5
Movimentos baseados no Eixo Medial

O eixo medial representa as características da união de bolas. Usando este fato, podemos simplificar a união diretamente a partir do eixo medial. Assim, buscamos deformações definidas por movimentos locais ao longo do eixo medial, seguindo (4, 5, 7) no caso bidimensional. Além disso, alguns dos eventuais defeitos do movimento (instabilidade numérica, mudanças topológicas) podem ser corrigidos diretamente no eixo medial.

Para calcular o movimento, guardamos o eixo medial na forma de grafo, cujos nós são os vértices do eixo medial e as arestas ligam vértices adjacentes. Os nós podem (ou não) corresponder aos centros das bolas originais e/ou serão pontos criados pelo eixo medial. Na estrutura, dois vértices só serão adjacentes quando suas respectivas bolas tiverem interseção.

5.1
Motivação

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. 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.

Muitas das funções de proteínas, por exemplo, estão relacionadas com as interações de uma série de moléculas, responsáveis pelo metabolismo e estrutura dos organismos vivos. Entender como os processos biológicos ocorrem no nível celular implica entender o papel funcional das diversas proteínas envolvidas nesses processos. A grande maioria das reações metabólicas ocorre através de encaixes do tipo chave-fechadura entre moléculas protéicas e, por esse motivo, a função das proteínas está geralmente relacionada à sua conformação tridimensional. Assim, outra aplicação possível é a análise de formas, principalmente para visualização e armazenamento de objetos, criando uma hierarquia de simplificações de bolas. Para mais informações sobre o assunto, indicamos a referência (6).

Essa dissertação, no entanto, possui caráter investigativo, visando apenas iniciar o estudo de evolução de bolas no espaço tridimensional.

5.2 Grafo de suporte

Os movimentos realizados caracterizaram-se pela variação do raio e da posição das bolas. Temos três tipos de objetos:

(i) As bolas originais que são vértices do eixo medial.
(ii) As bolas originais que não são vértices do eixo medial.
(iii) Os vértices do eixo medial que não são bolas originais.

Como os nós do grafo são os vértices do eixo medial, todo o cálculo do movimento pode ser feito no grafo. Como os objetos do tipo iii, isto é, os vértices do eixo medial que não são bolas originais, são derivados das bolas originais, nada precisa ser feito para eles. Porém, eles contribuem ao movimento, e podemos associá-los a um raio, definido como o raio da bola inscrita na união de bolas. Temos, assim, uma estrutura uniforme de grafo, onde todos os nós são bolas.

5.3 Bases do movimento

No nosso contexto, o movimento para os objetos do tipo i e do tipo ii é definido localmente, envolvendo apenas as bolas vizinhas ao objeto. Nesta primeira investigação, consideramos apenas objetos que estão diretamente adjacentes ao longo do eixo medial. Em trabalhos futuros, poderão ser consideradas bolas vizinhas no 0-shape e, em particular, para calcular a curvatura num ponto do bordo da união de bolas. Para cada bola $b = (x, r)$ do tipo i, com centro x e raio r, denotamos por $\mathcal{A}_b$ o conjunto de nós (bolas de tipo i ou iii) adjacentes no grafo.

A cada iteração, a nova posição das bolas depende a priori das bolas vizinhas. É o caso das bolas do tipo (i). Porém, as bolas de tipo (ii) não têm vizinho, e portanto a nova posição depende apenas delas mesmo. Assim, o movimento pode ser definido esquematicamente pelas funções f^i e f^{ii}:

$$\forall b = (x, r) \in Type_i, \qquad x \leftarrow f_x^i\left(b, \mathcal{A}_b\right), \quad r \leftarrow f_r^i(b, \mathcal{A}_b).$$

$$\forall b = (x, r) \in Type_{ii}, \qquad x \leftarrow f_x^{ii}(b), \quad r \leftarrow f_r^{ii}(b).$$

5.4
Movimento simples

Cada passo do movimento de contração pode ser definido como um conjunto de nível $-k$ da transformada em distância da forma. Isto corresponde a diminuir o raio das bolas de um fator $d < 1$ e aproximar os centros das bolas. No nosso contexto, podemos aproximar este movimento definindo f^i e f^{ii} por:

$$f_x^i(b, \mathcal{A}_b) = d \cdot \sum_{(x',r') \in \mathcal{A}_b} \vec{xx'}, \qquad f_r^i(b, \mathcal{A}_b) = d \cdot r$$

$$f_x^{ii}(b) = x, \qquad f_r^{ii}(b) = d \cdot r$$

Movimentos de dilatação podem ser definidos de maneira similar usando um fator $d > 1$. Neste caso não precisaríamos manter uma condição de amostragem, pois as bolas não se desconectarão, enquanto no movimento de contração poderia ser usado para aproximar melhor o caso usual.

5.5
Condição de amostragem

Para evitar o desconectar da forma que está sendo deformada e também para evitar a dependência demasiada da discretização do objeto, é possível incluir no movimento uma condição de amostragem. Uma amostragem densa demais é naturalmente filtrada pela triangulação regular, onde bolas cobertas por bolas vizinhas não são trianguladas. Para compensar uma amostragem esparsa demais, é possível incluir bolas novas na união, seguindo (7).

Se duas bolas b e b', adjacentes no eixo medial, são distantes mais do que o raio da menor bola ($|x, x'| < \min(r, r')$), uma bola extra b^+ será inserida na união, no meio das duas bolas b e b': $x^+ = \frac{1}{2}(x + x')$, $r^+ = \frac{1}{2}(r + r')$.

Esta condição de amostragem impede que o eixo medial se desconecte, o que pode ser interessante ao estender movimentos por curvatura em 3D.