UNIVERSIDADE FEEVALE

LUCAS ANDRÉ KOCH

##### SICEC: SISTEMA DE INFORMAÇÃO DE CÁLCULOS DE ESPECTROSCOPIA COMPUTACIONAL

###### Anteprojeto de Trabalho de Conclusão

Novo Hamburgo

2017

LUCAS ANDRÉ KOCH

##### SICEC: SISTEMA DE INFORMAÇÃO DE CÁLCULOS DE ESPECTROSCOPIA COMPUTACIONAL

Anteprojeto de Trabalho de Conclusão de Curso, apresentado como requisito parcial

à obtenção do grau de Bacharel em

Ciência da Computação pela

Universidade Feevale

Orientador: Juliano Varella De Carvalho

Novo Hamburgo

2017

# RESUMO

Determinar estruturas moleculares é uma capacidade essencial para a química orgânica, pois assim, seus cientistas são capazes de sintetizar e estudar substâncias. Dentre os métodos utilizados para a determinação destas estruturas está a técnica de espectroscopia experimental. Esta técnica emprega diferentes tipos de eletromagnetismo – como infravermelho e rádio frequência – para determinar as características de uma molécula. Atualmente, o avanço da tecnologia juntamente com métodos teóricos, possibilitam a química computacional realizar simulações destas técnicas, através de cálculos executados por programas de computadores. As simulações são utilizadas para auxiliar a interpretação de dados experimentais ou para prever propriedades moleculares. Este trabalho pretende aumentar a performance deste processo de pesquisa do Grupo de Química Computacional e Bioinformática da Universidade Feevale, o qual faz uso destas simulações em seus trabalhos. Acompanhando as simulações realizadas pelo grupo, foram levantados problemas que podem ser solucionados através da aplicação dos conhecimentos da ciência da computação, como por exemplo, grande quantidade de operações manuais de dados para extração de resultados em arquivos de saída do programa de simulações. Para alcançar a melhora da performance, será realizada uma pesquisa aplicada junto com metodologias da pesquisa experimental para o desenvolvimento e avaliação de um Sistema de Informação de Cálculos de Espectroscopia Computacional para auxiliar os pesquisadores do grupo.

Palavras-chave: Química Computacional, Bioinformática, Espectroscopia, Desenvolvimento de Software, Sistema de Informação.

SUMÁRIO

MOTIVAÇÃO ...........................................................................................................................5

OBJETIVOS ..............................................................................................................................8

METODOLOGIA ......................................................................................................................9

CRONOGRAMA ....................................................................................................................10

BIBLIOGRAFIA ....................................................................................................................11

# MOTIVAÇÃO

Os cientistas da área de Química Orgânica estão constantemente envolvidos na busca de novas substâncias com atividade fisiológica. Assim, é essencial para a química orgânica a capacidade de determinar estruturas moleculares para identificar as novas substâncias encontradas, para que elas possam ser sintetizadas – ou seja, para que sejam produzidas artificialmente – e estudos possam ser realizados para descobrir mais sobre o comportamento biológico delas (BRUICE, 2006).

Atualmente existe uma série de diferentes técnicas utilizadas para a identificação de estruturas moleculares, dentre elas a espectroscopia. Essa técnica é rápida e utiliza uma quantidade muito pequena da substância como amostra, mas que fornece muitas informações sobre a mesma (BRUICE, 2006).

A espectroscopia é o estudo da interação da matéria com a radiação eletromagnética. Existe uma série de diferentes tipos de radiação eletromagnética, cada tipo de radiação está associado a uma faixa particular de energia, e são utilizadas em diferentes técnicas de espectroscopia, como por exemplo a espectroscopia de infravermelho (IV) e a espectroscopia de ressonância magnética nuclear (RMN) (BRUICE, 2006).

A espectroscopia no infravermelho é utilizada para identificar os tipos de agrupamentos funcionais de uma substância. O grupo funcional é o centro de reatividade em uma molécula e confere certas propriedades características a ela, como por exemplo o odor. Utilizando um instrumento chamado espectrômetro de IV, a amostra é irradiada com um feixe de radiação infravermelha fazendo com que as ligações entre os átomos vibrem, assim parte desta radiação é absorvida – a qual está diretamente relacionada aos grupos funcionais que compõem uma estrutura molecular – e parte da radiação é transmitida. O equipamento “enxerga” os dois modos, o que é transmitido e o que é absorvido, e assim gera um espectro que é interpretado pelo analista químico (SILVERSTEIN 2015; BRUICE, 2006; SACKHEIM, 2001; BRUICE, 2014).

A espectroscopia de ressonância magnética nuclear identifica o esqueleto carbono-hidrogênio de uma substância orgânica. Esta técnica utiliza radiação eletromagnética na faixa da rádio frequência, a qual é transmitida pelo espectrômetro de RMN. Quando um núcleo de um átomo é irradiado com esta radiação de mesma frequência em que gira, deixa seu estado fundamental, passando a um estado excitado. Quando a irradiação cessa, o núcleo retorna a seu estado fundamental emitindo energia que é detectada pelo equipamento para, depois de tratamento computacional, gerar um espectro que será interpretado pelo analista químico (SILVERSTEIN 2015; BRUICE, 2006).

Atualmente, progressos significativos estão sendo alcançados ao descrever técnicas experimentais através de métodos teóricos. O desenvolvimento computacional dos últimos anos tem alavancado de forma significativa as capacidades da química computacional, que utiliza estes métodos teóricos para simular as técnicas de espectroscopia através de cálculos realizados por programas de computadores (FERNANDES, 2011; LINDGREN, 2011; BELÉM, 2016; TRSIC, 2009).

Os cálculos e simulações das técnicas experimentais são desenvolvidos para auxiliar a interpretação de dados experimentais, nem sempre de fácil tratamento ou para prever propriedades moleculares. Estes cálculos são desenvolvidos em computadores os mais diversos, desde um computador pessoal doméstico até nos supercomputadores de altíssima capacidade de processamento. Sobre os programas utilizados nestes equipamentos, existem vários, livres ou pagos, caros ou baratos, mais e menos capazes, com diferentes algoritmos de cálculos. Um exemplo destes programas é o Gaussian, o qual é um programa de química quântica, sendo um dos mais utilizados no ramo científico (FERNANDES, 2011; TRSIC, 2009).

No entanto, por mais tecnologia que esteja envolvida nestes processos de simulação, eventualmente faltam algumas ferramentas para auxiliar o químico computacional. Através do acompanhamento do processo das simulações junto ao Grupo de Química Computacional e Bioinformática da Universidade Feevale (GQCBio) – o qual atua no Laboratório de Estudos Avançados em Materiais – foram levantados alguns problemas que os cientistas desta área enfrentam.

Entre os problemas encontrados se destaca a extração manual em arquivos de saída dos dados obtidos através das simulações do programa Gaussian. Este processo gera grande quantidade de operações manuais de dados experimentais e simulados por parte do pesquisador. Esta gigantesca quantidade de operações de dados adiciona um tempo considerável no processo de pesquisa – o qual já é alto, devido ao tempo que o programa leva para calcular a simulação das propriedades das moléculas – e pode levar a erros, já que se trata de processo manual realizado pelos pesquisadores.

Outro problema enfrentado pelo grupo de pesquisa é o armazenamento das informações e dados dos experimentos e simulações já realizadas. Estas informações ficam armazenadas em arquivos, salvos em pendrives e em drives na "nuvem". Esta situação acaba dificultando a localização de determinada simulação ou experimento dentro da coletânea de arquivos armazenados.

Avaliando o cenário descrito criou-se a ideia de aplicar os conhecimentos e técnicas da área da Ciência da Computação para tentar resolver os problemas descritos, através do desenvolvimento de um Sistema de Informação de Cálculos de Espectroscopia Computacional (SICEC). O sistema deverá extrair automaticamente os dados das simulações dos arquivos de saída do programa Gaussian e também deverá guardar em uma base de dados as informações dos experimentos computacionais (simulações) e experimentais, sistematizando assim parte do processo de pesquisa dos cientistas do GQCBio.

OBJETIVOS

Sistematizar parte do processo de pesquisa do Grupo de Química Computacional e Bioinformática da Universidade Feevale, aumentando a performance da equipe e de seus experimentos.

* Levantar os requisitos para o sistema que será desenvolvido;
* Desenhar os protótipos das telas do sistema que será desenvolvido;
* Desenvolver o esquema relacional do banco de dados;
* Desenvolver um sistema de informação para sistematizar os experimentos do GQCBio;
* Extrair automaticamente dados de arquivos de saída do programa Gaussian;
* Salvar as informações dos experimentos em uma base de dados;
* Diminuir o tempo dos experimentos;
* Diminuir a vulnerabilidade a falhas do processo;
* Organizar e facilitar a busca por experimentos realizados.
* Validar o sistema.

# METODOLOGIA

O trabalho tem o intuito de sistematizar parte do processo de pesquisa do Grupo de Química Computacional e Bioinformática da Universidade Feevale, através do levantamento de requisitos e desenvolvimento de um sistema de informação o qual foi batizado de SICEC. Assim, esta pesquisa é caracterizada como aplicada, pois segundo Prodanov (2013), a pesquisa aplicada tem como característica a geração de conhecimentos para a aplicação prática dirigidos a solução de problemas específicos.

Inicialmente, foram realizadas reuniões com o GQCBio para o acompanhamento das simulações, e assim levantar os problemas enfrentados pela equipe durante suas pesquisas. Com os conhecimentos adquiridos através destas reuniões, foram levantados os requisitos do sistema, os quais serviram de base para a criação de documentos preliminares, tais como: casos de uso, esquema relacional do banco de dados e protótipo das telas do sistema – os quais estão sendo validadas com o grupo de pesquisa.

Como próximos passos, será realizado uma pesquisa bibliográfica na literatura existente de química orgânica, química computacional, espectroscopia, engenharia de software e *user experience,* para guiar o desenvolvimento do sistema, e também a tomada de decisão das tecnologias que serão utilizadas no processo. Serão realizadas também novas reuniões com o GQCBio para refinamento de requisitos.

Com as definições das tecnologias que serão empregadas, será iniciado o desenvolvimento do SICEC. Para avaliar a efetividade do sistema e sua validação, após finalizado, será realizado um experimento. Onde os processos de determinada simulação serão realizados sem a utilização do sistema e, posteriormente, os mesmos processos serão executados uma segunda vez com a utilização do sistema. Assim, este trabalho emprega elementos da pesquisa experimental, já que segundo Prodanov (2013), esta submete os objetos de estudo à influência de certas variáveis, em condições controladas e conhecidas pelo investigador, para observar os resultados que a variável produz.

Assim, avaliando os resultados do experimento realizado, procura-se verificar o quanto as técnicas da tecnologia de informação empregadas foram eficazes no aumento da performance do grupo de pesquisadores.

# CRONOGRAMA

Trabalho de Conclusão I

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| Etapa | Meses | | | |
| Mar | Abr | Mai | Jun |
| Escrita do Anteprojeto |  |  |  |  |
| Revisão do Anteprojeto |  |  |  |  |
| Entrega do Anteprojeto |  |  |  |  |
| Reuniões com o GQCBio e Refinamento dos requisitos do sistema |  |  |  |  |
| Pesquisa bibliográfica sobre espectroscopia, *user experience*, engenharia de software e tecnologias empregadas no desenvolvimento do sistema. |  |  |  |  |
| Criação dos documentos do sistema |  |  |  |  |
| Início do desenvolvimento do sistema |  |  |  |  |
| Escrita do TCC 1 |  |  |  |  |
| Revisão do TCC 1 |  |  |  |  |
| Entrega do TCC 1 |  |  |  |  |

Trabalho de Conclusão II

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| Etapa | Meses | | | |
| Ago | Set | Out | Nov |
| Desenvolvimento do sistema |  |  |  |  |
| Aplicação dos métodos para a validação do sistema |  |  |  |  |
| Análise dos resultados |  |  |  |  |
| Escrita do TCC 2 |  |  |  |  |
| Revisão do TCC 2 |  |  |  |  |
| Entrega do TCC 2 |  |  |  |  |

# BIBLIOGRAFIA

BELÉM, F. R. L.; SILVA, D. W. A. da; SENA Jr., D. M. Desenvolvimento de um Programa para Cálculo do Fator de Escala Vibracional. Revista Virtual de Química. n.8, p.313-318, 2016.

BRUICE, Paula Yurkanis. Fundamentos da Química Orgânica, segunda edição. São Paulo: Pearson education do Brasil, 2014.

BRUICE, Paula Yurkanis Química orgânica, quarta edição, volume 1. São Paulo : Pearson Prentice Hall, 2006.

FERNANDES, F. M. S. S. Perspectivas da Química Computacional. Química, n. 123, p.47-53, 2011.

LINDGREN, E. B.; LEAL, K. Z. Aplicação da Química Computacional no Cálculo dos Deslocamentos Químicos de RMN de 13C de Moléculas Orgânicas. Revista Virtual de Química. n.5, p.235-242, 2011.

PRODANOV, Cleber Cristiano. Metodologia do trabalho científico: métodos e técnicas da pesquisa e do trabalho acadêmico, segunda edição. Novo Hamburgo: Feevale, 2013

SACKHEIM, George. Química e Bioquímica para Ciências Biomédicas, Oitava Edição. São Paulo: Malone, 2001.

SILVERSTEIN, Robert M. et al. Spectrometric Identification of Organic Compounds. 7th ed. New Jersey: Wiley, 2015.

TRSIC, Milan; PINTO, Melissa F. Siqueira. Química quântica : fundamentos e aplicações. São Paulo: Malone, 2009.