

PAINEL 9

Criação de Algoritmo para Visualização de Moléculas no Estilo Ball e Ball and Stick

Flávio Pimentel Duarte

Bolsista de Inic. Científica, Informática, UFRJ

Peter Rudolf Seidl

Orientador, Químico Industrial, Ph.D.

Márcia Viana de Sá Earp

Co-orientadora

1. INTRODUÇÃO

Com essa intenção, foi criado um *software* para construir, visualizar e editar moléculas na forma tridimensional. Ele foi desenvolvido, utilizando-se técnicas de computação gráfica. Ele foi escrito em linguagem C (1,2). Utilizou-se compilador *MICROSOFT C/C++* e o *WINDOWS SOFTWARE DEVELOPMENT KIT (SDK)* para utilização de uma interface com o usuário *Windows™* (3-5).

Com o estudo dessa técnica foi possível criar algoritmos de visualização tridimensional das moléculas com efeitos dinâmicos, como a rotação. As moléculas podem ser representadas em diversos estilos *stick*, *ball* e *ball and stick*. Além disso, o programa permite ainda, a utilização de vários tipos de rótulos (*labels*) para os átomos da molécula, como o tipo do átomo e numeração.

2. OBJETIVO

A modelagem molecular por computadores tem como objetivo auxiliar químicos com ferramentas para estudos de concepção e análise de estruturas moleculares.

3. METODOLOGIA

Estando pronta a parte de construção e visualização no estilo *stick* e *ball and stick*, foi iniciada a criação de um algoritmo para a visualização no estilo *ball*.

Tanto no estilo *ball* quanto no *ball and stick*, os átomos são representados por esferas, sendo que no estilo *ball* as esferas são desenhadas com raio igual a 3/4 do raio de van der Waals (Figura 1a), por isso as esferas acabam por se interceder, não permitindo, assim, a visualização da ligação entre os átomos.

Já no estilo *ball and stick*, as esferas são desenhadas com raio igual a 1/4 do raio de van der Waals, e as ligações são traços que partem do centro de uma esfera para o centro da outra (Figura 1b).

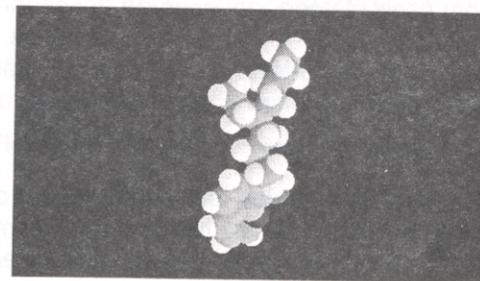


Figura 1a - Molécula vista no estilo *ball*

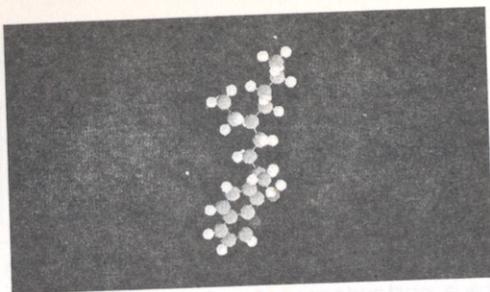


Figura 1b - Molécula vista no estilo *ball and stick*

Essa parte do desenvolvimento do *software* tem como objetivo criar um algoritmo eficiente, tanto em qualidade de imagem quanto em velocidade de desenho das moléculas.

O desenvolvimento do algoritmo para representação dos estilos *ball* e *ball and stick* despendeu bastante tempo, pois os algoritmos apresentavam-se lentos e/ou com visualização deficientes. Como ponto de partida, criou-se um algoritmo (Figura 2) que desenha as esferas ponto a ponto. Esse algoritmo foi desprezado a princípio, pois imaginava-se ser ele muito lento. Foram então testados outros métodos. Tentou-se então um algoritmo no qual representa-se a esfera através de um poliedro. Com esse método, ao invés de desenhar ponto a ponto, desenhava-se face a face, esperando-se, assim, aumentar a velocidade do desenho. No entanto, não houve aumento da velocidade e, além disso, obteve-se uma pior resolução.

Tendo testado esses dois métodos, decidiu-se utilizar o método do desenho face a face para o estilo *ball and stick*, começando-se a pensar como fazer a interseção das esferas no estilo *ball*, uma vez que o cálculo da interseção por esse método era muito complicado.

Pensou-se então em utilizar cálculos matemáticos para descobrir qual o círculo de interseção das esferas e, assim, calcular o arco que representava a interseção das mesmas. Esse arco seria a metade do círculo. Observando a Figura 2, é possível visualizar o círculo em questão; porém, esse método

se complicou ao pensar que com a inclinação dos átomos, a projeção do círculo no plano XY seria uma elipse, dificultando ainda mais os cálculos necessários para a dedução do arco a ser calculado.

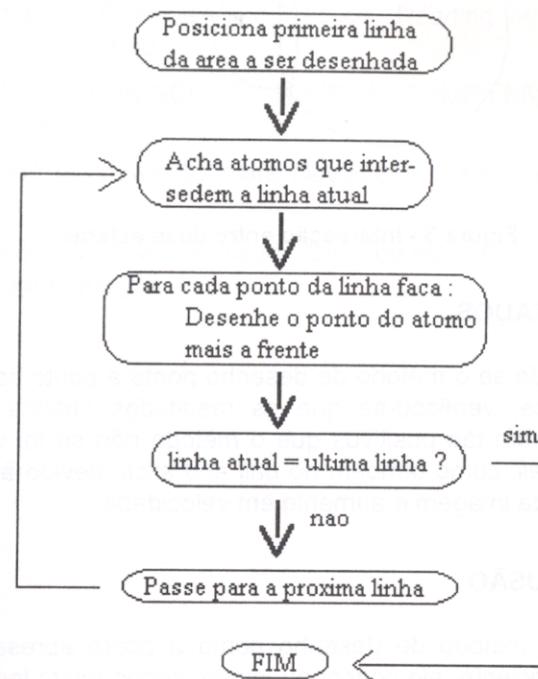


Figura 2 - Algoritmo de desenho ponto a ponto

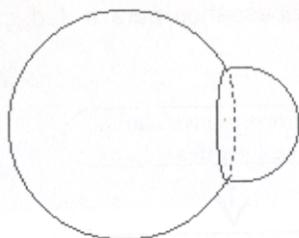


Figura 3 - Interseção entre duas esferas

4. RESULTADOS

Comparando-se o método de desenho ponto a ponto com o de face a face, verificou-se que os resultados obtidos com o primeiro foram tão positivos que o método não só foi utilizado no estilo *ball*, como também no *ball and stick*, devido à melhor qualidade da imagem e aumento em velocidade.

5. CONCLUSÃO

Apesar do método de desenho ponto a ponto apresentar-se bastante eficiente, ele continuou, ainda, sendo muito lento para permitir a rotação com a molécula nesse estilo de visualização, optando-se, assim, em desenhar a molécula no estilo *stick* enquanto a mesma estiver sendo rotacionada.

BIBLIOGRAFIA

1. MURRAYS III, W. H., PAPPAS, C. H. Programação para Windows versão #, McGraw Hill.
2. FOLEY, J. A., VAN DAM, J. F., HUGHES, J. Computer Graphics: Principles and Practice, Reading, MA: Addison - Wesley, 1990.
3. MICROSOFT WINDOWS SOURCE COMPILER. USER'S GUIDE.
4. Microsoft Windows Software Development Kit, Environment and Tools.
5. Microsoft Windows Software Development Kit - Guide to Programming.