

基于 Delphi 结构化语言开发电池设计数据库

李俊, 孙祯圻, 林银钟, 符显珠, 廖代伟

(厦门大学物理化学研究所, 厦门大学化学系, 固体表面物理化学国家重点实验室, 福建, 厦门, 361005)

摘要: 用 Delphi 结构化语言实现了电池设计的数据库系统。知识库采用了 Paradox 数据库, 链接了 TTable 和 TQuery 组件, 为数据库提供了添加、修改和查询等强大功能。推理机采用精确计算与选择相结合的方法来确定符合条件的半反应电对。利用了面向对象的 Windows 编程方式, 窗口界面友好直观和易于使用。而且系统安装后, 可脱离 Delphi 独立运行。

关键词: 电池设计; 数据库系统; 面向对象语言; Delphi

中图分类号: O 6, O 23, TQ 015.9

文献标识码: A

文章编号: 1001-4160(2003)06-778-782

Exploitation of battery design database based on delphi structural language

LI Jun, SUN ZhenQi, LIN YinZhong, FU XianZhu and LIAO DaiWei

(Department of Chemistry, State Key Laboratory of Physical Chemistry on Solid Surfaces, Institute of Physical Chemistry, Xiamen University, Xiamen, 361005, Fujian, China)

Abstract: The database system for battery design was programmed using Delphi 7 structural language. A Paradox-type database was employed in the knowledge base, which provided strong function, such as appending, modification and search etc. To determinate the desire half equation, accurate computation combining with fuzzy selection was adopted in the inference engine. The friendly window interfaces can be easily employed since a windows-type OOD programming method was used. Moreover, after success setup, the database can disengage from Delphi and independently run.

Key words: battery design, database system, object-oriented language, delphi

Li J, Sun ZQ, Lin YZ, Fu XZ and Liao DW. Exploitation of battery design database based on delphi structural language. Computers and Applied Chemistry, 2003, 20(6):778-782.

1 引言

我们已经报道了计算机辅助催化剂分子设计的开创性研究结果^[1-9], 本文将首先报道我们在计算机辅助化学电源设计方面的初步研究结果。化学电源是将物质化学反应产生的能量直接转化为电能的一种装置。其具有能量变换效率高、使用方便、安全可靠等特点。如果能够实现对现有电极电位数据和半反应的快速检索及配对, 将能显著加快新型电池的研究进度, 而通过使用计算机数据库管理系统将能够达到以

上目的。

数据库管理系统是基于信息的管理系统, 作为新一代面向对象的可视化开发工具, Delphi 将面向对象的语言功能与方便的可视化编程环境结合起来。它能够在极短的时间内建立快速、直观、强大的应用程序, 是目前开发客户/服务器数据库应用程序的强有力工具^[10]。Delphi 拥有强大的数据库访问能力, 它提供了一个利用 Borland 数据库驱动引擎 (BDE) 来进行数据库编程的数据构件库; 它支持分布式的数据集, 能够将客户应用程序直接与数据库相

收稿日期: 2003-07-25; 修回日期: 2003-0-28

基金资助: 国家自然科学基金资助项目 (20273053)

作者简介: 李俊 (1979—), 男, 江西人, 博士生, 物理化学专业, 导师: 廖代伟。

连,并将所有的数据库类型都看作客户/服务器模式,在客户端进行数据备份,然后将修改结果直接送到服务器中。通过 BDE 可以访问本地数据库和支持结构化查询语言(SQL)的远程数据库如 Oracle、InterBase 等,也可以连接 ODBC 所支持的各种类型的数据库,并可方便地编写网络数据库。它比可视化开发工具 VB 具有更大的优越性^[11]。

现代结构化查询语言(SQL)已经发展成为一种强大的行业标准数据库查询语言。本数据库的 Paradox 即采用 SQL 作为其 InterBase 引擎的标准编程语言,所使用的 SQL 是 ANSI 标准的一种变形,这与绝大多数其它的解决方案一样。

数据的查询分为两组,这两组分别是用数据定义语言(DDL)和数据处理语言(DML)来创建的。DDL 查询是定义或改变该数据库的结构,而 DML 查询则是直接对包含在该数据库中的数据进行操作。这两类查询都有一些共同的组成元素,例如:命令、子句、操作符和集合函数等。在数据库中,DDL 型的查询有 Create、Drop 和 Alter 等命令,而 DML 型的查询则包括 Select、Insert、Update 和 Delete 等命令。根据其结构和用途,查询可更进一步地分为 Join、Union 和 Parameter 等几种类型。本数据库的一个查询由参数说明、控制语句和选项说明等基本结构组成^[12]。

2 Delphi 在电池设计数据库中的应用

本文所涉及的电池设计数据库是一个综合的信息管理系统。具有数据采集、数据分析、数据处理、输出分析报告和生成查询结果等功能。利用 Delphi7 所提供的可视化集成环境和数据库访问功能完成该项目的设计,实现了系统所需要的数据查询中大量的数据处理和化学计算。主要从以下几个方面对系统进行分析和设计。

2.1 数据库的选择

为满足本系统中所涉及数据的多样性及对数据的完整性和约束性的要求,通过对几种类

型数据库的比较,特采用 Delphi 所提供的 Paradox,它支持多种字段类型,并规定了数据的安全性检查及数据的有效性,可满足系统的要求。

2.2 数据库的建立

数据库采用 Delphi 的数据库建立工具 Database Desktop 建立^[13]。其中为了科学计算和有效数字显示的需要,特别将电极电位使用#BCD 类型存储。数据使用湖南科学技术出版社的《电化学数据手册》^[14]。

2.3 数据的安全性

系统采用用户名与密码授权的方式保证系统的安全性,使用 Delphi 提供的密码和口令设置控件,限制非法用户访问数据库,以防止数据泄露,使数据库有基本的安全保证。

2.4 数据处理

本系统的主要功能之一是将数据存入数据库后进行查询。研究中所采用的是一种简单、直观的交互操作界面。它不仅能提高数据处理的效率,同时还具备使用方便,易于上手等特点。系统使用 TDataSource 控件挂接系统数据库,通过 TQuery 控件实现添加、删除、查询等各种数据处理操作,其结果通过 TTable 表达。同时由于采用 Delphi 的文本编辑框、按钮和菜单技术、滚动文本框等元件,使得程序的用户交互操作界面十分友好,用户只需根据屏幕的提示就可完成对数据的输入、修改、检索和结果分析。图 1、图 2 分别为系统的添加/删除数据和数据查询操作界面。

2.4.1 数据集

本系统使用了 TQuery 和 TTable 数据集,以动态访问数据库的方式取得所需的数据。

2.4.2 数据模块

采用数据模块的方式实现了数据的可重用性,提高了程序运行的效率。通过数据模块对 DataSet 和 DataSource 的封装,可以将它们的属性、事件和代码集中在同一个单元内^[15]。使得不同的程序模块使用不同数据库时,每个程序模块皆可使用数据库访问元件和数据控制元件,以及它们的各种属性、事件和方法,从而增加程序模块的可重用性和代码的可读性,使整

个应用程序具有良好的伸缩性、共享性和可移植性。

2.4.3 数据输入

数据输入部分采用 SaveToDB 进程,通过调用标准 SQL 语句 insert 实现在数据库中动态插入数据的功能,同时基于数据的完整性考虑,对输入的数据完整性进行了检查。

2.4.4 数据删除

程序通过唯一的数据索引和反应式的存储路径,删除指定的数据记录。如果删除失败,则给出失败提示。

2.4.4 数据查询

根据用户对分析的要求,为得到用户希望输出的结果,在程序中采用 Delphi 访问数据库提供的 TQuery 访问格式。它是一种动态数据查询方式,在程序运行中由用户任意指定查询条件。采用 SQL 语句快速查询数据库,从中选取满足条件的数据提交给用户,并返回一个结果集,或进行别的操作。下面提供程序中的一部分,分别对应于向程序中添加数据和进行不同复杂度的查询,源程序简略如下:

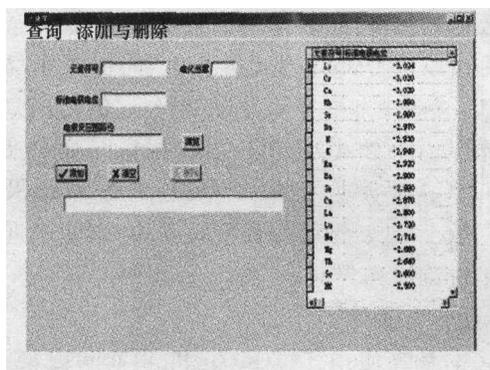


图1 数据库的添加/删除界面

Fig. 1 Add-remove interface

```

procedure
SaveToDB( ID: string; Code: real; FilePath: string; DNum: Integer );
procedure
IDAndRangeQuery( CID: string; Min, Max: real );
procedure TForm1. SaveToDB;
    //加半反应数据添加入数据库
var Query: TQuery; DBID: integer;
begin

```

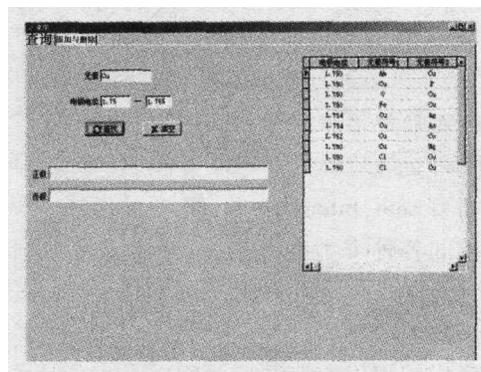


图2 数据库的查询界面

Fig. 2 Data querying interface

```

Query := TQuery. Create( nil );
Query. Close;
Query. SQL. Add( ' Select
Max( DBCode ) from "Chemistry. db" );
//取出库中最后一条记录号
Query. Open;
if Query. Eof then
    DBID := 1
else
    DBID := Query. Fields[ 0 ]. AsInteger + 1;
//将新数据添加的位置定在库的末尾
AddQuery. close;
//以下是添加入库的数据
AddQuery. ParamByName( ' ID ' ). AsString := ID;
    //元素名
AddQuery. ParamByName( ' Code ' ). AsFloat := Code; //库中记录编号
AddQuery. ParamByName( ' Path ' ). AsString := FilePath; //存放反应式图片的路径
AddQuery. ParamByName( ' DBCode ' ). AsInteger := DBID; //电极电位
AddQuery. ParamByName( ' DNum ' ). AsInteger := DNum; //半反应中转移的电子数
AddQuery. Prepare;
AddQuery. ExecSQL; //执行 ADDQuery,调用 SQL 语言的 Add 命令完成数据添加
AddQuery. Close;
end;
procedure
TForm1. IDAndRangeQuery( CID: string; Min, Max: real );
//组合查询,查询含有指定元素参与的,电势差在指定范围内的半反应电对
begin
QueryDataSource. DataSet := QueryIDAndRange;
QueryRangeGrid. Visible := true;

```

```

IDQueryGrid. Visible: = false;
QueryIDAndRange. Close;
//提供查询的参数
QueryIDAndRange. ParamByName('ID'). AsString: = CID;//提供指定的参与反应的元素
QueryIDAndRange. ParamByName('Min'). AsFloat: = Min;//要求电势差的最小值(下限)
QueryIDAndRange. ParamByName('Max'). AsFloat: = Max;//要求电势差的最大值(上限)
QueryIDAndRange. Open; //执行查询
if QueryIDAndRange. Eof then showmessage('没有查找
到相应的记录!');
//当没有查找到符合条的数据时给出提示信息
end;
```

3 结论

3.1 系统特点

技术先进,较为实用:该系统基于 Delphi7 开发,文件较小(大约 10M),可独立运行,并能实现绿色安装/删除。非常适合高校或研究所等不同条件的单位使用。

操作简便,界面友好:系统采用直观友好的 Windows 图形界面,并且不同功能项目之间调用简便易行。对于熟悉 Windows 操作系统者无须或者稍作交代即可掌握。

查询功能完善,实用性强:系统查询功能完善,查询方式灵活,既可按照元素名称查询,又可使用电极电位数据调出符合条件的数据,并通过点击鼠标调出相应项目中的所有记录进行浏览。另外,下列技术还增加了系统的实用性:

- ①使用该系统,通过输入指定电位条件范围,能对符合客户电压要求的可能正负极物质进行初步的遴选。
- ②通过输入所需查询离子或元素的元素符号或离子团表达式,还能对已知物质所有可能存在的电极半反应、电极电位等数据进行查询。
- ③数据录入方便、快捷:本系统除具有查询功能以外,还为以后的数据的添加、修改留下较大的空间。所有的电化半反应数据均 *. bmp 格式保存在程序安装目录的 Pic 子文件夹中。不仅方便于浏览,更为以后的完善工作留有余地。

授权操作、数据安全:对授权用户进入系统

按照权限操作,防止非法进入系统并修改数据库文件。

3.2 应用效果

本系统开发后,经试用发现系统运行稳定、安全、实用、高效。通过使用该软件,不仅能使电池设计者免于陷入对大量无序数据的查找过程,还大大方便了日常电池研究工作中,对由杂质造成的电池急慢性短路、漏液可能原因的查找。

3.3 系统扩展

本系统的开发,实现了对电池设计有关的大量数据的初步遴选。在以后的工作里,只需要将复杂条件表达式化,就可以实现更加复杂条件下的电池设计工作。同时对本系统的数据和部分查询条件进行相应修改之后,也可以胜任包括催化剂数据库,无机元素数据库在内的多种相关化学数据库的工作。

References

- 1 Liao DW, Huang ZN, Lin YZ, Wan HL, Zhang HB and Tsai KR. Computer-aided molecular design of catalysts based on mechanism and structure. *J Chem Inf Comput Sci*, 1996, 36(6):1178-1182.
- 2 Huang Zunnan, Liao Daiwei, Zhang Hongbin, Wan Huilin and Tsai Khirui. Expert system of molecular design of catalyst and its application in catalyst design of oxidative coupling of methane. *Computers and Applied Chemistry*, 1996, 13(3):167-171.
- 3 Huang Zunnan, Liao Daiwei, Wan Huilin, Zhang Hongbin and Tsai Khirui. Computer-aided molecular design for catalyst components. *Computers and Applied Chemistry*, 1997, 14(1):12-16.
- 4 Fang Ning, Sun Jie, Jiang Yangbo, Yi Jun and Liao Daiwei. Universal Database and User Interface for Catalyst Design. *Computers and Applied Chemistry*, 1999, 16(2):105-110.
- 5 Jin Hai, Cai Yun, Lin Jingdong, Chen Hongbo and Liao Daiwei. Expert system of molecular design for metal catalysts. *Computers and Applied Chemistry*, 2000, 17(4):327-330.
- 6 Fang Ning, Sun Jie, Jiang Yangbo, Lin Jingdong, Chen Hongbo and Liao Daiwei. Universal knowledge-base and user interface for molecular design of catalyst. *J Xiamen Univ NS*, 2000, 39(1):45-51.
- 7 Liao Daiwei, Huang Zunnan, Lin Yinzong, Cong Wenhua, Wan Huilin, Zhang Hongbin and Tsai Khirui. Molecular design program for vatalyst composition of oxidative coupling of methane. *J Xiamen Univ, NS*, 1996, 35(1):133-136.

- 8 Huang Zunnan, Liao Daiwei, Lin Yinzong, Zhang Hongbin, Wan Huilin and Tsai Khirui. Design of inference engine in expert system for molecular design of catalyst. *J Xiamen Univ NS*, 1996, 35(3):389-392.
- 9 Huang Zunnan, Liao Daiwei, Lin Yinzong, Zhang Hongbin, Wan Huilin and Tsai Khirui. Construction of data base and knowledge base in expert system for molecular design of catalyst. *J Xiamen Univ NS*, 1996, 35(5):739-744.
- 10 Tan Peng. Delphi 5.0 Database application development and programming technique. Wuhan: Huazhong University of Science and Technology Press, 2000.
- 11 Feisi Scientific and Technological Development Centre. Delphi 7 Database Application Development. Beijing: Peking Publishing House of Electronics Industry, 2003.
- 12 Qinghong Studio. Delphi Database Development. Beijing: China Machine Press, 2000.
- 13 Liu Haitao, et al. Delphi 5.0 Programming on Internet and Database. Beijing: Tsinghua University Press, 2001.
- 14 Zhu Yuanbao. Electrochemical Data Handbook. Changsha: Hunan Science & Technology Press, 1985.
- 15 Feisi Scientific and Technological Development Centre. Delphi 6 Database Application and Development. Beijing: Peking Publishing House of Electronics Industry, 2002.
- 附中文参考文献**
- 2 黄遵楠, 廖代伟, 张鸿斌, 万惠霖, 蔡启瑞. 催化剂分子设计专家系统 ESMDC 及其在甲烷氧化偶联催化剂设计中的应用. *计算机与应用化学*, 1996, 13(3):167-171.
- 4 方宁, 孙杰, 江扬波, 易军, 廖代伟. 催化剂分子设计的通用数据库与用户界面. *计算机与应用化学*, 1999, 16(2):105-110.
- 5 金海, 蔡云, 林敬东, 陈鸿博, 廖代伟. 金属催化剂分子设计专家系统. *计算机与应用化学*, 2000, 19(4):327-330.
- 6 方宁, 孙杰, 江扬波, 林敬东, 陈鸿博, 廖代伟. 催化剂分子设计的通用知识库与用户界面. *厦门大学学报(自然科学版)*, 2000, 39(1):45-51.
- 7 廖代伟, 黄遵楠, 林银钟, 龚文华, 万惠霖, 张鸿斌, 蔡启瑞. 甲烷氧化偶联金属氧化物催化剂组份分子设计程序. *厦门大学学报(自然科学版)*, 1996, 35(1):133-136.
- 8 黄遵楠, 廖代伟, 林银钟, 张鸿斌, 万惠霖, 蔡启瑞. 催化剂分子设计专家系统中推理机的设计. *厦门大学学报(自然科学版)*, 1996, 35(3):389-392.
- 9 黄遵楠, 廖代伟, 林银钟, 张鸿斌, 万惠霖, 蔡启瑞. 催化剂分子设计专家系统中数据库和知识库的建立. *厦门大学学报(自然科学版)*, 1996, 35(5):739-744.
- 10 谭鹏. Delphi 5.0 数据库应用开发与编程技巧. 武汉: 华中理工大学出版社, 2000.
- 11 飞思科技产品研发中心. Delphi 7 数据库应用开发. 北京: 电子工业出版社, 2003.
- 12 清宏计算机工作室. Delphi 数据库开发. 北京: 机械工业出版社, 2000.
- 13 刘海涛, 等. Delphi 5.0 因特网与数据库程序设计. 北京: 清华大学出版社, 2001.
- 14 朱元保. 电化学数据手册. 长沙: 湖南科学技术出版社, 1985.
- 15 飞思科技产品研发中心. Delphi 6 数据库开发. 北京: 电子工业出版社, 2002.