

Figura 1 - Impressão da tela do software desenvolvido editando uma molécula construída no software SD

BIBLIOGRAFIA

1. FOLEY, J.A., VAN DAM, S.F. and HUGHES, J. Computer Graphics - Principles and Practice, Addison-Wesley Publishing Company, Reading. MA.; (1990) pp. 858 - 859
2. GL Programming 1, Supplement 1, Fortran Code Supplement - Student's Workbook, Silicon Graphics Computer Systems (1991)
3. GL Programming 2 - Student's Workbook, Silicon Graphics Computer Systems (1991)
4. PowerVision Graphics Programming - Student's Workbook, Silicon Graphics Computer Systems (1990)
5. NYE, A. - Xlib Programming Manual, O'Reilly & Associates, Inc. (1990)

PAINEL 16

*Banco de Estruturas
Moleculares*

DESTAQUE

Vanessa Paranhos Türner
Bolsista de Inic. Científica, Informática,
UFRJ

Peter Rudolf Seidl
Orientador, Químico, D.sc.

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

1. INTRODUÇÃO

A modelagem molecular por computador é atualmente considerada um importante método de pesquisa química. A moderna tecnologia existente torna possível a simulação e estimativa de estruturas moleculares. Porém, a grande quantidade de informações tratadas durante o estudo de uma família de moléculas torna inviável a utilização de meios não computacionais de armazenamento e recuperação desses dados.

Isto foi observado durante a execução do trabalho "Construção, Cálculo e Catalogação de Famílias de Moléculas Tensionadas Derivadas do Norbonano Através da Modelagem Molecular" (1). Este trabalho catalogou dezessete moléculas e gerou um catálogo em papel impresso com aproximadamente 500 páginas, fato que dificulta consideravelmente o acesso às informações catalogadas.

Assim, tendo em vista viabilizar o armazenamento de informações sobre estruturas moleculares e auxiliar a pesquisa química, agilizando a busca de dados já existentes, foi definido um banco de dados para armazenamento de estruturas moleculares e suas propriedades conformacionais calculadas, bem como de um programa para recuperação dessas informações.

Cada molécula é catalogada através de características específicas (como nome IUPAC, fórmula molecular etc.), bem como pelos átomos que a constituem e as ligações entre eles, podendo também armazenar valores medidos para a molécula.

2. METODOLOGIA

Primeiramente, foi feito um levantamento das informações contidas no catálogo de derivados do norbonano. Nesse levantamento, foram identificados dois tipos básicos de moléculas: as calculadas com rotação e as calculadas sem rotação.

As informações comuns aos dois tipos são as seguintes: fórmula molecular; nome IUPAC da molécula; nome comercial da molécula; trabalhos publicados, contendo título, autor, data de publicação e tipo de publicação; forma espacial construída através do *software* ALCHEMY II; forma plana construída através do *software* CHEMYWINDOWS; forma espacial construída através do *software* CERIOUS (com os símbolos dos elementos e com os átomos numerados de acordo com a classificação IUPAC).

Além dessas informações, existem outras que são geradas pelos cálculos efetuados através do MOPAC. Foram calculados vários parâmetros das moléculas, principalmente a distribuição de cargas, a energia e a análise conformacional, com o hamiltoniano AM1, como uma ferramenta de varredura de todos os confôrmeros, variando-se um ângulo de torção, tomando por base um determinado átomo pré-definido para ser estudado.

Pela rotação deste átomo, escolhido previamente, foram obtidas as variações de carga e energia em cada ponto da rotação, determinado pelo ângulo escolhido para a subdivisão da rotação de 360°. As moléculas que possuem rotação apresentam, para cada posição angular: calor de formação, energia eletrônica, repulsão núcleo a núcleo, dipolo, número de níveis preenchidos, ionização potencial, peso molecular, cálculos SCF, tempo de computação, matriz-z (que contém para cada átomo suas coordenadas (x, y, z), suas ligações e sua carga).

Após este levantamento concluiu-se que cada molécula possuía características próprias que a distinguiam das demais e eram independentes de sua conformação, e que cada confôrmero da molécula também possuía características próprias e dependentes da posição angular. Além disto, os átomos, tanto em relação à molécula quanto a cada um de seus confôrmeros, também podem ser caracterizados de maneira única. A estrutura lógica da informação armazenada pode ser, então, definida como:

Molécula	⇒	Valor	⇒	Tipo do Valor
Confôrmero	⇒	Valor	⇒	Tipo do Valor
Molécula	⇒	Átomo	⇒	Valor ⇒ Tipo do Valor
Confôrmero	⇒	Átomo	⇒	Valor ⇒ Tipo do Valor

Como piloto para a geração do banco de dados de armazenamento de estruturas moleculares, foi definida a estrutura interna de um banco de dados baseado nas informações contidas no Catálogo de Derivados do Norbonano, resultando em um modelo teórico de armazenamento das informações, modelo entidade-relacionamento - MER (Figura 1). Para a construção deste modelo, as informações tiveram que ser divididas em dois grupos, segundo características distintas. Estes dois grupos são: entidades e relacionamentos.

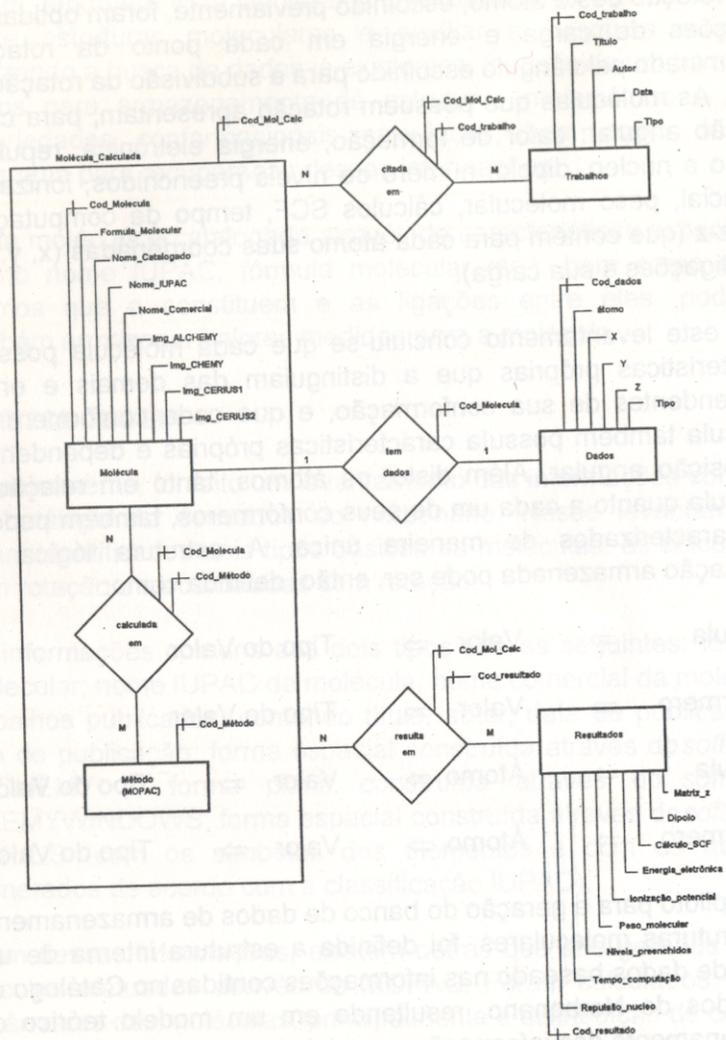


Figura 1 - Modelo Entidade-Relacionamento

Após a construção do MER, são definidas as tabelas SQL. Durante esta definição, o modelo passa por um processo de otimização das entidades e relacionamentos propostos, de forma a eliminar a redundância e diminuir o espaço gasto em armazenamento, conseguindo maior eficiência e rapidez (Figura 2).

MER	SQL	FOXPRO
Entidades, Relacionamentos modelo teórico	Tabelas modelo computacional	Table/DBF formato final

Figura 2 - Fluxo de Desenvolvimento do Banco de Dados

A implementação do modelo teórico otimizado é feita na forma de um modelo computacional, formado por um conjunto de tabelas SQL (Figura 3). Estas tabelas são uma forma tabular de representação dos dados armazenados segundo o padrão SQL (*Sequential Query Language*), considerada, praticamente, como um padrão na área de banco de dados.

Finalmente, foi feita a transcrição desse modelo computacional para o formato final no padrão do gerenciador de banco de dados escolhido, FoxPro for Windows (2), *software* padrão SQL e que utiliza a filosofia de janelas para a comunicação com o usuário.

Moléculas	
cod_molécula	Numérico
fórmula_molecular	Caracter (20)
nome_catalogado	Caracter (5)
nome_IUPAC	Caracter (60)
nome_comercial	Caracter (10)
imagem_alchemy	Imagem
imagem_chemy	Imagem
imagem_cerius_1	Imagem
imagem_cerius_2	Imagem
Método	
cod_molécula	Numérico
cod_método	Caracter (10)
Trabalhos	
cod_molécula	Numérico
cod_método	Numérico
título	Caracter (40)
autor	Caracter (40)
data	Caracter (10)
tipo	Caracter (30)
Dados_Molécula	
cod_molécula	Numérico
átomo	Caracter (15)
x	Numérico
y	Numérico
z	Numérico
tipo	Caracter (15)
Resultados	
cod_molécula	Numérico
calor_de_formação	Numérico
energia_eletrônica	Numérico
repulsão_núcleo_a_núcleo	Numérico
dipolo	Numérico
níveis_preenchidos	Numérico
ionização_potencial	Numérico
peso_molecular	Numérico
cálculos_SCF	Numérico
tempo_computação	Numérico
matriz_z	Numérico

Figura 3 - Tabelas SQL

3. RESULTADOS OBTIDOS

Foram definidas e implementadas as tabelas SQL no formato do *software* FoxPro for Windows (3), formando assim o "esqueleto" do banco de dados. Algumas fases do projeto já estão sendo implementadas, como a definição dos *layouts* das telas (Figura 4), e outras estão em fase de desenvolvimento, como o estudo do tratamento de imagens.

Após um estudo sobre os meios de conversão das imagens que serão inseridas no Banco de Dados de Estruturas Moleculares, conclui-se que o método mais eficiente é o uso do *scanner*, que é um equipamento que converte textos ou imagens do papel impresso para o microcomputador em imagens digitalizadas. A principal vantagem do uso do *scanner* é que este possibilita a escolha do formato para a imagem digitalizada. Sendo assim podemos salvar estas imagens no padrão que o FoxPro for Windows aceita, padrão *bitmap* (.BMP).

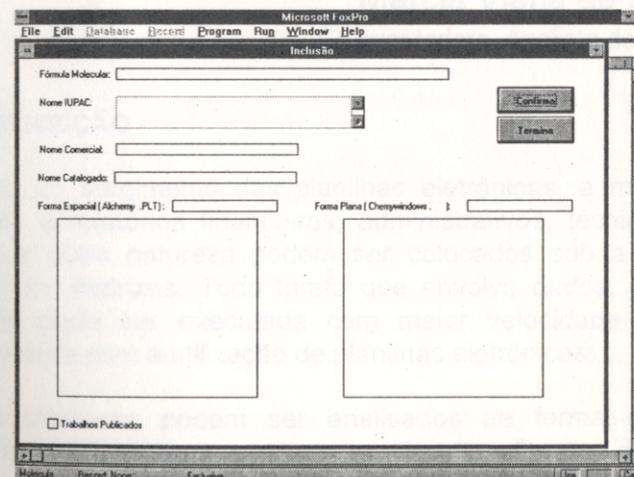
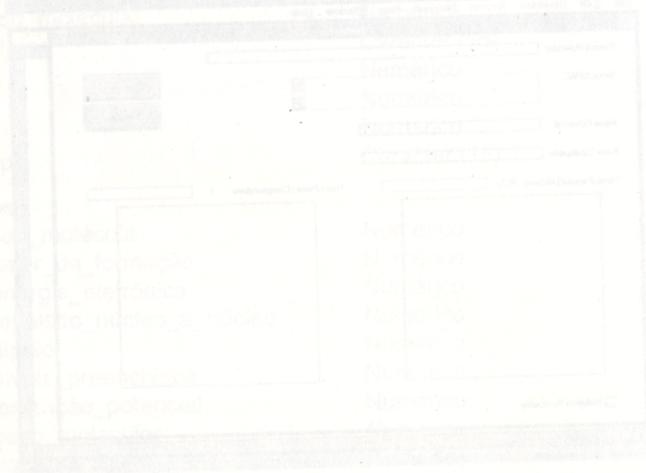


Figura 4 - Layout da tela de Inclusão

BIBLIOGRAFIA

1. VIANA, P.M. "Construção, Cálculo e Catalogação de uma Família de Moléculas Tensionadas Usadas em Estudos de Química Teórica e Ressonância Magnética Nuclear (RMN)", Relatório Anual de Atividades - Bolsa de Iniciação Científica, 1993, CNPq/CETEM-Centro de Tecnologia Mineral.
2. Microsoft FoxPro for Windows Language Reference. Microsoft Corporation, 1989-1993
3. Microsoft FoxPro for Windows Developer's Guide, Microsoft Corporation, 1989-1993



PAINEL 17

Módulo de Geração de Gráficos para o Banco de Dados Metais Pesados

Wagner Guimarães Oliveira
Bolsista de Inic. Científica, Informática,
UFRJ

Ana Maria B. M. da Cunha
Orientadora, Socióloga

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

1. INTRODUÇÃO

A partir do surgimento das planilhas eletrônicas, a maioria das análises e relatórios financeiros, administrativos, técnicos ou de qualquer outra natureza podem ser colocados sob a forma de tabelas ou matrizes. Toda tarefa que envolva dados, cálculos e gráficos pode ser executada com maior velocidade e melhor apresentada com a utilização de planilhas eletrônicas.

Dados tabulares podem ser analisados de forma estatística, gerando gráficos que auxiliam na visualização dos fenômenos modelados.

O Banco de Dados Metais Pesados tem por objetivo colocar à disposição da comunidade científica, interessada na questão do impacto ambiental de metais pesados sobre o meio ambiente, um