

# PAINEL 14

## Definição de um Projeto Lógico e Implementação do Projeto Físico do Banco de Dados de Estruturas Moleculares

**Vanessa Paranhos Türner**

Bolsista de Inic. Científica, Eng. Química, PUC/RJ

**Peter Rudolf Seidl**

Orientadora, Químico Industrial, Ph.D.,

**Márcia Viana de Sá Earp**

Co-orientadora

### 1. INTRODUÇÃO

O projeto de desenvolvimento de um banco de dados está dividido em três sub-projetos: Projeto Conceitual, Projeto Lógico e Projeto Físico.

Um sistema de gerenciamento de banco de dados (SGBD) fornece meios para o projeto, desenvolvimento e manutenção de um modelo de informação que representa alguma parte do mundo real. O SGBD é um sistema que suporta todo o processamento do banco de dados.

A primeira etapa é completamente independente do modo como o sistema é implementado. Já as duas últimas etapas são, específicas e dependem das vantagens e possibilidades que cada SGBD oferece.

O SGBD escolhido para a implementação deste projeto foi o *Fox Pro for Windows* (1,2), pois era o único *software* de gerenciamento de banco de dados ao qual teve-se acesso através do CETEM. Ele mostrou-se eficiente e capaz de gerenciar a massa de informações armazenadas no banco de dados.

O projeto conceitual foi um trabalho que durou muito tempo. Ele teve uma importância significativa à implementação das etapas seguintes, e ainda aumentou as possibilidades de estabilização do banco de dados, já que a primeira fase está diretamente relacionada com a coleta e análise dos dados que darão "vida" ao sistema.

O fluxograma da Figura 1 mostra as etapas no projeto de Banco de Dados:

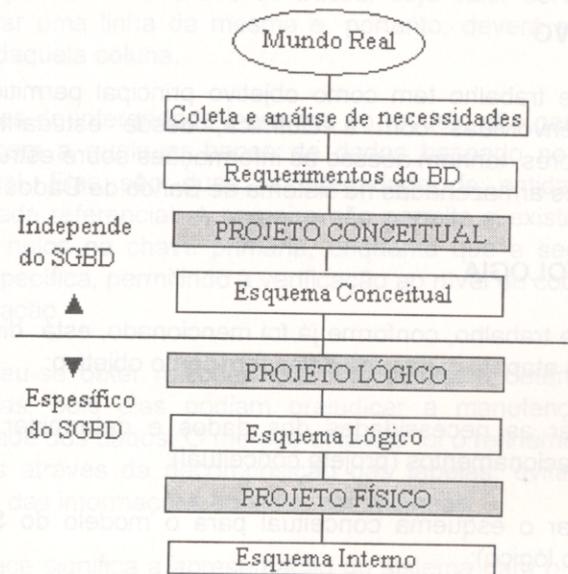


Figura 1 - Etapas desenvolvidas durante a execução do projeto

O presente banco de dados originou-se do trabalho "Banco de Dados de Estruturas Moleculares" (2), apresentado na II Jornada de Iniciação Científica do CETEM. O atual projeto é uma continuação do trabalho citado.

A utilidade do sistema depende exclusivamente da necessidade do usuário, já que possibilita vários tipos de consultas. Assim, podem ser feitas consultas básicas como propriedades de átomos, assim como também consultas mais elaboradas, visando a atender os pesquisadores mais especializados.

A idéia de generalização de sistemas está vinculada ao efeito de adaptação do mesmo. Parte-se do princípio que, quanto mais abrangente for o banco de dados, mais usuários serão possibilitados a usar o sistema, e conseqüentemente, a "vida média" do mesmo será maior, facilitando assim sua adaptação.

## 2. OBJETIVO

O presente trabalho tem como objetivo principal permitir que pessoas envolvidas com a Química, desde estudantes a pesquisadores, tenham acesso às informações sobre estruturas moleculares armazenadas no sistema de Banco de Dados.

## 3. METODOLOGIA

O presente trabalho, conforme já foi mencionado, está dividido em três etapas; cada uma delas tem como objetivo:

- (a) analisar as necessidades dos dados e determinar seus interrelacionamentos (projeto conceitual);
- (b) mapear o esquema conceitual para o modelo do SGBD (projeto lógico);
- (c) determinar as características físicas de armazenamento (projeto físico).

Cada um das etapas tem uma importância significativa para o desenvolvimento de qualquer aplicação dentro da área de banco de dados. Porém, no caso deste trabalho, as propostas são fundidas e unem suas capacidades para conseguir atingir um objetivo maior, armazenar uma grande quantidade de informações sobre estruturas moleculares na forma tridimensional e suas propriedades. O sistema conta, ainda, com dados resultantes de cálculos químicos, como por exemplo: parâmetros espectrais, calor de formação etc.

A passagem de um esquema para o outro baseou-se em regras e conceitos específicos. Poder-se-ia generalizar da seguinte maneira: toda entidade passa a ser uma relação (tabela), todos os atributos passam a ser, cada um deles, uma coluna da relação, e ainda, cada ocorrência, na prática, passa a ser uma dupla (linha) da relação. É importante ressaltar que cada tabela deverá possuir uma chave de busca, cujo valor servirá para identificar uma linha da mesma e, portanto, deverá ser único dentro daquela coluna.

As regras de integridade inerentes ao modelo são gerais, que se aplicam a qualquer banco de dados baseado no modelo relacional. Elas são duas: a integridade de entidade e a integridade referencial. A primeira não permite a existência de valores nulos na chave primária, enquanto que a segunda é mais específica, permitindo a verificação ao nível de codificação na aplicação.

Pretendeu-se obter relações que não tivessem determinadas anomalias, pois elas podiam prejudicar a manutenção e a integridade dos dados. O método utilizado foi o refinamento das relações através da decomposição das tabelas, evitando um prejuízo das informações contidas nas mesmas.

A interface significa a apresentação do sistema para o usuário. Principalmente em um sistema como o presente, que visa corresponder às expectativas de usuários de diversos níveis de conhecimento. É conclusivo que a interface seja o mais *user-friendly* possível.

Estabelecer um padrão para as telas de inserção e consultas é de extrema responsabilidade. A utilização de *software* para *Windows* facilita muito essa etapa, já que, no momento, as telas são baseadas no próprio ambiente do *Windows*. A Figura 2 exemplifica o padrão *Windows* na definição das janelas.

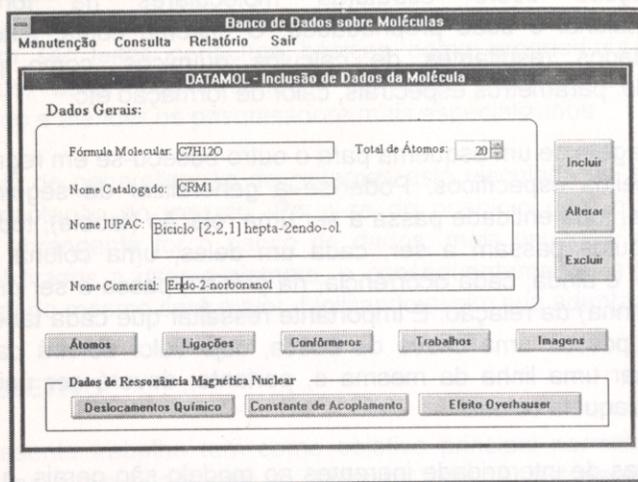


Figura 2 - Janela que exemplifica o padrão *windows* na definição das janelas criadas para o presente trabalho

#### 4. RESULTADOS

Este trabalho resultou num sistema computadorizado a ser utilizado em microcomputadores, que oferece as seguintes vantagens:

- compartilhamento de dados, ou seja, várias pessoas podem ter acesso ao mesmo dado através do microcomputador;
- controle de redundância, onde não são permitidos dados redundantes no banco de dados;
- segurança e autorização, método que protege o sistema e, através de senhas, cria várias "máscaras" em cima dos

dados, de acordo com a importância e necessidade do usuário;

- potencial para impor padrões, ou seja, através de relatórios impressos pelo sistema e de telas de inserção e consultas é possível criar padrões que serão utilizados por todos os usuários.

Anteriormente, foi citada a importância de uma base forte no esquema conceitual para que o projeto fosse desenvolvido com bom desempenho. Certamente, este trabalho é muito estável, pois contou com uma prolongada fase de estudos, onde foram previstas possibilidades de mudanças, que não afetaram o esquema conceitual do projeto.

#### 5. CONCLUSÕES

A utilização de instrumentos computacionais, como sistemas de banco de dados, permite que estudos de outras áreas, nesse caso a Química, obtenham agilidade e garantia de recuperação eficiente e rápida das informações armazenadas.

Atualmente, o sistema está em fase de testes. Devido à necessidade de algumas modificações, parte do trabalho ainda está em desenvolvimento.

Paralelamente, os *lay-outs* dos relatórios são elaborados dentro de especificações e padrões requeridos.

Quando este trabalho estiver concluído, a idéia de que a fusão da química teórica com a informática só tende a contribuir para ambos os lados vai se concretizar em forma de um sistema computadorizado.

## BIBLIOGRAFIA

1. TÜRNER, V. P., Seidl, P.R., EARP, M.V.S. *Banco de Dados de Estruturas Moleculares* In: Jornada de Iniciação Científica, 2, 1994. Rio de Janeiro: CETEM/CNPq, 1994.
2. MICROSOFT FOXPRO FOR WINDOWS: Language Reference, Microsoft Corporation, 1989 - 1993.
3. MICROSOFT FOXPRO FOR WINDOWS: Developer's Guide, Microsoft Corporation, 1989 - 1993.

# PAINEL 15

## *Implementação de Novas Opções do Módulo Gerador de Gráficos do Banco de Dados Metais Pesados*

**Wagner Guimarães Oliveira**

Bolsista de Iniciação Científica, Informática - UFRJ

**Carlos Cesar Peiter**

Orientador: Eng. Metalúrgico

### 1. INTRODUÇÃO

A partir dos resultados obtidos no trabalho "Módulo de Geração de Gráficos para o Banco de Dados Metais Pesados", chegou-se à conclusão que deveria ser dado prosseguimento ao projeto, implementando novas facilidades do módulo gerador de gráficos. O acesso às informações pôde ser feito através do uso do sistema computadorizado desenvolvido para consulta e relatório (1). Essa base faz parte da proposta encaminhada ao PADCT, que objetivava acelerar a interligação do CETEM à Rede de Núcleos de Informação Tecnológica - RNIT através de meios eletrônicos de alta capacidade.

### 2. OBJETIVO

Acrescentar ao Banco de Referências sobre Metais Pesados no Meio Ambiente um módulo gerador de gráficos para facilitar as consultas estatísticas da comunidade interessada, criando novas opções, outros gráficos e diferentes *lay-outs* no antigo módulo.