

UNIVERSIDADE FEDERAL DE JUIZ DE FORA
INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS
PÓS-GRADUAÇÃO EM CIÊNCIA DA COMPUTAÇÃO

Liliane Rodrigues de Almeida

**Remoção de Contatos em Curvas Cilíndricas via
Reposicionamento de Polilinhas 2D Utilizando
Coloração de Grafos**

Juiz de Fora

2017

UNIVERSIDADE FEDERAL DE JUIZ DE FORA
INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS
PÓS-GRADUAÇÃO EM CIÊNCIA DA COMPUTAÇÃO

Liliane Rodrigues de Almeida

**Remoção de Contatos em Curvas Cilíndricas via
Reposicionamento de Polilinhas 2D Utilizando
Coloração de Grafos**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Ciência da Computação, do Instituto de Ciências Exatas da Universidade Federal de Juiz de Fora como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Ciência da Computação.

Orientador: Marcelo Bernardes Vieira

Coorientador: Heder Soares Bernardino

Juiz de Fora

2017

Liliane Rodrigues de Almeida

**Remoção de Contatos em Curvas Cilíndricas via
Reposicionamento de Polilinhas 2D Utilizando Coloração de
Grafos**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Ciência da Computação, do Instituto de Ciências Exatas da Universidade Federal de Juiz de Fora como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Ciência da Computação.

Aprovada em 23 de Fevereiro de 2017.

BANCA EXAMINADORA

Prof. D.Sc. Marcelo Bernardes Vieira - Orientador
Universidade Federal de Juiz de Fora

Prof. D.Sc. Heder Soares Bernardino - Coorientador
Universidade Federal de Juiz de Fora

Prof. D.Sc. Rodrigo Luis de Souza da Silva
Universidade Federal de Juiz de Fora

Prof. D.Sc. Vitor Rafael Coluci
UNICAMP

Aos meus amigos.

AGRADECIMENTOS

Agradeço especialmente a minha mãe, Fatima, por cuidar de mim tão bem, e ao meu pai que sei que está torcendo por mim. E ao meu namorado, Flávio, por ser a pessoa mais perfeita que pode existir. E não menos importante, agradeço a minha colega e amiga Laura pelos momentos bons e ruins. Você foi o maior presente dessa jornada de dois anos. Agradeço também a minha irmã, Letícia, e minhas primas Natália e Alice, por me ouvirem e por me aconselhar. Agradeço a Sophie, minha cachorrinha, por me fazer sorrir com as coisas mais simples. Agradeço a todos os amigos, colegas do Grupo de Computação Gráfica, Imagem e Visão que já formaram ou não, e familiares que estiveram ao meu lado durante esses anos de estudo. Em especial, agradeço a Helena por ter me ajudado nos últimos segundos, e ao Allan pela contribuição neste trabalho. Agradeço a FAPEMIG pelo suporte a essa pesquisa e a todos que tornaram esse trabalho possível.

"A true friend knows your weaknesses but shows you your strengths; feels your fears but fortifies your faith; sees your anxieties but frees your spirit; recognizes your disabilities but emphasizes your possibilities."

William Arthur Ward

RESUMO

Este trabalho propõe um método de reposicionamento de polilinhas em 2D que representam curvas cilíndricas para manter a distância entre os segmentos de reta com pelo menos c unidades mais os raios de dois cilindros quaisquer, cada um associado a uma polilinha. A abordagem depende da construção de um grafo que representa os pontos que violam uma distância mínima, reduzindo o problema de remoção de contatos ao problema de coloração de grafos. Uma vez construído, o grafo é colorido usando uma heurística para encontrar quais vértices podem estar no mesmo plano. O número final de cores indica o número de planos na terceira dimensão necessários para resolver os contatos. Propõe-se também duas abordagens para calcular os deslocamentos dos vértices a partir do grafo e das cores computadas, ambas projetadas para obter florestas com a soma de deslocamentos mínima. Os resultados mostram a eficiência da construção do grafo, da coloração do grafo e do mapeamento de cor em planos. Aplica-se o método proposto e as duas abordagens de deslocamento no problema de desentrelaçamento de florestas de polilinhas que representam nanotubos de carbono. O número de contatos cai significativamente depois da aplicação do método mesmo em florestas de tubos densas e com vários contatos.

Palavras-chave: processamento de curvas cilíndricas. polilinhas livres de cruzamento. coloração de grafos.

ABSTRACT

This work proposes a method to reposition of 2D polylines representing cylindrical curves in order to keep the distance between line segments with at least c unities plus the radii of any two cylinders, each associated with a polyline. Our approach relies on the construction of a graph representing the points violating a minimum distance, reducing the contact removal problem to a graph coloring problem. Once constructed, the graph is colored using a heuristic to find out which vertices can be in the same plane. The final number of colors indicates the number of planes in third dimension needed to solve contacts. We also propose two approaches to compute vertex displacements from the computed graph and colors, both designed to obtain forests with minimum sum of displacements. Results show the efficiency of the graph construction, graph coloring and color to plane mappings. We apply the proposed method and the two displacement approaches on the problem of untangling forests of polylines representing carbon nanotubes. The number of contacts drops significantly after applying our method even in dense forests of tubes with numerous contacts.

Keywords: cylindrical curve processing. cross-free polylines. graph coloring.

LISTA DE FIGURAS

1.1	Representação de florestas de polilinhas e tubos. a) floresta de polilinhas 3D projetadas em um plano. b) dois tubos com segmentos separados por pelo menos c unidades.	16
2.1	Exemplos de posicionamento dos pontos mais próximos entre dois segmentos de reta em 2D. A linha tracejada indica a extensão da reta representada pelo segmento. Como o ponto de interseção não pertence ao segmento, o ponto extremo do segmento é a solução. Em destaque, o segmento formado pelos pontos mais próximos. a) Pontos mais próximos formados por um ponto extremo e um não extremo, onde o segmento em destaque é perpendicular a um dos segmentos; b) Quaisquer dois pontos extremos são os pontos mais próximos; c) Interseção entre dois segmentos, em que os pontos mais próximos são iguais.	20
2.2	Exemplos de contatos duplicados em que segmentos diferentes geram contatos formados pelos mesmos pontos mais próximos. a) Dois contatos localizados na mesma posição e gerados por pares de segmentos diferentes. O ponto extremo compartilhado por dois segmentos consecutivos (s_m e s_{m+1}) é o ponto mais próximo do segmento s_n . b) Quatro contatos coincidentes formado por pares de segmentos diferentes (cada par mostrado em destaque).	20
2.3	Exemplos de colorações válidas para um mesmo grafo. Os números indicam o índice da cor. a) Coloração original. b) Troca das cores 1 e 2 em relação a coloração original. c) Troca das cores 2 e 3 em relação a coloração em (b). d) Segunda cor possível para o único vértice de grau 1, no caso.	25

3.1	Exemplo de contatos (parte superior) entre duas polilinhas e as arestas resultantes (em vermelho) adicionados ao grafo (parte inferior). Pontos ausentes não geram arestas. a) o contato está dentro do segmento s_j e liga-se ao ponto de s_i . b) o contato ocorre entre os pontos extremos de qualquer duas polilinhas. c) o contato é o ponto de interseção de dois segmentos s_i and s_j . d) o subgrafo para o contato em (a). e) o subgrafo para os contatos em (b). f) o subgrafo para o contato em (c).	28
3.2	Processo de união dos grafos passo a passo de acordo com o Algoritmo 1. a) Um conjunto de contatos em segmentos consecutivos de duas polilinhas distintas. b) Primeiro subgrafo, no caso montado para o contato entre ponto extremo e ponto não extremo. Em destaque, os segmentos analisados s_m e s_n . c) Subgrafo para um contato formado entre pontos extremos. Uma das arestas coincide com a localização dos segmento formado pelo contato analisado. d) Subgrafo gerado pela interseção entre os segmentos s_{m+1} e s_{n+1} . Arestas já adicionadas por iterações anteriores estão representadas em tons mais claros. e) Subgrafo conectado resultante da união dos subgrafos de cada contato de segmentos consecutivos. Existe apenas uma aresta conectando os mesmos vértices.	29
3.3	Exemplo de deslocamento dos vértices em diferentes mapeamentos de cor a planos em Z devido à permutação de cores. Pontos em tons mais claros marcam a posição original antes do deslocamento. a) Três polilinhas definidas no plano central $Z = 0$. Em destaque, os vértices que serão deslocados, cada um com as suas respectivas cores antes do mapeamento em planos. No caso, cada conjunto de vértices que representam pontos da mesma polilinha estão associados a um plano em Z . b) Pontos da polilinha P_1 são levados a um plano $Z < 0$, os pontos de P_2 permanecem em $Z = 0$, e os pontos de P_3 deslocam-se para um plano $Z > 0$. c) Permutação das cores em que pontos de P_1 permanecem em $Z = 0$, pontos de P_2 recebem coordenadas $Z > 0$, e pontos de P_3 são deslocados para $Z < 0$	35
3.4	Vista superior de dois tubos mais próximos do que a distância mínima c . a) posição original do tubo no plano $Z = 0$. b) distância mínima z necessária para separar os tubos para impor c	36

3.5	Dois atratores fora do plano $Z = 0$ colocados na coordenada média X e Y de todos os vértices.	40
4.1	Florestas de nanotubos geradas para quatro densidades com 30 passos de crescimento e crescimento médio de $75 \mu\text{m}$ com desvio padrão de 10%. Os raios externos e internos médios de cada CNT são 6 e 10 nm, respectivamente. Cada floresta tem 80 CNTs, mas apenas uma parte deles é visível para 5, 10 e 15 CNT/ μm para mostrar o efeito de diferentes densidades. O eixo X representa a posição dos nanotubos e o eixo Y representa a altura. Ambos os eixos têm 1 μm de espaçamento.	44
4.2	Porcentagem de contatos não resolvidos em relação ao número inicial de contatos para cada densidade, onde a distância crítica é o parâmetro c . O número médio de contatos para cada densidade e distância crítica são: a) 603.2 ($c = 0.1$, $c = 0.3$, e $c = 0.5$), 645.5 ($c = 1.0$), 698.7 ($c = 2.0$); b) 734.7 ($c = 0.1$, $c = 0.3$, e $c = 0.5$), 802.8 ($c = 1.0$), 891.9 ($c = 2.0$); c) 1639.1 ($c = 0.1$, $c = 0.3$, e $c = 0.5$), 1782.7 ($c = 1.0$), 1956.2 ($c = 2.0$). d) <i>Boxplot</i> de contatos restantes para a floresta de densidade de 25 CNT/ μm ao variar a distância crítica c . Florestas com densidade 5 CNT/ μm tiveram todos os seus contatos totalmente eliminados em todos os casos.	46
4.3	<i>Boxplot</i> da soma dos deslocamentos para todas as densidades de floresta em função da distância crítica c	49
4.4	Tempo para processar florestas de densidade 25 CNT/ μm . a) número médio de contatos. b) tempo total de computação em média.	50
4.5	Visualização em 3D da floresta gerada em 2D de densidade 25 CNT/ μm . Os contatos foram calculados usando $c = 0.3$ nm. a) Floresta em 2D. b) Floresta em 3D. c) Destaque para as regiões dos tubos em que os segmentos das polilinhas possuem pelo menos um contato. d) Blocos de contato em destaque.	52
4.6	Comparação de deslocamentos resultantes do Método Linear e do Método Direto. Em a) está representado o bloco de contatos formado pelas polilinhas dos tubos no plano XY . O deslocamento e o mapeamento de cor de vértice em planos em Z para o Método Linear é mostrado em b) e para o Método Direto em c).	53

4.7 Casos de falha caracterizados pelos contatos não resolvidos pelo método proposto. Esses caso de falha acontecem em ambos os métodos de deslocamento propostos e em qualquer floresta. O bloco de contato é representado pelo conjunto de tubos de mesma cor. Em destaque, a imagem ampliada desses contatos entre os mesmos tubos, porém cada um renderizado com cores diferentes a) Diferentes ângulos de dois contatos encontrados após o deslocamento causado por má coloração em uma floresta de densidade de 25 CNT/ μm . b) Visualização em posições diferentes de dois contatos devido a deslocamento insuficiente em uma floresta de densidade 10 CNT/ μm . . . 54

A.1 Exemplo de um grafo com três vértices cada um conectado aos atratores α e β . Os pesos w_{ij} estão associados as respectivas arestas. 62

LISTA DE TABELAS

- 4.1 Média e desvio padrão do total de contatos antes do deslocamento, da porcentagem de contatos não resolvidos pelo Método Direto e Método Linear. Unidades em porcentagem para as colunas referentes aos métodos Direto e Linear, e valores absolutos para as colunas referentes ao total de contatos. 48
- 4.2 Média da soma do deslocamento provocado em uma floresta em relação às 30 florestas simuladas de cada uma das 4 densidades. Unidades em nanômetros. 50
- 4.3 Soma do total de contatos antes do deslocamento e soma do total de contatos remanescentes das 30 florestas de cada densidade para ambos métodos de deslocamento. Entre parênteses, o número de florestas que possui pelo menos um contato. 51

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	14
1.1	DEFINIÇÃO DO PROBLEMA	15
1.2	OBJETIVO	17
1.3	TRABALHOS RELACIONADOS	17
2	FUNDAMENTOS	19
2.1	POLILINHA	19
2.2	FLORESTAS DE NANOTUBOS DE CARBONO	21
2.3	COLORAÇÃO DE GRAFOS	24
3	MÉTODO PROPOSTO	26
3.1	CONSTRUÇÃO DO GRAFO	27
3.2	COLORAÇÃO DO GRAFO	30
3.2.1	Heurística de Coloração	31
3.2.2	Mapeamento de Cores em Ordem	34
3.3	CÁLCULO DO DESLOCAMENTO	35
3.3.1	Método Direto	36
3.3.2	Método Linear	38
3.3.2.1	Matriz de Ordem	40
3.3.2.2	Laplaciano	41
4	RESULTADOS	43
4.1	RESULTADOS QUANTITATIVOS	43
4.1.1	Protocolo de Avaliação	44
4.1.2	Análise dos Resultados	45
4.2	RESULTADOS QUALITATIVOS	52
5	CONCLUSÃO	56
	REFERÊNCIAS	58
	APÊNDICES	59

1 INTRODUÇÃO

Polilinhas são definidas como segmentos de reta em sequência conectados por pontos, sendo classificadas como abertas ou fechadas. São amplamente usadas na ciência da computação para representar objetos como estradas, vias elétricas e hidráulicas, veias sanguíneas, nanotubos de carbono, fibras tractográficas, simulação de fios de cabelo, entre várias outros. Os nanotubos de carbono (*carbon nanotubes* ou CNTs), por exemplo, são estruturas cilíndricas, ocas, de comprimento muito maior que seu diâmetro. Sendo assim, os CNTs podem ser representados por uma curva cilíndrica computada a partir dos pontos de uma polilinha definida como eixo medial. Essa modelagem em que CNTs são polilinhas é apresentada em Maschmann (2015), a fim de simular em 2D o crescimento de um conjunto de CNTs (floresta de CNTs) verticalmente alinhados. Esse crescimento e os contatos que surgem quando CNTs estão próximos influenciam a morfologia da floresta. O resultado dessa simulação é compatível com imagens de florestas reais, apesar de gerar polilinhas que se cruzam. Na literatura sobre CNTs, o mesmo processo de crescimento aplicado em uma floresta real produz CNTs que se dobras e deformam seu raio em vez de estarem mais próximos que uma determinada distância permitida. Portanto, para que as polilinhas realmente representem CNTs elas devem ser separadas.

Numa descrição mais geral, o método proposto visa separar um conjunto de curvas cilíndricas movendo alguns pontos de sua polilinha de controle, de modo que não existam contatos após a aplicação do deslocamento. Aqui, um *contato* é formado quando a distância mínima entre dois segmentos de reta é menor que c unidades mais o raio dos cilindros. Isto significa que ambos pontos de um segmento possivelmente precisam ser movidos para que o contato seja eliminado. Além disso, o deslocamento calculado deve ser suficiente para manter todos os tubos separados por pelo menos uma distância de c unidades. Um grafo é construído para representar os pontos dos segmentos de reta em contato, isto é, os pontos que violam a distância mínima entre quaisquer dois tubos. Esse grafo é calculado em relação à vizinhança de contatos, a fim de capturar as restrições necessárias para separar todas as polilinhas envolvidas por essa vizinhança. Uma vez construído, o grafo é colorido usando uma heurística para descobrir quais vértices podem estar no mesmo plano. O número final de cores indica o número de planos necessários para resolver os

contatos. A construção do grafo e o método de coloração são as principais contribuições deste trabalho.

Um conjunto de polilinhas de controle 2D é dado como entrada e interpretado como a projeção ortogonal de uma estrutura 3D desconhecida sobre um plano 2D. Isso se traduz em uma restrição para o deslocamento de pontos, que neste caso deve ocorrer somente na direção normal do plano onde as polilinhas são definidas. Propõe-se duas abordagens para calcular os deslocamentos de vértices a partir do grafo computado e das cores. Um método é guloso e calcula cada deslocamento localmente. O outro é global e baseado em um sistema linear. Ambos os métodos fornecem mapeamentos de cor a plano e são projetados para obter florestas com soma mínima de deslocamentos para obter um resultado compacto. Apesar de simples, essas abordagens apresentaram resultados efetivos e são também contribuições deste trabalho.

Idealmente, o grafo colorido tem todas as informações para remover todos os contatos. Na prática, no entanto, algumas interseções complexas podem levar a contatos não resolvidos. Apesar do método proposto neste trabalho nem sempre ser capaz de eliminar todos os contatos, o número de contatos cai significativamente neste aplicativo. Os resultados mostram que a remoção de contatos de curvas cilíndricas usando a coloração de grafos é uma abordagem promissora. E quanto menor o deslocamento, mais geometricamente semelhantes são as florestas de entrada e de saída.

1.1 DEFINIÇÃO DO PROBLEMA

Define-se que uma **floresta** $F = \{P_1, P_2, \dots, P_k\}$ é um conjunto de polilinhas 3D P_i , para $1 \leq i \leq k$. Para simplificar a definição do problema, as polilinhas são definidas sobre o plano XY , ou seja, todos os seus vértices têm coordenada $Z = 0$. A distribuição das polilinhas sobre o plano, sua topologia e geometria são arbitrárias. Para este trabalho, a característica mais importante das polilinhas é que elas podem se cruzar livremente (Fig. 1.1(a)). Tal floresta pode ser o modelo de fibras em um tecido orgânico, o perfil de fios de cabelo simulados ou uma fileira de nanotubos cujo crescimento foi simulado. Em todos esses exemplos, a floresta é uma projeção 2D das estruturas 3D reais.

Agora, supõe-se que cada polilinha representa o eixo medial de uma curva cilíndrica que define a região volumétrica onde se encontra o objeto representado. Esse modelo estendido pode ser definido como uma floresta de curvas cilíndricas projetadas sobre um

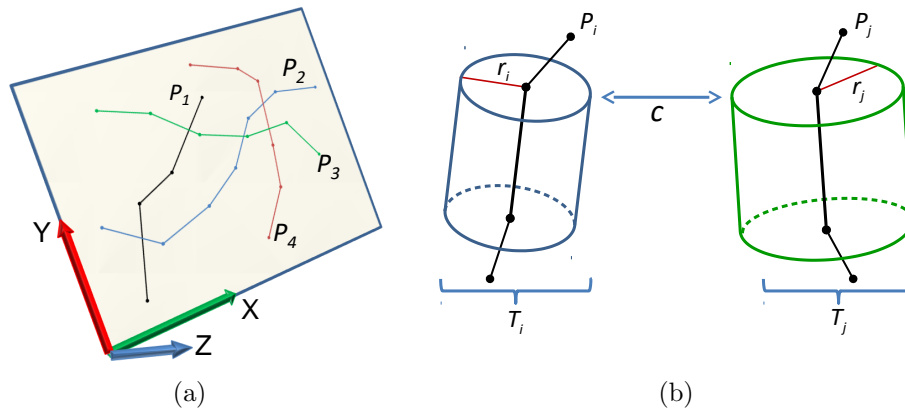


Figura 1.1: Representação de florestas de polilinhas e tubos. a) floresta de polilinhas 3D projetadas em um plano. b) dois tubos com segmentos separados por pelo menos c unidades.

plano, ou simplesmente uma **floresta de tubos**, $Q = \{T_1, T_2, \dots, T_k\}$, onde cada **tubo** é um par $T_i = (P_i, r_i)$ tal que P_i é o eixo medial sobre o plano XY e r_i é o raio do tubo cilíndrico ao longo de toda a polilinha (Fig. 1.1(b)).

Dada uma floresta de tubos Q como entrada, o problema deste trabalho é encontrar uma nova floresta $Q' = \{T'_1, T'_2, \dots, T'_t\}$ tal que, para qualquer $T'_i \in Q'$, Q é a projeção de Q' sobre o plano XY e tem-se

$$d(P'_i, P'_j) \geq c + r_i + r_j, \quad (1.1)$$

como a restrição de distância para as polilinhas, onde c é um escalar definido pelo usuário, r_i e r_j são os raios dos tubos T'_i e T'_j , $i \neq j$ respectivamente.

Em outras palavras, o objetivo é calcular uma floresta de tubos Q' cujos tubos (eixo medial mais raio) estão todos separados por pelo menos uma distância c . A distância na Desigualdade 1.1 é definida como a menor distância euclidiana entre todos os segmentos de linha das polilinhas dos tubos T'_i e T'_j . Além disso, a projeção ortogonal das polilinhas em Q' sobre o plano XY é exatamente a floresta original de tubos Q . Como resultado, Q' representa os mesmos objetos que Q representa, com a característica adicional de que os tubos estão separados por pelo menos c unidades.

1.2 OBJETIVO

Dado um conjunto de tubos cilíndricos representados por polilinhas, o objetivo deste trabalho é assegurar que todos os tubos estejam afastados entre si pelo menos c unidades. O afastamento dos tubos é feito deslocando os pontos das polilinhas de controle, logo, a distância entre os pontos é de c unidades mais o raio dos tubos. Esse deslocamento é feito apenas na coordenada Z pois as polilinhas são definidas no plano XY , por simplicidade. Assim, preserva-se a projeção ortogonal da solução no plano XY , ou seja, a projeção da solução equivale ao conjunto de polilinhas original, e evita-se a criação de novas áreas de violação de distância. Como restrição, tal deslocamento deve ser mínimo para que a geometria da solução seja próxima da geometria original, o que implica em um aspecto visual mais coerente com a aplicação em florestas de nanotubos de carbono.

1.3 TRABALHOS RELACIONADOS

Polilinhas estão presentes em vários trabalhos, tanto como o assunto principal ou somente uma ferramenta para resolver um problema. Por exemplo, Liu et al. (2007) contribuiu com um algoritmo para encontrar o *offset* das curvas para qualquer polilinha que se auto-intercepta ou não. Entretanto, no estado atual de conhecimento, não existe um trabalho que lida especificamente com o problema de encontrar polilinhas livres de contato a partir de outras projetadas, ou geradas, sobre superfícies 2D. Os seguintes trabalhos relacionados compartilham características tanto com o problema que este trabalho tenta resolver ou com o método proposto.

Restrição de comprimento de arco de um objeto em 3D é possível quando se cobre sua superfície com polilinhas, como mostra Yang et al. (2013). Elas formam a base estrutural para uma abordagem baseada em minimização de energia. Tanto a função de energia quanto as restrições são não-lineares. Em vez disso, em um dos métodos propostos aqui usa-se um sistema linear e a energia é associada aos pontos, não à polilinha.

Um método para traçar polilinhas livres de cruzamento sobre superfícies trianguladas é dado por Ray and Sokolov (2013). As polilinhas resultantes estão alinhadas com um campo de direção N -simétrico. O principal efeito é cobrir a superfície com polilinhas livre de cruzamentos e não mescladas, seguindo células N -simétricas, formando um campo que pode ser processado como contínuo. As polilinhas são montadas sem interseções e o

principal problema é onde colocar um ponto de polilinha sobre uma aresta de triângulo. Aqui, as polilinhas são feitas para serem livres de cruzamento. No problema tratado neste trabalho precisa-se separar polilinhas que já se interceptam.

Polilinhas também aparecem como *streamlines* para visualização de fluxos 3D e de campos tensoriais. Motivado pelo fato de que alguns campos podem ser muito densos, e portanto características relevantes estão ocultas, Tong et al. (2016) desenvolveu um sistema usando a metáfora da lente para distorcer as *streamlines* no espaço de tela. Ou seja, os dados da posição real não são modificados. Uma função de deslocamento empurra os pontos para uma região específica e obtém o efeito da lente. O método proposto encontra o deslocamento para empurrar os pontos para um plano no eixo Z .

Em algumas aplicações, as polilinhas precisam ser simplificadas, como na visualização de limites de mapas geográficos. O algoritmo clássico proposto por Douglas-Peucker (DOUGLAS; PEUCKER, 1973) é amplamente utilizado para esse fim e para polilinhas com qualquer dimensão. No entanto, Wu et al. (2004) observou que o algoritmo pode quebrar a propriedade de não-interseção. A modificação proposta no algoritmo gera uma polilinha livre de cruzamentos mais simples e consistente com a topologia original. Aqui, a nova polilinha é gerada iterativamente evitando interseções em vez de mover os pontos.

Cirurgias com pequenas incisões têm a assistência de uma micro câmera e de uma ferramenta cirúrgica. Esse tipo de cirurgia requer um certo nível de treinamento da coordenação mão-olho do usuário. Uma opção é usar simuladores de realidade virtual com duas condições a serem satisfeitas: computação em tempo real e realismo de animação. Para atendê-los, France et al. (2002) propôs modelar intestinos como *splines* de Catmull-Rom combinados com o método de *skinning*, conhecido na área de animação. Isto mantém o cálculo mais simples. France et al. (2002) analisa o comportamento do material quando grandes deslocamentos, contatos e auto-colisões são causados pela interação do usuário e pelo ambiente. Isso significa que os intestinos, conseqüentemente as polilinhas, são movidos para manter o sistema fisicamente válido.

2 FUNDAMENTOS

2.1 POLILINHA

Polilinhas abertas ou fechadas são definidas como uma sequência de segmentos de reta ou de arcos interconectados por pontos, e que não possui restrição em relação ao comprimento dos segmentos ou sobre o número de segmentos. Em termos mais formais, aqui, uma polilinha é denotada por P_i sendo formada por segmentos de reta $s_l = \{p_m, p_{m-1}\}$ em que p_m e p_{m-1} são pontos com três dimensões com uma coordenada sempre nula. Ou seja, pontos tridimensionais fixos em um plano $Z = 0$, no caso deste trabalho. Para este trabalho, apenas polilinhas abertas foram geradas para formar a base de dados, pois elas representam florestas de nanotubos de diferentes densidades (Seção 2.2). Neste caso, a base de dados contém vários conjuntos de polilinhas, em que cada polilinha possui segmentos de mesmo comprimento.

As polilinhas na base de dados tem geometria arbitrária, ou seja, trechos de duas ou mais polilinhas podem se cruzar ou estarem mais próximos que um determinado valor. Neste trabalho, esses trechos são identificados calculando a distância mínima entre dois segmentos. Para isso, mede-se a distância entre os pontos mais próximos entre dois segmentos, calculados como descrito em Ericson (2004). Esses pontos mais próximos entre dois segmentos em 2D podem ser encontrados em três situações: (i) um está sobre a extremidade do segmento de reta da polilinha e o outro está sobre algum ponto ao longo de outro segmento (Fig. 2.1(a)); (ii) ambos estão sobre o ponto extremo do segmento da polilinha (Fig. 2.1(b)); (iii) ambos estão sobre algum ponto do segmento da polilinha, exceto as extremidades (Fig. 2.1(c)). Caso a distância entre esses pontos mais próximos seja menor que um determinado valor, tem-se uma violação denominada aqui como **contato**.

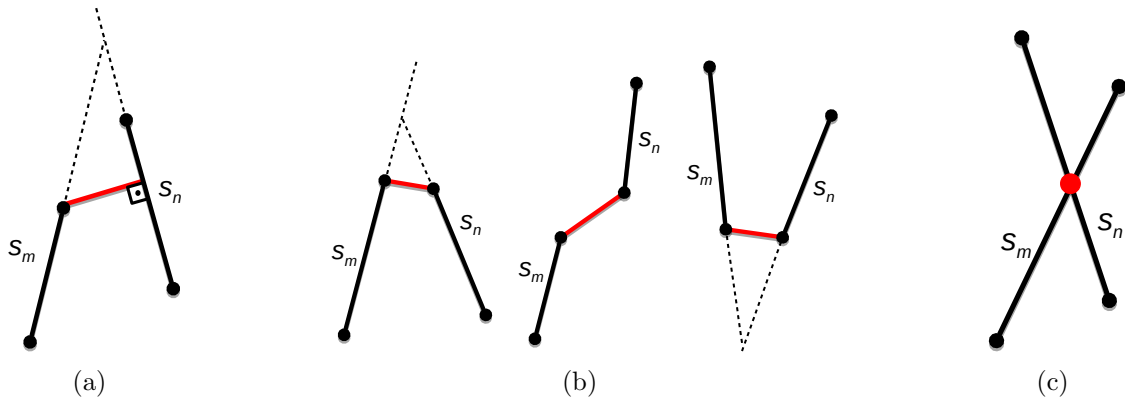


Figura 2.1: Exemplos de posicionamento dos pontos mais próximos entre dois segmentos de reta em 2D. A linha tracejada indica a extensão da reta representada pelo segmento. Como o ponto de interseção não pertence ao segmento, o ponto extremo do segmento é a solução. Em destaque, o segmento formado pelos pontos mais próximos. a) Pontos mais próximos formados por um ponto extremo e um não extremo, onde o segmento em destaque é perpendicular a um dos segmentos; b) Quaisquer dois pontos extremos são os pontos mais próximos; c) Interseção entre dois segmentos, em que os pontos mais próximos são iguais.

Nota-se que, em uma polilinha, segmentos consecutivos podem ter seu ponto extremo compartilhado sendo o ponto mais próximo em relação ao mesmo segmento de outra polilinha. Em outras palavras, os dois pontos mais próximos entre esses três segmentos são os mesmos, como mostra a Figura 2.2(a). Além disso, é possível que segmentos consecutivos, dispostos como na Figura 2.2(b), formem quatro contatos distintos, porém formados pelos mesmos pontos. Esses casos são chamados aqui de **contatos duplos**, e neste trabalho não são um problema a ser tratado.

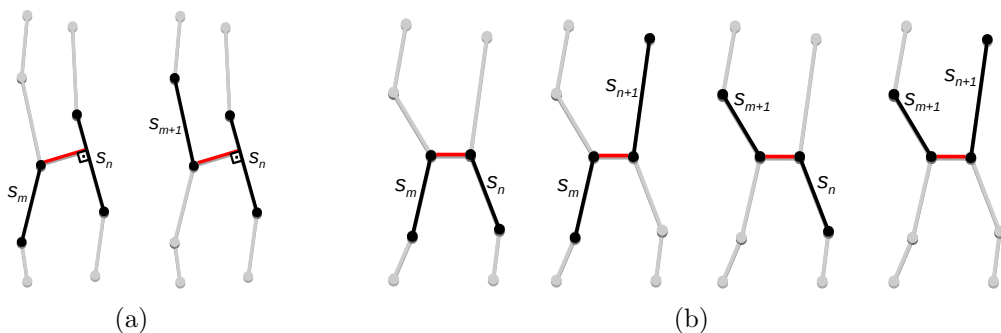


Figura 2.2: Exemplos de contatos duplicados em que segmentos diferentes geram contatos formados pelos mesmos pontos mais próximos. a) Dois contatos localizados na mesma posição e gerados por pares de segmentos diferentes. O ponto extremo compartilhado por dois segmentos consecutivos (s_m e s_{m+1}) é o ponto mais próximo do segmento s_n . b) Quatro contatos coincidentes formado por pares de segmentos diferentes (cada par mostrado em destaque).

2.2 FLORESTAS DE NANOTUBOS DE CARBONO

O nanotubo de carbono, ou *carbon nanotube* (CNT), é um alótropo de carbono com uma estrutura cilíndrica que apresenta várias propriedades para a produção de novos materiais. No entanto, esses materiais não estão disponíveis em grande escala ainda devido aos poucos anos de pesquisa sobre este tema e aos escassos resultados experimentais, apesar das numerosas previsões teóricas (ZHANG et al., 2016). Alguns desses materiais hipotéticos são complexas arquiteturas 3D feitas a partir da combinação de formas de carbono 1D, como CNT (ZHANG et al., 2016), e pode ser construída de duas maneiras: (i) via forte ligação covalente e (ii) por atração de van der Waals. De acordo com Elías et al. (2014), as junções por ligação covalente podem, por exemplo, criar ramos ligados por cadeias de carbono num único CNT e as junções de van der Waals podem ligar os CNT sem afetar a sua estrutura atômica. Neste último, é possível gerar redes de CNT aleatórias e finas em 2D para aplicações eletrônicas onde os CNTs podem cruzar, mas não se interceptam. Neste trabalho, o foco é esse tipo de floresta.

Uma simulação 2D de florestas de CNT com diferentes densidades foi proposta por Maschmann (2015). Os CNTs são modelados como vigas interconectadas de Euler-Bernoulli com duas coordenadas espaciais, que visualmente são polilinhas. Os contatos entre CNTs também são modelados como uma viga e ocorrem devido a atração de van der Waals entre CNTs próximos. Outros parâmetros relacionados ao CNT como seu diâmetro, ângulo de crescimento e taxa de crescimento, são escolhidos aleatoriamente sob uma distribuição normal com desvio padrão de 0%, 10% e 20%. Essa simulação 2D gera fileiras CNTs semelhantes as micrografias de florestas reais. Tais fileiras de CNTs podem atingir alguns micrômetros de altura ao crescer CNTs em uma simulação baseada em passos de tempo. Em cada passo de tempo, uma nova viga é adicionada na base dos CNTs, que estão sobre um substrato horizontal, causando um deslocamento sobre as vigas acima. Esse deslocamento calculado pelo Método de Elementos Finitos, ou *Finite Element Method* (FEM), em que se resolve um sistema linear $F = Kd$, onde a incógnita d é o deslocamento dos pontos, K a matriz de rigidez global, e F a força externa aplicada na estrutura. A modelagem discreta para a simulação resulta em deslocamentos que podem criar interseções entre as vigas e isso não é considerado um problema. No entanto, ao visualizar essas polilinhas e o contorno dos tubos, há vários CNTs emaranhados de uma maneira não realista. Neste modelo de estrutura, forças de reação ao crescimento são

incorporadas através da subtração na equação

$$\{F\}_t - [K]_{t-1} \{U\}_{t-1} = [K]_t \{U\}_t, \quad (2.1)$$

onde F é um vetor de força de crescimento, K é a matriz de rigidez para toda a estrutura da floresta, U é o vetor com os deslocamentos dos nós, e t indica o passo de tempo. O objetivo da modelagem adotada é capturar os efeitos de primeira ordem das interações complexas que envolvem a taxa de crescimento de cada CNT e seu diâmetro, a atração de van der Waals entre os CNTs vizinhos e propriedades mecânicas da floresta. A simulação é feita em duas dimensões para que se possa comparar o resultado com fotografias de ressonância magnética que, de acordo com Maschmann (2015), era o método de visualização de florestas reais disponível até o momento.

Cada viga (segmento do CNT/polilinha) possui uma matriz de rigidez local e três graus de liberdade para cada um dos dois pontos que a formam: deslocamento no eixo X e no eixo Y e ângulo de flexão θ . Observa-se que a estrutura formada possui as características de um pórtico plano, na qual a matriz de rigidez local no sistema de coordenadas local é dada por

$$K_{local} = \begin{bmatrix} \frac{EA}{L} & 0 & 0 & -\frac{EA}{L} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{12EI}{L^3} & \frac{6EI}{L^2} & 0 & -\frac{12EI}{L^3} & \frac{6EI}{L^2} \\ 0 & \frac{6EI}{L^2} & \frac{4EI}{L} & 0 & -\frac{6EI}{L^2} & \frac{2EI}{L} \\ -\frac{EA}{L} & 0 & 0 & \frac{EA}{L} & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{12EI}{L^3} & -\frac{6EI}{L^2} & 0 & \frac{12EI}{L^3} & -\frac{6EI}{L^2} \\ 0 & \frac{6EI}{L^2} & \frac{2EI}{L} & 0 & -\frac{6EI}{L^2} & \frac{4EI}{L} \end{bmatrix}, \quad (2.2)$$

onde $E = 1.0$ TPa é a constante elástica, L é o comprimento da viga, A é a área de seção, I é o segundo momento de inércia. A interconectividade entre os segmentos do CNT permite a geração de uma matriz de rigidez global K , quadrada, cuja dimensão é dada pelo número de graus de liberdade multiplicado pelo total de pontos de todos os CNTs na floresta, que é montada a partir das matrizes locais de cada segmento. Cada ponto possui um índice que corresponde a uma submatriz quadrada com a mesma dimensão que o grau de liberdade dentro da matriz global K (3x3, no caso). A submatriz de cada segmento é encaixada na matriz global K somando os elementos da submatriz com os elementos já presentes na matriz global, após serem convertidas para as coordenadas cartesianas. Para isso, multiplica-se $K_G = T \cdot K_{local} \cdot T^T$, onde K_G é a matriz de rigidez local em coordenadas

globais, T é a matriz de rotação completa dada por

$$T = \begin{bmatrix} C_x & C_y & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -C_y & C_x & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_x & C_y & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -C_y & C_x & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

Nessa matriz de rotação, $C_x = \cos\beta$ e $C_y = \sin\beta$, onde β é o ângulo formado pela viga e o eixo X . Outra forma de calcular, é definindo $C_x = (p_m^{(x)} - p_{m-1}^{(x)})/L$ e $C_y = (p_m^{(y)} - p_{m-1}^{(y)})/L$, onde L é o tamanho do segmento/viga, e $p_m^{(x)}$ e $p_{m-1}^{(x)}$ são as coordenadas em X dos pontos que formam o segmento/viga como definido na Seção 2.1. Similarmente, $p_m^{(y)}$ e $p_{m-1}^{(y)}$ definem a coordenada Y dos pontos que formam o mesmo segmento. Após esse processo, pontos compartilhados por dois segmentos do mesmo CNT tem os valores dos elementos somados.

A força de van der Waals também possui uma matriz de rigidez pré-definida com valores obtidos pela experimentação em florestas reais. Neste trabalho, apenas as florestas com CNTs com raio externo de $25nm$ em média foram simulados. Essa matriz de rigidez para a força de van der Waals é adicionada a matriz global K se os CNTs estiverem mais próximos que uma distância mínima. A inclusão na matriz global é feita da mesma forma em que outras vigas foram adicionadas: obtendo as coordenadas globais e somando os elementos das matrizes. De acordo com Maschmann (2015), a ligação formada pela força de van der Waals dificilmente é quebrada ao longo do crescimento de uma floresta real assim como na simulação proposta. Assim, diz-se que quando há a atuação da força de van der Waals, os CNTs estão em contato.

Dois aspectos entre a simulação original e a implementada para este trabalho são diferentes. No trabalho original de Maschmann (2015), a distância entre pontos determina a inserção da matriz de rigidez de van der Waals na matriz global. Além disso, usa-se o método atualizado de Lagrange como modelo para iterar sobre os passos de tempo. Entretanto, a simulação de florestas feita para este trabalho não faz uso desse método atualizado de Lagrange, e utiliza a distância mínima entre segmentos de reta como condição para a criação de um contato entre CNTs.

O alinhamento de CNTs simulados e de CNTs observados a partir de micrografias é medido para validar o método de Maschmann (2015). As micrografias mostram a projeção 2D de uma floresta CNT real, portanto podemos supor que esta simulação é também uma projeção 2D de uma estrutura 3D. Neste trabalho, consideramos esta estrutura 3D como uma rede aleatória de 2D van der Waals de CNTs, isto é, os CNTs se desviam entre si e são distribuídos aleatoriamente sobre um plano fino. Como a força de van der Waals é repulsiva quando os átomos estão mais próximos do que um limiar, os desvios do CNT ocorrem na distância de equilíbrio, calculada por Zhbanov et al. (2010). Portanto, os CNTs simulados precisam ser separados por essa distância mínima. Vale ressaltar que a deformação radial significativa ocorre com CNT sob compressão/carga ou entre CNTs com raio muito pequeno (≤ 1 nm) devido à força de van der Waals (PALACI et al., 2005). Como os CNTs simulados aqui têm raios grande (≥ 10 nm), a distorção da seção transversal não é levada em conta.

2.3 COLORAÇÃO DE GRAFOS

De acordo com Galinier and Hertz (2006), o termo coloração tem origem no século XIX e na observação de que um mapa administrativo pode ser colorido usando quatro cores, onde regiões vizinhas recebiam cores diferentes. A partir disso, definiu-se o Problema das Quatro Cores, em que se questiona se é possível colorir qualquer mapa usando apenas quatro cores. Nota-se que esse tipo de mapa pode ser representado por um grafo planar, sendo que cada vértice corresponde a uma região e as arestas relacionam regiões que compartilham uma fronteira. Mais tarde, provou-se que esse problema é equivalente ao Teorema das Quatro Cores, porém sem solução até o momento. Cerca de um século depois, no trabalho de Appel et al. (1977), esse teorema foi demonstrado com o auxílio de computadores, e sua prova foi simplificada em Robertson et al. (1997).

A coloração de grafos é definida na sua forma mais simples como uma atribuição de cores, ou rótulos, diferentes a vértices que compartilham a mesma aresta, e pode ser aplicada em grafos não dirigidos que não possuem laços. Uma solução trivial pode ser atribuir a cada vértice uma cor diferente. Entretanto, quando se busca o número mínimo de cores (número cromático) tem-se a coloração ótima. O problema de coloração utilizando o número cromático é classificado como NP-completo, como Karp (1972) demonstra. Neste caso, heurísticas são desenvolvidas para encontrar uma solução aceitável em tempo de

processamento razoável.

No problema clássico de coloração a cor que cada vértice recebe não é relevante, apenas se a coloração é válida. Dessa forma, pode-se trocar a cor de um conjunto de vértices de mesma cor, como mostra a Figura 2.3 (a), (b), (c). Essa característica é explorada nesse trabalho, uma vez que a cor de cada vértice tem impacto na solução do problema abordado aqui. Além disso, é possível atribuir mais de uma cor a um vértice sem mudar o número cromático ou infringir a condição que mantém uma coloração válida, como mostra a Figura 2.3(d). Tal possibilidade aumenta o número de colorações que pode ou não melhorar a solução encontrada pela heurística detalhada na Seção 3.2.1.

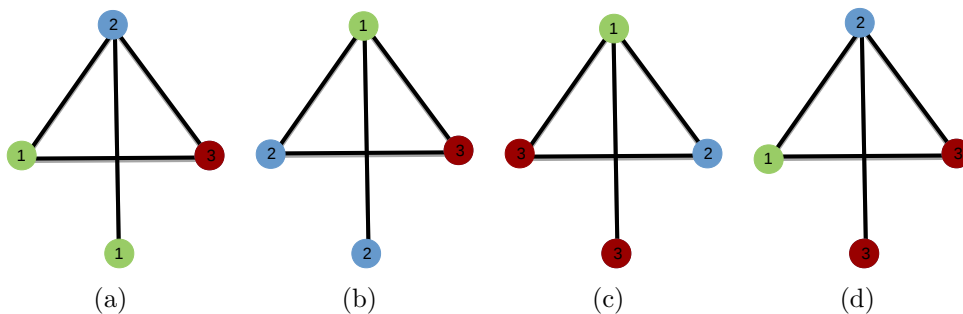


Figura 2.3: Exemplos de colorações válidas para um mesmo grafo. Os números indicam o índice da cor. a) Coloração original. b) Troca das cores 1 e 2 em relação a coloração original. c) Troca das cores 2 e 3 em relação a coloração em (b). d) Segunda cor possível para o único vértice de grau 1, no caso.

3 MÉTODO PROPOSTO

Observa-se que um procedimento trivial para resolver o problema definido na Seção 1.1 é colocar cada polilinha P_i no i -ésimo plano paralelo ao plano XY ; duas camadas i e j são separadas por uma distância de pelo menos $c + r_i + r_j$, em que c é uma distância pré-definida, r_i e r_j são os raios dos tubos T_i e T_j cujo eixo medial são as polilinhas P_i e P_j , respectivamente. No entanto, a solução gerada por essa abordagem não é útil na prática dado o grande deslocamento gerado nas polilinhas.

Embora esse procedimento trivial não produza uma floresta de tubos conveniente, a ideia de colocar partes das polilinhas em camadas diferentes é interessante. Em resumo, a abordagem deste trabalho detecta as violações de restrições e lida com os conflitos colocando esses pontos das polilinhas em planos diferentes (paralelo ao plano XY) de acordo com uma determinada ordem. A determinação dessa ordem de planos em Z é crucial para o cálculo do deslocamento de cada ponto da polilinha necessário para afastar os tubos.

A floresta dos tubos $Q = \{T_1, T_2, \dots, T_t\}$ é analisada com o objetivo de construir grafos em que seus vértices são pontos dos tubos. Esses pontos pertencem aos segmentos de reta das polilinhas que violam a restrição de distância definida pela Desigualdade 1.1. As arestas do grafo relacionam os pontos que devem ficar em planos distintos de acordo com os contatos encontrados em cada segmento. Na Seção 3.1 descreve-se a montagem do grafo com mais detalhes. Um problema de otimização deve então ser resolvido, onde as cores são atribuídas aos vértices com o objetivo de minimizar os conflitos remanescentes. A heurística usada aqui para a coloração de grafo é detalhada na Seção 3.2. Os vértices dos grafos que representam os pontos dos tubos são colocados em planos paralelos ao plano XY de acordo com suas cores. O cálculo dos deslocamentos pode ser realizado por abordagens diferentes. Neste trabalho, duas propostas são utilizadas e nomeadas de **Método Direto** e **Método Linear**. O Método Direto calcula os deslocamentos algoritmicamente e usando apenas informações locais, enquanto o Método Linear obtém os valores de deslocamento resolvendo um sistema linear com uma informação global. Essas abordagens são detalhadas na Seção 3.3.

3.1 CONSTRUÇÃO DO GRAFO

O objetivo do grafo é identificar os pontos das polilinhas que precisam ser movidos e quais devem estar em planos diferentes (paralelo ao plano XY , no caso deste trabalho). Todas as polilinhas são formadas por uma coleção de segmentos consecutivos $s_l = \{p_m, p_{m-1}\}$, onde p_m e p_{m-1} são dois pontos consecutivos. O conjunto S de todos os segmentos em uma floresta é denotado por $\{s_1, s_2, \dots, s_{|S|}\}$. Define-se que um contato é composto pelos pontos mais próximos de dois segmentos, calculados conforme descrito em Ericson (2004). Quaisquer dois segmentos s_a e s_b de duas polilinhas distintas P_i e P_j , respectivamente, estão em contato quando

$$d(s_a, s_b) < c + r_i + r_j, \quad (3.1)$$

onde c é um parâmetro definido pelo usuário para as unidades entre os tubos T_i e T_j , r_i e r_j são os raios das polilinhas, e $d(s_a, s_b)$ é a distância euclidiana dos pontos mais próximos de s_a e s_b . Seja o subconjunto $S' \subseteq S$ formado por todos os segmentos que satisfazem a Desigualdade 3.1, ou seja, segmentos com pelo menos um contato. Os vértices do grafo são então compostos por todos os pontos que formam os segmentos em S' .

Cada segmento em S' está em contato com pelo menos um outro segmento também em S' de uma polilinha diferente. A distância entre os segmentos em contato de S' deve aumentar para que os contatos sejam eliminados. Os tipos de contatos são baseados na posição dos pontos mais próximos entre os segmentos, que podem ser localizados de três maneiras possíveis: (i) um deles é um ponto final e o outro está ao longo do segmento (Fig. 3.1(a)); (ii) ambos são pontos finais (Fig.3.1(b)); (iii) ambos estão ao longo do segmento (Fig. 3.1(c)). No caso (i) e (ii), quando um ponto de contato está sobre um ponto compartilhado por segmentos consecutivos, ambos os segmentos incidentes têm um contato e, conseqüentemente, ambos são adicionados a S' .

De acordo com a Seção 1.1, a projeção ortogonal das polilinhas deve ser preservada, portanto os pontos de segmentos distintos envolvidos no mesmo contato devem ser atribuídos a planos diferentes em Z . A partir disso, define-se que uma aresta no grafo conecta apenas dois pontos que devem estar em planos diferentes. Em outras palavras, uma aresta conecta um dos pontos extremo $p_m \in s_a$ a um dos pontos extremo $p_n \in s_b$ se s_a e s_b estão em contato. Logo, p_m e p_n estarão em planos diferentes em Z . Neste trabalho, nem todos os pares de pontos que satisfazem essa definição se tornam uma aresta. Em vez

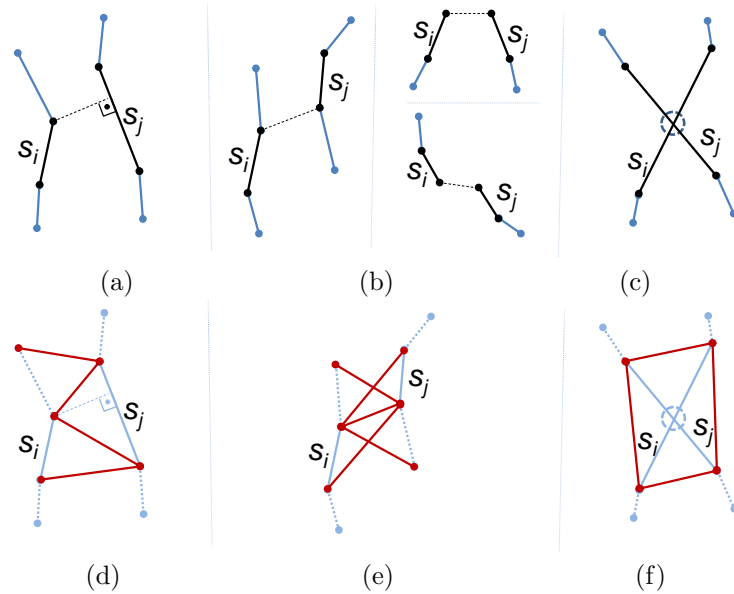


Figura 3.1: Exemplo de contatos (parte superior) entre duas polilinhas e as arestas resultantes (em vermelho) adicionados ao grafo (parte inferior). Pontos ausentes não geram arestas. a) o contato está dentro do segmento s_j e liga-se ao ponto de s_i . b) o contato ocorre entre os pontos extremos de qualquer duas polilinhas. c) o contato é o ponto de interseção de dois segmentos s_i and s_j . d) o subgrafo para o contato em (a). e) o subgrafo para os contatos em (b). f) o subgrafo para o contato em (c).

disso, subgrafos predefinidos são gerados especificamente para cada tipo de contato, como representado na Figura 3.1.

Observa-se que vários **subgrafos conectados** são formados pelos contatos de segmentos consecutivos. Pela definição dos tipos de contatos, o número mínimo de vértices de um subgrafo conectado é 4 (Fig. 3.1(f)). Neste trabalho, esses subgrafos conectados são montados de acordo com o Algoritmo 1, onde percorre-se iterativamente os segmentos e analisa-se seus contatos associados. Compara-se apenas os segmentos de polilinhas distintas para medir a distância entre eles, sendo que cada segmento da polilinha P_i é comparado com todos os segmentos de todas as polilinhas P_j , em que $j > i$ (linhas 3 e 5). Dessa forma, não é necessário calcular a distância entre segmentos de polilinhas de índice menor que i pois já foram calculadas em iterações anteriores. A função na linha 7 computa os pontos mais próximos entre dois segmentos, e estes formam um segmento de reta denotado por s_{mn} . O tamanho deste segmento representa a distância mínima entre os segmentos s_m e s_n . Caso este tamanho satisfaça a Desigualdade 3.1 (linha 9), significa que os pontos que formam s_m e s_n serão adicionados ao conjunto S' . Além disso, um subgrafo deve ser gerado de acordo com o tipo de contato, mostrados na Figura 3.1, que os segmentos s_m e s_n formam. Esses tipos são identificados com base na posição dos

pontos mais próximos em relação aos seus respectivos segmentos (linha 10). Uma vez identificado, une-se o subgrafo gerado (linha 11) ao subgrafo conectado, denotado por G na linha 12. Essa união de grafos é representada passo a passo pela Figura 3.2. Os segmentos analisados e as arestas de cada subgrafo estão em destaque. Apenas arestas que não existem no subgrafo conectado são adicionados no processo de união. Dessa forma, existe apenas uma aresta ligando dois vértices.

Nota-se que se um dos pontos em um subgrafo conectado é movido, ele pode afetar todos os outros pontos. Portanto, uma estratégia para resolver os contatos deve levar em conta todos os pontos em cada subgrafo de uma só vez. Na próxima seção, propõe-se uma abordagem de coloração de grafo para eliminar os contatos em cada subgrafo.

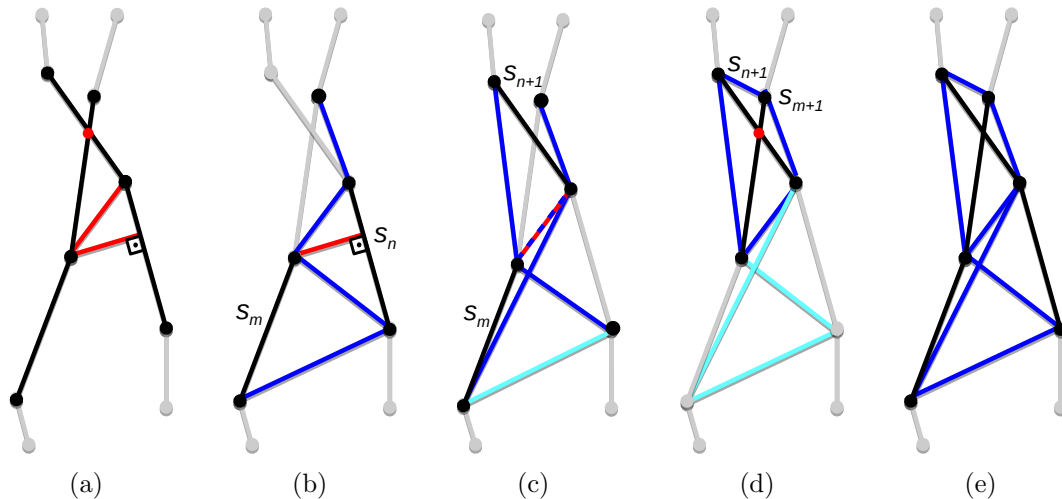


Figura 3.2: Processo de união dos grafos passo a passo de acordo com o Algoritmo 1. a) Um conjunto de contatos em segmentos consecutivos de duas polilinhas distintas. b) Primeiro subgrafo, no caso montado para o contato entre ponto extremo e ponto não extremo. Em destaque, os segmentos analisados s_m e s_n . c) Subgrafo para um contato formado entre pontos extremos. Uma das arestas coincide com a localização dos segmento formado pelo contato analisado. d) Subgrafo gerado pela interseção entre os segmentos s_{m+1} e s_{n+1} . Arestas já adicionadas por iterações anteriores estão representadas em tons mais claros. e) Subgrafo conectado resultante da união dos subgrafos de cada contato de segmentos consecutivos. Existe apenas uma aresta conectando os mesmos vértices.

Algoritmo 1: GERAGRAFO

Entrada: Floresta: Q
Saída: Grafo : G

```

1 início
2   Grafo : subgrafo
3   para cada polilinha  $P_i \in Q$  faça
4     para cada segmento  $s_m \in P_i$  faça
5       para cada polilinha  $P_j \in Q, j > i$  faça
6         para cada segmento  $s_n \in P_j$  faça
7            $s_{mn} \leftarrow \text{PontosMaisPróximos}(s_m, s_n)$ 
8            $d \leftarrow \text{Tamanho}(s_{mn})$ 
9           se  $d < c + r_i + r_j$  então
10             $tipo \leftarrow \text{TipoContato}(s_{mn}, s_m, s_n)$ 
11             $subgrafo \leftarrow \text{Subgrafo}(tipo)$ 
12             $G \leftarrow G \cup subgrafo$ 
13          fim se
14        fim para cada
15      fim para cada
16    fim para cada
17  fim para cada
18 fim
19 retorna  $G$ 

```

3.2 COLORAÇÃO DO GRAFO

O problema de coloração de vértices trata de atribuir cores diferentes a vértices compartilhando uma aresta e usando o número mínimo de cores (número cromático). A cor atribuída a um vértice não é relevante *per se*, ou seja, a coloração ainda é válida quando se permuta as cores dos vértices após uma primeira coloração, ou quando é possível atribuir mais de uma cor válida para o mesmo vértice. Como este é um problema NP-completo, heurísticas são adequadas para calcular uma boa solução em um tempo de processamento razoável. Estas heurísticas podem incorporar outros objetivos, além de encontrar o menor número de cores, como escolher a melhor cor para um vértice. Neste trabalho, as cores são mapeadas em planos em Z de forma que os segmentos sejam separados e a cor do vértice indica um plano onde o ponto da polilinha deve estar. Dependendo dessa escolha, um contato pode ser eliminado ou não.

A correspondência entre planos e cores é devido à montagem do grafo definida na Seção 3.1. Nota-se que vértices conectados por uma aresta devem estar em planos diferentes em Z , assim como as cores desses dois vértices devem ser diferentes. Dessa forma, pode-se

encontrar o número de planos necessário para separar os segmentos em contato resolvendo o problema de coloração. Além disso, a cor de cada vértice (ponto da polilinha) indica em qual dos planos em Z ele deve estar após o deslocamento. Nesta etapa sabe-se apenas que existem planos em Z desconhecidos, mas que podem ser organizados em ordem crescente. De forma indireta, as cores também podem ser ordenadas devido ao mapeamento entre cor e plano em Z . Não há critério para escolher diretamente o melhor mapeamento, portanto, testa-se os $|C|!$ mapeamentos possíveis até que se encontre aquele que cause o menor número de violações após o deslocamento.

Diferentemente do problema clássico de coloração, aqui o número de planos não é necessariamente o número cromático, uma vez que o objetivo principal é eliminar os contatos. Para isso, propõe-se uma heurística na Seção 3.2.1 que busca colorir o subgrafo conectado considerando como um contato é formado. Na Seção 3.2.2 propõe-se um mapeamento de cor em plano em Z que gere o menor número de contatos.

3.2.1 HEURÍSTICA DE COLORAÇÃO

A heurística de coloração desenvolvida para este trabalho visa atingir dois objetivos: (i) manter vértices que representam pontos de uma mesma polilinha com a mesma cor; e (ii) usar o menor número de cores. Dessa forma, os trechos das polilinhas tendem a ser posicionados em um único plano, ou em dois planos consecutivos. Caso isso aconteça, os contatos são eliminados na fase de deslocamento para todos os segmentos do trecho de uma polilinha. Caso contrário, o segmento com pontos posicionados em planos não consecutivos intercepta um plano intermediário, onde é possível que exista um outro segmento próximo o suficiente para formar um contato. Em relação ao segundo item, usar o menor número de cores possível significa que o deslocamento provocado na etapa seguinte será menor. Conseqüentemente, a distorção nos tubos será menor e as florestas de entrada e saída permanecerão geometricamente mais próximas.

Seja C uma coloração que representa um conjunto de cores $\{c_1, c_2, \dots, c_{|C|}\}$ para cada subgrafo conectado. O número de cores $|C|$ é o número de planos necessários para separar as polilinhas e, neste trabalho, não se espera que seja o mínimo global. A coloração do grafo é realizada por uma técnica gulosa em conjunto com o algoritmo *first fit* para percorrer o grafo. Este algoritmo trabalha em uma lista ordenada V de vértices dos quais essa ordem impacta diretamente a coloração resultante. Propõe-se ordenar os vértices de

tal forma que os vértices associados com as polilinhas com mais arestas no grafo apareçam primeiro. Isto significa que os tubos originais com mais contatos são processados primeiro, isto é, as cores são atribuídas primeiro aos seus vértices associados. Assim, os primeiros vértices possivelmente serão coloridos com a mesma cor. Além disso, os vértices associados ao mesmo tubo são classificados em ordem decrescente de sua valência.

Supondo uma lista infinita de cores $\{c_1, c_2, \dots\}$, o método de coloração guloso proceda da seguinte forma. Para cada vértice em V , primeiro verifica-se seus vizinhos consecutivos na mesma polilinha, que também pertence ao grafo. Se uma ou duas cores foram atribuídas aos vizinhos, escolhemos a cor c_i com o menor índice i . Esta cor é mantida se for válida em relação à cor atual. Caso contrário, procura-se a primeira cor na sequência $\{c_{i-1}, \dots, c_1, c_{i+1}, \dots\}$ que forma uma coloração válida. Se os vizinhos ainda não estiverem coloridos ou não pertencerem ao grafo, realiza-se o mesmo processo de busca de cor, mas com a sequência $\{c_1, c_2, \dots\}$. Observe que nessa pesquisa e verificação de cores, as cores ainda não utilizadas são adicionadas automaticamente a C .

O Algoritmo 3 mostra a busca pela melhor cor para o vértice v_i como descrito anteriormente. Na linha 2, os vértices v_a e v_b representam os pontos acima e abaixo, respectivamente, do ponto representado pelo vértice v_i na mesma polilinha. O valor zero atribuído à cor na linha 3 não representa uma cor, é usado apenas para inicializar a variável. A função utilizada na linha 5 é referente ao Algoritmo 2, onde verifica-se se uma cor c é válida para o vértice v_i analisando a cor de seus vértices vizinhos. Das linhas 10 a 17 escolhe-se a cor para iniciar a sequência de busca a partir da cor de maior índice dentre os vértices acima (v_a) e abaixo (v_b) de v_i .

Algoritmo 2: TESTACOR

Entrada: Cor : c , Vértice: v_i

```

1 início
2   para cada  $v_j \in \text{Vizinho}(v_i)$  faça
3     se  $c = \text{Cor}(v_j)$  então
4       retorna Falso
5     fim se
6   fim para cada
7 fim
8 retorna Verdadeiro

```

Algoritmo 3: ESCOLHECOR

Entrada: Vértice: v_i , Vetor: *OrdemCor*
Saída: Cor : c

```

1 início
2   Vértice :  $v_a, v_b$ 
3   Cor:  $c \leftarrow 0$ 
4   se  $\text{Cor}(v_a) = 0$  e  $\text{Cor}(v_b) = 0$  então
5     repita
6        $c \leftarrow c + 1$ 
7     até  $\text{TestaCor}(c, v_i) = \text{Verdadeiro}$ ;
8   fim se
9   senão
10    se  $\text{Cor}(v_a) \neq 0$  e  $\text{Cor}(v_b) \neq 0$  então
11       $c \leftarrow \text{Max}(\text{Cor}(v_a), \text{Cor}(v_b))$ 
12    fim se
13    se  $\text{Cor}(v_a) = 0$  e  $\text{Cor}(v_b) \neq 0$  então
14       $c \leftarrow \text{Cor}(v_b)$ 
15    fim se
16    se  $\text{Cor}(v_a) \neq 0$  e  $\text{Cor}(v_b) = 0$  então
17       $c \leftarrow \text{Cor}(v_a)$ 
18    fim se
19     $c_{inicial} \leftarrow c + 1$ 
20    repita
21       $c \leftarrow c - 1$ 
22    até  $\text{TestaCor}(c, v_i) = \text{Verdadeiro}$  e  $c \leq 0$ ;
23    se  $c = 0$  então
24       $c \leftarrow c_{inicial} - 1$ 
25    repita
26       $c \leftarrow c + 1$ 
27    até  $\text{TestaCor}(c, v_i) = \text{Verdadeiro}$ ;
28    fim se
29  fim se
30 fim
31 retorna  $c$ 

```

3.2.2 MAPEAMENTO DE CORES EM ORDEM

Neste trabalho, todos os planos da solução são paralelos ao plano XY e o total de cores equivale ao número de planos necessários para separar os tubos. Esses planos são basicamente definidos pela posição que ocupam no eixo Z e podem ser ordenados por $z_1 < z_2 < \dots < z_{|C|}$, onde $|C|$ é o total de cores e z_i é uma coordenada Z que representa o plano. Uma vez que cada cor representa um plano, as cores de um subgrafo conectado também podem ser ordenadas $c_1 \prec c_2 \prec \dots \prec c_{|C|}$, sendo c_i a cor mapeada em uma coordenada z_j . Nota-se que nesta etapa, os valores exatos de cada plano ainda são desconhecidos, porém sabe-se a relação entre eles. A partir da ordenação das cores, o método de deslocamento posteriormente define o valor de cada z_i mantendo a ordem original válida.

Embora planos e cores possam ser ordenados, o mapeamento de uma cor a um plano é livre. Isto significa que o índice i atribuído a uma cor não determina que seu plano correspondente tem o mesmo índice, mas a sua posição relativa. Ou seja, a i -ésima cor, não a cor c_i , corresponde ao plano na coordenada z_i . Logo, o problema aqui é definir uma ordem de cores para se ter a ordem dos planos em Z . Em outras palavras, é necessário definir qual das cores recebe a profundidade z_1 (a menor em Z), qual das cores recebe z_2 , e assim por diante.

Trocando a posição relativa das cores em uma ordenação, pode-se encontrar a melhor sequência de planos para reposicionar os vértices em Z . Isso é feito explorando todas as permutações das $|C|$ cores sem repetição para encontrar uma permutação que minimize o número de contatos. Para isso, é necessário calcular o deslocamento causado por cada permutação e verificar quantos contatos permanecem. Isso é realmente calculado usando os métodos de deslocamento propostos na próxima seção.

Na prática, a permutação na ordem de cores tem o mesmo efeito de trocar a cor dos vértices. Neste caso, o conjunto de vértices de uma cor c_i passam a ter a cor c_j , e o conjunto de vértices com a cor c_j passam a ter a cor c_i . Dessa forma, o deslocamento de duas permutações de cor pode provocar distorções diferentes como mostra a Figura 3.3. No caso, a Figura 3.3(c) tem muitos pontos sendo deslocados em relação a Figura 3.3(b).

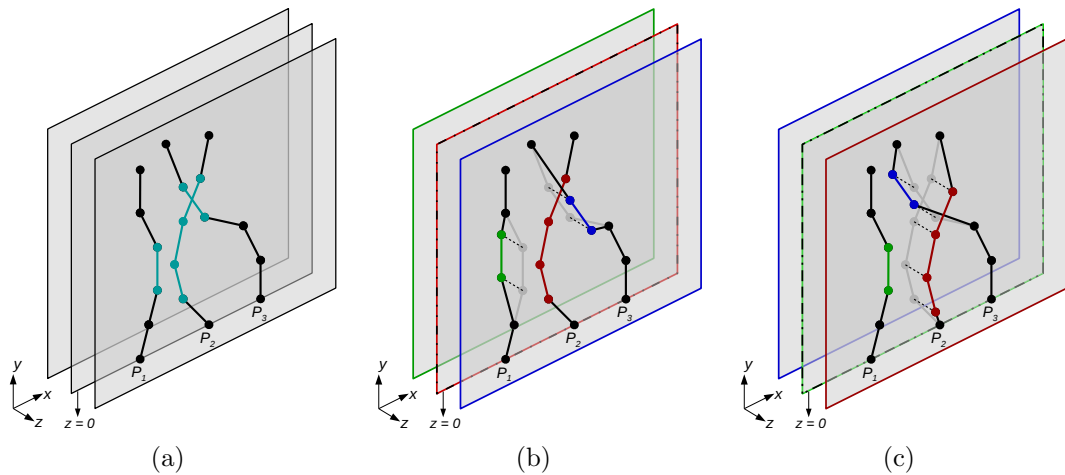


Figura 3.3: Exemplo de deslocamento dos vértices em diferentes mapeamentos de cor a planos em Z devido à permutação de cores. Pontos em tons mais claros marcam a posição original antes do deslocamento. a) Três polilinhas definidas no plano central $Z = 0$. Em destaque, os vértices que serão deslocados, cada um com as suas respectivas cores antes do mapeamento em planos. No caso, cada conjunto de vértices que representam pontos da mesma polilinha estão associados a um plano em Z . b) Pontos da polilinha P_1 são levados a um plano $Z < 0$, os pontos de P_2 permanecem em $Z = 0$, e os pontos de P_3 deslocam-se para um plano $Z > 0$. c) Permutação das cores em que pontos de P_1 permanecem em $Z = 0$, pontos de P_2 recebem coordenadas $Z > 0$, e pontos de P_3 são deslocados para $Z < 0$.

3.3 CÁLCULO DO DESLOCAMENTO

Após a coloração do grafo descrita na Seção 3.2, cada cor de um subgrafo conectado precisa ser mapeado em um valor de coordenada Z . Na etapa de deslocamento, calcula-se a coordenada em Z para cada cor, dentro do intervalo pré-definido pela ordem das cores $c_1 \prec c_2 \prec \dots \prec c_{|C|}$, para todos os vértices de cada subgrafo. Como mencionado acima, a posição das cores pode ser permutada para se encontrar a melhor ordem. Propõe-se duas abordagens de deslocamento: (i) o **Método Direto**, que algoritmicamente atribui uma única coordenada em Z para cada cor do subgrafo; (ii) e o **Método Linear**, que é baseado em um sistema linear e permite que vértices de mesma cor em um subgrafo tenham coordenadas em Z próximas.

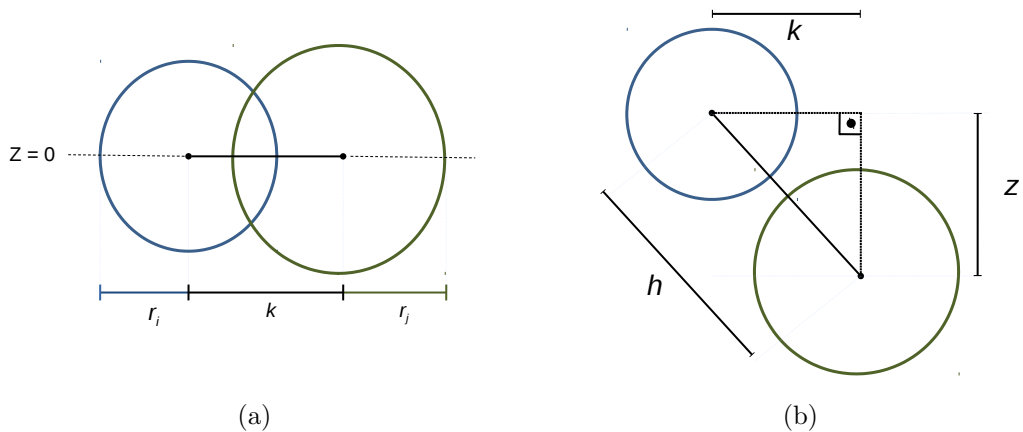


Figura 3.4: Vista superior de dois tubos mais próximos do que a distância mínima c . a) posição original do tubo no plano $Z = 0$. b) distância mínima z necessária para separar os tubos para impor c .

Espera-se que a floresta solução seja geometricamente próxima da floresta de entrada, caso contrário o problema teria solução trivial (isolar cada polilinha em um planos distantes em Z). Portanto, os deslocamentos devem ser o menor possível. A distância entre os segmentos em contato devem ser de pelo menos c unidades mais o raio dos tubos que contém esse segmentos (Fig. 3.4), e não a distância entre planos em Z , como mostra

$$z^2 = h^2 - k^2, \quad (3.2)$$

onde k é o comprimento do contato (distância entre os pontos mais próximos de dois segmentos) e $h = c + r_i + r_j$ é a distância mínima necessária para separar os tubos. Esse cálculo para z é usado em ambas abordagens. Também, os deslocamentos estão centrados em $Z = 0$ onde as polilinhas estão definidas, para que a distorção total dos tubos seja suavizada.

3.3.1 MÉTODO DIRETO

A essência do Método Direto é atribuir para cada cor um único deslocamento (valor da coordenada Z). Assim, todos os vértices com a mesma cor em um subgrafo conectado são movidos na mesma quantidade. Para isso, uma única distância em Z (z na Equação 3.2) deve ser associada entre duas cores consecutivas, respeitando a ordem de cores. Supondo

uma ordenação de $|C|$ cores dada por $c_1 \prec c_2 \prec \dots \prec c_{|C|}$, tem-se

$$\underbrace{c_1 \prec c_2 \prec c_3 \prec c_4 \prec c_5}_{z} \dots \prec \underbrace{c_{|C|-1} \prec c_{|C|}}_z \quad (3.3)$$

em que cada z é calculado pela Equação 3.2 apenas entre cores consecutivas, e possivelmente o valor de z varia a cada par de cores. Neste exemplo, os índices das cores coincidem com a posição das cores nesta sequência de ordem, por simplificação. Nota-se que vértices com a mesma cor podem representar pontos de polilinhas distintas, ou seja, raios distintos. Como o valor de z na Equação 3.2 depende de r_i, r_j e k , a distância entre cores consecutivas pode variar de acordo com os vértices analisados. Então, define-se que z deve ser o maior valor possível dentro do subgrafo conectado para cada par de cores consecutivas. Para isso, associa-se cada cor c_i com o maior raio dentre todas as polilinhas que tem vértices coloridos por c_i . Também, define-se k como o comprimento do menor contato entre todos esses vértices. Como resultado, alguns vértices se movem além da distância mínima necessária localmente para eles. A maioria dos contatos que geraram o subgrafo conectado são eliminados e isto é mais importante que uma minimização justa dos deslocamentos. Além disso, esta abordagem é fácil de implementar e tem tempo de cálculo eficiente.

Os deslocamentos devem causar o mínimo de distorção nas polilinhas originais para manter a floresta de saída geometricamente próxima da floresta de entrada. Portanto os deslocamentos estão centrados no plano onde as polilinhas foram definidas ($Z = 0$). Define-se que a primeira metade das cores em uma dada ordem de cores representam planos atrás (planos em $-Z$) e a segunda metade, planos à frente (planos em $+Z$). O deslocamento associado a cada cor é dado pelo somatório das distâncias em Z até a cor na posição $|C|/2$. Se $|C|$ é ímpar, vértices com a cor na posição $\lceil |C|/2 \rceil$ permanecem em $Z = 0$. Se $|C|$ é par, metade do valor da distância em Z das cores na posição $|C|/2$ e $|C|/2 + 1$ é incluída no somatório para a cor c_i .

O Algoritmo 4 mostra o cálculo de deslocamento do Método Direto para cada vértice do grafo. Na linha 4 tem-se como entrada um subgrafo conectado G e o vetor com a ordem das cores $OrdemCor$. A função na linha 2 calcula o comprimento do menor contato encontrado entre os segmentos cujos pontos fazem parte do subgrafo G . Os vetores declarados nas linhas 3, 11 e 16 são inicializados com o valor zero para todos seus elemen-

tos. A função na linha 6 retorna o índice da posição que a cor do vértice v está no vetor $OrdemCor$. Ao final da execução deste algoritmo para todos os subgrafos conectados, a floresta solução Q' apresentará regiões de polilinhas com segmentos perfeitamente alinhados e equidistantes em Z em relação a outros segmentos.

Algoritmo 4: MÉTODO DIRETO

Entrada: Grafo: G , Vetor: $OrdemCor$

```

1 início
2    $k \leftarrow \text{MenorContato}(G)$ 
3    $\text{raios}[|C|] \leftarrow 0$ 
4   para cada vértice  $v \in G$  faça
5      $r \leftarrow \text{Raio}(v)$ 
6      $i \leftarrow \text{PosiçãoCor}(v, \text{OrdemCor})$ 
7     se  $r > \text{raios}[i]$  então
8        $\text{raios}[i] \leftarrow r$ 
9     fim se
10  fim para cada
11   $z[|C| - 1] \leftarrow 0$ 
12  para  $i \leftarrow 1$  até  $i \leq |C| - 1$  faça
13     $h \leftarrow c + \text{raios}[i] + \text{raios}[i + 1]$ 
14     $z[i] \leftarrow \sqrt{h^2 - k^2}$ 
15  fim para
16   $d[|C|] \leftarrow 0$ 
17  se  $|C|/2$  é par então
18     $d[|C|/2] \leftarrow d[|C|/2] - z[|C|/2]/2$ 
19     $d[|C|/2 + 1] \leftarrow d[|C|/2 + 1] + z[|C|/2]/2$ 
20  fim se
21  para  $i \leftarrow 1$  até  $i < \lceil |C|/2 \rceil$  faça
22     $d[i] \leftarrow -\sum_{j=i}^{\lceil |C|/2 \rceil} z[j]$ 
23  fim para
24  para  $i \leftarrow \lfloor |C|/2 \rfloor + 1$  até  $i < |C|$  faça
25     $d[i] \leftarrow \sum_{j=i}^{|C|} z[j]$ 
26  fim para
27  para cada vértice  $v \in G$  faça
28     $i \leftarrow \text{PosiçãoCor}(v, \text{OrdemCor})$ 
29     $v^{(z)} \leftarrow d[i]$ 
30  fim para cada
31 fim

```

3.3.2 MÉTODO LINEAR

Em uma abordagem diferente, o Método Linear depende de dois sistemas lineares de equações para calcular o deslocamento dos vértices de um subgrafo. Os sistemas são re-

solvidos em sequência e a solução de um é utilizada para construir a matriz de coeficientes do outro. O primeiro sistema linear é baseado na ordem de cores dada pela coloração do subgrafo, como descrito na Seção 3.2. O segundo sistema linear calcula o deslocamento final de cada vértice.

Neste método, o deslocamento dos vértices é calculado aplicando uma versão modificada do operador Laplaciano discreto no subgrafo conectado, de forma similar à apresentada por Pecanha et al. (2013). No trabalho de Pecanha et al. (2013), cada vértice possui uma energia em função do deslocamento do próprio vértice e dos vértices vizinhos, e é ponderada pelo peso atribuído às arestas. O valor para o peso de uma aresta é inversamente proporcional à valência do vértice vizinho, o que torna o operador Laplaciano uniforme. O deslocamento é obtido resolvendo um sistema linear em que cada linha é a função de energia de um vértice. Para este trabalho, cada linha desse sistema linear é dada por

$$\sum w_{ij}(t_i - t_j) = - \sum w_{ij}(v_i - v_j), \quad (3.4)$$

onde o somatório envolve todos os vértices v_j vizinhos a v_i , w_{ij} é o peso da aresta que conecta o v_i ao v_j , t_i e t_j é o deslocamento desconhecido para v_i e v_j , respectivamente, e v_i e v_j são as posições dos i -ésimo e j -ésimo vértices. Entretanto, a aplicação direta deste operador no subgrafo conectado gera dois resultados não esperados: (i) não há deslocamento em Z , pois todos os vértices estão situados no mesmo plano; e (ii) os pesos das arestas que geram o deslocamento necessário para eliminar os contatos é desconhecido. Para resolver o primeiro caso, insere-se dois pontos externos a cada subgrafo, chamados aqui de **atratores** α e β , com um valor não nulo para a coordenada Z . Um atrator tem coordenada Z negativa, enquanto o outro tem coordenada Z positiva, e ambos estão conectados a todos os outros vértices do subgrafo, exceto a outro atrator (Fig. 3.5). No segundo caso, nota-se que a distância entre os deslocamentos de dois vértices com cores consecutivas tem que ser o valor de z na Equação 3.2. Logo, é possível derivar um sistema linear em que os pesos são a incógnita, onde cada linha relaciona os pesos para as arestas que ligam o atrator a dois vértices com cores consecutivas.

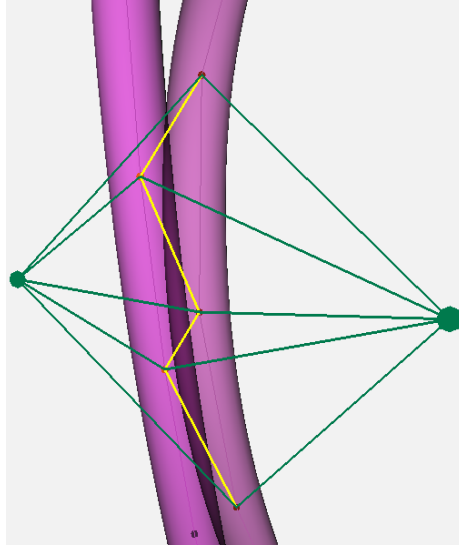


Figura 3.5: Dois atratores fora do plano $Z = 0$ colocados na coordenada média X e Y de todos os vértices.

Em resumo, o primeiro sistema linear calcula os pesos para de todas as arestas que conectam um dos atratores e utiliza a ordem das cores para montar as equações. Neste trabalho, a matriz de coeficientes é denominada de **Matriz de Ordem** e é detalhada na Seção 3.3.2.1. O segundo sistema linear é o operador Laplaciano, cuja matriz de coeficientes é formada pelos pesos calculados pelo primeiro sistema linear. Detalhes sobre sua formulação são dados na Seção 3.3.2.2.

3.3.2.1 Matriz de Ordem

A matriz de ordem é a matriz de coeficientes para o primeiro sistema linear. O objetivo desse sistema linear é calcular os pesos $w_{\alpha i}$ e $w_{\beta i}$ adequados para as arestas que conectam aos atratores aos demais vértices. Uma vez que o peso das arestas do subgrafo sem os atratores é nulo, a proporção entre os pesos dos dois atratores determina o deslocamento de um vértice. Assim, a soma dos dois pesos são fixadas como $w_{\alpha i} + w_{\beta i} = 1$. As equações desse sistema linear são dadas por

$$w_{\alpha i} - w_{\beta j} = \frac{z}{v_{\alpha}^{(z)} - v_{\beta}^{(z)}}, \quad (3.5)$$

onde z é a distância definida pela Equação 3.2, $w_{\alpha i}$ e $w_{\beta j}$ são os pesos desconhecidos para deslocar em Z os vértices v_i e v_j , respectivamente, e $v_{\alpha}^{(z)}$ e $v_{\beta}^{(z)}$ são as posições em Z dos atratores α e β .

A última linha para esse primeiro sistema linear é dada por

$$\sum_i^{|V|} w_{\alpha i} = \frac{v_{\alpha}^{(z)} |V|}{v_{\alpha}^{(z)} - v_{\beta}^{(z)}},$$

onde $v_{\alpha}^{(z)}$ e $v_{\beta}^{(z)}$ são as posições em Z dos atratores α e β , respectivamente, $|V|$ é o total de vértices do subgrafo conectado, e $w_{\alpha i}$ é o peso das arestas que ligam o atrator α . Dessa forma, o deslocamento provocado por esses pesos no segundo sistema linear será centrado em $Z = 0$.

Em resumo, a matriz de ordem tem $|V| + 1$ linhas e $|V|$ colunas. A diagonal principal da submatriz quadrada, obtida excluindo a última linha, possui o valor 1 ou -1 , nunca o valor 0. Em cada linha há apenas um valor 1 e um valor -1 , enquanto o restante é zero. A última linha tem apenas o valor 1.

3.3.2.2 Laplaciano

O segundo sistema linear é o próprio Laplaciano, e usa os $w_{\alpha i}$ e $w_{\beta i}$ calculados na etapa anterior. O Laplaciano é usado em sua forma matricial L e pode ser aplicado separadamente para cada coordenada cartesiana. Coordenadas ou pontos que não devem se mover simplesmente tem suas respectivas colunas e linhas removidas de L . Neste trabalho, considera-se em L as coordenadas X e Y dos atratores, assim como as coordenadas Z dos vértices que representam pontos das polilinhas. As linhas correspondentes às coordenadas X , relacionando todos os vértices v_i ao atrator na posição v_{α} , são definidas por

$$t_{\alpha}^{(x)} \sum w_{\alpha i} = - \sum w_{\alpha i} (v_{\alpha}^{(x)} - v_i^{(x)}),$$

onde $t_{\alpha}^{(x)}$ é o deslocamento desconhecido em X para o atrator α , $w_{\alpha i}$ é o peso calculado para deslocar o vértice v_i em direção a α , e $v_{\alpha}^{(x)}$ e $v_i^{(x)}$ são as coordenadas X para α e o i -ésimo vértice, respectivamente. Linhas análogas são incluídas para as coordenadas Y do atrator α . Também, linhas análogas são incluídas para relacionar as coordenadas X e Y de todos os vértices v_i ao atrator β . Neste caso, $w_{\beta i}$ são os pesos calculados para deslocar os vértices em direção a β . Nota-se que os atratores α e β podem se mover em X e Y , pois fixá-los pode impactar no cálculo para o deslocamento em Z dos vértices. Para completar o sistema Laplaciano, adiciona-se as coordenadas Z dos vértices, que possuem

a mesma equação para o cálculo do deslocamento, porém pode ser simplificada para

$$(w_{\alpha i} + w_{\beta i})t_i^{(z)} = w_{\alpha i}v_{\alpha}^{(z)} + w_{\beta i}v_{\beta}^{(z)} \quad (3.6)$$

onde $t_i^{(z)}$ é o deslocamento em Z para o i -ésimo vértice do subgrafo conectado. Tal simplificação é feita pois as arestas que conectam vértices representando pontos da polilinha tem aqui peso $w_{ij} = 0$. A solução do sistema Laplaciano fornece t_{α} e t_{β} (que não são de grande relevância para a solução) e os deslocamentos desejados t_i de cada vértice.

4 RESULTADOS

4.1 RESULTADOS QUANTITATIVOS

A motivação deste trabalho é o método proposto em Maschmann (2015) para a modelagem de nanotubos de carbono, ou *carbon nanotubes* (CNT), como uma série de vigas de Euler-Bernoulli interligadas. Um CNT é dado como uma polilinha com os pontos nas extremidades pertencentes a apenas um segmento. Os tubos gerados cruzam-se devido aos parâmetros da simulação de crescimento e pode-se interpretar o resultado como a projeção de nanotubos individuais em um plano. O método proposto é aplicado para desentrelaçar a floresta de tubos, uma vez que nenhum CNT está verdadeiramente conectado, isto é, não há ligação real nas interseções projetadas.

Alguns aspectos do trabalho apresentado em Maschmann (2015) são esclarecidos aqui para entender como o método proposto é avaliado. Uma floresta de CNTs apresenta diferentes propriedades de acordo com a densidade da floresta, com o ângulo de crescimento e com o raio do CNT. Os dois últimos atributos são escolhidos aleatoriamente sob uma distribuição normal. Uma vez que os CNTs são interpretados como tubos, foram definidos em Maschmann (2015) um raio interno e externo que altera a distância mínima para formar um contato, o comprimento da viga e o cálculo da resistência à flexão. Na simulação, um ângulo de crescimento diferente de 90° em relação ao substrato horizontal causa contatos entre os CNTs ao longo do tempo e, conseqüentemente, a flexão do CNT. Esta flexão juntamente com a nova viga adicionada na base em cada passo de tempo provoca um deslocamento que pode fazer as vigas se cruzarem e isto não é um problema a ser tratado. O método proposto aborda esse problema depois que a floresta é gerada, ou seja, não interfere em cada passo de tempo.

Foram simuladas em Maschmann (2015) quatro densidades de 5, 10, 15, 25 CNT/ μm que foram reproduzidas para configurar uma base de dados de polilinha. Por simplicidade, foram geradas apenas florestas com desvio padrão de 10% para todos os atributos aleatórios, e o raio externo da CNT é de 10 nm na média, portanto o comprimento da viga é de cerca de 50-75 nm. Dois aspectos sobre a geração de floresta CNT feita para este trabalho e em Maschmann (2015) são diferentes. A busca por contatos original é feita computando a distância entre pontos, e neste trabalho é pela menor distância entre dois

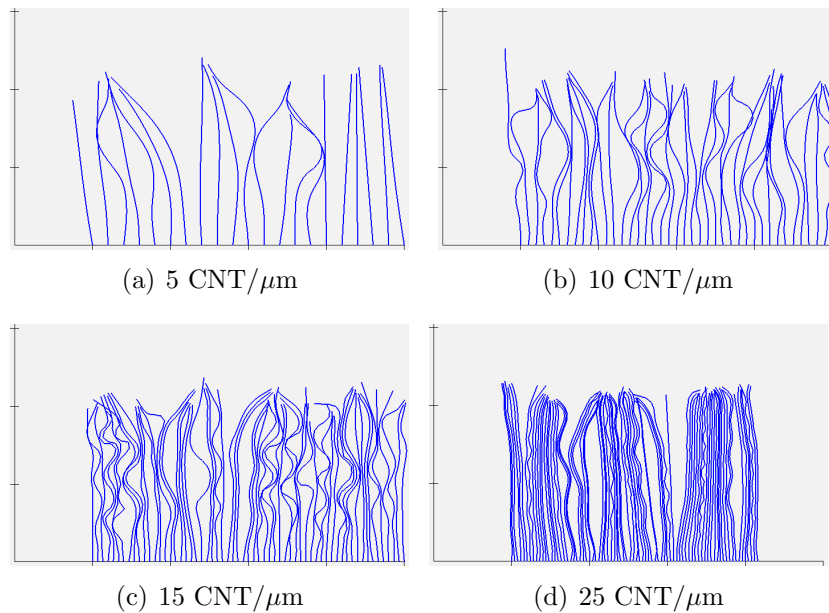


Figura 4.1: Florestas de nanotubos geradas para quatro densidades com 30 passos de crescimento e crescimento médio de $75 \mu\text{m}$ com desvio padrão de 10%. Os raios externos e internos médios de cada CNT são 6 e 10 nm, respectivamente. Cada floresta tem 80 CNTs, mas apenas uma parte deles é visível para 5, 10 e 15 $\text{CNT}/\mu\text{m}$ para mostrar o efeito de diferentes densidades. O eixo X representa a posição dos nanotubos e o eixo Y representa a altura. Ambos os eixos têm $1 \mu\text{m}$ de espaçamento.

segmentos de reta. E não foi usado o método atualizado de Lagrange para iterar sobre o tempo. Entretanto, auto-contatos não são considerados em ambos os trabalhos.

Observa-se que na Figura 4.1 o espaçamento na floresta de densidade $5 \text{ CNT}/\mu\text{m}$ produz menos contatos, portanto, existem poucas dobras ao longo do CNT. Na floresta de densidade $10 \text{ CNT}/\mu\text{m}$, os CNTs se dobram e formam curvas suaves, e o espaçamento em alguns casos permite que o CNT cresça em linha reta. A densidade $15 \text{ CNT}/\mu\text{m}$ apresenta CNTs com várias dobras ao longo do comprimento, de modo que sua morfologia é mais complexa do que as das florestas de outras densidades. O espaçamento da floresta de densidade $25 \text{ CNT}/\mu\text{m}$ produz contatos desde o início do crescimento, de modo que os CNTs tendem a crescer em uma direção comum com poucas dobras e muito próximas uns dos outros.

4.1.1 PROTOCOLO DE AVALIAÇÃO

Aplicar o método proposto a uma única floresta não é suficiente para evidenciar sua eficiência, pois há uma aleatoriedade intrínseca no crescimento da floresta que cria contatos distintos em cada floresta. Por isso, foram geradas 30 florestas para cada uma das quatro

densidades (5, 10, 15 e 25 CNT/ μm) para mostrar a tendência do método de encontrar uma solução. Além disso, o método proposto nem sempre pode resolver todos os contatos, o que torna importante fornecer seu comportamento médio em múltiplas florestas. Os deslocamentos dos vértices ocorrem apenas no eixo Z e idealmente devem ser minimizados. Além disso, a projeção da floresta de CNT processada sobre o plano XY deve ser a entrada original. No contexto dos CNTs, $c = 0.3$ nm, chamado aqui de **distância crítica**, pois átomos de carbono mais próximos de 0.3 nm tendem a quebrar a estrutura cilíndrica do CNT e criar novas ligações com o CNT adjacente. Embora não haja limitação na distância crítica para a avaliação geométrica, escolheu-se cinco valores próximos ao valor necessário para a aplicação: 0.1 nm, 0.3 nm, 0.5 nm, 1.0 nm, 2.0 nm. A avaliação completa do método inclui os três seguintes itens: **tempo de execução** para o desempenho da abordagem medido em segundos, **soma dos deslocamentos** como forma de avaliação da distorção e **contatos não resolvidos** que mostra o número de contatos que permaneceram após a aplicação do método. Para cada um desses itens, calcula-se a média deles para as florestas de 30 das quatro densidades. No total, foram 10 execuções (cinco parâmetros variando nos dois métodos de separação) para 120 florestas (30 florestas para cada uma das quatro densidades). Os resultados são apresentados para as duas abordagens de mapeamento de cor em plano: mapeamento guloso direto e modelo linear global. Todos os modelos de floresta utilizados e todos os resultados numéricos dos grafos seguintes estão disponíveis em www.gcg.ufjf.br/docs/contactcnts.zip.

4.1.2 ANÁLISE DOS RESULTADOS

A Figura 4.2 apresenta a avaliação de contatos não resolvidos quando c aumenta. Como as florestas têm vários contatos, apresenta-se a porcentagem média de contatos não resolvidos relacionados ao número original de contatos. A eficiência do método em termos de eliminação de contato depende fortemente da construção do grafo e dos passos de coloração do grafo. Alguns contatos permanecem quando o grafo não captura informações suficientes para separar os tubos. O mapeamento de cor para plano (Seção 3.2.2), entretanto, pode definir uma ordem que não é capaz manter todos os tubos separados. Os resultados para os Métodos Direto e Linear mostram que o mapeamento é um passo importante para desentrelaçar os tubos. Em todos os casos, o Método Linear teve melhor desempenho que o Método Direto. Vale ressaltar que esses dois métodos tentam reduzir

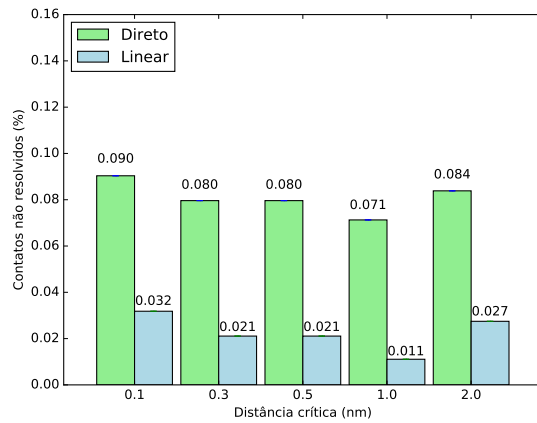
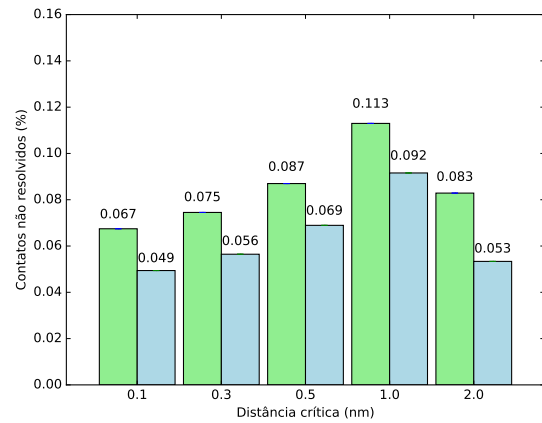
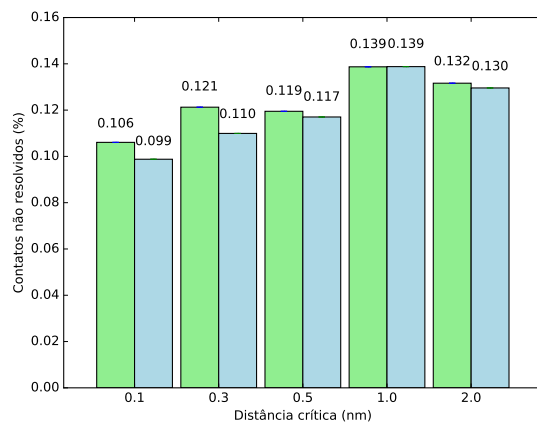
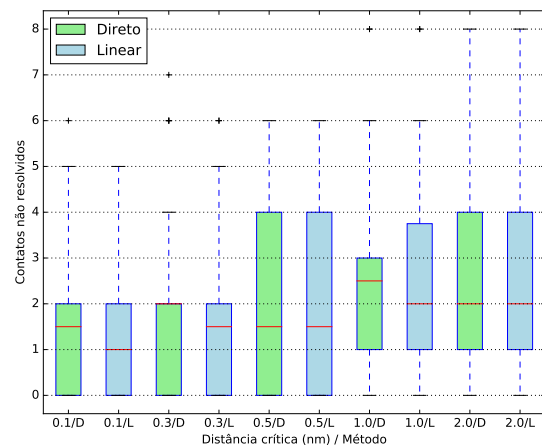
(a) 10 CNT/ μm (b) 15 CNT/ μm (c) 25 CNT/ μm (d) 25 CNT/ μm

Figura 4.2: Porcentagem de contatos não resolvidos em relação ao número inicial de contatos para cada densidade, onde a distância crítica é o parâmetro c . O número médio de contatos para cada densidade e distância crítica são: a) 603.2 ($c = 0.1$, $c = 0.3$, e $c = 0.5$), 645.5 ($c = 1.0$), 698.7 ($c = 2.0$); b) 734.7 ($c = 0.1$, $c = 0.3$, e $c = 0.5$), 802.8 ($c = 1.0$), 891.9 ($c = 2.0$); c) 1639.1 ($c = 0.1$, $c = 0.3$, e $c = 0.5$), 1782.7 ($c = 1.0$), 1956.2 ($c = 2.0$). d) *Boxplot* de contatos restantes para a floresta de densidade de 25 CNT/ μm ao variar a distância crítica c . Florestas com densidade 5 CNT/ μm tiveram todos os seus contatos totalmente eliminados em todos os casos.

a soma dos deslocamentos do resultado como forma de reduzir as distorções dos tubos. Uma versão mais relaxada de ambos os métodos pode dar menos contatos não resolvidos.

Além disso, nota-se na Figura 4.2 que a diferença entre os dois métodos diminui à medida que a densidade aumenta. Uma razão é a maior complexidade da morfologia das florestas com densidades mais altas, que geram interseções mais desafiadoras. Um olhar mais atento sobre as estatísticas de contatos não resolvidos em florestas com 25 CNT/ μm é mostrado na Figura 4.2d. Em geral, o comportamento de ambos os métodos é semelhante, dando muito poucos contatos não resolvidos em comparação com a média do número original de contatos (1639.1 para $c = 0.1$, $c = 0.3$, e $c = 0.5$; 1782.7 para $c = 1.0$, e 1956.2 para $c = 2.0$). Exceto para $c = 1.0$, a dispersão de todas as caixas tem a mesma proporção e esse comportamento também é observado nas outras densidades. Em todas as distâncias críticas, a mediana dos resultados obtidos pelo Método Linear é igual ou inferior à mediana dos obtidos pelo Método Direto. Esse contexto geral sugere que o Método Linear global é mais estável em torno da média do que o Método Direto.

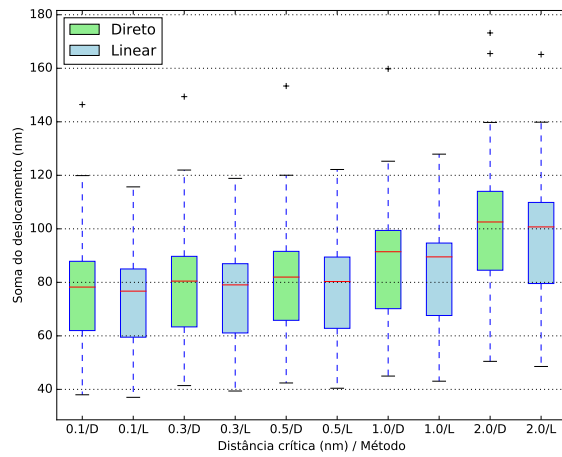
A Tabela 4.1 mostra a média e o respectivo desvio padrão do total de contatos da floresta e da porcentagem de contatos não resolvidos resultantes do Método Direto e do Método Linear. A média e o desvio padrão para o total de contatos é igual dentro de cada densidade para as distâncias $c = 0.1$, $c = 0.3$, e $c = 0.5$. Isso indica que para essas três distâncias os contatos encontrados são os mesmos, e conseqüentemente o grafo gerado também é o mesmo. Entretanto, a diferença de 0.2 entre essas três distâncias é suficiente para alterar a solução encontrada pelos métodos de deslocamento, como mostram os valores percentuais médios em cada coluna. Em outras palavras, os métodos de deslocamento são mais sensíveis a mudanças na distância mínima para separar os tubos, enquanto o aumento do número de contatos depende também da geometria da floresta. Em todos os casos, o Método Linear possui valores menores que o Método Direto, indicando que o Método Linear é mais eficiente para se reduzir o número de contatos. A maioria das florestas tiveram todos os seus tubos separados (sem contatos após o deslocamento), o que leva a 0% de contatos restantes. Nota-se que, em uma mesma coluna, a porcentagem média de contatos não resolvidos segue o mesmo padrão apresentado no gráfico da Figura 4.2. Para as florestas de densidade 15 CNT/ μm e 25 CNT/ μm , o valor máximo da média ocorre quando a distância é $c = 1.0$, exceto para a floresta de densidade 10 CNT/ μm .

Dist. Crítica	5 CNT/ μm			10 CNT/ μm		
	Total	Direto (%)	Linear (%)	Total	Direto (%)	Linear (%)
0.1 nm	139.03 ± 46.31	0.0 ± 0.0	0.0 ± 0.0	603.27 ± 72.48	1.89 ± 1.87	0.57 ± 0.56
0.3 nm	139.03 ± 46.31	0.0 ± 0.0	0.0 ± 0.0	603.27 ± 72.48	1.13 ± 1.12	0.54 ± 0.53
0.5 nm	139.03 ± 46.31	0.0 ± 0.0	0.0 ± 0.0	603.27 ± 72.48	1.13 ± 1.12	0.42 ± 0.42
1.0 nm	147.2 ± 47.67	0.0 ± 0.0	0.0 ± 0.0	645.5 ± 75.21	1.39 ± 1.38	0.31 ± 0.31
2.0 nm	156.73 ± 49.58	0.0 ± 0.0	0.0 ± 0.0	698.73 ± 79.18	1.65 ± 1.64	0.51 ± 0.51

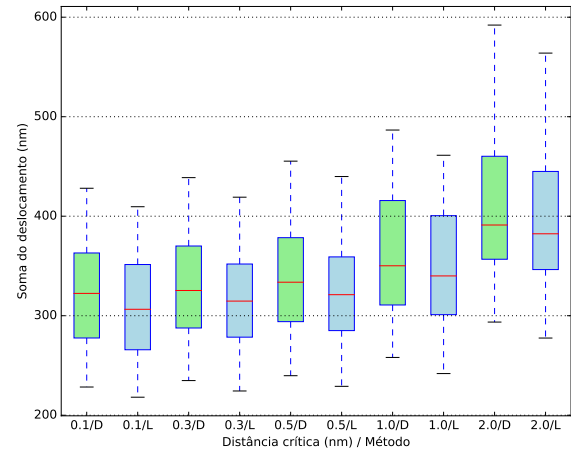
Dist. Crítica	15 CNT/ μm			25 CNT/ μm		
	Total	Direto (%)	Linear (%)	Total	Direto (%)	Linear (%)
0.1 nm	734.7 ± 95.53	1.02 ± 1.01	0.46 ± 0.46	1639.1 ± 233.55	1.52 ± 1.51	1.72 ± 1.7
0.3 nm	734.7 ± 95.53	1.2 ± 1.19	0.75 ± 0.74	1639.1 ± 233.55	1.8 ± 1.78	1.45 ± 1.43
0.5 nm	734.7 ± 95.53	1.05 ± 1.04	1.33 ± 1.31	1639.1 ± 233.55	2.03 ± 2.0	1.42 ± 1.4
1.0 nm	802.8 ± 99.24	1.57 ± 1.55	1.39 ± 1.38	1782.73 ± 233.52	2.28 ± 2.25	1.94 ± 1.93
2.0 nm	891.97 ± 106.99	1.21 ± 1.2	1.05 ± 1.04	1956.23 ± 239.46	2.22 ± 2.2	1.99 ± 1.97

Tabela 4.1: Média e desvio padrão do total de contatos antes do deslocamento, da porcentagem de contatos não resolvidos pelo Método Direto e Método Linear. Unidades em porcentagem para as colunas referentes aos métodos Direto e Linear, e valores absolutos para as colunas referentes ao total de contatos.

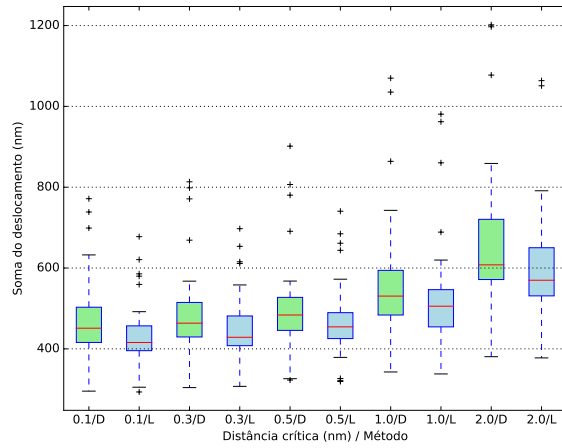
A soma dos deslocamentos, isto é, a soma de todas as coordenadas $|Z|$ resultantes, pode quantificar a distorção que uma floresta computada tem. A obtenção de uma floresta livre de cruzamentos, cuja projeção em um plano é exatamente a floresta de entrada é trivial se a soma de deslocamentos não é considerada. A restrição de que a soma de deslocamentos deve ser tão baixa quanto possível leva a melhores soluções. Em outras palavras, deslocamentos menores em Z implicam uma floresta processada geometricamente mais próxima da floresta original. A Figura 4.3 mostra um *boxplot* da soma dos deslocamentos para cada densidade. Como esperado, a soma do deslocamento aumenta à medida que a densidade aumenta. A soma absoluta tende a aumentar proporcionalmente em cada *plot* à medida que a distância crítica aumenta. Nota-se um maior número de *outliers* na Figura 4.3(c). As florestas geradas com densidade 15 CNT/ μm têm características morfológicas distintas, estreitamente relacionadas com o funcionamento do simulador de



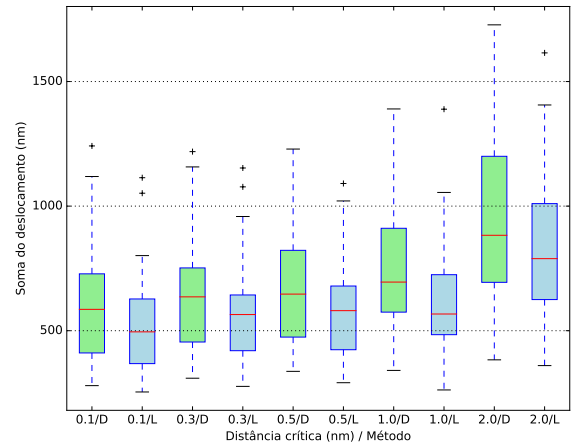
(a) 5 CNT/μm



(b) 10 CNT/μm



(c) 15 CNT/μm



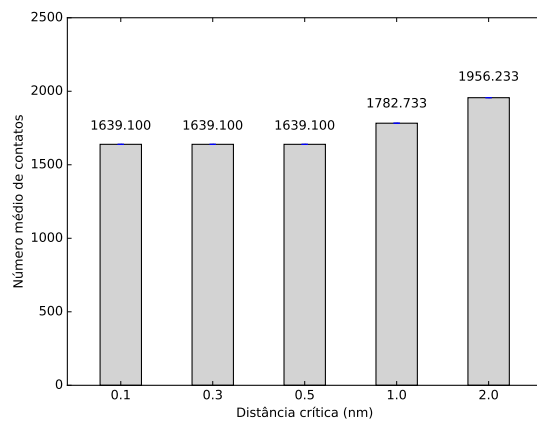
(d) 25 CNT/μm

Figura 4.3: *Boxplot* da soma dos deslocamentos para todas as densidades de floresta em função da distância crítica c .

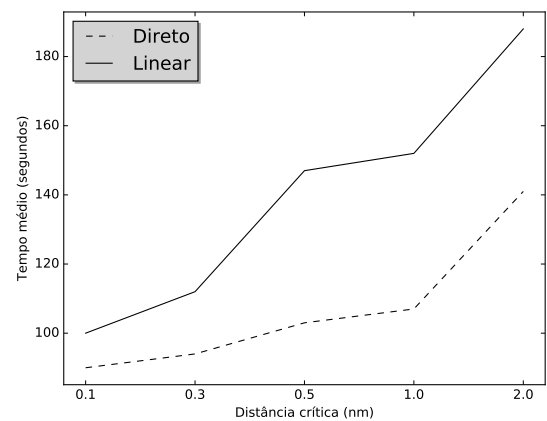
crescimento apresentado em Maschmann (2015). Por exemplo, as oscilações com alta amplitude são claramente visíveis na Figura 4.3(c) quando comparadas com outras densidades. As florestas com densidade de 25 CNT/μm exibem uma tendência para manter os CNTs retos e ondulados semelhantes entre si. Estas características distintas com 15 CNT/μm podem eventualmente exigir deslocamentos mais altos para resolver contatos. Em todos os casos, a mediana, média e dispersão do Método Linear estão abaixo daqueles do Método Direto. O mesmo é observado na Tabela 4.2, onde apresenta-se a média e o desvio padrão da soma dos deslocamentos de ambos métodos de deslocamento propostos. Nota-se que todos os valores relacionados ao Método Linear são menores que os referentes ao Método Direto. Isto sugere que o método global proposto para calcular deslocamentos é melhor para encontrar florestas menos distorcidas.

Dist. Crítica	5 CNT/ μm		10 CNT/ μm		15 CNT/ μm		25 CNT/ μm	
	Direto	Linear	Direto	Linear	Direto	Linear	Direto	Linear
0.1 nm	78.27 ± 22.67	74.97 ± 19.97	320.03 ± 52.82	309.63 ± 52.02	468.46 ± 114.24	434.98 ± 90.27	605.32 ± 230.19	526.79 ± 201.90
0.3 nm	80.36 ± 22.92	76.95 ± 20.29	328.63 ± 54.36	317.77 ± 53.75	488.58 ± 125.48	451.83 ± 94.42	644.63 ± 225.08	563.40 ± 204.43
0.5 nm	82.07 ± 23.12	78.64 ± 20.43	339.17 ± 57.60	327.06 ± 55.98	509.76 ± 129.26	472.23 ± 100.28	675.18 ± 238.14	584.89 ± 203.20
1.0 nm	87.66 ± 23.91	83.95 ± 21.17	364.68 ± 64.15	350.30 ± 61.54	570.90 ± 168.44	533.87 ± 154.14	756.79 ± 269.57	641.74 ± 236.64
2.0 nm	101.54 ± 27.62	96.51 ± 24.80	415.06 ± 76.11	398.70 ± 73.14	672.84 ± 191.28	612.99 ± 150.95	950.81 ± 351.58	831.26 ± 306.76

Tabela 4.2: Média da soma do deslocamento provocado em uma floresta em relação às 30 florestas simuladas de cada uma das 4 densidades. Unidades em nanômetros.



(a)



(b)

Figura 4.4: Tempo para processar florestas de densidade 25 CNT/ μm . a) número médio de contatos. b) tempo total de computação em média.

Na Figura 4.4, apresenta-se o tempo médio para processar florestas de densidade 25 CNT/ μm . Todas os experimentos foram calculados em um processador Intel Core 2 Quad Q9550 2.833GHz com 8GB DDR3/1333MHz RAM. O custo computacional claramente não está relacionado ao número de contatos. De fato, a geometria da floresta e a topologia são consideradas arbitrárias e podem impactar o tempo de processamento de forma imprevisível. A computação do grafo e a coloração, por exemplo, dependem não só do número de contatos, mas também de como as polilinhas se cruzam. É difícil, portanto, derivar o custo da complexidade do tempo para o método proposto. Como esperado, o Método Direto é mais rápido que o Método Linear.

Dist. Crítica	5 CNT/ μm			10 CNT/ μm		
	Total	Direto	Linear	Total	Direto	Linear
0.1 nm	4171	0 (0)	0 (0)	18098	18 (7)	6 (3)
0.3 nm	4171	0 (0)	0 (0)	18098	16 (6)	4 (2)
0.5 nm	4171	0 (0)	0 (0)	18098	16 (6)	4 (2)
1.0 nm	4416	0 (0)	0 (0)	19365	15 (6)	2 (1)
2.0 nm	4702	0 (0)	0 (0)	20962	19 (7)	6 (3)
Dist. Crítica	15 CNT/ μm			25 CNT/ μm		
	Total	Direto	Linear	Total	Direto	Linear
0.1 nm	22041	15 (9)	11 (5)	49173	50 (20)	47 (19)
0.3 nm	22041	16 (10)	12 (6)	49173	58 (20)	53 (19)
0.5 nm	22041	19 (11)	15 (8)	49173	59 (19)	58 (18)
1.0 nm	24084	28 (15)	23 (11)	53482	75 (23)	75 (23)
2.0 nm	26759	22 (14)	14 (8)	58687	79 (25)	78 (25)

Tabela 4.3: Soma do total de contatos antes do deslocamento e soma do total de contatos remanescentes das 30 florestas de cada densidade para ambos métodos de deslocamento. Entre parênteses, o número de florestas que possui pelo menos um contato.

A Tabela 4.3 apresenta a soma de todos os contatos das 30 florestas de cada uma das 4 densidades simuladas. Todos os tubos das florestas de densidade 5 CNT/ μm foram separados o suficiente para que nenhum contato fosse encontrado após a aplicação do método de deslocamento. Nas demais densidades, o Método Linear reduziu o número de contatos mais que o Método Direto. Esses contatos restantes encontrados após o cálculo feito pelo Método Linear estão concentrados em um número menor de florestas (indicado entre parênteses) se comparado aos valores obtidos após a execução do Método Direto. Nota-se que quanto mais densa a floresta, menor a diferença entre os métodos tanto para a soma dos contatos restantes quanto para a distribuição dos contatos pelas florestas.

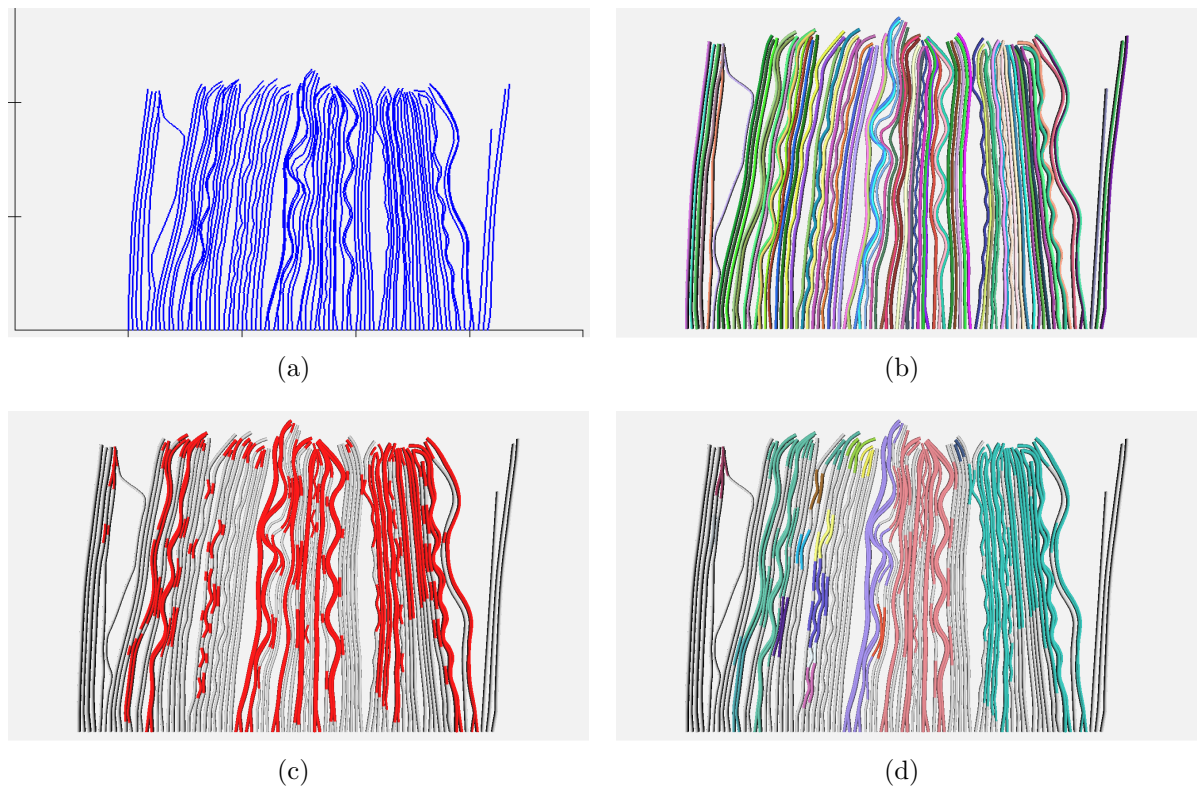


Figura 4.5: Visualização em 3D da floresta gerada em 2D de densidade $25 \text{ CNT}/\mu\text{m}$. Os contatos foram calculados usando $c = 0.3 \text{ nm}$. a) Floresta em 2D. b) Floresta em 3D. c) Destaque para as regiões dos tubos em que os segmentos das polilinhas possuem pelo menos um contato. d) Blocos de contato em destaque.

4.2 RESULTADOS QUALITATIVOS

A análise qualitativa do método proposto no Capítulo 3 também é feita sobre conjuntos de polilinhas em que cada um representa uma floresta de nanotubos de carbono. Assim, é possível avaliar o aspecto visual das florestas simuladas Q' comparando-as com as florestas de nanotubos reais. Na simulação em Maschmann (2015) que foi reproduzida aqui os tubos podem ser retos ou ondulados e não há tubos helicoidais ou com ramificações.

Observa-se que os nanotubos reais não se cruzam durante o crescimento da floresta. Porém, isso acontece na simulação em Maschmann (2015) devido a abordagem adotada e pela simplificação em 2D. Sabe-se que nanotubos de carbono, assim como qualquer estrutura composta apenas de carbono, tendem a quebrar as ligações que mantêm a forma original quando a distância entre os átomos de estruturas vizinhas é menor que 0.3 nm . Por isso, em todas as imagens apresentadas nesta Seção em relação as soluções do método proposto possuem o parâmetro $c = 0.3 \text{ nm}$ e as florestas geradas são as mesmas descritas na Seção 4.1.

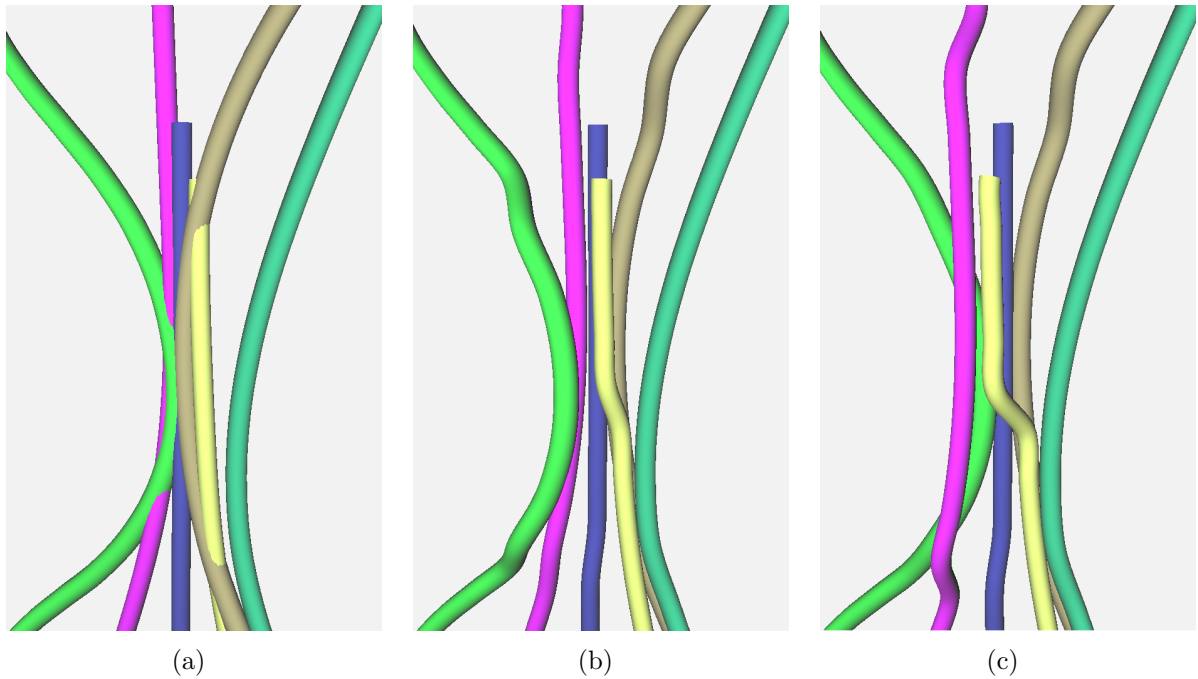


Figura 4.6: Comparação de deslocamentos resultantes do Método Linear e do Método Direto. Em a) está representado o bloco de contatos formado pelas polilinhas dos tubos no plano XY . O deslocamento e o mapeamento de cor de vértice em planos em Z para o Método Linear é mostrado em b) e para o Método Direto em c).

A Figura 4.5 mostra a visualização em 3D de uma floresta com densidade de $25 \text{ CNT}/\mu\text{m}$ gerada em 2D após 30 passos de crescimento. A altura de todas as florestas geradas está em torno de $2 \mu\text{m}$ mesmo quando a densidade varia. Em destaque na Figura 4.5(c) estão os segmentos das polilinhas que violam a Desigualdade 1.1 e na Figura 4.5(d) estão os blocos de contato.

Na Figura 4.6, compara-se o resultado visual do Método Linear e do Método Direto. Observa-se que o melhor mapeamento de cor em ordem de planos (Seção 3.3.2.1) é diferente para cada método de deslocamento para o mesmo grafo de uma mesma floresta. A solução dada pelo Método Direto, mostrada na Figura 4.6(c), deslocou um tubo com muitas conexões para um plano paralelo ao plano XY mais afastado de $Z = 0$. Nesse caso, o deslocamento total da floresta aumenta, pois mais pontos sofrem um deslocamento maior para que todos os segmentos das polilinhas não violem a restrição de distância dada pela Desigualdade 1.1. Em comparação com o Método Direto, o Método Linear (Fig. 4.6(b)) ajusta melhor os deslocamentos para cada nanotubo.

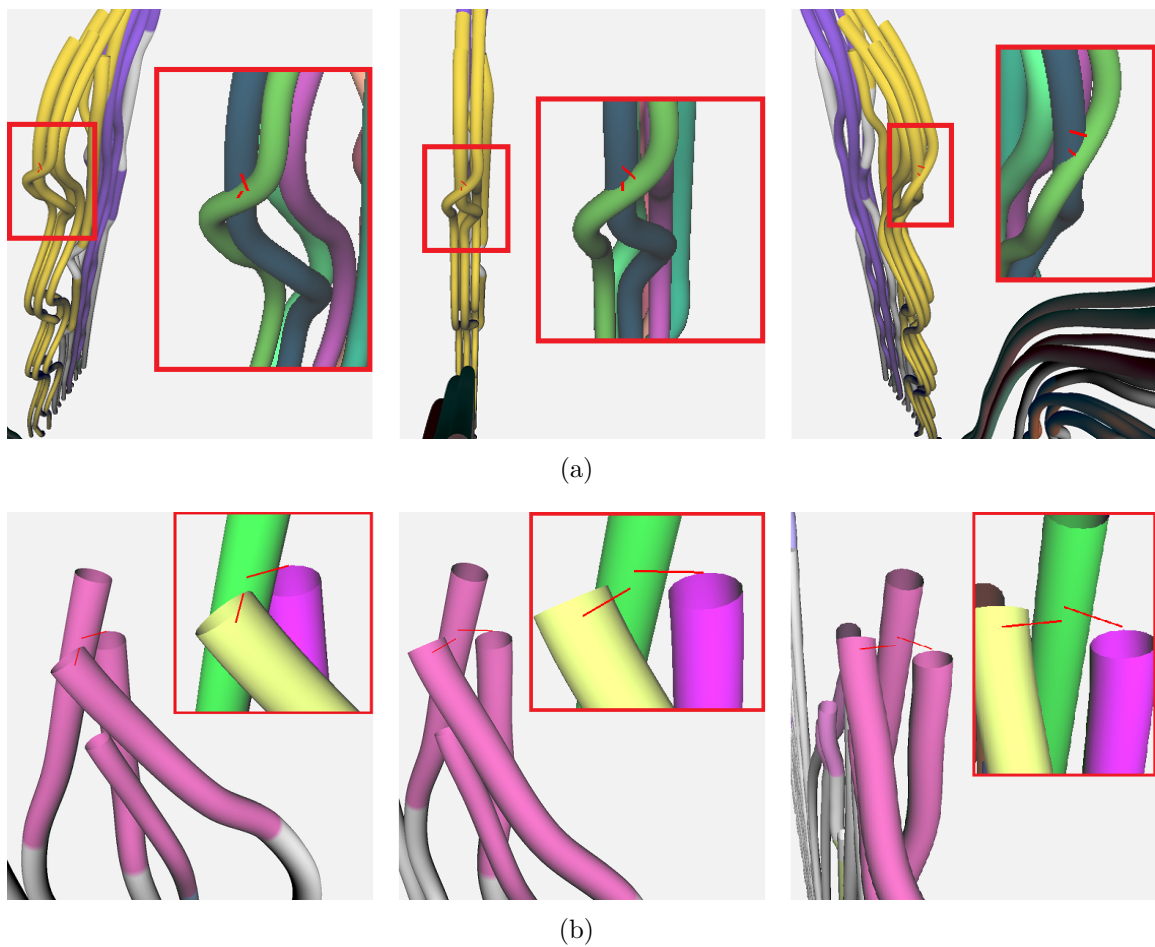


Figura 4.7: Casos de falha caracterizados pelos contatos não resolvidos pelo método proposto. Esses caso de falha acontecem em ambos os métodos de deslocamento propostos e em qualquer floresta. O bloco de contato é representado pelo conjunto de tubos de mesma cor. Em destaque, a imagem ampliada desses contatos entre os mesmos tubos, porém cada um renderizado com cores diferentes a) Diferentes ângulos de dois contatos encontrados após o deslocamento causado por má coloração em uma floresta de densidade de 25 $\text{CNT}/\mu\text{m}$. b) Visualização em posições diferentes de dois contatos devido a deslocamento insuficiente em uma floresta de densidade 10 $\text{CNT}/\mu\text{m}$.

Os casos de falha se caracterizam pelo número de contatos encontrados após a aplicação do método de deslocamento proposto na Seção 3.3. Essas falhas ocorrem tanto no Método Linear quanto no Método Direto e em qualquer densidade de floresta de nanotubos. Porém, as florestas de densidade de 25 CNT/ μm apresentam mais exemplares dentre as florestas geradas com contatos não resolvidos. A Figura 4.7 exemplifica os dois casos de falha encontrados neste trabalho.

Os dois contatos em destaque na Figura 4.7(a) são consequência da má coloração. Nesse caso, o mapeamento de cor de vértice em ordem entre planos em Z é capaz apenas de encontrar uma solução que resulta no menor número de contatos. Uma causa da má coloração é o grande número de vértices com mesmo grau. Com isso, o segundo item de ordenação do grafo descrito na Seção 3.2.1 não altera a ordem original do grafo, que é ordenado de forma crescente em relação ao índice do ponto e ao índice da polilinha. Observa-se que a má coloração ocorre em sua maioria em grafos que possuem vértices que representam pontos ao longo de toda a polilinha. No caso, o grafo conecta os pontos das polilinhas dentro da região em destaque (parte dos tubos com a mesma cor) que representa o bloco de contato.

O deslocamento em Z pode ser insuficiente para resolver os contatos, como mostra a Figura 4.7(b). Nesse caso, o comprimento dos segmentos de contato são muito próximos do valor c nos cinco parâmetros testados (0.1, 0.3, 0.5, 1.0, 2.0). A causa dessa falha pode estar associada a alguma informação não considerada no método proposto. Entretanto, a maioria dos contatos é resolvida, como mostra a Figura 4.2.

5 CONCLUSÃO

Este trabalho apresenta um método para reposicionar curvas cilíndricas representadas por polilinhas, a fim de manter distâncias de vértice a aresta de pelo menos c unidades mais os raios dos cilindros. A abordagem apresentada aqui baseia-se na construção de um grafo que representa os pontos que violam a distância mínima. Esse grafo é calculado em relação à vizinhança de contatos, a fim de capturar as restrições necessárias para desentrelaçar as polilinhas, reduzindo o problema de remoção de contato para o problema de coloração de grafo. Uma vez construído, o grafo é colorido usando uma heurística para descobrir quais vértices podem estar no mesmo plano. O número final de cores indica o número de planos necessários para resolver os contatos. A construção do grafo e o método de coloração são a principal contribuição deste trabalho. Também duas abordagens são propostas para calcular deslocamentos de vértices a partir do grafo e cores computados. Um método é guloso e computa cada deslocamento localmente. O outro método é global e baseado em um sistema linear. Ambos os métodos fornecem mapeamentos de cor a plano e são projetados para obter florestas com uma soma de deslocamentos baixa como forma de obter um resultado compacto.

Aplica-se os métodos propostos sobre o problema do desentrelaçamento de florestas de polilinhas que representam nanotubos de carbono. Os resultados mostram a eficiência da construção grafo, coloração do grafo e mapeamento de cor em plano. Apesar do método proposto não ser capaz de eliminar todos os contatos, o número de contatos cai significativamente. Os resultados típicos em florestas densas de tubos obtêm 0.139%, ou 27.2 contatos em média, do número original de contatos não resolvidos (1956.2 em média de contatos inicialmente). Alguns dos contatos restantes são devidos à simplicidade da cor ao mapeamento plano. O Método Linear provou ser quantitativamente melhor que o Método Direto em todos os casos. Isso pode ser entendido como uma evidência de que os métodos globais são mais adequados para esta etapa. Muitas outras melhorias são possíveis, uma vez que a atribuição de cor ao plano proposta é bastante simples, embora tenha bons resultados.

Trabalhos futuros incluem uma investigação mais aprofundada sobre os limites da construção do grafo. Esta etapa é o núcleo do método proposto e muitas melhorias são

possíveis. É importante ter uma melhor compreensão dos casos de falha devido à má formação do grafo. Esses casos podem ser utilizados para melhorar o método para obter uma melhor coloração do grafo. Também é importante avaliar a viabilidade da aplicação do método proposto em outros problemas. Apesar de os experimentos se basearem em tubos situados num plano XY , o método pode ser usado com mapeamentos de superfície para plano, isto é, curvas cilíndricas sobre uma superfície podem ser mapeadas para um plano, ter contatos removidos e mapeados de volta para a superfície levando em conta a curvatura da superfície.

REFERÊNCIAS

APPEL, K.; HAKEN, W.; KOCH, J. Every planar map is four-colorable. **Illinois Journal of Mathematics**, v. 21, p. 429–567, 1977.

DOUGLAS, D. H.; PEUCKER, T. K. Algorithms for the reduction of the number of points required to represent a digitized line or its caricature. **The Canadian Cartographer**, v. 10, p. 112–122, 1973.

ELÍAS, A. L.; PEREA-LÓPEZ, N.; RAJUKUMAR, L. P.; MCCREARY, A.; LÓPEZ-URÍAS, F.; TERRONES, H.; TERRONES, M. Chapter 17 - three-dimensional nanotube networks and a new horizon of applications. In: SCHULZ, M. J.; SHANOV, V. N.; YIN, Z. (Ed.). **Nanotube Superfiber Materials**, 2014. p. 457–493.

ERICSON, C. **Real-Time Collision Detection - Chapter 5 Basic Primitive Tests**, 2004. 125-155 p. ISBN 1558607323, 9781558607323.

FRANCE, L.; LENOIR, J.; MESEURE, P.; CHAILLOU, C. Simulation of a minimally invasive surgery of intestines. **Proc. of the Fourth Intl. Conference Virtual Reality**, p. 1–8, 2002.

GALINIER, P.; HERTZ, A. A survey of local search methods for graph coloring. **Comput. Oper. Res.**, Elsevier Science Ltd., Oxford, UK, UK, v. 33, n. 9, p. 2547–2562, set. 2006. ISSN 0305-0548. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.cor.2005.07.028>>.

KARP, R. M. **Complexity of Computer Computations: Proceedings of a symposium on the Complexity of Computer Computations**, 1972. 85–103 p. ISBN 978-1-4684-2001-2.

LIU, X.-Z.; YONG, J.-H.; ZHENG, G.-Q.; SUN, J.-G. An offset algorithm for polyline curves. **Comput. Ind.**, v. 58, p. 240–254, 2007.

MASCHMANN, M. Integrated simulation of active carbon nanotube forest growth and mechanical compression. **Carbon**, v. 86, p. 26–37, 2015.

- PALACI, I.; FEDRIGO, S.; BRUNE, H.; KLINKE, C.; CHEN, M.; RIEDO, E. Radial elasticity of multiwalled carbon nanotubes. **Phys. Rev. Lett.**, American Physical Society, v. 94, p. 175502, May 2005. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.94.175502>>.
- PECANHA, J.; FILHO, J. S.; VIEIRA, M.; LOBOSCO, M.; DANTAS, S. Iterative method for edge length equalization. **International Conference on Computational Science**, v. 18, p. 481–490, 2013.
- RAY, N.; SOKOLOV, D. Tracing cross-free polylines oriented by a n-symmetry direction field on triangulated surfaces. **CoRR**, abs/1306.0706, p. 1–13, 2013.
- ROBERTSON, N.; SANDERS, D.; SEYMOUR, P.; THOMAS, R. The four-colour theorem. **J. Comb. Theory Ser. B**, Academic Press, Inc., Orlando, FL, USA, v. 70, n. 1, p. 2–44, maio 1997. ISSN 0095-8956. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1006/jctb.1997.1750>>.
- TONG, X.; EDWARDS, J.; CHEN, C.; SHEN, H.; JOHNSON, C. R.; WONG, P. C. View-dependent streamline deformation and exploration. **IEEE Trans. Vis. Comput. Graph.**, v. 22, p. 1788–1801, 2016.
- WU, S.-T.; SILVA, A. C. G. da; MÁRQUEZ, M. R. G. The douglas-peucker algorithm: Sufficiency conditions for non-self-intersections. **J. Braz. Comp. Soc.**, v. 9, p. 67–84, 2004.
- YANG, H.; HAO, K.; DING, Y. Arc-length constraint-based surface deformation using energy-minimum optimization. **Information Science and Cloud Computing Companion (ISCC-C), 2013 International Conference on**, v. 1, p. 110–116, 2013.
- ZHANG, J.; TERRONES, M.; PARK, C. R.; MUKHERJEE, R.; MONTHIOUX, M.; KORATKAR, N.; KIM, Y. S.; HURT, R.; FRACKOWIAK, E.; ENOKI, T.; CHEN, Y.; CHEN, Y.; BIANCO, A. Carbon science in 2016: Status, challenges and perspectives. **Carbon**, v. 98, p. 708 – 732, 2016. ISSN 0008-6223. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0008622315006818>>.
- ZHBANOV, A. I.; POGORELOV, E. G.; CHANG, Y.-C. Van der waals interaction between two crossed carbon nanotubes. **ACS Nano**, v. 4, n. 10, p. 5937–5945, 2010.

Apêndice A - FORMULAÇÃO ALTERNATIVA PARA O MÉTODO LINEAR

O objetivo deste capítulo é apresentar uma formulação alternativa para o Método Linear que deriva da mesma origem. No Método Linear descrito na Seção 3.3.2, assume-se que a aresta que conecta o i -ésimo e j -ésimo vértices que representam pontos das polilinhas tem peso $w_{ij} = 0$. A formulação detalhada a seguir considera que o peso dessas arestas originais do grafo (Seção 3.1) não é necessariamente nulo, e fornece uma regra mais geral sobre o modelo. Logo, a Equação 3.4 é simplificada de forma diferente.

O Método Linear foi baseado no trabalho de Pecanha et al. (2013), em que cada vértice possui uma função de energia, dada por

$$E(v_i) = \sum_{j \in \text{Vizinhos}(v_i)} w_{ij} \|v_i + t_i - v_j - t_j\|^2,$$

onde w_{ij} é o peso da aresta que conecta os vértices vizinhos v_i e v_j , cada um com um deslocamento denotado por t_i e t_j , respectivamente, e a norma é euclidiana. A ideia é encontrar o deslocamento para cada vértice que minimize a energia, transladando o vértice para o ponto médio de seus vizinhos. Para isso, define-se que a derivada dessa função em relação ao vértice analisado v_i é zero, como mostra a equação

$$\frac{\partial E(v_i)}{\partial v_i} = \sum_{j \in \text{Vizinhos}(v_i)} w_{ij} (v_i + t_i - v_j - t_j) = 0.$$

Nota-se que a representação matricial dessa equação para todos os vértices equivale ao Laplaciano do grafo/malha poligonal em função de equações lineares.

A partir deste ponto, a formulação proposta na Seção 3.3.2 e o modelo apresentado aqui divergem. No Método Linear, essa equação pode ser reescrita para a Equação 3.4 e simplificada em relação a coordenada Z para a Equação 3.6. Além disso, devido a imposição de que $w_{\alpha i} + w_{\beta i} = 1$, pode-se explicitar a relação entre o deslocamento t_i e o peso de um dos atratores α ou β em uma única equação dada por

$$t_i - t_j = (w_{\alpha i} - w_{\alpha j})(v_\alpha - v_\beta),$$

onde supõe-se pela ordem entre cores/planos (Seção 3.2.2) que os deslocamentos dos vértices de cores consecutivas v_i e v_j é $t_i > t_j$. Considerando que $t_i - t_j = z$, sendo z dado pela Equação 3.2, tem-se a Equação 3.5, que define a matriz de ordem.

Para o modelo geral apresentado neste capítulo, a simplificação ocorre apenas no lado direito da Equação 3.4. Nota-se que expandindo o somatório, os valores da coordenada Z dos vértices $v_i^{(z)}$ e $v_j^{(z)}$ são iguais. Logo, pode-se reescrever a Equação 3.4 para

$$\sum_{j \neq \alpha, \beta} w_{ij} (t_i^{(z)} - t_j^{(z)}) = w_{\alpha i} (v_\alpha^{(z)} - v_i^{(z)}) + w_{\beta i} (v_\beta^{(z)} - v_i^{(z)}),$$

onde o somatório é sobre os vértices vizinhos ao i -ésimo vértice excluindo os atratores, w_{ij} são os pesos das arestas originais do grafo, $t_i^{(z)}$ e $t_j^{(z)}$ são os deslocamentos respectivos a $v_i^{(z)}$ e $v_j^{(z)}$, todos referentes à coordenada Z . Para manter a generalização, o valor para a coordenada Z dos vértices representando pontos das polilinhas é mantido caso sejam definidos em outro plano $Z \neq 0$. Assumindo que

$$w_{\alpha i} + w_{\beta i} + \sum_{j \neq \alpha, \beta} w_{ij} = 1, \quad (\text{A.1})$$

pode-se reescrever para

$$\sum_{j \neq \alpha, \beta} w_{ij} (t_i^{(z)} - t_j^{(z)} + v_\beta^{(z)} - v_i^{(z)}) - w_{\alpha i} (v_\alpha^{(z)} - v_\beta^{(z)}) = v_\beta^{(z)} - v_i^{(z)}. \quad (\text{A.2})$$

Nota-se que $(t_i - t_j)$ é mantido, pois essa subtração pode ser substituída pelo valor z definido pela Equação 3.2. Além disso, o somatório não engloba os atratores pois sabe-se apenas que $t_\alpha^{(z)} = t_\beta^{(z)} = 0$.

O sistema linear que agrupa as equações de cada vértice é formado por $2|V|$ linhas e $2|V| + |E|$ colunas, sendo $|V|$ o total de vértices do grafo, excluindo os atratores, e $|E|$ o total de arestas do grafo original (sem os atratores). $|V|$ linhas são referentes a Equação A.2 e $|V|$ linhas são relacionadas à condição de que a soma dos pesos é 1. Das $2|V|$ colunas, metade está associada ao peso das arestas do atrator α e a outra metade é referente ao peso das arestas do atrator β . As $|E|$ colunas restantes são relativas aos pesos das arestas originais do grafo. Com isso, nota-se que esse sistema linear é subdeterminado, ou seja, pode ter infinitas ou nenhuma solução. Um trabalho futuro pode investigar quais outras regras pode-se impor no sistema linear, adicionando novas equações, para que exista uma

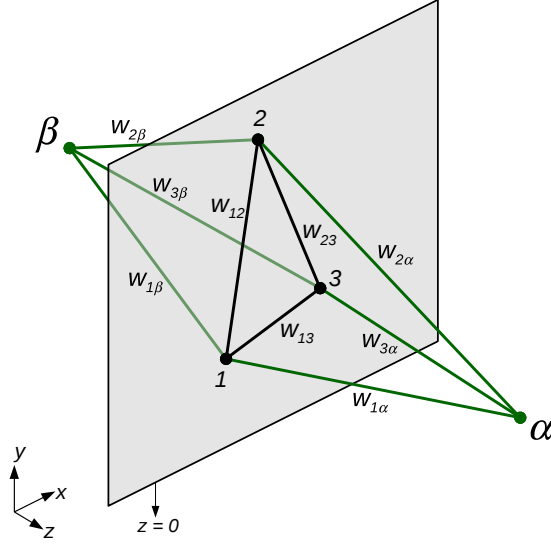


Figura A.1: Exemplo de um grafo com três vértices cada um conectado aos atratores α e β . Os pesos w_{ij} estão associados às respectivas arestas.

solução única. Uma sugestão é definir que cada peso das arestas originais do grafo é a proporção entre a distância entre dois vértices após o deslocamento e a distância entre a posição dos atratores, ou seja, $w_{ij} = \frac{t_i - t_j}{v_\alpha - v_\beta}$.

Para exemplificar a montagem desse novo sistema linear, utiliza-se o grafo completo de três vértices representado na Figura A.1 com os dois atratores conectados a todos os vértices. Supõe-se que $t_1 > t_2 > t_3$ de acordo com alguma ordenação de cores/planos. As Equações A.3, A.4, e A.5 mostram a expansão do somatório dado na Equação A.2 e a separação de variáveis (pesos) das constantes (posição dos vértices em Z). Os valores z que substituem todas as subtrações $t_i - t_j$ nessas três equações não são necessariamente os mesmos. Neste caso, cada um é calculado seguindo a regra mostrada na Equação 3.3. Vale ressaltar que $w_{ij} = w_{ji}$, portanto existem 3 pesos, um para cada aresta original do grafo de exemplo.

$$\begin{aligned}
 w_{12}(t_1 - t_2 + v_\beta - v_1) + w_{13}(t_1 - t_3 + v_\beta - v_1) - w_{1\alpha}(v_\alpha - v_\beta) &= v_\beta - v_1 \\
 w_{12}(z + v_\beta - v_1) + w_{13}(2z + v_\beta - v_1) - w_{1\alpha}(v_\alpha - v_\beta) &= v_\beta - v_1 \quad (\text{A.3}) \\
 (z + v_\beta - v_1)w_{12} + (2z + v_\beta - v_1)w_{13} + (v_\beta - v_\alpha)w_{1\alpha} &= v_\beta - v_1
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
w_{12}(t_1 - t_2 + v_\beta - v_2) + w_{23}(t_1 - t_3 + v_\beta - v_2) - w_{2\alpha}(v_\alpha - v_\beta) &= v_\beta - v_2 \\
w_{12}(-z + v_\beta - v_2) + w_{23}(z + v_\beta - v_2) - w_{2\alpha}(v_\alpha - v_\beta) &= v_\beta - v_2 \\
(-z + v_\beta - v_2)w_{12} + (z + v_\beta - v_2)w_{23} + (v_\beta - v_\alpha)w_{2\alpha} &= v_\beta - v_2
\end{aligned} \tag{A.4}$$

$$\begin{aligned}
w_{13}(t_1 - t_3 + v_\beta - v_3) + w_{23}(t_2 - t_3 + v_\beta - v_3) - w_{3\alpha}(v_\alpha - v_\beta) &= v_\beta - v_3 \\
w_{13}(-2z + v_\beta - v_3) + w_{23}(-z + v_\beta - v_3) - w_{3\alpha}(v_\alpha - v_\beta) &= v_\beta - v_3 \\
(-2z + v_\beta - v_3)w_{13} + (-z + v_\beta - v_3)w_{23} + (v_\beta - v_\alpha)w_{3\alpha} &= v_\beta - v_3
\end{aligned} \tag{A.5}$$

Com os coeficientes de cada variável em evidência, o sistema linear pode ser representado na forma $AX = B$ (Eq. A.6), onde A é a matriz de coeficientes em que as $|V| = 3$ primeiras linhas são dadas pela Equação A.2, as $|V| = 3$ linhas seguintes representam a condição dada pela Equação A.1, X é o vetor com as incógnitas dadas por w_{ij} e B é o vetor de termos independentes:

$$\begin{bmatrix}
z + v_\beta & 2z + v_\beta & 0 & v_\beta & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
-v_1 & -v_1 & & -v_\alpha & & & & & \\
-z + v_\beta & 0 & z + v_\beta & 0 & v_\beta & 0 & 0 & 0 & 0 \\
-v_2 & & -v_2 & & -v_\alpha & & & & \\
0 & -2z + v_\beta & -z + v_\beta & 0 & 0 & v_\beta & 0 & 0 & 0 \\
& -v_3 & -v_3 & & & -v_\alpha & & & \\
1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\
1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\
0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1
\end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} w_{12} \\ w_{13} \\ w_{23} \\ w_{1\alpha} \\ w_{2\alpha} \\ w_{3\alpha} \\ w_{1\beta} \\ w_{2\beta} \\ w_{3\beta} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} v_\beta - v_1 \\ v_\beta - v_2 \\ v_\beta - v_3 \\ 1.0 \\ 1.0 \\ 1.0 \end{bmatrix}. \tag{A.6}$$