



MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO  
Universidade Federal de Alfenas . Unifal-MG  
Pró-reitoria de Pesquisa e Pós-graduação  
Rua Gabriel Monteiro da Silva, 700 . Alfenas/MG . CEP 37130-000  
Fone: (35) 3299-1000 . Fax: (35) 3299-1063



# Tutorial Sisma - Sistema de Mapas Autocatalíticos

May 4, 2018

*José Maurício Schneedorf FS*

Sisma - Sistema de Mapas Autocatalíticos, é um programa desenvolvido na UNIFAL-MG para visualização e estudo de transformações de objetos pautadas na dinâmica de forças (quantidades) e fluxos (taxas de variação). A versão atual é 1.5, opera somente em sistemas operacionais que permitem Java (Microsoft, Linux, Apple), para tal dependendo somente da Máquina Virtual Java instalada no sistema. Para verificar se seu computador possui a JVM (*Java Virtual Machine*), entre num buscador da internet e procure pelo sítio do Java

O Sisma pode ser utilizado sem qualquer instalação, bastando-se clicar no arquivo executável Java presente na pasta `caminho do computador/Sisma/dist/Sisma release XX.jar`, onde "XX" representa a versão do programa. <https://java.com>.

Como o Sisma permite a visualização dinâmica de mapas bidimensionais estáticos, pode ser empregado no estudo de conversões variadas, tais como as transformações enzimáticas que ocorrem durante o metabolismo, tema principal em que se baseou o projeto.

## 1 Montando uma reação

1. Abra o programa. O Sisma foi desenhado para facilitar a inserção de objetos e vias metabólicas, simulando um lápis e uma folha de papel em branco. Com esse par, determinada reação pode ser criada desenhando-se no papel o reagente e o produto, digamos, R e P, seguindo-se de uma seta unidirecional que os une e informa o sentido da reação (Figura 1).

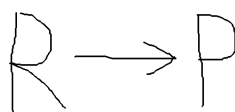


Figure 1: Representação de uma reação, apresentando reagente (R), produto (P) e o sentido da reação (seta).

2. O Sisma pode reproduzir essa figura, como qualquer editor de imagem ou apresentação faria, de duas formas: clicando-se nos ícones do menu principal (passe o mouse embaixo de cada para conhecer sua ação), ou clicando-se diretamente na janela principal em branco (o "papel").
3. O segundo método é mais ágil e natural pois, como mencionado acima, busca imitar o que o usuário faria com um lápis e um papel. Assim, para reproduzir a imagem da Figura 1: clique em qualquer ponto da janela principal com o botão direito do mouse e selecione "Object". Ao abrir a **janela de configuração de objeto**, selecione no campo de nome a letra "R" e clique em OK.
4. faça o mesmo para letra "P", e posicione-as próximas, como representado na Figura 1, clicando e arrastando cada objeto. Observe que existem 12 pequenos quadrados claros ao redor de cada objeto criado (**conector**).
5. Para a seta, clique com o botão direito do mouse novamente, e selecione "Path". Agora, para unir R a P, clique com o botão esquerdo do mouse em qualquer conector de R (início da reação), arraste o mouse para um conector em P, clicando em seguida novamente com o botão esquerdo, para consolidar a seta. Se não ocorrer nada, mexa um pouco o mouse para que se abra a **janela de configuração de caminho**. O resultado deve ser parecido ao da Figura 2.
6. Caso o "path" (seta) se estabeleça em conector não desejado, basta clicar o botão direito do mouse e selecionar *Remove path*. Há uma dificuldade nas primeiras vezes, pois na concepção do Sismo privilegiou-se o uso simplificado do binômio caneta/papel para todo o processo de simulação, o que resulta por vezes na abertura de outras janelas de diálogo. Insista.
7. O posicionamento dos objetos do mapa pode ser ajustável com clique e arraste do mouse. Experimente mudar a posição de um objeto e observe como o caminho acompanha essa nova posição.
8. O nome do mapa, inicialmente como *New*, pode ser alterado clicando-se no botão direito do mouse.



Figure 2: Reprodução da reação  $R \rightarrow P$  da Figura 1 no Sisma.

## 2 Executando a reação

9. Uma vez elaborada a reação (Figura 2) pode-se agora visualizar a conversão de R em P, como indicado pela seta. Contudo, a transformação de um objeto em outro no Sisma é visualizada pela variação de sua luminosidade. Assim, para que seja possível observar a conversão de R em P, faz-se necessário que R esteja num brilho maior que P, de tal forma que, durante a transformação, R vá cedendo sua

luminosidade para P. Na prática, basta atribuir um valor tonal alto para R (nível 100, por ex) e outro baixo para P (nível 10, por ex).

10. Para alterar esses valores, clique com o botão esquerdo em R e verifique se está em **nível 100 (valor relativo máximo numa escala de luminosidade)** na janela de configuração de objeto. Repita a operação para P, atribuindo-lhe o valor de 10 com auxílio da barra de rolagem.
11. Para visualizar a conversão de R em P, basta clicar em no ícone de "Play" do menu de ícones. Observe que durante algum tempo, o brilho de R decai enquanto que o de P aumenta até atingir um valor máximo (nível 1000). Essa é alma do Sisma: observar transformações de objetos conectados em um mapa pelas variações em seus brilhos.

### 3 Avaliando a reação

12. Uma vez criada e executada a reação, o Sisma permite seu estudo por duas ferramentas: visualização de um gráfico no tempo de execução do simulador, e exportação dos dados para planilha.
13. Para visualizar a conversão num **gráfico de progresso**, clique no ícone de gráfico após o início da execução (**Play**), ou mantenha esse gráfico na tela sobre as demais antes da execução. O resultado é apresentado na Figura 3 abaixo.

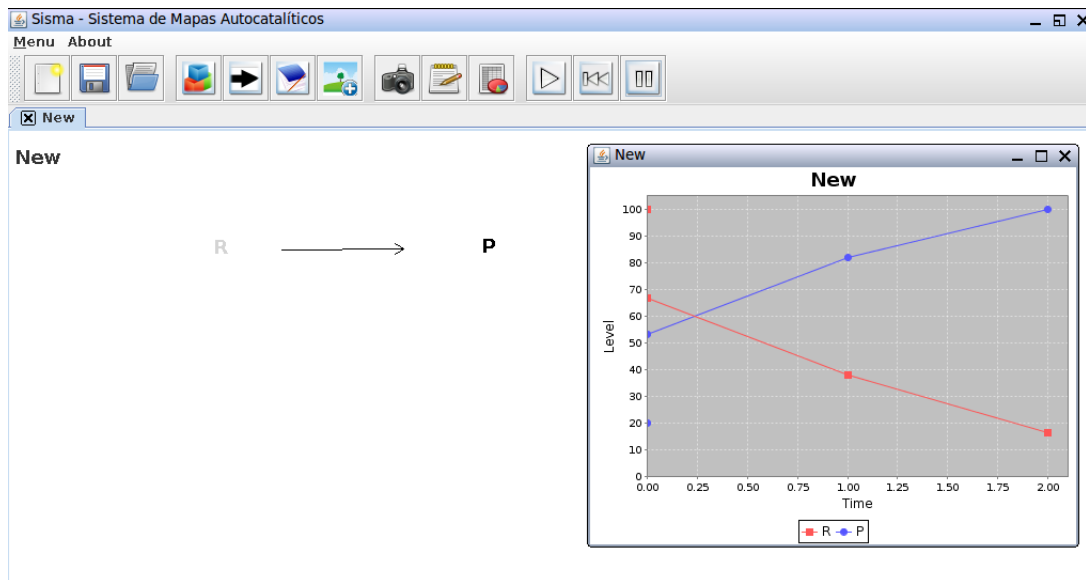


Figure 3: Tela do Sisma apresentando uma reação  $R \rightarrow P$  e a representação gráfica da variação de luminosidade dos objetos ao longo do tempo.

14. Por outro lado, o Sisma permite a **exportação dos dados** do gráfico para planilhas convencionais. Para tanto, basta clicar no ícone representado por um caderno e fornecer nome e caminho para o arquivo exportado que aparece na forma de uma tabela (Figura 4). Deve-se ter em mente, contudo, que a exportação de dados leva em conta **todos** os dados gerados ao longo da sessão do programa. Dessa forma, esse recurso permite recuperar todas as simulações realizadas,

embora sem distinção das mesmas. Para recuperar somente os dados da tabela atual, deve-se optar por selecionar os dados da tabela, seguido de Ctrl+C e Ctrl+V numa planilha já aberta.

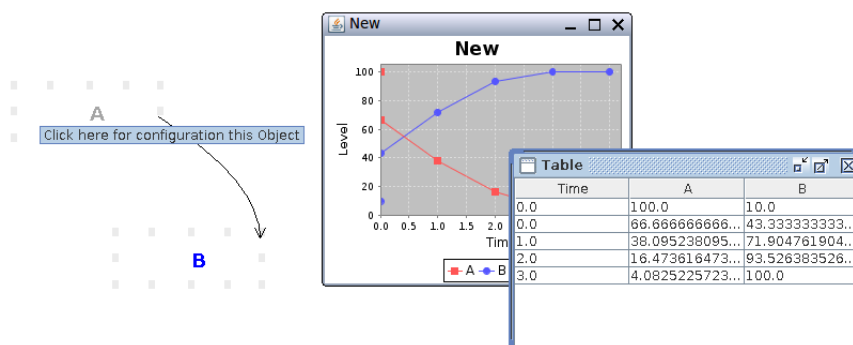


Figure 4: Janela do programa apresentando a tabela de valores de luminosidade dos objetos. Para copiar os valores basta clicar na primeira ou última linha da tabela e arrastar o mouse, seguindo-se de Ctrl+C.

## 4 Gráfico de progresso da conversão de objetos

15. O gráfico de tempo *versus* nível dos objetos é bastante configurável. Pode-se variar seu tamanho clicando e arrastando suas extremidades, bem como definir diversas opções de título, cores, eixos, impressão e salvamento, clicando-se com o botão direito sobre o plot (Figura 5).
16. Deve-se ter em mente que o aplicativo gráfico trabalha de forma independente ao programa; na prática, a escolha de cores dos objetos na janela principal não é coincidente com as cores e legendas do gráfico de progresso da reação.

## 5 Complicando a reação $R \rightarrow P$

O gráfico da reação  $R \rightarrow P$  encerra-se quando esgotado o nível de R. Como seria esse gráfico no tempo se as mesmas taxas de produção de P puderem reverter a reação para R ( $R \rightleftharpoons P$ ) ?

17. Desenhe um "path" indo de P a R usando um par distinto de conectores, clique no ícone "Play" e visualize o gráfico resultante (Figura 6).
18. Você deverá notar que a reação torna-se infinita, pois R converte-se a P e vice-versa, em taxas iguais, gerando um gráfico simétrico das conversões. Para interrompê-la basta clicar no ícone **Pause** ou reiniciar a reação no ícone "Rewind".
19. O ícone **Rewind** trabalha como sugerido: interrompe a reação e volta ao seu início. Uma observação importante: o início é considerado a partir da construção inicial do mapa ou de sua última imagem salva (atributo \*.sis). Assim, "Rewind" reverte ao mapa inicial ou ao seu último salvamento. Na prática, se o usuário executar um mapa que não foi salvo e desejar repetir a simulação, os dados para

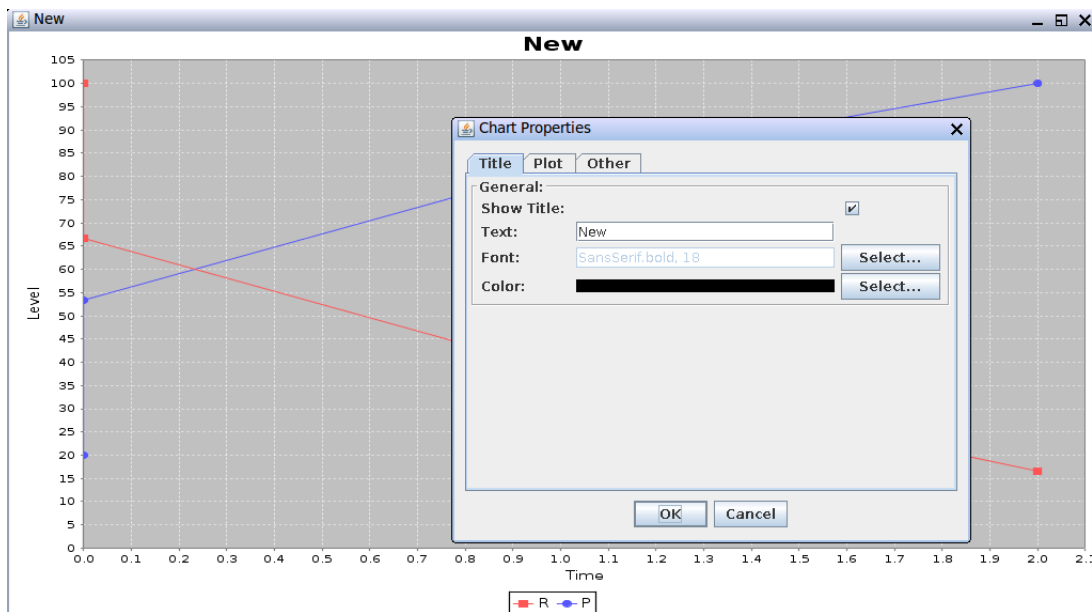


Figure 5: Configuração do gráfico gerado ao longo da simulação de  $R \rightarrow P$ . Permite customizar título, eixos, etiquetas, plano de fundo, cores, símbolos e linhas, além do salvamento em arquivo de imagem raster (PNG, *Portable Network Graphics*).

essa não estarão disponíveis, pois não foram salvos como arquivo pelo Sisma. Por isso, **salve sempre !**

## 6 Outras funcionalidades visuais.

20. O programa permite uma gama variada de funções, embora sem excessos desnecessários, como creem seus autores. Dessa forma, o Sisma permite, além da execução, pausa e retorno de operações do mapa, a visualização de um gráfico de progresso do mapa e da exportação de seus dados, a exportação de uma imagem instantânea do mapa (ícone **Grab**), a importação de uma figura rasterizada (jpg, png, bmp) no ícone **Figure**, e a inserção de texto com janela de dimensão ajustável no ícone **Note**. A seguir uma breve explicação de cada.

### 6.1 Grab - captura do mapa

21. Para a imagem "congelada" do mapa, basta clicar no ícone *Grab* antes, após ou mesmo durante a execução do mesmo e salvar a imagem no caminho desejado. A apreensão da imagem durante a execução do mapa permite o congelamento de um estado intermediário do mesmo para estudo.
22. A função Grab permite a exportação da imagem do mapa sem a visualização dos conectores, tornando-o mais limpo.

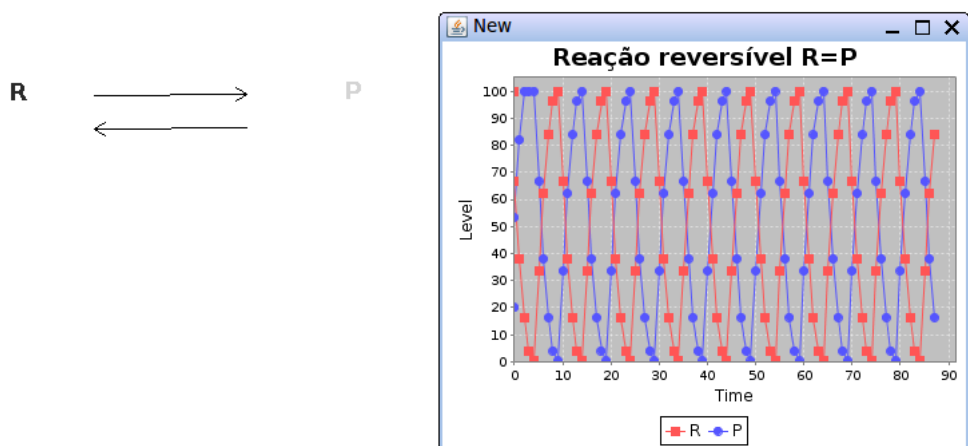


Figure 6: Reação direta e reversa entre R e P apresentando o grafico resultante após um período

## 6.2 Figure - Inserção de imagem

23. A inserção de uma Figura promovida pelo ícone homônimo permite enriquecer o mapa com imagens correlatas ao seu desenho. Para tanto, o usuário deve clicar no ítem e selecionar a figura desejada. Deve-se observar que a figura inserida não é dimensionável no programa, o que deve ser feito/testado previamente.

## 6.3 Note - Inserção de texto

24. Essa funcionalidade permite introduzir textos para melhor compreensão da estrutura do mapa construído. As notas podem ser posicionadas logo acima das setas ("paths"), ou em qualquer área do mapa. A dimensão do texto introduzido é ajustável clicando-se no canto inferior direito de sua janela. Isso permite reduzir a sobreposição do quadro de texto sobre objetos e caminhos do mapa.
25. A Figura 7 exemplifica as três funcionalidades de inserção de texto (Note) e imagem (Figure), bem como da captura de tela do Sisma (Grab).

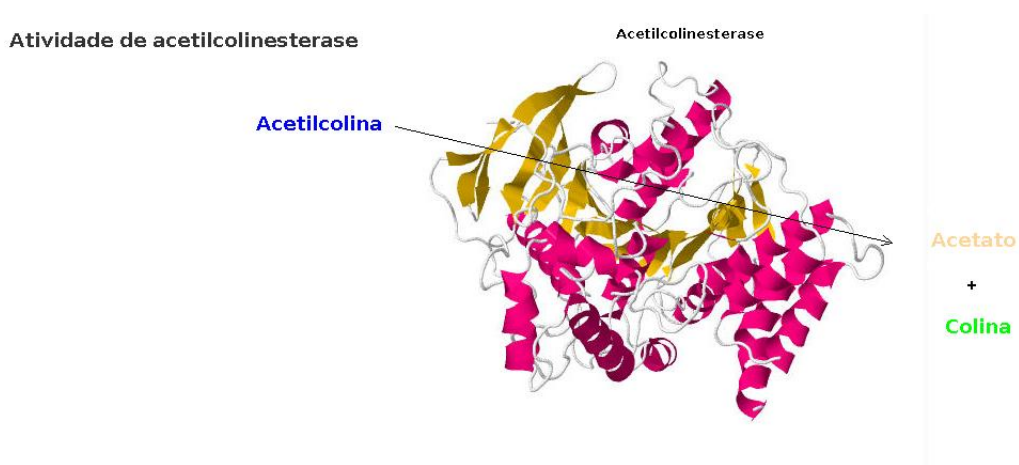


Figure 7: Exemplo de imagem (*Figure*), texto (*Note*) e captura de tela (*Grab*) do Sisma em uma única imagem.

## 7 Configuração de objeto e caminho.

Tanto os objetos quanto os caminhos ("path") podem ser customizados de duas formas: 1) clicando-se com o botão direito do mouse sobre os mesmos e selecionando-se **Properties**, ou clicando-se com o botão esquerdo do mouse diretamente sobre o objeto ou ponta da seta de um caminho.

26. Da mesma forma, ambos, objetos e caminhos, podem ser apagados do mapa selecionando-se **Remove**.

### 7.1 Objeto

27. Como já exemplificado, os objetos num mapa representam sua estrutura própria, ou as forças contidas nesse. Pode ser basicamente configurado em nome, cor e nível (Figura 7). Pode também ser configurado quanto a sua presença ou não no gráfico de progresso (**caixa Plot**), bem como quanto sua presença ou não ao início da simulação (**caixa Init**). Para configuração de objeto, basta clicar o botão direito do mouse
28. Em relação à opção *Init*, deve-se ter em mente que a atual versão do programa simula o paralelismo utilizando filas. Não obstante, esse paralelismo não é perfeito, o que impede que vários objetos sejam iniciados realmente como tal. Dessa forma, num gráfico de progresso, ainda que se opte por mais de um objeto iniciando a simulação, o efeito visual (e por conseguinte, de exportação de dados) não exhibe paralelismo completo, e sim uma ordenação. Nessa, o primeiro objeto introduzido no mapa tem prevalência temporal sobre os subsequentes.

### 7.2 Caminho

29. A customização de "path" também pode ser feita clicando-se com o botão direito do mouse seguido de "Properties", ou diretamente, clicando-se com o botão esquerdo sobre a ponta da seta.
30. O caminho pode ser desenhado de duas formas: linear e curvilinear. Para a primeira, vide o exemplo da Figura 2. Para um caminho curvilinear, muito utilizado em representações de mapas, fluxogramas, heredogramas, e organogramas, basta que o usuário clique numa área livre do mapa entre dois objetos, antes de um segundo clique que una os objetos (Figura 8)



Figure 8: Exemplo de um caminho curvilinear entre dois objetos

31. A configuração de caminho possui uma funcionalidade singular que permite estudos cinéticos sobre os fluxos no mapa. Trata-se da inserção de **equações introduzidas pelo usuário**, e que podem ser iguais ou não para cada caminho (Figura 9).
32. É possível introduzir para um caminho no Sisma qualquer equação que envolva as operações matemáticas básicas (+, -, /, \*), além de raiz quadrada- $\sqrt{x}$ , logaritmo- $\log(x)$ , e exponencial- $\exp(x)$ .
33. Na janela principal de inserção de uma equação (Figura 9) pode-se editar a função, introduzir uma nova função e utilizar a barra de rolagem para acelerar ou reduzir a velocidade de cada transformação (**speed**). Essa aceleração ou desaceleração, contudo, é apenas visual, não interferindo na reação propriamente dita (equações).
34. Na janela secundária do editor de equações, e que se acessa clicando-se em **Edit function** para uma equação existente ou **New function** para uma nova, é possível alocar a equação que descreve a conversão entre objetos, bem como os parâmetros (**Parameters**) que a descreve (Figura 10).

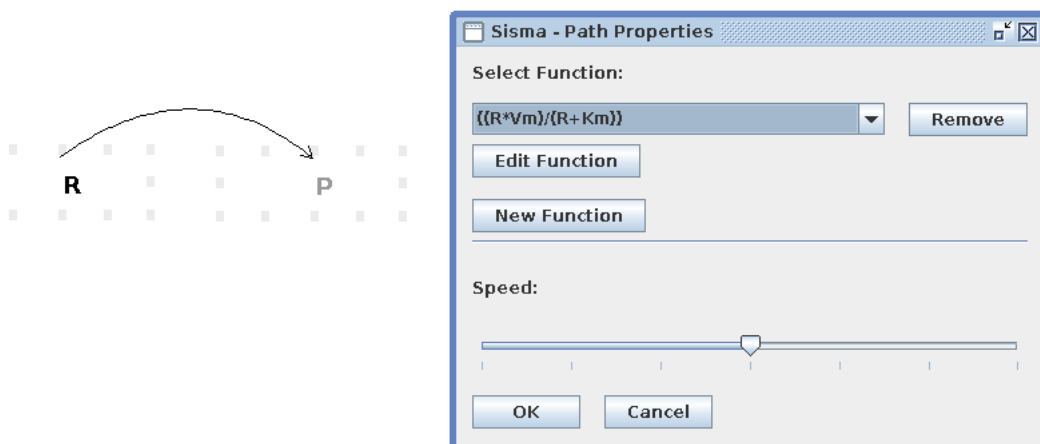


Figure 9: Janela principal de configuração de equações do *path*.

35. É possível a inserção de até 12 parâmetros numa equação, embora esse limite possa impactar na estabilidade das simulações dependendo da capacidade de *hardware*.
36. Para a inserção de uma nova equação, deve-se estabelecer a relação entre os parâmetros e demais valores (R e P, por exemplo) sem o sinal de igualdade, bem como alocar valores para os parâmetros (Figura 10).
37. Como representado na Figura 10, é também possível manter um conjunto de informações sobre cada reação (**Hint**), tais como origem da equação ou suas variantes, parâmetros alternativos à equação, ou referência bibliográfica da reação.
38. Por padrão no Sisma, a função comum disponível quando se insere um novo caminho no mapa é a equação de cinética enzimática clássica de Michaelis-Menten:

$$v = \frac{V_m * S}{K_m + S} \quad (1)$$



39. Observe também pela Figura 10 que o valor da intensidade do brilho de cada objeto interligado por uma função é dada, embora não seja possível editá-los. De fato, se uma simulação for pausada seguindo-se a edição de seu caminho, os níveis de luminosidade apresentados serão os obtidos no momento da interrupção da simulação.

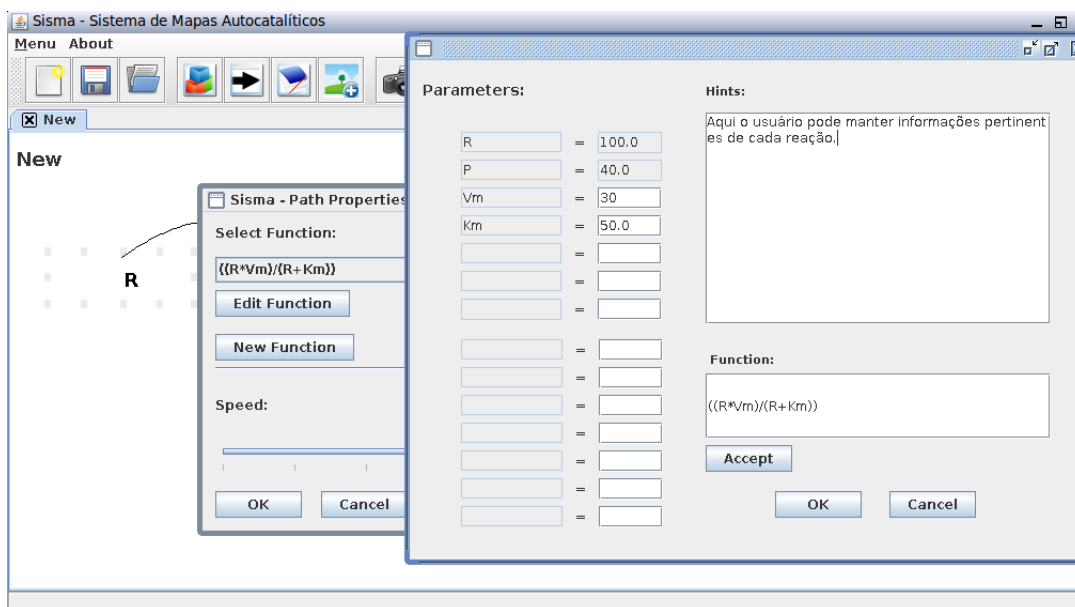


Figure 10: Janela secundária do editor de equações do *path*.

40. Como um exemplo final encerramos esse tutorial com uma amostra de um hiperciclo formado por três ciclos interligados na Figura 11.

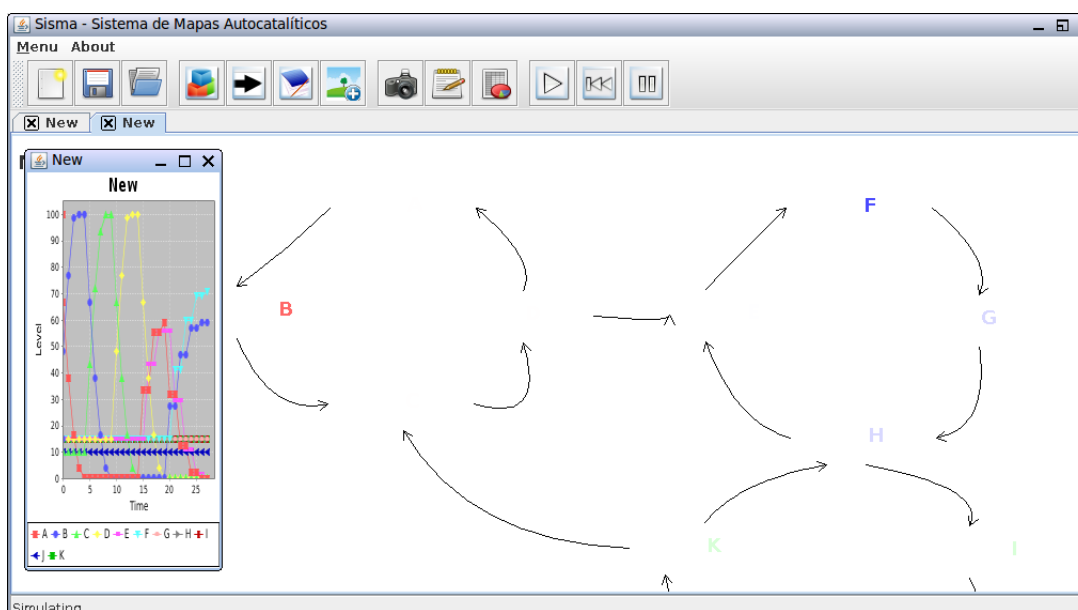


Figure 11: Simulação de um hiperciclo composto por três ciclos interligados e seu gráfico de progresso.