

# PAINEL 14

## *Visualização Molecular em Microcomputadores*

**Flávio Pimentel Duarte**

Bolsista de Inic. Científica, Informática,  
UFRJ

**Ana Maria B. M. da Cunha**

Orientadora, Socióloga

**Márcia Viana de Sá Earp**

Co-orientadora, Analista de Sistemas

### 1. INTRODUÇÃO

O uso de modelos teve uma influência decisiva sobre o desenvolvimento dos conceitos utilizados na interpretação de propriedades químicas. Assim, na última década, os químicos têm recebido importantes auxílios na forma de *softwares* que atuam como ferramentas para seus estudos de concepção e análise de estruturas moleculares.

Esses *softwares* podem ser divididos em dois grupos: os de cálculo, que fornecem conformações e propriedades moleculares, e os de visualização, que permitem resumir, em uma figura, os dados obtidos nos cálculos. Porém, a existência de diferentes métodos de cálculo e as diversas configurações de equipamentos utilizados fazem com que haja uma variedade enorme de

programas de visualização, cada qual seguindo e gerando um formato diferente para os dados.

Este trabalho tem como objetivo criar métodos e desenvolver soluções para os problemas de padronização, através do desenvolvimento de um *software* de visualização de moléculas em microcomputadores que possibilite ao pesquisador utilizar dados gerados pela maioria dos *softwares* acadêmicos e comerciais existentes. Além disto, foram estudadas técnicas de computação gráfica para a geração de algoritmos de visualização tridimensional das moléculas, com efeitos dinâmicos como rotação, apresentando diversos modelos de representação tais como *stick* e *ball and stick*, com a possibilidade de utilização de vários tipos de *labels* para os átomos da molécula, como tipo de átomos, numeração IUPAC e energia de minimização.

## 2. METODOLOGIA

Como ponto de partida do desenvolvimento do *software* de visualização, foi definido um estudo dos principais métodos de construção e do formato do arquivo de dados por eles gerados. Em seguida, optou-se pela utilização do formato gerado pelo *software* MM2, para desenvolvimento de um programa piloto. Assim, foi definido um programa de visualização de estruturas químicas escrito em linguagem C, utilizando compilador MICROSOFT C/C++ (1) e o Windows *Software Development Kit* (SDK) (2, 3) para a utilização de uma interface com o usuário padrão Windows (4).

Para a visualização da molécula, é lido um arquivo texto no formato gerado pelo *software* MM2. Esse arquivo contém informações sobre a molécula na forma de duas tabelas: uma, representando as coordenadas cartesianas tridimensionais de cada átomo, e outra, as ligações entre átomos.

A seguir, é executado um procedimento de *scaling*, que redimensiona o tamanho da molécula para enquadrá-la no

tamanho da janela onde ela será mostrada (5). A matriz de escala é dada por:

$$S = \begin{bmatrix} s_x & 0 & 0 \\ 0 & s_y & 0 \\ 0 & 0 & s_z \end{bmatrix}$$

Onde  $s_x$ ,  $s_y$  e  $s_z$  são os fatores de escala para cada um dos eixos x, y, z, respectivamente.

Na etapa seguinte, aplica-se uma projeção ortogonal [I] nas coordenadas tridimensionais lidas, obtendo coordenadas bidimensionais [II], que representam o posicionamento da molécula na tela.

$$P = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad [I]$$

$$\begin{bmatrix} X \\ Y \\ 0 \end{bmatrix} = P \begin{bmatrix} X_c \\ Y_c \\ Z_c \end{bmatrix} \quad [II]$$

Uma das maneiras de representar uma molécula é o estilo *stick* (Figura 1). Esse estilo mostra apenas as ligações entre os átomos da molécula, na forma de linhas retas, cujas extremidades são os centros dos dois átomos que fazem a ligação.

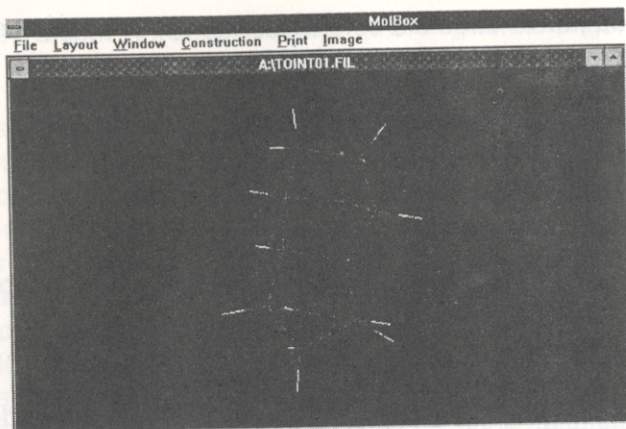


Figura 1 - Molécula representada no estilo *stick*.

Um outro modo de visualização da molécula é o estilo *ball and stick* (Figura 2), onde os átomos da molécula são representados por esferas de centro em suas coordenadas e as ligações entre átomos representadas por linhas de maneira semelhante ao estilo *stick*.

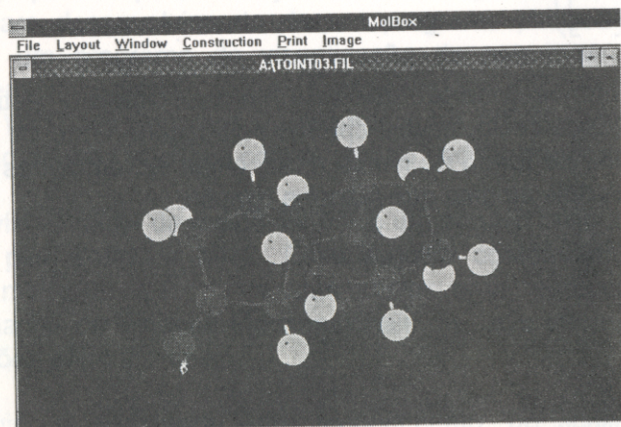


Figura 2 - Representação espacial de uma molécula no estilo *ball and stick*.

Além disso, a molécula também pode ser vista com ou sem *labels*. Um *label* é um identificador para os átomos da molécula, podendo mostrar: cargas, o nome, ou número do átomo.

O programa também pode apresentar a molécula sob outro ângulo, isto é, pode rotacionar a molécula para qualquer ponto de vista que o usuário desejar. Para fazer isso, o programa utiliza duas transformações, uma rotação em torno do eixo X [III] e uma rotação em torno do eixo Y [IV], que foram combinadas em uma única fórmula [V] para se obter um rendimento melhor.

$$R_x(\theta) = \begin{bmatrix} \cos \theta & \sin \theta & 0 \\ -\sin \theta & \cos \theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad \text{[III]}$$

$$R_y(\alpha) = \begin{bmatrix} \cos \alpha & 0 & -\sin \alpha \\ 0 & 1 & 0 \\ \sin \alpha & 0 & \cos \alpha \end{bmatrix} \quad \text{[IV]}$$

$$R_{xy}(\theta, \alpha) = \begin{bmatrix} \cos \theta \cos \alpha & \sin \theta & -\cos \theta \sin \alpha \\ -\sin \theta \cos \alpha & \cos \theta & \sin \theta \sin \alpha \\ \sin \alpha & 0 & \cos \alpha \end{bmatrix} \quad \text{[V]}$$

$$\begin{bmatrix} X_r \\ Y_r \\ Z_r \end{bmatrix} = R_{xy}(\theta, \alpha) \begin{bmatrix} X \\ Y \\ Z \end{bmatrix} \quad \text{[VI]}$$

Finalmente, é permitido ao usuário imprimir a molécula sob o ângulo, no estilo e com o *label* com que ela está sendo visualizada na tela do microcomputador.

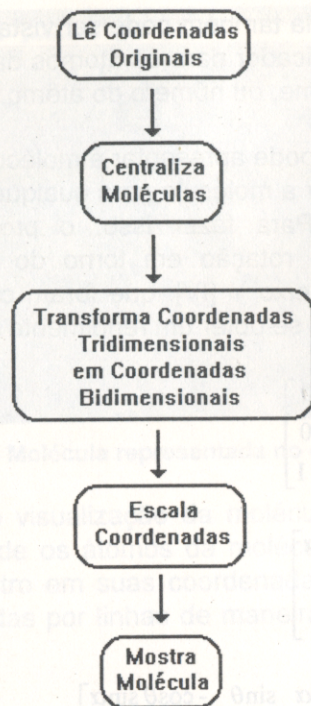


Figura 3 - Diagrama de funcionamento

### 3. RESULTADOS OBTIDOS

Atualmente, o programa está com o módulo de visualização em fase de finalização. As moléculas podem ser visualizadas em dois estilos, *stick* e *ball and stick*, e com três tipos de *labels*. Serão implementados algoritmos de minimização para cálculo das cargas utilizadas como *labels* (Figura 4).

O módulo de construção está na sua fase inicial de implementação, devendo suas rotinas serem testadas e comparadas a outras semelhantes na busca de uma melhor performance.

O módulo de impressão está parcialmente acabado, embora existam novas opções a serem discutidas e, se aprovadas, implementadas, tais como impressão de relatórios, distâncias e ângulos.

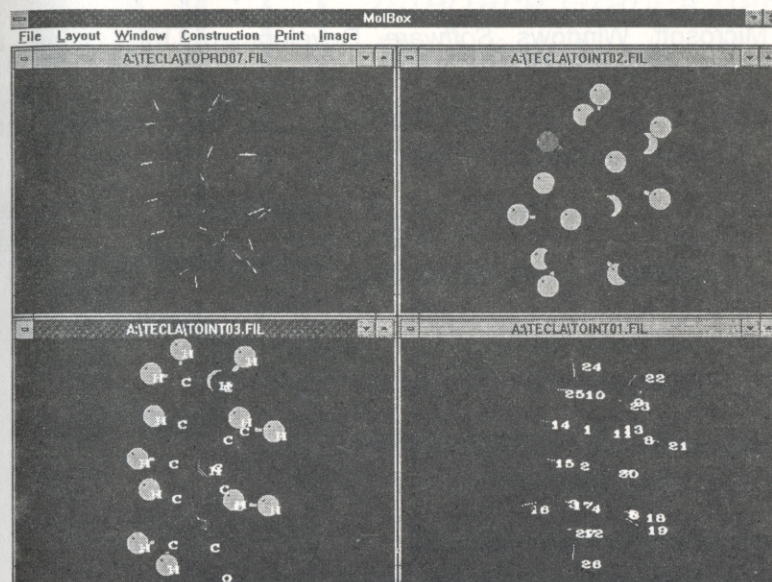


Figura 4 - Visualização simultânea de quatro moléculas diferentes pelo MolBox

### 4. CONSIDERAÇÕES GERAIS

O estilo *ball*, que representa os átomos da molécula como esferas de raio igual ao raio de Van der Waals, não foi implementado porque os microcomputadores atuais ainda são lentos para muitas tarefas relacionadas com a visualização molecular nesse estilo, embora para tarefas simples, tais como visualização na forma *stick*, a sua performance seja razoavelmente boa.

## BIBLIOGRAFIA

1. Microsoft Windows Source Compiler, User's Guide.
2. Microsoft Windows *Software Development Kit*, Environment and Tools.
3. Microsoft Windows *Software Development Kit*, Guide to Programing.
4. MURRAY III, W. H. e PAPPAS, C.H. Programação para Windows versão 3, McGraw Hill.
5. FOLEY, J. A., VAN DAM, J. F. and HUGHES, J. Computer Graphics - Principles and Practice, Addison - Wesley Company, Reading MA (1990).

# PAINEL 15

## *Desenvolvimento de Interface Gráfica para Visualização de Moléculas Tridimensionais*

### DESTAQUE

**Patrícia Alves Dias**

Bolsista de Inic. Científica, Informática, UFRJ

**Paulo Sérgio da Silva Pinto**

Orientador, Químico, D.Sc.

**Márcia Viana de Sá Earp**

Co-orientadora, Analista de Sistemas

### 1. INTRODUÇÃO

A modelagem molecular por computador tem a finalidade de simular estruturas e suas respectivas interações. A Computação Gráfica (1) é a ferramenta ideal para a visualização das mudanças ocorridas em um sistema em função do tempo, além de possibilitar a visualização das estruturas, a representação das moléculas e a manipulação interativa de modelos geométricos. Assim, tomando como base *softwares* acadêmicos de construção e cálculo de propriedades químicas, foi desenvolvida uma interface gráfica para a visualização das estruturas químicas geradas em uma *workstation Silicon Graphics*.