

1

Introdução

O estudo computacional de uniões de bolas possui aplicações em diversas áreas da Matemática. Em Geometria Computacional, por exemplo, toda superfície pode ser bem aproximada por uma união de bolas, vide [9]. E o *power crust*, vide [10], é uma aproximação da superfície a partir das polibolas que aproxima o interior e o exterior da superfície.

O objetivo principal deste trabalho é propor uma evolução de união de bolas que simplifique a sua forma procurando preservar seus grandes elementos geométricos. A desconexão ou não das formas é um aspecto essencial da evolução. Em alguns casos, pode significar uma divisão importante do objeto, vide [7]. Em outros casos, pode ser indesejada, pois gostaríamos de ter uma versão conexa simplificada da forma. Por esta razão, estamos estudando os movimentos propostos sem a preocupação de preservar a conexidade a qualquer custo. Observamos que as desconexões estão ocorrendo, na maioria das vezes, em “pescoços” da forma. Essa é uma característica desejável do movimento. O fechamento de buracos é um outro aspecto que também pode ser bastante útil quando estamos interessados em detectar buracos “grandes” e “pequenos” de uma união de bolas.

Esperamos que este estudo seja importante em Biologia, pois 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. Por esta razão, este tipo de simplificação pode ser importante para a simulação de encaixes de moléculas, já que trabalhar com uma molécula não simplificada é inviável computacionalmente. Aplicações biológicas da Topologia Computacional podem ser encontradas em [5]. Além disso, esta simplificação também pode ser útil na visualização e no armazenamento de objetos. Mais precisamente, objetivamos criar um espaço de escala para união de bolas, que é uma hierarquia de simplificações dessa união de bolas. Nesta dissertação, no entanto, não estudamos nenhuma das possíveis aplicações do movimento. Este trabalho possui um caráter investigativo, visando apenas iniciar o estudo de evoluções de polibolas.

Consideramos apenas o caso 2D por ser mais fácil de testar as idéias e, principalmente, por ser mais fácil de implementar. No caso 2D, um dos espaços de escala para formas mais utilizado é o gerado pelo movimento por curvatura. Algumas propriedades importantes desse movimento são a preservação da topologia da forma e a sua convexificação gradual. Neste trabalho, procuraremos gerar movimentos com tais características .

O grande interesse em descrever a forma de um objeto 2D ou 3D através de seu eixo medial deve-se ao fato de que este é uma estrutura geométrica mais simples e que preserva várias características da forma. Por exemplo, o eixo medial mantém o número de componentes conexas e o número de buracos, sendo na realidade um retrato homotópico da forma original. Também preserva um pouco da geometria do objeto, representando bem suas cavidades. A transformação do eixo medial (MAT) representa uma forma através do eixo medial e da distância de cada ponto do eixo à fronteira. Parece bastante promissor, então, modificarmos a forma através de alterações no MAT, isto é, no eixo medial e na função raio.

No caso de polibolas, o eixo medial pode ser computado exatamente e tem uma estrutura combinatória simples que pode ser facilmente representada no computador. Sendo assim, simplificar a forma a partir do eixo medial e da função raio parece bastante natural.

O primeiro movimento proposto simplificou bem as polibolas, mas desconectou-as muito. As variações do movimento tiveram como objetivo diminuir a quantidade de desconexões. Consideramos que a escolha da velocidade dos centros de bolas e a variação dos raios é um problema relevante que começamos a enfrentar neste trabalho. Mas, neste momento, o estudo ainda está incompleto e aberto a novas propostas.

A implementação de eixos mediais de polibolas não é um problema simples. Em particular, esta torna-se difícil por estar diretamente relacionada à implementação de triangulações de Delaunay e de α -shapes. Por esta razão, encontramos várias dificuldades na implementação do programa para a evolução das polibolas. Tivemos problemas numéricos e também com pontos em posição não-geral, pois trabalhamos com um conjunto de pontos que é resultado das interseções entre as bolas. No entanto, conseguimos resolver, razoavelmente, estes problemas e o programa implementado tem funcionado bem, pelo menos quando consideramos um número limitado de bolas. As soluções encontradas foram descritas neste trabalho.

Esta dissertação foi dividida em sete capítulos. No segundo capítulo foram apresentados os principais conceitos teóricos de Geometria Computacional necessários para o que vem a seguir, que são a definição de α -shape e as

propriedades do eixo medial de união de bolas. O terceiro capítulo contém a estrutura de classes para a implementação do eixo medial em C++. O quarto capítulo discute alguns dos problemas surgidos na implementação do eixo medial de união de bolas. O quinto capítulo descreve a evolução proposta e o sexto capítulo apresenta alguns dos resultados obtidos. O sétimo capítulo fecha este trabalho apresentando algumas conclusões e trabalhos futuros.