

Pontifícia Universidade Católica



Aluno:

RODRIGO FERREIRA DE ALMEIDA WALLAUER

Orientador:

Prof. Me. FÁBIO GOMES de ASSUNÇÃO

Trabalho de conclusão de curso I

Estrutura de Dados Winged Edge, e sua aplicação na química orgânica

- Introdução;
- Justificativa;
- Objetivos ;
 - Gerais:
 - Específicos:
- Metodologia;
- Resultados Esperados:
- Ideia teórica;



Introdução

- Segundo Carvalho, Os alunos consideram a Química como um componente de difícil compreensão, devido ao fato de considerarem esta ciência como algo abstrato e completamente fora do seu cotidiano.
- Muito pode estar ligado a didática do professor. Porém um link entre o teórico e o pratico é necessário.
- Pesquisa feita pelo Instituto Luteriano de Ensino Superior – ILES/ULBRA



Introdução

- Duas Etapas
 - Teórico:

Desinteresse dos alunos no conteúdo ministrado pelo professor. Ao final notou-se que a maioria não conseguiam sequer fazer uma relação com o cotidiano.
 - Prático:

Alunos levados para o laboratório de química do Instituto Luteriano de Ensino Superior de Itumbiara – Go.
Maior proveito do conteúdo ministrado.

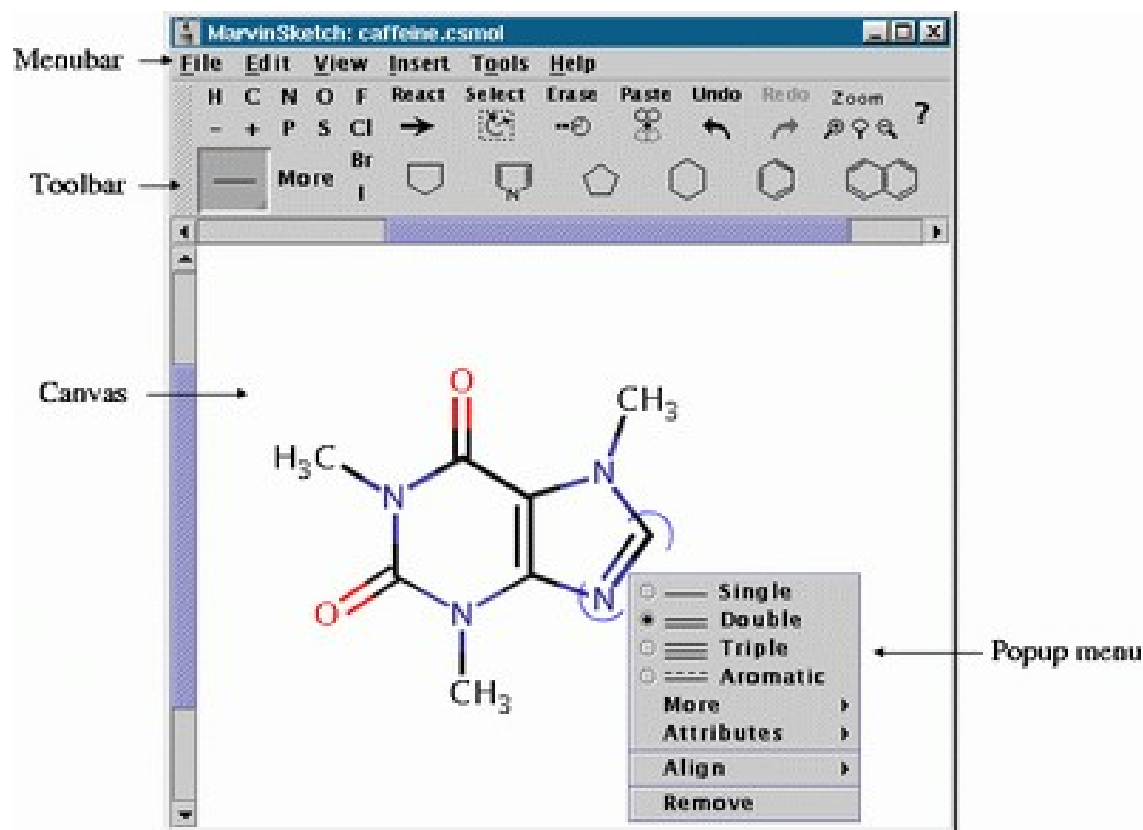


Introdução

- Pratico
 - Não é restrito a somente atividades praticas.
 - Link com aplicativos de computadores.
 - Marvin 5.2.04
 - ChemFormatter
 - Chemstry 4-D



Introdução



Size:260,452K

Language: English

Directory:Chemical Drawing Tools

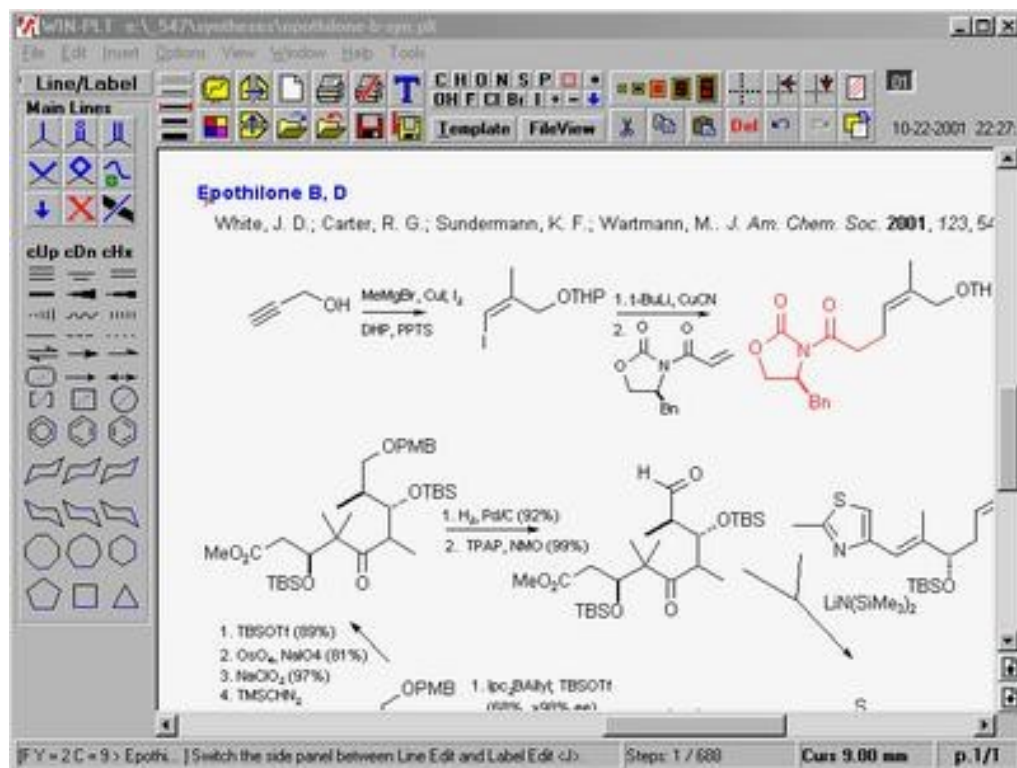
Requirements: Java

Date added: 2015-12-14

Web Site: Home Page



Introdução



Chemistry library ported to Windows especially with .NET Framework.



Introdução

- Construir uma ferramenta que fosse capaz de, para cada formula química, demonstrá-la em diversos ângulos, e que fosse necessário apenas um simples navegador para acessar a esta aplicação ao invés de ter que baixar e instalar uma aplicação para isso.
- Livre de limitações de plataformas



Justificativa

- Desenvolver uma ferramenta que auxilie na didática dos professores a ministrarem o seu conteúdo.
- Seu desenvolvimento em plataforma web , torna sua execução possível em qualquer ambiente, livre de limitações de desempenho, salvo a conexão com a rede, ou Sistemas operacionais.



Objetivos

- Objetivo Geral:
 - Desenvolver uma ferramenta que utiliza a estrutura de dados Winged-Edge para a ilustração de estruturas 3-D, neste caso as fórmulas dos orgânicos, voltadas para o ensino e visualização das mesmas.
- Objetivos Específicos:
 - Aprender um pouco da química orgânica;
 - Revisar conceitos de desenvolvimento WEB;
 - Estudar a plataforma WEB-GL;
 - Estudar a estrutura de dados Winged Edge;
 - Fazer uma ferramenta com a aplicação do Winged-Edge



Justificativa

- Desenvolver uma ferramenta que auxilie na didática dos professores a ministrarem o seu conteúdo.
- Seu desenvolvimento em plataforma web , torna sua execução possível em qualquer ambiente, livre de limitações de desempenho, salvo a conexão com a rede, ou Sistemas operacionais.



Método

- Referencial teórico a partir dos próximos capítulos;
- Pesquisas experimentais;



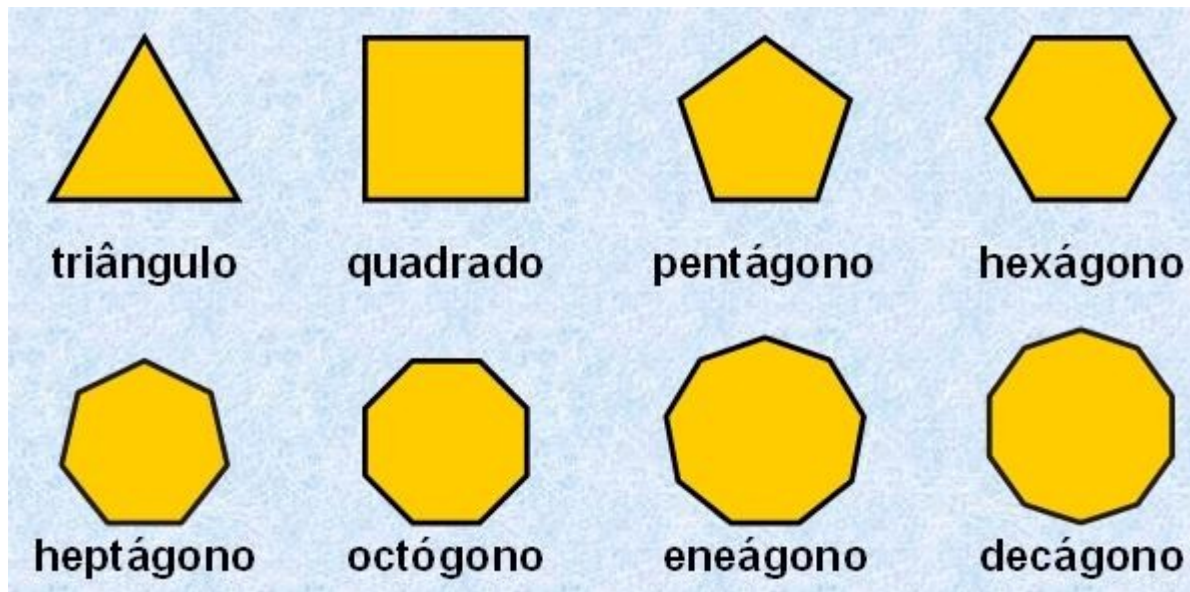
Resultados Esperados

- **Ao fim, espera-se o desenvolvimento de uma ferramenta computacional voltada para o ensino de química, e que esta ferramenta seja útil para a comunidade Acadêmica.**



Ideia Teórica

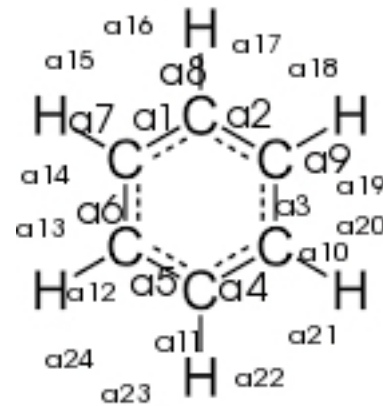
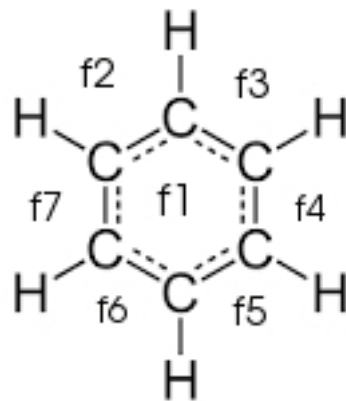
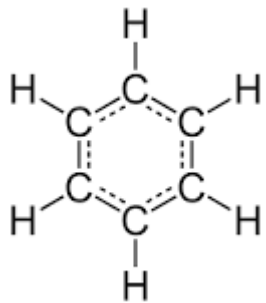
- Processo de digitalização de objetos reais em representações abstratas na visão de computadores;
- Representado em malhas, com detalhes de polígonos



Ideia teórica

- Guardar esta abstração em uma Subdivisão planar.

- Exemplo:
 - C₆H₆



Ideia teórica

faces	F1	F2	F3	F4	F5	F6	F7							
Arestas	A1	A2	A3	A4	A5	A6	A7	A8	A9	A10	A24
vertices	V1	V2	V3	V4	V5	V6	V7	V8	V9	V10	V18

- Por fim, guardar estes dados no formato da estrutura de dados

Representação parcial da estrutura

aresta	PV	SV	PF	SF	ABE	ABD	ACE	ACD
A1	V1	V6	F1	F2	A7	A6	A8	A2
A2	V1	V2	F1	F3	A1	A8	A3	A9
...
...



Ideia teórica

Representação parcial da estrutura

Vertices	Arestas
V1	A1, A7, A6
V2	A1, A2,A8
...	

Tabela de faces, guardam vértices e arestas.



Referências

André L. Marques et al, A importância de aulas práticas no ensino de química para melhor compreensão e abstração de conceitos químicos, 2008, ULBRA, Av. Beira Rio, 1001 Bairro Nova Aurora, Itumbiara-GO.

A. T. Prado, “proposta de ferramenta gráfica para representação de grafos com aplicação de métodos de busca” 2009, Universidade de Campinas. Campinas;

Bruce G. Boumgart, Winged Edge polyhedron representation, 1972, Stanford University

Bryan N. J. et al, Visualizing and Animating the Winged-Edge Data Structure, 2007 Department of Computer Science, Michigan Technological University, Houghton, MI 49931, USA

Referências

E.J. Wartha et al, *A elaboração conceitual em química orgânica na perspectiva da semiótica Peirceana*. 2015 Universidade Federal de Sergipe, Departamento de química fundamental USP.

I.S. Manssour et al, *Introdução a computação gráfica*, 2006, PUCRS

Maria B. Barison, ***POLIEDROS SEMI-REGULARES***, Survey 2007

N. L. Torres et al, *Dificuldade de aprendizagem: além do Muro Escolar*, 2016, Faculdade AMADEUS.

Pedro R. A. Neto et al, Comparação de Estruturas de Dados para Subdivisões Planares Baseada em Transições, 2006, UFPR

Abrigado