mundo e com a capacidade de acessar informações com apenas alguns cliques do *mouse*), que é utilizado por mais de 80% dos *Internautas* (pessoas que utilizam a *Internet*), o *Netscape*. (2)

Com a utilização dessa ferramenta é possível dizer que essa *home page* será vista de uma forma única por mais de 80% dos *Internautas*. Quanto aos outros *Internautas* que utilizam outros *browsers* como: *Mosaic*, *Lynx* e outros, teve-se o cuidado de criar comandos que minimizem as diferenças entre o *Netscape* e os outros *browsers* usados.

Para a criação do arquivo *HTML* (*Hipertext Markup Language*), que é lido pelo *Netscape* para a criação da *home page*, utilizou-se o *Notepad* (*software* que cria arquivos tipo *ASCII* do *Windows 3.11*) e para o tratamento de imagens os *softwares* *LviewPro*, *WinGif* e *Print Shop Pro*.

Para a criação da *home page* foram utilizadas algumas técnicas que permitem uma arte final muito boa, são elas:

- a) os conceitos de navegabilidade - que permitem que o *Internauta* utilize o hipertexto da linguagem *HTML*, de uma forma bastante agradável e simplificada.
 - b) a introdução de *GIFs* (*Graphical Interchange Format*, que é um formato gráfico largamente utilizado nas *home pages*) transparentes e interlaçadas - que cria a idéia de gráficos fluando no fundo da tela (*GIFs* transparentes), dando a impressão de uma imagem manchada sendo aperfeiçoada constantemente (*GIFs* entrelaçadas). Essa última é muito bem aceita pelos *Internautas*, porque os gráficos fazem sentido mais rapidamente em relação as não-entrelaçadas.
- (4)

4. CONCLUSÃO

Os resultados obtidos na conexão entre os computadores do nosso local de trabalho se mostraram extremamente satisfatórios. Foi possível extrair melhor a potencialidade de cada computador, além de utilizar as facilidades de cada um deles em pró um dos outros.

Quanto à interconectividade entre outros computadores, com o auxílio da *home page* de modelagem molecular, conseguiu-se não só criar um ponto de referências para outros profissionais de modelagem molecular, como também acompanhar uma tendência que está se tornando cada dia mais evidente.

BIBLIOGRAFIA

1. Niedermiller-Chaffins, D. , Dominando a Novell NetWare, 1993.
2. Tauber, D. A. , Navegando pela Internet com o Netscape, 1995.
3. Thomas, R. , Unix Total, 1989.
4. Fox, D. , Dominando o Editor HTML Web, 1995.