

Universidade de Aveiro
Computação Visual

Molecule Viewer

WebGL

Diego Hernandez,
77013

Francisco Oliveira,
80108

O que é?

Molecule Viewer é uma plataforma para a visualização de moléculas em 3D.





Molecule Viewer

Upload molecule from file
 No file chosen

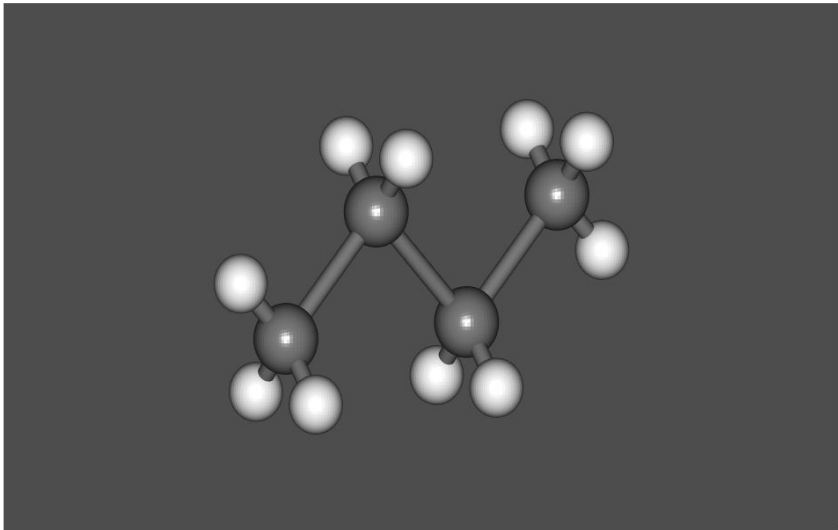
Choose the projection type:

Current method: Origin moves

Examples

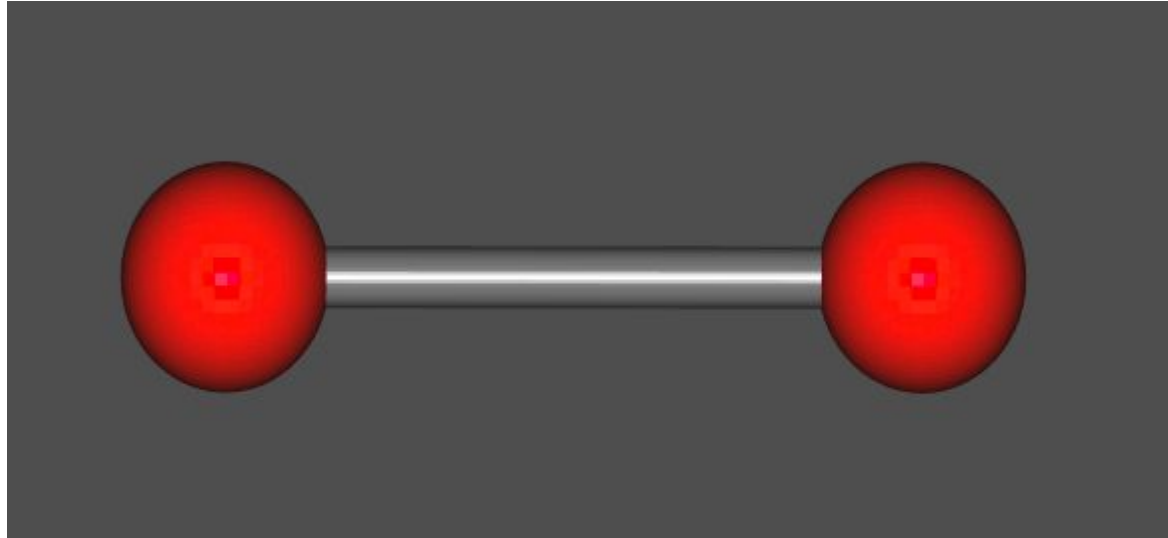


Ethane Butane Methane Propane



Em que consiste?

- **Esferas** para átomos.
- **Cilindros** para as ligações.



Geração de esferas e cilindros

- **Esferas** - Esferas consistem num cubo no qual as faces foram divididas em quadrados mais pequenos e aos quais se aplicou posteriormente uma normalização ao vetor posição.
- **Cilindros** - Cilindros passam por um processo semelhante ao das esferas mas a normalização é diferente. O processo de normalização dos cilindros em vez de levar em conta as coordenadas de x , y e z , apenas leva em conta as coordenadas de x e y . Isto leva a que todos os pontos do cilindro fiquem à mesma distância do eixo de Z em vez de ficarem à mesma distância da origem.

Ficheiro com moléculas

- Dividido em duas partes, com o caracter “/” para diferenciar;
- Primeira parte com informação sobre os átomos (tipo de átomo e posição);
- Segunda parte com informação sobre ligações (átomos que se ligam e tipo de ligação).

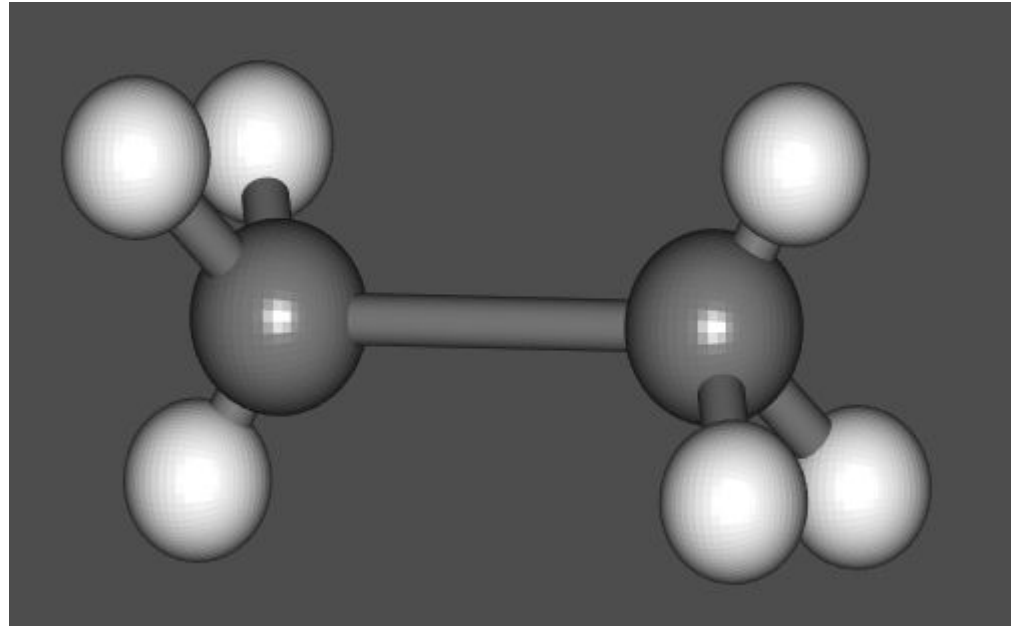
```
C 0.5 -0.5 0.0
C -1.5 -0.5 0.0
C 1.5 0.5 0.0
C -0.5 0.5 0.0
H -1.5 -1 0.5
H -1.5 -1 -0.5
H -2 0.0 0.0
H -0.5 1 0.5
H -0.5 1 -0.5
H 0.5 -1 0.5
H 0.5 -1 -0.5
H 1.5 1 0.5
H 1.5 1 -0.5
H 2 0.0 0.0
/
0 2 1
0 3 1
3 1 1
1 4 1
1 5 1
1 6 1
3 7 1
3 8 1
0 9 1
0 10 1
2 11 1
2 12 1
2 13 1
```

Posicionamento dos cilindros

- Aplicadas rotações apenas sobre os eixos de X e Y.
- Para o ângulo de rotação sobre o eixo de Y usa-se a fórmula abaixo onde P2 e P1 são os centros dos dois átomos.

$$\arctan((P2y - P1y)/(P2x - P1x)) * 180/\pi$$

- Para o ângulo de rotação sobre o eixo de X primeiro aplica-se uma rotação aos pontos de maneira a ficarem sobre o eixo de X e de seguida aplica-se a fórmula acima.



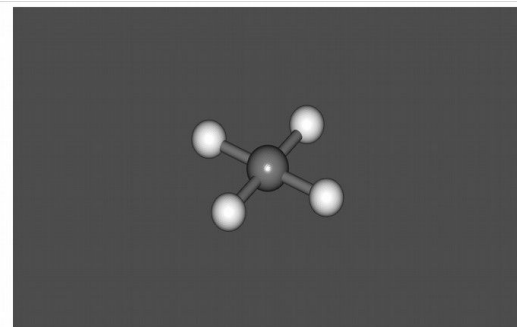
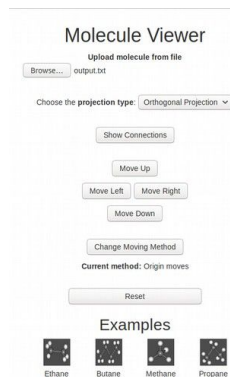
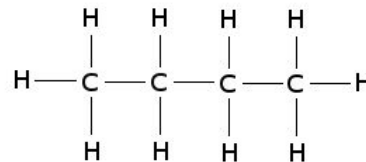
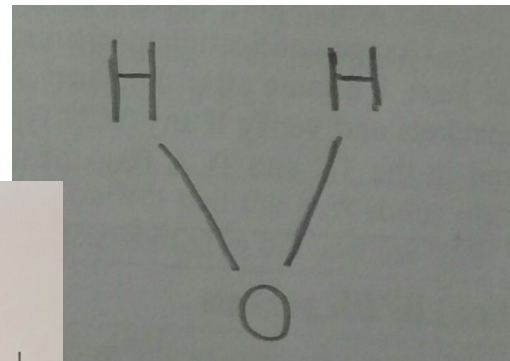
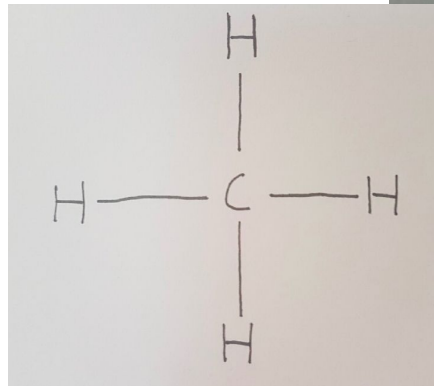
Demonstração

Reconhecimento de Fórmulas Moleculares

OpenCV

Em que consiste?

Através duma imagem de uma fórmula molecular simples, gerar um ficheiro com determinado formato para a visualização 3D da respetiva, no *Molecule Viewer*

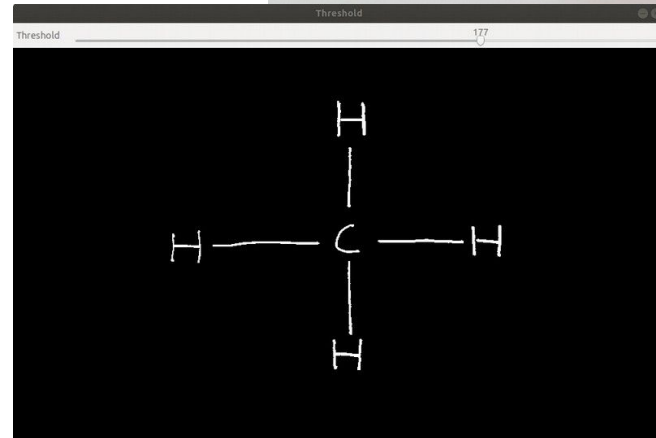
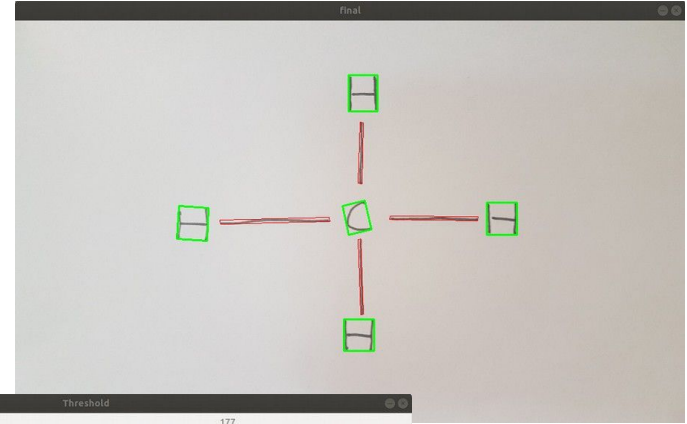


Fases de execução

- Detecção de objetos de interesse.
- Identificação de Átomos e Ligações.
- Construção da Molécula.
- Geração do Ficheiro.

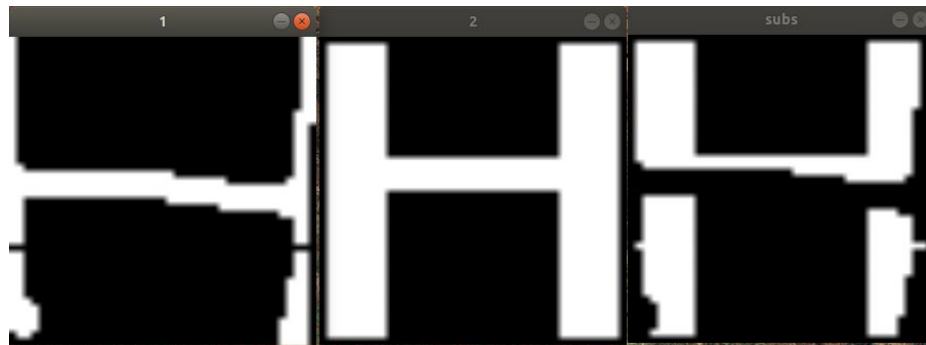
Deteção de objetos de interesse

- Transformação Grayscale à imagem.
- Aplicação de Inverted Binary Threshold
- Aplicações de transformações morfológicas:
 - Opening.
 - Closing.
- Determinação dos contornos dos objetos de interesse.
- Determinação da área retangular mínima do objeto de interesse.
- Diferenciação entre letras e linhas.
 - Dependente da relação entre altura e largura da área do objeto detectado.
- Desenho dos contornos da área retangular.



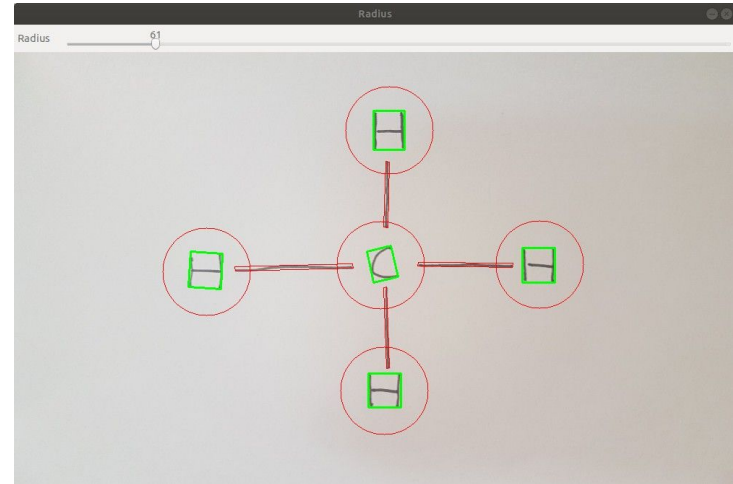
Identificação de Átomos e Ligações

- Endireitamento da letra a analisar.
- A respectiva letra a analisar é comparada com uma série de letras predefinidas.
- Modificação do tamanho da imagem da letra.
- É efetuada uma operação do tipo *Inverted Binary Threshold* a letra a analisar.
- É efetuada uma operação de subtração entre a letra predefinida e a letra em consideração.
- Contagem de número de pixels com intensidade equivalente a 0 da imagem resultante.
- Contagem de número de pixels com mesma intensidade equivalente a 255 com mesma coordenada.
- Efetuada uma relação entre os dois tipos de contagem efetuadas. A imagem da letra com maior percentagem de semelhança é a considerada para a letra analisada.



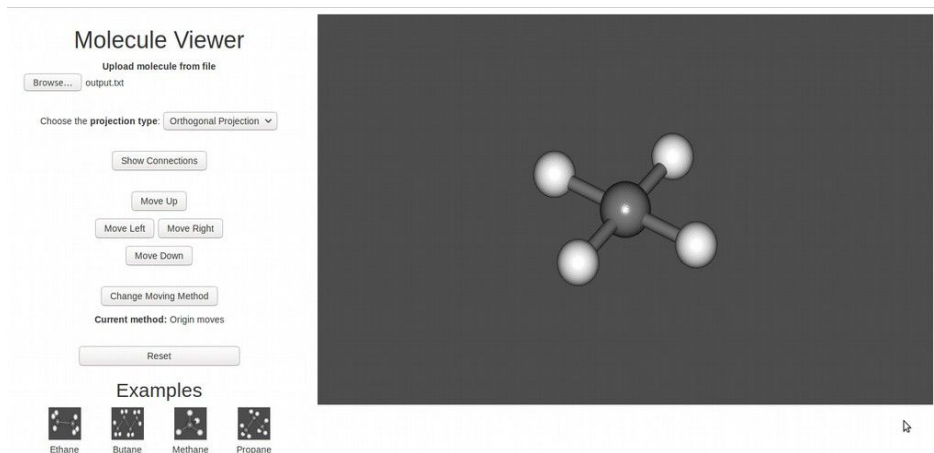
Construção da Molécula

- São calculadas e armazenadas as posições do centro de cada átomo, com o seu respectivo carácter atribuído.
- São calculadas e armazenadas as posições de cada ponta de cada reta ilustrada.
- São determinados os vários tipos de ligações existentes.
- Em cada centro dos átomos é desenhado um círculo vermelho com raio variável de acordo com o valor gerado pelo Trackbar.
- A seleção das correspondentes ligações do átomo correspondem às linhas que são interceptadas pelo contorno do círculo.
- É efetuada iterativamente uma relação e identificação das ligações entre dois respectivos átomos.



Geração do Ficheiro

- Após obtida a relação entre átomos e as suas respetivas ligações é dado a posição de cada átomo num espaço tri-dimensional.
- É gerado no final um documento texto com determinado formato para a visualização do modelo 3D da molécula na plataforma Web *Molecule Viewer*.



```
IL
H 1 0 0
C 0 0 0
H 0 0 1
H -1 0 0
H 0 0 -1
/
1 4 1
1 3 1
1 2 1
0 1 1
```

Demonstração