

Banco de Dados para Gerenciamento de Desenvolvimento de Software

Ingrid Oliveira Lotfi

Bolsista de Inic. Científica, Informática, UFRJ

Peter Rudolf Seidl

Orientador, Químico Industrial, Ph.D.

RESUMO

O projeto consiste em desenvolver um Banco de Dados para armazenar informações sobre programas criados pelo Grupo de Modelagem Molecular para manipular estruturas moleculares, permitindo uma integração entre esses programas, bem como um ponto de referência para consultas e esclarecimentos de dúvidas quando à correta utilização desses programas.

1. INTRODUÇÃO

O projeto está sendo desenvolvido em Borland Delphi 1.0 e suas tabelas no sistema Paradox. O Banco de Dados possui sete tabelas principais que armazenam:

- 1) As classes principais, chamadas Nouns, que contêm toda informação química e suas características;
- 2) Os comandos dos programas e suas características, que modificam os Nouns e são chamados Verbs;
- 3) Os parâmetros dos comandos, chamados Adverbs, que modificam os Verbs;
- 4) As bibliotecas, chamadas Libraries, que agrupam comandos de características semelhantes;
- 5) Ambientes de desenvolvimento dos programas, chamados Toolkits;
- 6) Desenvolvedores dos comandos (Verbs) e Nouns;
- 7) Usuários dos comandos (Verbs) e Nouns;

A tabela que armazena todos os Verbs, além de fornecer os nomes e as suas descrições, filtra quais parâmetros (Adverbs), estruturas moleculares (Nouns) e usuários estes comandos possuem, bem como qual o ambiente de desenvolvimento (Toolkit), desenvolvedor e biblioteca a que pertence o Verb.

O Banco de Dados permite que novos dados sejam adicionados às tabelas, visualizados e localizados de maneira rápida e eficiente, através da digitação da chave de procura.

As bibliotecas podem ser abertas em arquivo texto dentro do Banco de Dados, para que sejam vistos os comandos que nela estão agrupados.

2. OBJETIVO

Criação de uma interface para que químicos possam solicitar novos comandos e localizar comandos dentro do Banco de Dados;

Criar e associar bibliotecas de comandos ao *software* de desenvolvimento de aplicativos utilizados;

Geração de relatórios contendo os manuais de comandos (na forma de dicionário, código C++, Manual Unix e HTML).

3. MATERIAIS E MÉTODOS

Banco de Dados possui tabelas que têm como campos o seu código, nome e descrição. Estas são Developers, Users, Libraries, Adverbs e Toolkits. Seus códigos são importantes, pois estes são representados nas tabelas Verbs e Nouns. Já estas últimas tabelas, além desses campos essenciais, possuem campos numéricos que informam o código de registro das tabelas Developers, Libraries e Toolkits correspondentes. Como cada comando da tabela Verbs pode possuir diversos Adverbs, Nouns e Users (também no caso da tabela Nouns), cada campo numérico não poderia suportar um só código, e sim vários. Para relacionar essas tabelas, foi criada uma terceira que relaciona os códigos dos Verbs com os códigos dos Users. E assim também foi feito com Nouns e Adverbs.

| Codverb | Verb | Description | Codlibrary | Codtoolkit | Coddevelop. |
|---------|-----------|------------------|------------|------------|-------------|
| 1 | VERB 1 | DESCRIPTION 1 | 5 | 3 | 1 |
| 2 | VERB 2 | DESCRIPTION 2 | 4 | 2 | 3 |
| 3 | VERB 3 | DESCRIPTION 3 | 1 | 5 | 2 |

Quando Verb é aberta, os nomes da biblioteca, desenvolvedor e Toolkit são mostrados e não os seus códigos, pois estes só servem de referência para as três tabelas.

| Codverb | Coduser |
|---------|---------|
| 1 | 2 |
| 2 | 3 |
| 2 | 4 |
| 3 | 1 |
| 3 | 3 |

4. RESULTADOS E DISCUSSÃO

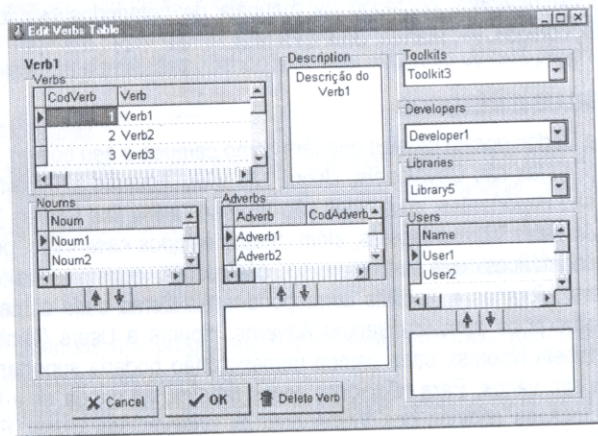


Figura 1 - Cadastro e alteração dos Verbs

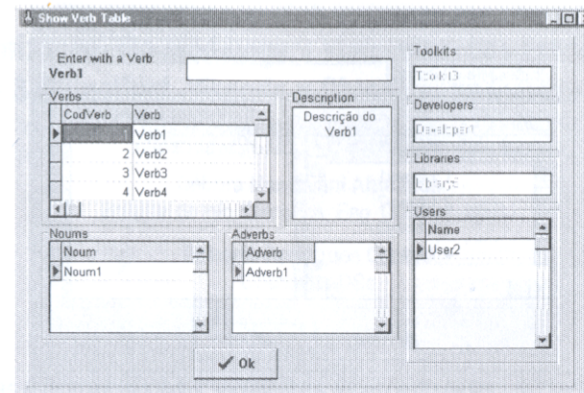


Figura 2 - Localização e visualização dos Verbs

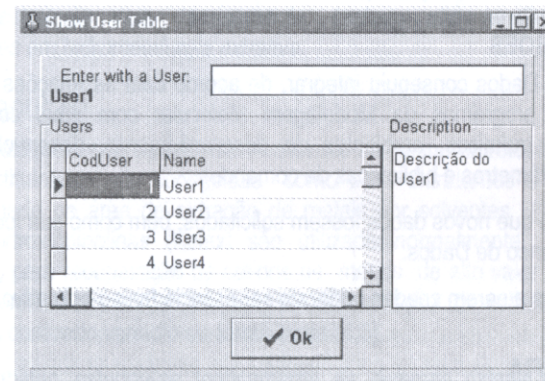


Figura 3 - Exemplo de uma das tabelas com campos essenciais

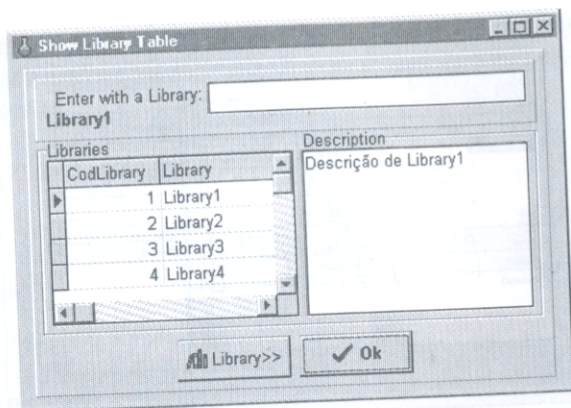


Figura 4 - O Botão Library mostra o conteúdo da biblioteca selecionada em arquivo texto

5. CONCLUSÕES

O Banco de Dados conseguiu integrar, de acordo com as relações entre as tabelas, os programas da Modelagem Molecular com seus comandos, informações químicas, ambientes de desenvolvimento, desenvolvedores, usuários, parâmetros e bibliotecas de comandos.

Foi permitido que novos dados fossem solicitados, bem como sua localização dentro do Banco de Dados.

As bibliotecas a serem criadas puderam ser associadas ao aplicativo.

BIBLIOGRAFIA

1. LONGO, MAURÍCIO B. Delphi 3.0 Total - Dominando a Ferramenta, Brasport, 1997.
2. LONGO, MAURÍCIO B. Delphi 3.0 Total - Aplicações de Banco de Dados, Brasport, 1997.

Otimização, Via Modelagem Molecular, das Estruturas do 8-Quinolol, Visando a Obtenção de Extratantes Iônicos de Alto Rendimento

Débora Mantovani Ahumada

Bolsista de Inic. Científica, Eng. Química, UERJ

Roberto Rodrigues Coelho

Orientador DSc

RESUMO

Diversas 8-hidroxiquinolinas substituídas foram estudadas utilizando cálculos semi-empíricos. Os cálculos da densidade de carga dos átomos do nitrogênio quinolínico e do oxigênio fenólico dessas 8-hidroxiquinolinas mostraram que é possível avaliar suas capacidades de complexação iônica. Isto permitiu propor estruturas que, teoricamente, tenham alto rendimento como extratantes em hidrometalurgia extrativa.

1. INTRODUÇÃO

As 8-hidroxiquinolinas substituídas, contendo um grupo hidrofóbico como um dos substituintes, são conhecidas como bons extratantes e têm grande aplicabilidade na área de extração de metais por solventes (1,2,3). As 7-alkil-8-hidroxiquinolinas (Kelex) são utilizadas, normalmente, em escala industrial, para recuperação de cátions de metais de alto valor agregado, a partir de lixívia resultantes do processo de obtenção de sulfato de cobre e de outras contendo vanádio ou terras-raras (4,5).

Neste trabalho estudou-se teoricamente as diversas oxinas substituídas, buscando-se aquelas estruturas químicas que apresentassem maior poder complexante.

2. OBJETIVO

Estudar teoricamente, a partir do cálculo da variável "densidade de carga" do nitrogênio quinolínico e do oxigênio fenólico, diversas moléculas das 8-hidroxiquinolinas substituídas, de modo a se otimizar aqueles substituintes que conferem à molécula um alto poder quelante.