

## 5 Evolução

Visando simplificar o eixo medial de união de bolas, buscamos uma evolução que preserve os grandes elementos geométricos das polibolas. A desconexão ou não das formas durante a evolução é uma característica bastante importante que pode ser desejada ou não dependendo dos objetivos das aplicações do movimento. Outra característica a ser observada é o fechamento dos buracos, quando uma determinada forma os possui. Tal característica pode ser útil na detecção de buracos “pequenos” e “grandes” de uma forma.

### 5.1 Possíveis Aplicações

Muitas das funções de uma proteína estão relacionadas com as interações entre proteínas e outras moléculas. Em outras palavras, as proteínas são as peças de um enorme quebra cabeças cuja solução requer, dentre outras coisas, um bom entendimento das formas envolvidas. Um dos modelos mais simples para a representação de moléculas consiste em representar um átomo por uma bola cujo raio depende do tipo de átomo. Este modelo é chamado de Modelo de Van der Waals. Por esta razão, em Biomatemática o estudo computacional de união de bolas é bastante importante para entender interações moleculares e desenvolver remédios. Sendo assim, esperamos que os movimentos propostos sejam úteis em Biologia para a simulação de encaixes de moléculas, pois trabalhar com uma molécula não simplificada é inviável computacionalmente. Neste caso, a desconexão da forma é indesejável, pois gostaríamos de ter uma versão simplificada do objeto.

Outra aplicação possível é a análise de formas. Neste caso, a desconexão pode significar uma divisão importante do objeto. Por exemplo, esta pode ser útil na identificação de “pescoços” de uma forma.

Esperamos também que esta simplificação possa ser útil na visualização e no armazenamento de objetos, criando uma hierarquia de simplificações de união de bolas.

Nesta dissertação, no entanto, não estudamos nenhuma das possíveis aplicações para as evoluções propostas. Este trabalho possui um caráter investigativo, visando apenas iniciar o estudo de evoluções de polibolas.

## 5.2 Evolução baseada no Eixo Medial

Há muitas opções para a evolução das polibolas. Fizemos vários testes de diferentes evoluções que obedeceram as direções do eixo medial e que variaram de acordo o tipo das bolas.

A escolha do eixo medial como base para as evoluções sugeridas deve-se ao fato de que o eixo medial de polibolas pode ser computado exatamente e tem uma estrutura combinatória simples que pode ser facilmente representada no computador. Além disso, as ligações do eixo medial sugerem, naturalmente, direções de movimento.

Em uma união de bolas, possuímos dois tipos de bolas classificadas com relação ao eixo medial: aquelas cujo centro faz parte e aquelas cujo centro não faz parte dele. Veja a figura 5.1.

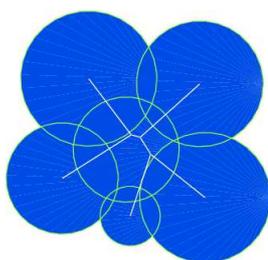


Figure 5.1: Nem todos os centros de bolas são nós do eixo medial

O movimento de uma bola se caracterizou pela variação de seus dois atributos: centro e raio.

Em todas as maneiras de evoluir testadas, quando foi o caso, o raio de uma bola variou segundo a equação

$$r_t = \sqrt{r^2 - 2t} ,$$

onde  $t$  representa um passo de tempo fixo. Esta equação representa o movimento por curvatura de uma bola. Escolhemos o movimento por curvatura porque ele tem como característica a preservação da topologia da forma e sua convexificação gradual.

Já a velocidade do movimento, isto é, o deslocamento do centro de cada bola, foi calculada obedecendo a direção das ligações do próprio eixo medial.

Para cada bola a ser movimentada, tomamos todas as ligações do eixo medial incidentes a ela e suas direções unitárias  $e'_i$ s correspondentes, podendo atribuir ou não um peso  $w_i > 0$  a cada uma delas. Calculamos a soma vetorial de todos os  $e'_i$ s e obtivemos a direção desejada do deslocamento de uma bola.

Assim, para cada bola a ser movimentada, temos o seguinte deslocamento :

$$d_t = tD ,$$

onde  $D = \sum w_i e_i$  tal que  $w_i > 0$  é o peso da direção correspondente e  $t$  representa um passo de tempo fixo.

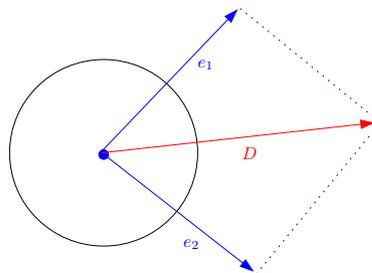


Figure 5.2: Cálculo da direção do movimento de uma bola

Consideramos um movimento contínuo e procuramos manter a escrita mínima das polibolas em cada etapa da evolução.

### 5.3

#### **Variações do Movimento**

Testamos três maneiras diferentes de evolução de polibolas que variaram de acordo com o tipo de bola. As variações foram propostas com o objetivo de tentar diminuir o número de desconexões da forma, tentando obter uma versão conexa simplificada do objeto.

#### **Primeiro Movimento**

Todas as bolas que fazem parte do eixo medial têm seus centros deslocados e seus raios alterados como descrito anteriormente.

#### **Segundo Movimento**

Todas as bolas que fazem parte do eixo medial têm seus centros deslocados e somente aquelas que possuem apenas uma ligação do eixo medial incidente a elas têm seus raios alterados.

#### **Terceiro Movimento**

Apenas as bolas que fazem parte do eixo medial e que possuem uma ou duas ligações incidentes a elas têm seus centros deslocados e somente aquelas que possuem uma ligação do eixo medial incidente a elas têm seus raios alterados.

## 5.4 Sobre a Implementação

As condições para a evolução de uma bola são verificadas em cada etapa em todas as três variações do movimento.

Neste sentido, observamos que a implementação fica mais “cara” à medida em que impomos mais condições para evolução de uma bola. Assim, o primeiro movimento é o mais rápido computacionalmente e o terceiro o mais lento.

Em todos os nossos exemplos, estamos considerando um passo de tempo fixo igual a 0,001 e atribuímos pesos  $w_i$ 's constantes e iguais a soma dos comprimentos de todas as ligações do eixo medial. Note que poderíamos considerar  $w_i = 1$ , para todo  $i$  e tomarmos o passo de tempo fixo  $t$  de acordo com os nossos objetivos.