

**MOL3D: UM SISTEMA GRAFICO DE APOIO A VISUALIZAÇÃO DO
COMPORTAMENTO ESPACIAL DE ESTRUTURAS MOLECULARES**

Autores : Evandro de Barros Costa

Universidade Federal de Alagoas

Departamento de Matemática Aplicada

Campus A.C. Simões, Tabuleiro do Martins

57000 Maceió-AL.

Paulo Roberto Campos de Araújo

Universidade Federal da Paraíba

Departamento de Engenharia Elétrica

Cx. Postal 10105

58100 Campina Grande-PB.

RESUMO

O presente trabalho descreve a concepção e a implementação de MOL3D, um "software" gráfico de apoio à visualização do comportamento espacial de estruturas moleculares". MOL3D tem seus algoritmos implementados na Linguagem Pascal, rodando em microcomputadores da linha IBM-PC.

1. INTRODUÇÃO

Sistemas computacionais para visualização de estruturas moleculares estão se tornando muito importantes como ferramenta auxiliar no ensino e na pesquisa, nas áreas de química, de bioquímica e outras áreas correlacionadas.

Dada a importância acima, resolveu-se partir para a especificação e implementação de um software, cujo propósito geral seria o de fornecer ao usuário recursos adequados para se lidar com

o fenômeno espacial das moléculas.

Procurou-se, assim, desenvolver um ambiente confortável, onde o usuário contasse com uma interface amigável, biblioteca de aminoácidos e de moléculas, recursos para armazenamento e leitura de telas, visualização de aminoácidos ou moléculas inteiras, bem como a movimentação em tempo real de aminoácidos ou moléculas.

2. ESTRUTURA FUNCIONAL

Em linhas gerais, o funcionamento de MOL3D pode ser descrito, conforme mostra o diagrama hierárquico da figura 2.: inicialmente é exibido um "Menu Geral", com cinco opções disponíveis ao usuário. Essas opções são :

1. Vistas de molécula ;
2. Vistas de aminoácido ;
3. Manipulação de tetraedros ;
4. Animação ;
5. Ajuda.

Escolhendo-se a opção 1 do "Menu Geral", é exibido um outro menu, com a biblioteca de moléculas, onde o usuário seleciona uma molécula para trabalho. Escolhida uma molécula aparece outro menu, exibindo os modelos geométricos que o sistema põe à disposição do usuário para representação das moléculas. Uma vez escolhido o modelo geométrico desejado, aparece o último menu desta sequência, com a apresentação de seis diferentes pontos de visualização da molécula (Z+, Z-, X+, X-, Y+, Y-) e as opções de ampliação ("Zoom+") e redução ("Zoom-") e deslizamento da molécula.

Escolhendo-se a opção 2 do "Menu Geral", aparece um outro menu, correspondente à biblioteca de aminoácidos, onde o usuário seleciona um aminoácido. Escolhido o aminoácido, apresenta-se um outro menu, exibindo os modelos geométricos para representação do

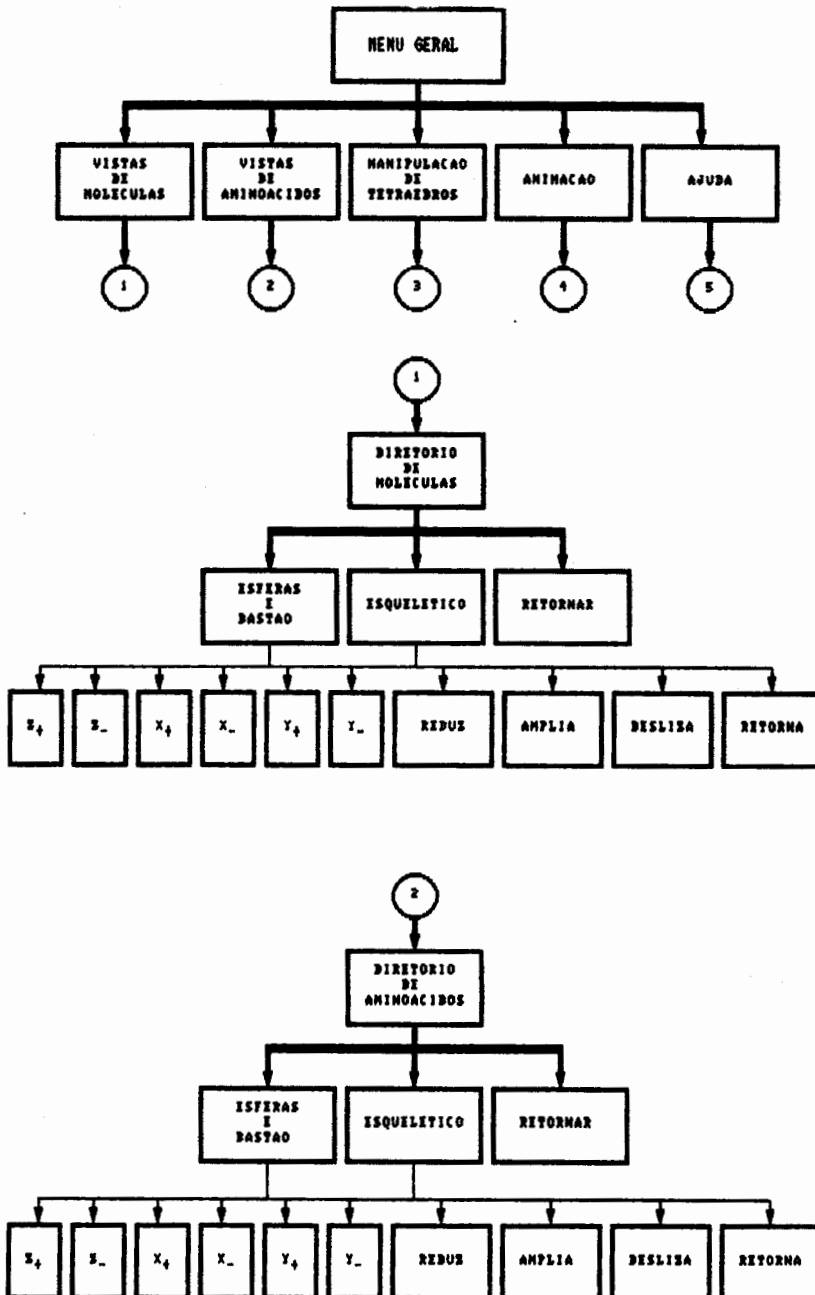


Figura 2.: Diagrama hierárquico do funcionamento de HOL3D.

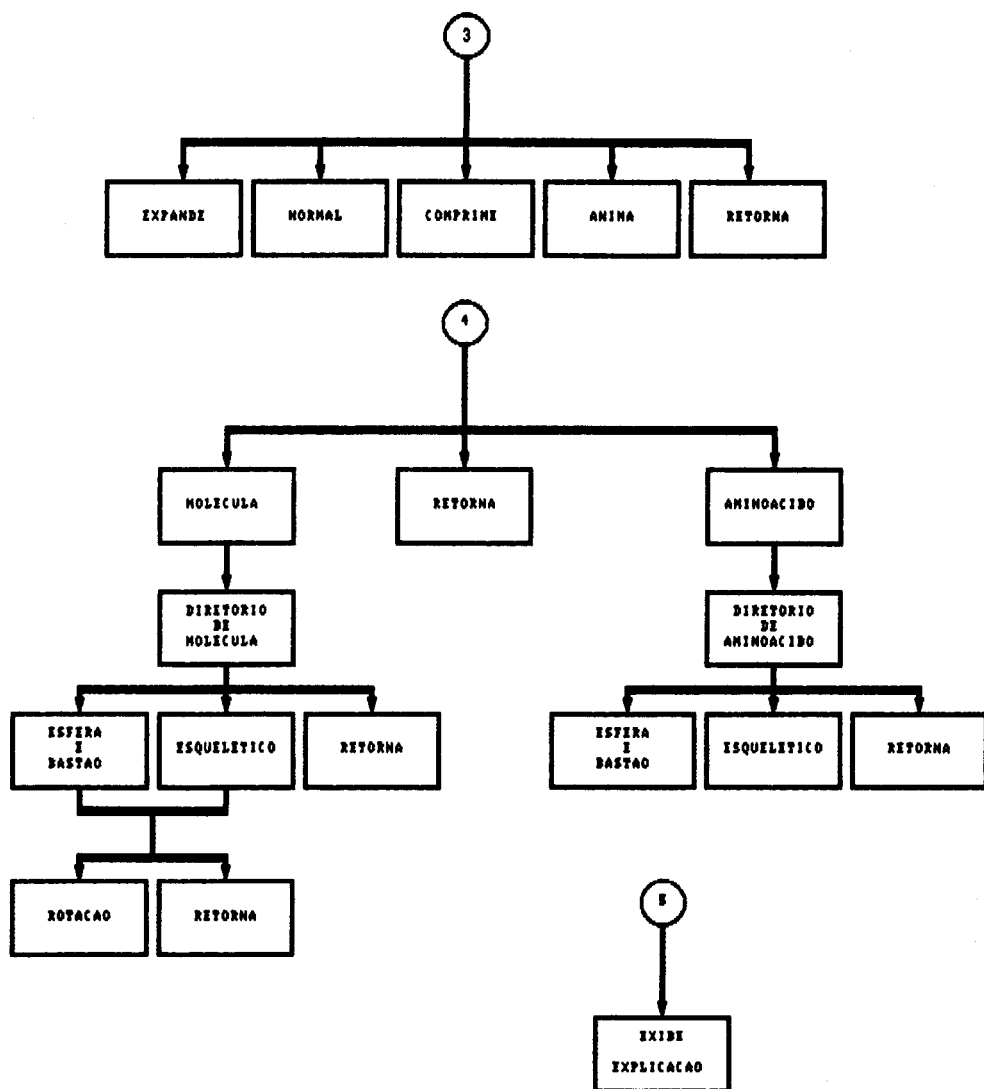


Figura 2.: Diagrama hierárquico do funcionamento de MOL3D.

mesmo. Uma vez escolhido o modelo geométrico desejado, aparece o último menu desta sequência, com a apresentação de seis pontos diferentes de visualização da aminoácido (Z+, Z-, X+, X-, Y+, Y-) e as opções de ampliação ("Zoom+"), redução ("Zoom-") e deslizamento do aminoácido.

Escolhendo-se a opção 3 do "Menu Geral", aparece um outro menu, com as operações que podem ser aplicadas no tetraedro, que são compressão, equilíbrio e expansão, além da animação que pode ser feita no mesmo.

Escolhendo-se a opção 4 do "Menu Geral", é exibido um outro menu, com as opções de pergunta sobre qual animação será feita, de moléculas ou de aminoácidos. Daí, aparece o diretório correspondente (de moléculas ou de aminoácidos), onde se fará a escolha desejada. Em seguida, surge o menu de escolha do modelo de representação aparecendo então a animação propriamente dita. Esta animação é obtida das vistas provenientes de rotações, de 10 em 10 graus, da figura em trabalho e, equivale a rotação de 360 graus do observador em torno do modelo visualizado.

A opção 5, "AJUDA", fornece explicação detalhada acerca das opções anteriores (de 1 a 4). Pressionando-se uma tecla, volta-se ao nível anterior.

Qualquer módulo em que o usuário esteja trabalhando permite alternativa de retorno ao módulo de nível imediatamente anterior.

3. AMBIENTE DE TRABALHO

MOL3D foi implementado no sistema Turbo Pascal, num microcomputador da linha IBM-PC e placa de interface gráfica CGA. A placa CGA possui uma resolução gráfica de 320 x 200 e 4 cores simultâneas (incluindo a cor de fundo). Foram utilizados dois tipos de monitores: RGB e monocromático. Visou-se com isso, avaliar os resultados obtidos em duas situações diferentes, pois

o uso do monitor monocromático é mais frequente em ambientes universitários. Embora MOL3D seja desenvolvido no padrão CGA, pode-se utilizá-lo no padrão EGA.

4. INTERFACE COM O USUÁRIO

A interface de usuário usada em MOL3D tenta proporcionar ao usuário um ambiente confortável. O tipo de diálogo utilizado é feito via "menu". Os menus estão organizados de acordo com uma estrutura de árvore, tendo o usuário a oportunidade de percorrê-la em vários níveis.

5. ARQUIVOS E ESTRUTURA DE DADOS

Consideram-se em MOL3D duas classes de arquivos. Numa incluem-se os arquivos com informações da geometria e topologia de objetos (moléculas ou aminoácidos). Na segunda classe, tem-se os arquivos de telas.

A estruturação dos dados é dinâmica na forma de uma "multilista linear simplesmente encadeada", tal que a cada elemento de uma primeira lista corresponde uma sub-lista linear encadeada. A primeira lista contém informações acerca dos átomos ou aminoácidos, na forma de registro. Cada registro contém campos envolvendo coordenadas espaciais (x,y,z), o raio, a cor, número indicativo da posição do elemento na molécula, e os ponteiros (um que aponta para o próximo elemento e o outro é o "cabeça" de uma sub-lista). Na segunda lista ("lista das conexões"), que indica quais as ligações de um dado elemento, as informações também estão em registros, cada um deles com dois campos, um para indicar o número do elemento de conexão em relação à posição na molécula o outro é um ponteiro para o próximo elemento.

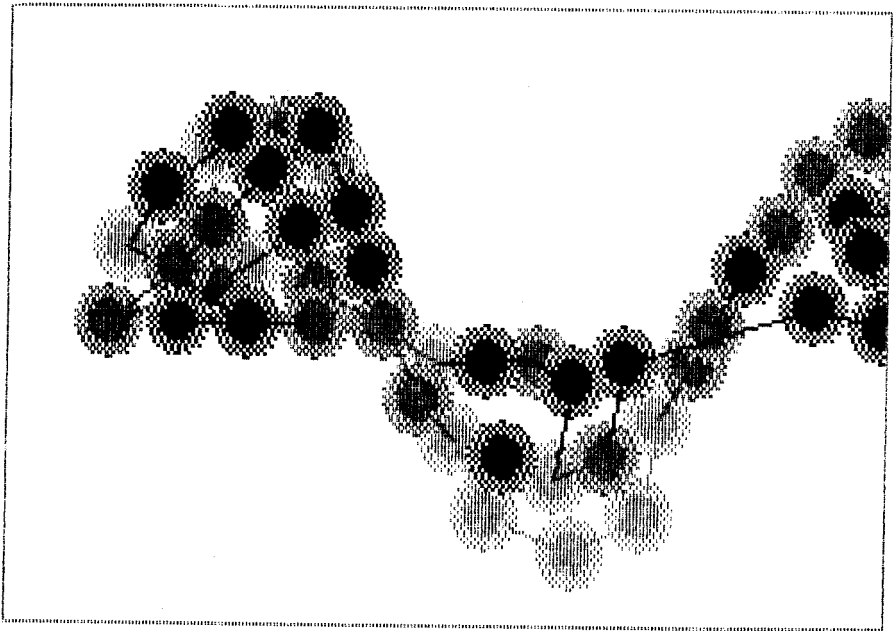
6. APRESENTAÇÃO VISUAL

Visando o apagamento de esferas e conexões não visíveis ao

observador, faz-se uma ordenação das esferas em relação à coordenada que mede a proximidade das mesmas ao observador. A pintura das esferas é feita então na sequência estabelecida na ordenação.

Objetivando o preenchimento de esferas, utilizaram-se em MOL3D diversas técnicas que visassem passar ao observador uma boa impressão de curvatura nas diferentes esferas pintadas. Dentre as soluções usadas, procurou-se escolher aquela que, com os poucos recursos disponíveis, proporcionasse melhor desempenho. Assim, prevaleceu a técnica de "halftoning" com o uso de uma matriz de pixels de ordem 2.

7. ALGUMAS IMAGENS OBTIDAS DE MOL3D



da área de química e áreas correlatas, no âmbito da UFPb onde será melhor avaliado. Uma expansão do mesmo se encontra em fase inicial de definição, já se podendo antever algumas novas ferramentas a serem incorporadas: utilização de placa EGA, melhoria na qualidade de pintura das esferas e conexões, algoritmo para compactação de imagens, simulação em tela de interações intermoleculares, melhoria na interface de usuário.

BIBLIOGRAFIA

Stryer L., "Bioquímica", Editorial Reverté (1979).

**Max, N.L.: " Computer Representation of Molecular Surfaces ",
IEEE Computer Graphics and Applications, August 1983, pp. 21-
29.**

**Tori, R.; Arakaki, R.; Massola A.; Filgueiras, L. , " Fundamentos
de Computação Gráfica ",LTC (1987).**

**Foley, J.D.; Van Dam, A., " Fundamentals of Interactive Computer
Graphics ", Addison-Wesley (1982).**

**Sutherland, I.; Sproull, R.F.; Schumacker, R.A. , "A
Characterization of Ten Hidden-Surfaces Algorithms", Computing
Surveys, vol. 6, no 1, march/1974.**

**Newman, W.H.; Sproull, R.f., " Principles of Interactive Computer
Graphics ", McGraw-Hill (1984).**