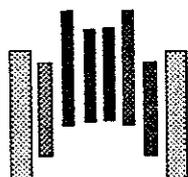


Rapport de Stage de Magistère d'Informatique et Modélisation Discrète Ecole Normale Supérieure de Lyon



Algorithmes géométriques

- Algorithmes de calcul de l'enveloppe convexe de sphères en dimension d .
- Surface de Connolly.
- Déplacements admissibles d'un ensemble de sphères par rapport à un autre

NIELSEN Franck
fnielsen@ensl.ens-lyon.fr



INRIA Sophia-Antipolis Projet PRISME
2004 Route des Lucioles
06565 Valbonne Cedex

15 Septembre 1992



Table des matières

1	Préliminaires pour les algorithmes en géométrie non-linéaire:	
	4	
1.1	Définition d'une sphère et d'un disque (boule):	4
1.2	Dualité dans l'espace E^d	5
1.3	Inversion de pôle:	5
1.3.1	Inversion de pôle d'un point de E^d :	6
1.3.2	Inversion de pôles d'une sphère S de E^d :	6
1.4	Définitions et propriétés d'un polytope:	6
1.4.1	Définition d'un polytope:	6
1.4.2	Faces d'un polytope:	7
1.4.3	Propriétés d'un polytope:	7
2	Algorithmes de calcul de l'enveloppe convexe de sphères.	8
2.1	Introduction.	8
2.2	Algorithme de calcul de l'enveloppe convexe en dimension d en $\Theta(n^{\lfloor d/2 \rfloor} + n \log n)$ [BCD ⁺ 92a].	8
2.2.1	Composition d'une enveloppe convexe:	9
2.2.2	L'algorithme:	10
2.2.3	Analyse de la complexité de l'algorithme:	12
2.3	Algorithmes de calcul d'enveloppe convexe de disques (en di- mension 2).	12
2.3.1	Implantation de l'algorithme général en $\Theta(n \log n)$. . .	12
2.3.2	Parcours de la ceinture du polytope	15
2.3.3	Projection d'un segment de E^3 ayant un plan support de l'enveloppe convexe à 45° avec l'axe z dans E^2 : . .	15
2.4	Calcul de l'enveloppe convexe de disques par un algorithme output-sensitive ($\Theta(nh)$).	17
2.4.1	Description générale de l'algorithme:	17
2.4.2	Calcul des tangentes extérieures communes à deux dis- ques	18
2.5	Analyse des résultats.	19
2.5.1	Complexité de la marche de Jarvis:	19
2.5.2	Conclusion:	19
3	Algorithme de calcul des surfaces de Connolly [BDD92].	21
3.1	Introduction.	21
3.2	Algorithme en dimension d	23

3.3	Algorithme de l'union de sphères.	23
3.3.1	Analyse des résultats.	24
4	Calcul des déplacements admissibles d'une molécule sur une autre.	24
4.1	Le formalisme de Minkowski:	26
4.2	Algorithme de Calcul des positions admissibles de \mathcal{A} par rapport à \mathcal{B} en autorisant que les translations de \mathcal{A} :	28
4.3	Calcul de $\mathcal{C}_{\mathcal{A}}(\mathcal{B})$:	31
4.3.1	Calcul de la région limite admissible de deux cercles:	31
4.3.2	Calcul de la région admissible d'un arc de cercles avec un cercle	31
4.3.3	Calcul de la région admissible de deux arcs de cercle:	31
4.3.4	Algorithme de calcul de la surface dans $E^2 \times [-\pi; +\pi[$:	33
4.3.5	Construction de $\mathcal{C}_{\mathcal{A}}(\mathcal{B})$:	34
4.3.6	Analyse des résultats:	35
4.3.7	Figures obtenues par la Silicon Graphics:	35
5	Annexe: Utilisation des programmes.	36
5.1	Programmes de calcul de l'enveloppe convexe de disques.	36
5.1.1	Organisation des programmes dans ProgI :	36
5.1.2	Rappel sur l'utilisation des programmes de calcul d'enveloppe convexe de points de Denis BARTHOU [Bar91]:	37
5.1.3	Utilisation de <i>EXEC4/donnees3d</i> : formation de fichiers pour <i>EXEC4/graphe</i>	37
5.1.4	L'exécution <i>EXEC4/graphe</i> fournit un fichier résultat lisible par <i>EXEC4/enveloppe</i> :	37
5.1.5	Utilisation de l'interface graphique sous XView :visualisation des résultats:	38
5.2	Programmes de calcul des surfaces de Connolly.	38
5.2.1	Organisation des données:	38
5.2.2	Utilisation de <i>EXEC4/visualisation</i> :	39
5.2.3	Format d'un fichier entrée:	39
5.3	Sortie des résultats sous format JpDraw :	39

En géométrie algorithmique¹, on s'est pendant longtemps intéressé aux objets linéaires (points, droites, polytopes). Dans la géométrie non linéaire, on s'intéresse, en premier lieu, aux algorithmes relatifs aux sphères:

- Enveloppe convexe de sphères
- Diagramme de Voronoï (diagrammes de puissance où vrais diagrammes de Voronoï)
- Arrangements de sphères
- Calcul du plus petit cercle englobant
- Surfaces de Connolly
- ...

Dans ce rapport, on s'est intéressé aux algorithmes de calcul d'enveloppe convexe de sphères et de surface de Connolly en dimension d .

1 Préliminaires pour les algorithmes en géométrie non-linéaire:

Dans cette première partie, on va définir les objets géométriques que l'on manipule ainsi que certaines transformations appelées: dualité. Le lecteur intéressé par les structures algorithmiques et les algorithmes de base pourra lire [BY93] [PS85].

1.1 Définition d'une sphère et d'un disque (boule):

On note E^d l'espace euclidien en dimension d . Une sphère² S en dimension d est définie par son centre $C(S) = (c_1, c_2, \dots, c_d)$ et son rayon: $r = R(S)$.

¹ Stage effectué à l'INRIA Sophia-Antipolis—Unité de Recherche Sophia-Antipolis.
Projet PRISME—Section géométrie algorithmique
Route des Lucioles
06565 Valbonne Cedex

² parfois, on utilise le terme d'hypersphères quand $d \geq 3$.

L'équation cartésienne vérifiée par les points de E^d appartenant à la sphère est

$$(x_1 - c_1)^2 + (x_2 - c_2)^2 + (x_d - c_d)^2 = r^2$$

On définit le disque comme étant l'intérieur de la sphère (y compris la sphère). Soit \mathcal{D} , un disque. Son équation cartésienne est:

$$(x_1 - c_1)^2 + (x_2 - c_2)^2 + (x_d - c_d)^2 \leq r^2$$

On appelle encore un disque \mathcal{D} une boule. Notons \mathcal{S}^d , l'ensemble des sphères et \mathcal{D}^d l'ensemble des disques de E^d . En dimension 1, on appelle cercle une sphère et arc un morceau continu d'une sphère.

1.2 Dualité dans l'espace E^d .

En géométrie algorithmique, on utilise souvent des transformations pour ramener une situation inconnue à une situation connue, la traiter, puis refaire les transformations inverses afin d'obtenir les résultats finaux. Une telle transformation bijective s'appelle une dualité.

La polarité par rapport à O' est une transformation qui à un point P de E^d différent de O' associe un hyperplan P^* ne contenant pas O' tel que si l'on ait:

$$P^* = \{X \in E^d \mid \overline{O'P} \cdot \overline{O'X} = 1\}$$

De même si on prend un hyperplan H ne passant pas par O' , on définit H^* par:

$$H^* \mid H^* \cdot X = 1, \forall X \in H$$

H^* est unique et différent de O' . La dualité s'exprime par son involution:

$$\mathcal{H}^{**} = \mathcal{H}$$

1.3 Inversion de pôle:

On a vu comment, on transforme des hyperplans en points et des points en hyperplans. Maintenant, on s'intéresse à avoir une dualité entre les sphères et les hyperplans, et donc par dualité, des sphères aux points de E^d .

³On définit un hyperplan en dimension d par son équation cartésienne: $a_1x_1 + \dots + a_dx_d + a_{d+1} = 0$

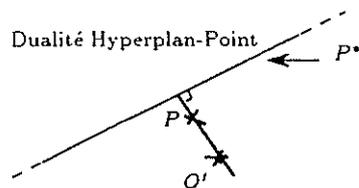


Figure 1 : Dualité par rapport à O'

1.3.1 Inversion de pôle d'un point de E^d :

Soit Υ et P deux points de E^d ($\Upsilon \neq P$), on appelle inversion de pôle P par rapport à Υ , la transformation ponctuelle qui associe à P un point P' tel que:

$$\overline{\Upsilon P} \cdot \overline{\Upsilon P'} = 1$$

1.3.2 Inversion de pôles d'une sphère S de E^d :

Soit S une sphère de E^d et Υ un point de cette sphère. L'inversion de pôle de cette sphère par rapport à Υ est la transformation qui associe à cette sphère un hyperplan défini par:

$$S^* = \{X | \overline{\Upsilon X} \cdot \overline{\Upsilon X'} = 1, X' \in S \setminus \{\Upsilon\}\}$$

A chaque point X' de S différent de Υ , on fait correspondre un point X tel que

$$\overline{\Upsilon X} \cdot \overline{\Upsilon X'} = 1$$

On voit immédiatement que S^* ne contient pas Υ . A tout hyperplan de E^d ne contenant pas Υ , on peut lui associer, dualement, une sphère passant par Υ .

1.4 Définitions et propriétés d'un polytope:

1.4.1 Définition d'un polytope:

Un polytope est défini par l'enveloppe convexe d'un ensemble fini de points de E^d . C'est un sous-ensemble fermé, borné et convexe de E^d .

On le définit dualement comme étant l'intersection finie d'hyperplans de E^d . Un polytope en dimension d est un d -polytope. Soit \mathcal{H} un hyperplan de E^d , \mathcal{H} est support de \mathcal{P} (un polytope) si $\mathcal{H} \cap \mathcal{P} \neq \emptyset$ et si \mathcal{P} est inclus dans l'adhérence de l'un des deux demi-espaces définis par \mathcal{H} :

- \mathcal{H}^+ , demi-espace ne contenant pas \mathcal{H} et contenant un point permettant de définir la région positive.
- \mathcal{H}^- , se définissant par rapport à \mathcal{H}^+ par la relation:

$$E^d = \mathcal{H}^+ + \mathcal{H}^- + \mathcal{H}$$

1.4.2 Faces d'un polytope:

On appelle face d'un polytope, l'intersection $\mathcal{H} \cap \mathcal{P}$ du polytope \mathcal{P} avec un de ses hyperplans supports. Ces faces sont des sous-ensembles de E^d de dimension comprises entre $(d-1)$ et 0 . Ce sont les faces propres du polytope. On leur ajoute deux faces impropres qui sont:

- La face vide de dimension -1 par définition.
- Le polytope \mathcal{P} lui-même, de dimension d .

L'ajout de ces faces impropres permet de simplifier certaines relations concernant les polytopes et de structurer l'architecture d'un polytope. On note j -face, une face de dimension j . Certaines faces sont désignées par des noms plus précis. Citons:

- 0-face: un sommet.
- 1-face: une arête.
- d -face: le polytope \mathcal{P}

Une k -face f_1 et une $(k+1)$ -face f_2 sont dites incidentes si f_1 est incluse dans la frontière de f_2 . On dit alors que f_1 est une sous-face de f_2 et f_2 , une super-face de f_1 .

1.4.3 Propriétés d'un polytope:

Un polytope \mathcal{P} , vérifie la relation d'Euler:
Notons $n_k(\mathcal{P})$ le nombre de k -faces.

Théorème 1.1 Les nombres $n_k(\mathcal{P})$, $-1 \leq k \leq d$, satisfont la relation:

$$\sum_{k=-1}^d (-1)^k n_k(\mathcal{P}) = 0$$

On démontre que c'est la seule relation linéaire vérifiée par les faces du polytope \mathcal{P} . Un autre type de relation utilisée sont les formules de Dehn-Sommerville qui permettent de calculer le nombre de faces de dimension k, k impair, connaissant tous les nombres de faces de dimension $i, 0 \leq i \leq k - 1$:

Théorème 1.2 *Relations de Dehn-Sommerville:*

$$\sum_{j=0}^k (-1)^j C_{d-j}^{d-k} n_j(\mathcal{P}) = n_k(\mathcal{P})$$

Lorsque k est pair, on voit que l'on ne peut obtenir $n_k(\mathcal{P})$. Aussi, pour un k -polytope, on écrit généralement toutes les relations de Dehn-Sommerville, ce qui donne $\lfloor \frac{k+1}{2} \rfloor$ relations indépendantes... La complexité d'un polytope \mathcal{P} ayant n sommets ou n $(d-1)$ -faces est $O(n^{\lfloor \frac{d}{2} \rfloor})$ [BY93].

2 Algorithmes de calcul de l'enveloppe convexe de sphères.

2.1 Introduction.

Lorsque l'on étudie les algorithmes géométriques d'objets linéaires, on s'intéresse tout d'abord au calcul de leur enveloppe convexe. Les calculs d'enveloppe convexe permettent de caractériser un ensemble de sphères en son enveloppe convexe (entité géométrique) ayant des caractéristiques mathématiques intéressantes. On peut ainsi, par exemple, modéliser une molécule par son enveloppe convexe, puis essayer de la reconnaître en l'assimilant à son enveloppe convexe (on réalise ainsi, un atlas des enveloppes convexes des molécules),.... Dans la suite, on présentera d'abord, un algorithme de calcul de cette enveloppe convexe (noté en abrégiation EC) en dimension d de complexité $\Theta(n^{\lfloor d/2 \rfloor} + n \log n)$, puis on donnera également des algorithmes plus spécifiques en dimension 2.

2.2 Algorithme de calcul de l'enveloppe convexe en dimension d en $\Theta(n^{\lfloor d/2 \rfloor} + n \log n)$ [BCD⁺92a].

On définit l'enveloppe convexe d'un ensemble de sphères S , comme étant le plus petit objet géométrique convexe contenant ces sphères. Si \mathcal{O} est un objet, on note, par convention, $EC(\mathcal{O})$ son enveloppe convexe.

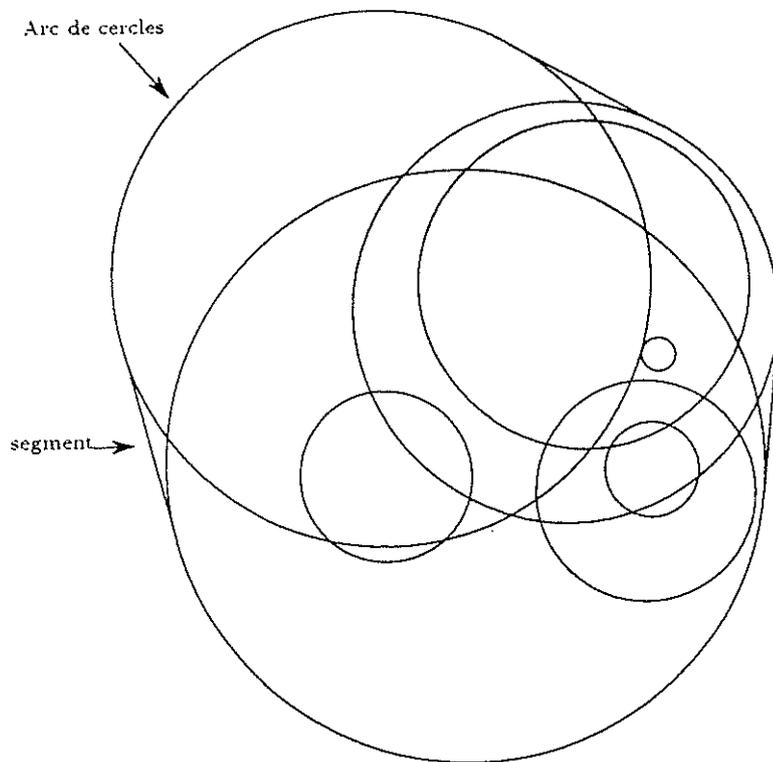


Figure 2 : Exemple d'enveloppe convexe de disques - Sortie Latex de EXEC4/enveloppe

2.2.1 Composition d'une enveloppe convexe:

- En dimension 2, le bord de l'enveloppe convexe de disques est composée de deux types d'éléments:
 1. des portions de cercles issus des disques initiaux.
 2. des segments, tangent à deux disques.
- En dimension 3, l'enveloppe convexe de sphères est constituée de trois types générateurs qui sont :
 1. des portions de sphères.

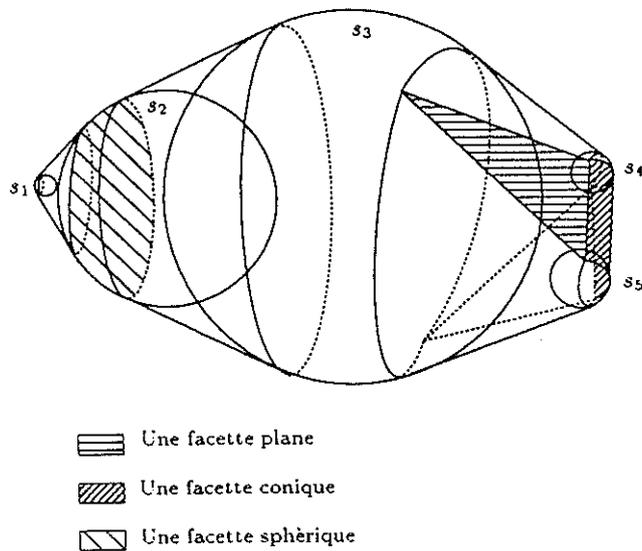


Figure 3 : Exemple d'enveloppe convexe de sphères en dimension 3.

2. des triangles tangent à trois sphères.
 3. des morceaux de cônes tangent à deux sphères.
- D'une manière générale, en dimension d , le bord de l'enveloppe convexe d'un ensemble de sphères est constituée de d types générateurs (on verra plus loin, lors de l'algorithme la justification).

2.2.2 L'algorithme:

Soit $\mathcal{S} = \{S_1, S_2, \dots, S_n\}$ l'ensemble de sphères de E^d (espace euclidien en dimension d) dont nous voulons calculer l'enveloppe convexe: $EC(\mathcal{S})$. Plongeons E^d dans E^{d+1} tel que l'hyperplan de $E^{d+1} : x_{d+1} = 0$ contienne toutes les sphères \mathcal{S} . On dira que le $(d+1)^{eme}$ axe est l'axe vertical. Pour chaque sphère de E^d , on associe un point de E^{d+1} tel que:

$$S_i \rightarrow \phi(S_i) = (x_1^{(i)}, x_2^{(i)}, \dots, x_n^{(i)}, \mathcal{R}_i) \text{ où } (x_1^{(i)}, x_2^{(i)}, \dots, x_n^{(i)}) \text{ désigne le centre de la sphère } S_i \text{ et } \mathcal{R}_i \text{ son rayon.}$$

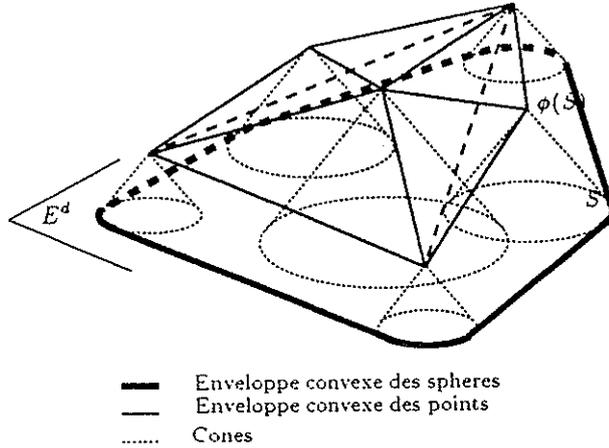


Figure 4 : Immersion de l'espace E^d dans l'espace E^{d+1} .

Soit C_0 un cône d'angle⁴ $\frac{\pi}{4}$ d'axe parallèle à x_{d+1} et de sommet quelconque. A toute sphère S_i de S , on associe un cône $\theta(S_i)$ tel que l'apex (le sommet) de ce cône soit $\phi(S_i)$ et soit le translaté du cône C_0 par rapport à l'axe vertical. Soit O' un point quelconque à l'intérieur de $EC(S)$.

Théorème 2.1 *Tout hyperplan de E^d qui est support de $EC(S)$ est l'intersection d'un unique hyperplan \mathcal{H} de E^{d+1} avec $x_{d+1} = 0$ tel que:*

1. \mathcal{H} est support de $EC(\phi(S))$.
2. \mathcal{H} est le translaté d'un hyperplan tangent à C_0 .
3. \mathcal{H} est au-dessus de O' .

Réciproquement, l'intersection d'un hyperplan de E^{d+1} vérifiant les trois conditions ci-dessus avec $x_{d+1} = 0$ est un hyperplan de E^d support de $EC(S)$.

Preuve.

- L'intersection entre $EC(\theta(S))$ et l'hyperplan $x_{d+1} = 0$ est $EC(S)$. Ceci découle du fait que $\theta(S) \cap (x_{d+1} = 0) = S$

⁴On choisit $\frac{\pi}{4}$ afin de faciliter les transformations, mais on pourrait prendre un angle arbitraire.

- Réciproquement, Si un hyperplan de E^{d+1} est support de $EC(\phi(\mathcal{S}))$, au dessus de O' et soit le translaté d'un hyperplan tangent à C_0 . alors son intersection avec l'hyperplan $x_{d+1} = 0$ est support de $EC(\mathcal{S})$ \square

Ainsi, on aura d types générateurs lorsque l'on calcule l'enveloppe convexe de sphères en dimension d , puisque l'on étudiera d'abord les faces de dimension $(d - 1)$, puis les $(d - 2)$ -faces, ..., 0-faces.

2.2.3 Analyse de la complexité de l'algorithme:

Comme la complexité de l'algorithme de calcul de l'enveloppe convexe de points en dimension d est $\Theta(n^{\lfloor \frac{d}{2} \rfloor} + n \log n)$ [Duq92] [BY93]. la complexité de l'algorithme est au moins celle-ci (il suffit de prendre des sphères de rayon nul, on a alors des points). Si l'on note $c(n)$ la complexité du calcul de l'enveloppe convexe; on a:

- $c(n) = \Omega(n^{\lfloor \frac{d}{2} \rfloor} + n \log n)$
- $c(n) = O(n^{\lfloor \frac{d+1}{2} \rfloor} + n \log n)$

Le problème est donc de savoir s'il existe des algorithmes meilleurs en dimension impaire (différent de 3) puisque l'immersion de l'espace de dimension d dans l'espace E^{d+1} augmente la complexité de l'algorithme d'un facteur⁵ n .

2.3 Algorithmes de calcul d'enveloppe convexe de disques (en dimension 2).

Dans cette partie, après avoir vu un algorithme fonctionnant en dimension quelconque, on va s'intéresser aux divers algorithmes en dimension 2. De même qu'il existe des algorithmes non généralisable de calcul d'enveloppe convexe de points en dimension 2, on va décrire des algorithmes spécifiques à cette dimension.

2.3.1 Implantation de l'algorithme général en $\Theta(n \log n)$.

L'implantation d'un algorithme nécessite le choix d'une structure de données. On code la structure d'un polytope par:

son graphe d'incidence

⁵Si $d = 2k + 1$ alors $\lfloor \frac{d}{2} \rfloor = k$ et $\lfloor \frac{d+1}{2} \rfloor = k + 1$.

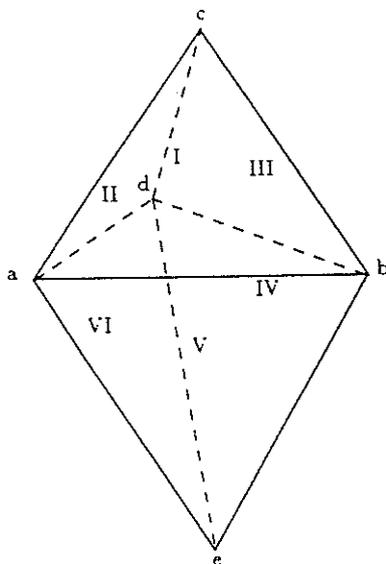


Figure 5 : Bipyramide à représenter sous son graphe d'incidence

On a choisi, de coder le polytope 3D, résultat du calcul de l'enveloppe convexe des disques convertis en points, par son **graphe d'incidence**. Le graphe d'incidence est un graphe non orienté qui décrit la structure faciale d'un polytope. Il est constitué de noeuds d'information dans lesquels sont stockés le polytope comme suit:

On distingue $(d+2)$ couches dans lesquelles sont énumérées toutes les j -faces pour $-1 \leq j \leq d$. Deux noeuds sont reliés s'ils diffèrent d'une couche et si l'un est une sous-face⁶ de l'autre. Ainsi, on voit bien l'intérêt d'ajouter les faces impropres. La -1-face nous permet d'avoir une racine: le point de départ de la structure du polytope. Par exemple, si l'on veut représenter cette bipyramide par son graphe d'incidence, on obtiendra un graphe d'incidence marquant toutes les relations entre les faces du polytope. En dimension 3, on peut également coder un polytope par sa liste d'arêtes[BY93] (on code un sommet par un noeud et une arête par deux noeuds:origine-extremité): en effet, ce sont les (3-2)-faces qui vont donner lieu, ou non, aux segments.

⁶voir la première partie...

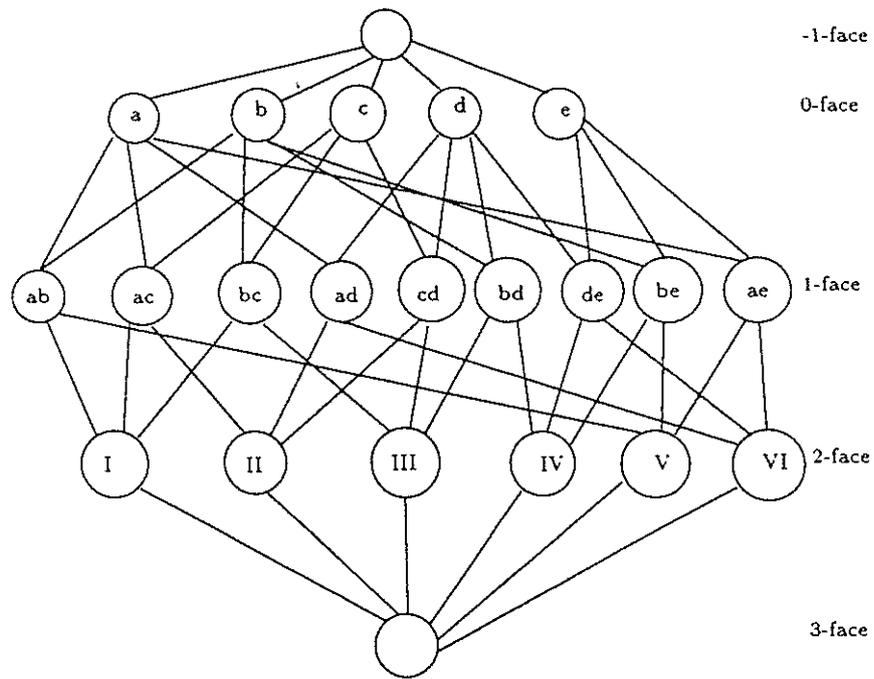


Figure 6 : Graphe d'incidence codant le polytope

2.3.2 Parcours de la ceinture du polytope

La ceinture se définit simplement comme étant l'ensemble des $(d-2)$ -faces (ici les arêtes) dont l'intersection de l'hyperplan support à 45^0 avec l'axe z et l'hyperplan $(z = 0)$ donne un segment du bord de l'enveloppe convexe des disques.

Théorème 2.2 *La ceinture est connexe.*

Preuve. Ceci est dû au fait que l'enveloppe convexe est connexe. \square Notons

S_i la sphère de centre (x_i, y_i) et de rayon r_i . Le parcours de la ceinture du polytope \mathcal{P} s'effectue de la manière suivante:

ALGORITHME:

1. Trouver le sommet, $s_{initial}$, du polytope \mathcal{P} qui vérifie la maximalité⁷ de $x_i + r_i$.
2. $s = s_{initial}$
3. Regarder une par une les arêtes partant du sommet s jusqu'à trouver une arête donnant un hyperplan support de $EC(\mathcal{O}(S))$ ayant un angle de 45^0 par rapport à l'axe z et se situant au-dessus de O' .
4. S'il existe⁸ un telle arête alors $s = EXTREMITE(arête)$. Si $s = s_{initial}$ alors FIN sinon aller en 3.

2.3.3 Projection d'un segment de E^3 ayant un plan support de l'enveloppe convexe à 45^0 avec l'axe z dans E^2 :

Pour calculer efficacement, la projection à 45^0 d'une arête $(P_1 P_2)$, on projette orthogonalement d'abord par rapport au plan $\{\bar{u} \mid \bar{u} = \alpha \bar{x} + \beta \bar{y}, (\alpha, \beta) \in R^2\}$; on obtient deux points P'_1 et P'_2 . On calcule les droites Δ_1 et Δ_2 telles que Δ_1 passe par P'_1 et soit perpendiculaire à la droite définie par l'intersection du plan support avec le plan $(z = 0)$ que l'on note Δ . On a alors $s_1 = \Delta \cap \Delta_1$ et $s_2 = \Delta \cap \Delta_2$ où Δ_2 est perpendiculaire à Δ et passe par P'_2 . Le segment faisant partie de l'enveloppe convexe est $[s_1 s_2]$.

⁷ on est sûr que la sphère S_i intervient dans l'EC.

⁸ Cette méthode permet de contrôler les éventuelles erreurs numériques du programme...

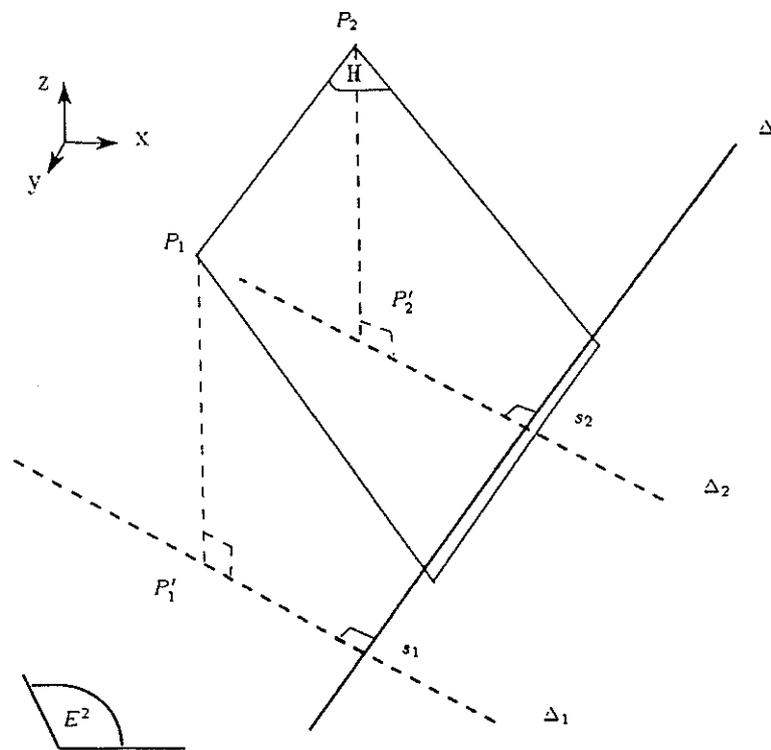


Figure 7 : Détermination d'un segment de l'enveloppe convexe.

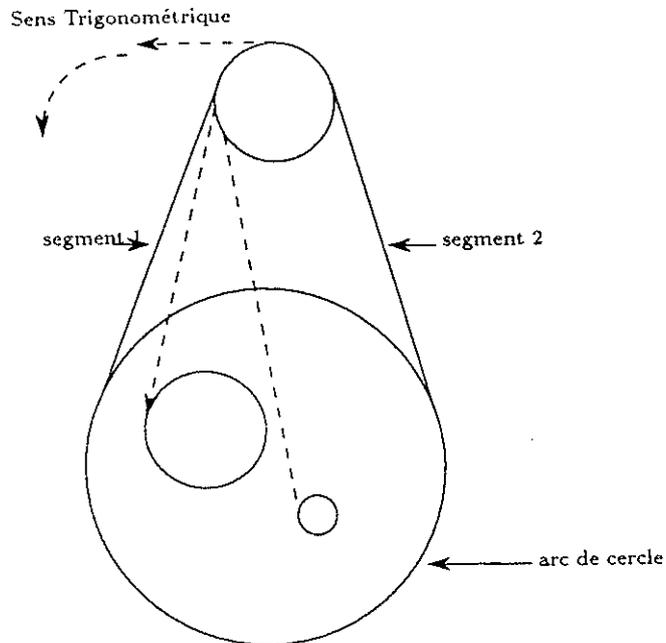


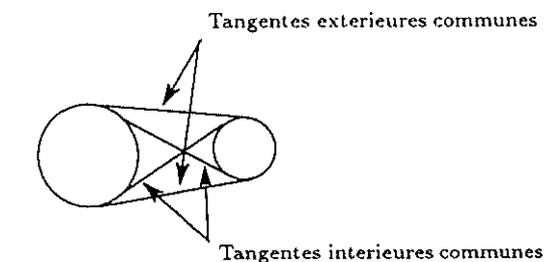
Figure 8 : Détermination d'un segment de l'enveloppe convexe.

2.4 Calcul de l'enveloppe convexe de disques par un algorithme output-sensitive ($\Theta(nh)$).

2.4.1 Description générale de l'algorithme:

Un algorithme output-sensitive est un algorithme dont la complexité dépend de la taille du résultat. Cet algorithme est une marche de Jarvis (algorithme de paquet cadeaux). Il faut au départ partir d'un disque qui fait partie de l'enveloppe convexe. Prenons, par exemple, le disque vérifiant $y_i + r_i$ maximal. On construit, alors, l'enveloppe convexe dans le sens trigonométrique de la manière suivante:

1. Prendre comme direction $dir_{initial}$ la tangente au cercle S_i passant par le point $(x_i, y_i + r_i)$ orientée dans le sens des x négatifs.
2. $dir = dir_{initial}$



Cas speciaux de tangentes exterieures:



Figure 9 : Tangentes communes à deux cercles.

3. Calculer toutes les directions définies par les tangentes communes extérieures⁹ (si elles existent) entre le cercle S_i et les autres cercles S_j et orientées de S_i à S_j .
4. Choisir le cercle S_j tel que l'angle entre dir et dir_j soit minimal.
5. Si $dir_j = dir_{initial}$ alors **FIN** sinon $dir = dir_j$.
6. Aller en 3.

2.4.2 Calcul des tangentes extérieures communes à deux disques

Le calcul se fait très bien, si l'on considère les cercles en équation polaire: Considérons deux cercles: C_1 et C_2 :

$$C_1 = \begin{cases} x = x_1 + r_1 \cos \theta \\ y = y_1 + r_1 \sin \theta \end{cases}$$

et

$$C_2 = \begin{cases} x = x_2 + r_2 \cos \theta' \\ y = y_2 + r_2 \sin \theta' \end{cases}$$

Lorsqu'il existe deux tangentes communes extérieures à ces deux cercles. on a la propriété que les points de contact sur les cercles sont tels qu'ils

⁹Sauf cas dégénéré, il existe 4 tangentes communes à deux cercles: 2 qui s'intersectent que l'on dit intérieures et 2 extérieures.

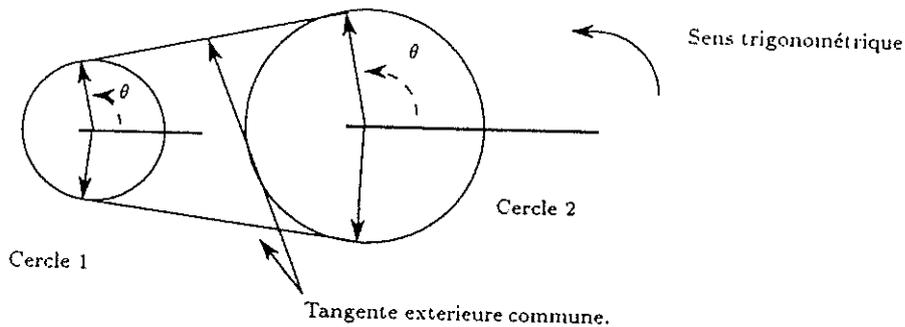


Figure 10 : Calcul des tangentes communes extérieures.

ont le même angle θ . On pose donc le vecteur \vec{u} comme étant le vecteur perpendiculaire à cette tangente:

$$\vec{u} = (\cos \theta, \sin \theta)$$

et

$$\vec{u} \cdot \overline{P_1 P_2} = 0$$

ce qui conduit directement à l'équation:

$$\Delta r + \Delta x \cos \theta + \Delta y \sin \theta = 0$$

où $\Delta r = r_2 - r_1$, $\Delta x = x_2 - x_1$, $\Delta y = y_2 - y_1$. Cette équation donne les éventuelles solutions...

2.5 Analyse des résultats.

2.5.1 Complexité de la marche de Jarvis:

A chaque étape de l'algorithme, on calcule $O(n)$ tangentes extérieures. Comme il y a h (nombre de segments du bord de l'enveloppe convexe) étapes, la complexité de l'algorithme est:

$$c(n) = \Theta(nh)$$

2.5.2 Conclusion:

Il n'y a pas d'algorithme telle que sa complexité soit minimale dans tous les cas. En effet, si la taille de l'enveloppe convexe est inférieure à $\log n$, l'algorithme en $\Theta(n.h)$ sera plus efficace, sinon il est préférable d'utiliser l'algorithme qui passe par le calcul de l'enveloppe convexe en dimension 3 en $\Theta(n \log n)$.

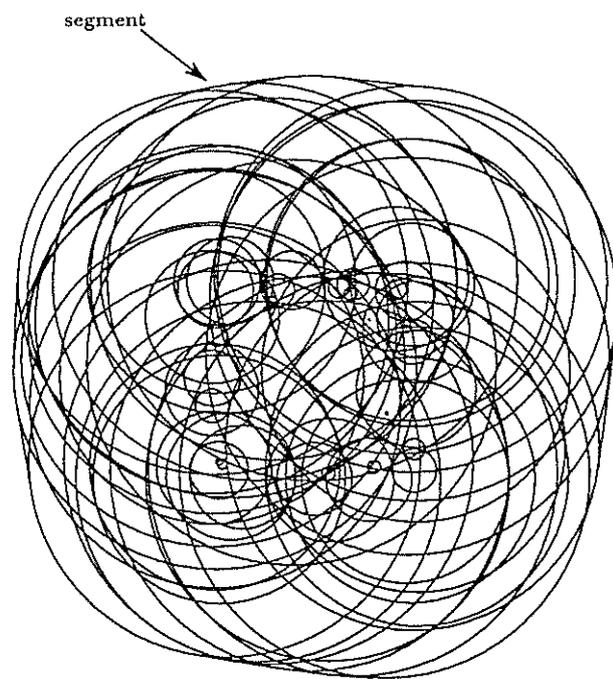


Figure 11 : Enveloppe convexe d'un ensemble de disques de \mathcal{D}^2 .

3 Algorithme de calcul des surfaces de Connolly [BDD92].

3.1 Introduction.

Les surfaces de Connolly sont utilisées en chimie [BLO90, SAN91] pour modéliser la possibilité de contacts entre deux molécules données. On modélise les molécules comme étant un ensemble de n sphères ¹⁰: $\mathcal{S} = \{S_i, 0 \leq i \leq n\}$ avec $|\mathcal{S}| = n + 1$. Appelons ρ -région, le complémentaire fermé d'un disque de rayon ρ . La surface de Connolly de \mathcal{S} noté $\mathcal{C}_\rho(\mathcal{S})$ est le bord de l'intersection de toutes les ρ -régions contenant \mathcal{S} . Mais on a également $\mathcal{C}_\rho(\mathcal{S})$ qui est le bord de l'union de toutes les sphères de rayon ρ n'intersectant pas \mathcal{S} . Fait:

- si $\rho = 0, \mathcal{C}_\rho(\mathcal{S}) = \mathcal{S}$
- si $\rho \rightarrow \infty, \mathcal{C}_\rho(\mathcal{S}) = \mathcal{EC}(\mathcal{S})$ (c'est son enveloppe convexe)

La bordure de la surface de Connolly décrit la zone accessible par une sphère de rayon ρ sur une molécule \mathcal{S} . En catalyse enzymatique, cette surface est utilisée pour modéliser les forces électrostatiques afin de visualiser les zones d'affinités des molécules et de déterminer les sites actifs [LK]. On appelle sphère de Connolly, une sphère de rayon ρ tangente à au moins deux sphères de \mathcal{S} . La surface de Connolly $\mathcal{C}_\rho(\mathcal{S})$ est composée:

- en dimension 2:
 1. de parties convexes, qui sont des morceaux de sphères S_i de \mathcal{S}
 2. de parties concaves, qui sont des morceaux de sphères de rayon ρ
- en dimension 3:
 1. de parties concaves
 - formées par des portions de sphères de rayon ρ tangente à trois sphères de \mathcal{S} .
 - de parties toriques de rayon ρ , tangente à deux sphères de la molécule \mathcal{S} .
 2. de parties convexes issues des sphères de la molécule.

¹⁰une sphère est un objet géométrique convexe défini par son centre (a_1, \dots, a_d) et son rayon r en dimension d :

$$(x_1 - a_1)^2 + (x_2 - a_2)^2 + \dots + (x_d - a_d)^2 = r^2$$

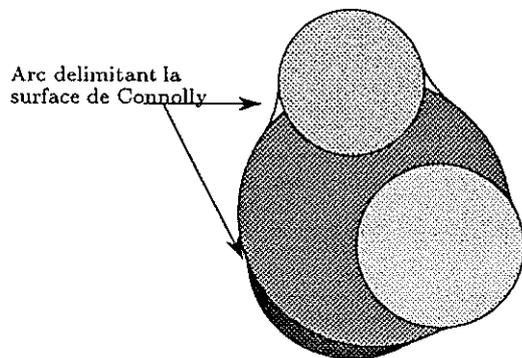


Figure 12 : Exemple de surfaces de Connolly.

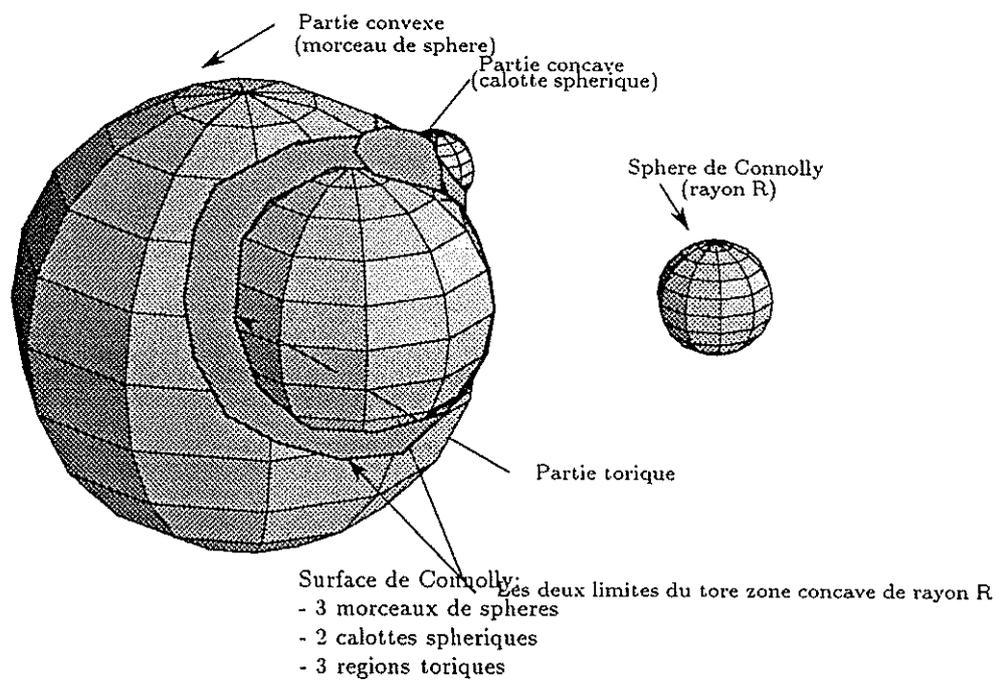


Figure 13 : Surface de Connolly en dimension 3.

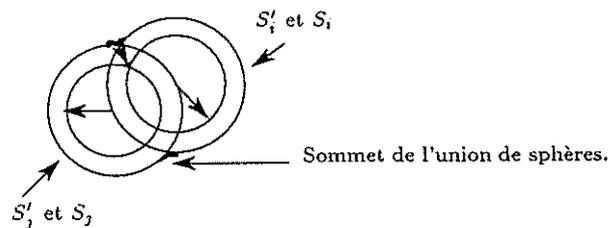


Figure 14 : Lien entre le calcul de d'une surface de Connolly et l'union de sphères.

3.2 Algorithme en dimension d .

On introduit un nouveau jeu de sphères $\mathcal{S}' = \{S'_i, 0 \leq i \leq n\}$ où S'_i est la sphère de même centre que S_i et de rayon $\rho + \rho_i$. En dimension 3, une sphère Σ de rayon ρ est tangente aux sphères $S_i, S_j,$ et S_k et n'intersecte pas d'autres sphères de \mathcal{S} ssi le centre de Σ est contenu dans l'intersection de $S'_i \cap S'_j \cap S'_k$, et n'est pas à l'intérieur d'autres sphères de \mathcal{S}' . Ceci montre l'isomorphisme, puisqu'un sommet de l'union des sphères donne un point définissant la surface de Connolly,...

- Un sommet de l'union correspond à une partie concave (calotte sphérique).
- Une arête correspond à une partie torique (tangente à deux sphères).
- Une face correspond à une partie convexe¹¹.

3.3 Algorithme de l'union de sphères.

On a donc ramené le problème de calculer les surfaces de Connolly à l'union de sphères. Comme l'union de n sphères a pour taille $\Theta(n^2)$, il s'ensuit que la complexité de la surface de Connolly est en $O(n^2)$ dans le cas le pire en dimension 3. On calcule cette union de la manière suivante:

1. Plongeons l'espace de dimension 3 (\mathcal{E}^3) dans l'espace euclidien de dimension 4: \mathcal{E}^4 . Soit α un point de \mathcal{E}^4 tel que $x_4(\alpha) \neq 0$
 $x_4(x)$ est la projection orthogonale de x sur l'axe vertical:

$$\mathcal{R}^4 \rightarrow \mathcal{R}[x = (a_1, a_2, a_3, a_4) \rightarrow x_4(x) = a_4$$

¹¹Chaque sommet apporte une restriction sur la complexité de l'objet.

, à chaque sphère de \mathcal{S}' , on associe une sphère en dimension 4, notée γ_i , telle que cette sphère passe par α et que l'intersection de cette sphère γ_i avec $(x_4 = 0)$ soit \mathcal{S}'_i . Bien évidemment γ_i est unique.

Fait:

Toutes les sphères $\gamma_i, 0 \leq i \leq n$ passent par α

2. Puis, effectuons une inversion de pôle α sur $\gamma = \{\gamma_i, 1 \leq i \leq n\}$, on transforme l'union de sphères en l'union de demi-espaces. Mais on préfère faire l'intersection des complémentaires des demi-espaces¹² calculable en $\Theta(n^2)$.
3. La dualité qui a un hyperplan de \mathcal{E}^4 fait correspondre un point de \mathcal{E}^4 permet de résoudre l'intersection des demi-espaces par le calcul de l'enveloppe convexe [SEI81] des points duaux en $\Theta(n^2)$ et par dualité, on trouve l'intersection des hyperplans ([BY93]).

3.3.1 Analyse des résultats.

Cet algorithme est généralisable en dimension d . Il illustre bien le fait qu'en géométrie algorithmique, on plonge souvent l'espace dans un espace de dimension supérieure ($d + 1, d + 2, \dots$). On utilise, alors la dualité pour pouvoir résoudre le problème puis on prend les solutions duales. Les surfaces de Connolly sont très utilisées en Chimie, pour le problème de **Docking**: il faut essayer de trouver la conformation d'un ligand et la position de ce ligand par rapport à un site d'une macromolécule. Bien sûr, ce problème n'est résolu qu'approximativement et fait intervenir des heuristiques¹³... Les résultats obtenus par le calcul sont précis¹⁴

4 Calcul des déplacements admissibles d'une molécule sur une autre.

Soit $\mathcal{A} = \{A_i, 1 \leq i \leq n\}$ et $\mathcal{B} = \{B_i, 1 \leq i \leq m\}$ deux ensembles de sphères en dimension 2, on présente dans la suite un algorithme permettant de calculer toutes les positions du plan admissibles par \mathcal{A} : c'est-à-dire, toutes

¹²Le complémentaire d'un demi-espace est un demi espace

¹³ALCHEMY et SYBYL, ont mis au point un outil de visualisation et de docking sur PC:ALCHEMY III

¹⁴L'erreur dépend du rayon de Connolly par rapport au rayon moyen des sphères de la molécule. En général, les calculs ont une précision de 10^{-15} .

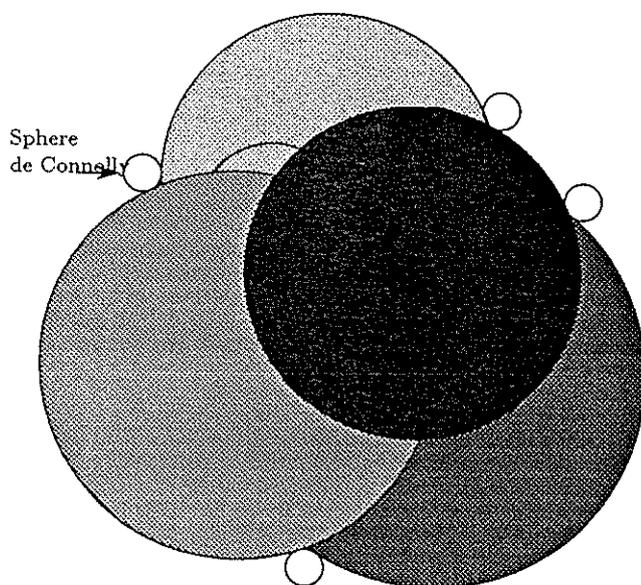


Figure 15 : Représentation des sphères de Connolly sur un ensemble de sphères.

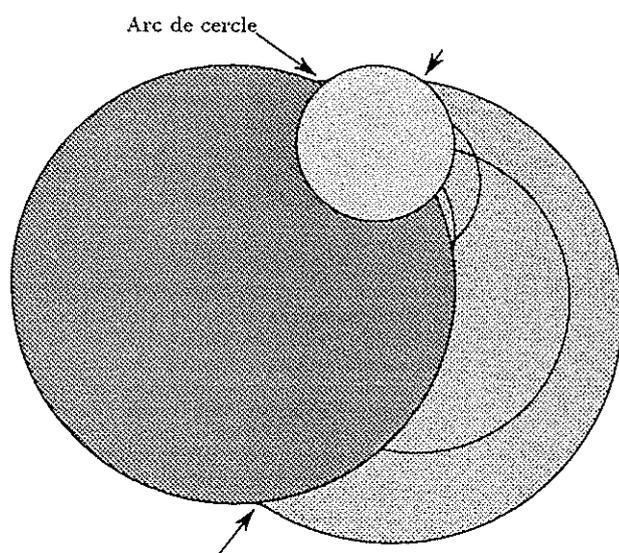


Figure 16 : Représentation des arcs de Connolly (molécule 4).

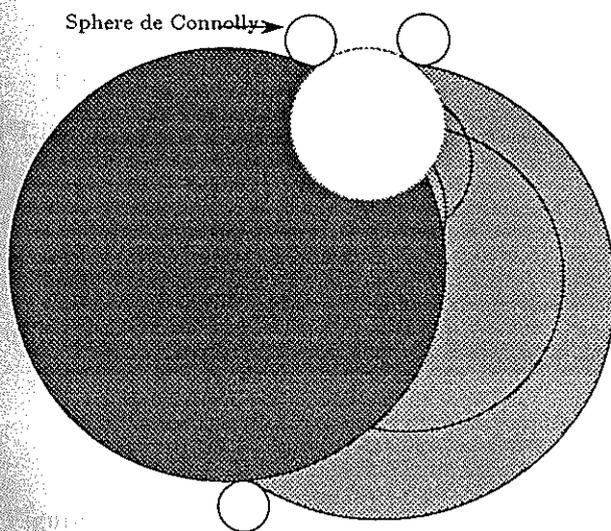


Figure 17 : Représentation des sphères de Connolly (molécule 4).

les positions satisfiant $A \cap B = \emptyset$. Dans un premier temps, après avoir développé le formalisme de Minkowski, on va n'autoriser que les translations de \mathcal{A} , puis on introduira les rotations de \mathcal{A} . On définit la surface de Connolly: $C_{\mathcal{A}}(\mathcal{B})$, comme étant le bord de la région admissible.

4.1 Le formalisme de Minkowski:

Soit \mathcal{A} et \mathcal{B} deux objets géométriques, on définit la somme de Minkowski par:

$$\mathcal{A} \oplus \mathcal{B} = \{a + b, a \in \mathcal{A} \text{ et } b \in \mathcal{B}\}$$

Si l'on prend la convention de noter $\ominus \mathcal{A} = \{-a, a \in \mathcal{A}\}$, alors on a:

$$\mathcal{A} \ominus \mathcal{B} = \mathcal{A} \oplus (\ominus \mathcal{B})$$

La somme de Minkowski est une convolution. En effet, $X \in \mathcal{A} \oplus \mathcal{B}$ est équivalent à:

$$\exists Y \in E^2, (Y \in \mathcal{A}) \wedge (X - Y \in \mathcal{B})$$

Si l'on note $\mathcal{A}(\cdot)$ et $\mathcal{B}(\cdot)$ les fonctions logiques telles que

$$X \in \mathcal{A} \Leftrightarrow \mathcal{A}(X) = 1, 0 \text{ sinon}$$

alors on a:

$$(\mathcal{A} \oplus \mathcal{B})(X) = \bigvee_{Y \in \mathcal{E}^2} (\mathcal{A}(Y) \wedge \mathcal{B}(X - Y))$$

Propriétés:

•

$$\mathcal{A} \oplus T_{\vec{u}}(\mathcal{B}) = \{a + u + b, a \in \mathcal{A}, b \in \mathcal{B}\}$$

$T_{\vec{u}}(\cdot)$ désigne la translation de vecteur \vec{u} . Soit

$$\mathcal{A} \oplus T_{\vec{u}}(\mathcal{B}) = T_{\vec{u}}(\mathcal{A} \oplus \mathcal{B})$$

•

$$T_{\vec{u}}(\ominus \mathcal{A}) = \ominus T_{-\vec{u}}(\mathcal{A})$$

•

$$(\mathcal{A}_1 \cup \mathcal{A}_2) \oplus \mathcal{B} = (\mathcal{A}_1 \oplus \mathcal{B}) \cup (\mathcal{A}_2 \oplus \mathcal{B})$$

Les sommes de Minkowski sont très utilisées pour les algorithmes de placement d'un objet par rapport à un autre.

Théorème:

$\mathcal{A} \cap \mathcal{B} \neq \emptyset$ ssi $0 \in \mathcal{A} \ominus \mathcal{B}$.

$\mathcal{A} \ominus \mathcal{B} = \{\vec{u} \mid T_{\vec{u}}(\mathcal{B}) \cap \mathcal{A} \neq \emptyset\}$.

Preuve:

Soit $X \in \mathcal{A} \cap \mathcal{B}$,

• $X = a = b, a \in \mathcal{A}, b \in \mathcal{B}$, soit $a - b = 0$ d'où $0 \in \mathcal{A} \ominus \mathcal{B}$.

• Si $0 \in \mathcal{A} \ominus \mathcal{B}$ alors $\exists a \in \mathcal{A} \exists b \in \mathcal{B} \mid a - b = 0$.
Soit $a = b$ et donc $\mathcal{A} \cap \mathcal{B} \neq \emptyset$.

• $T_{\vec{u}}(\mathcal{A}) \cap \mathcal{B} \neq \emptyset$
 $\Leftrightarrow \exists a \in \mathcal{A} \exists b \in \mathcal{B} \mid a + u = b$
 $\Leftrightarrow u = b - a$
 Soit $u \in \mathcal{B} \ominus \mathcal{A}$

Ainsi, lorsque l'on veut calculer toutes les positions des translats de \mathcal{A} par rapport à \mathcal{B} tel que $\mathcal{A} \cap \mathcal{B} \neq \emptyset$, on calcule $\mathcal{A} \ominus \mathcal{B}$. Soit \mathcal{O} un objet géométrique

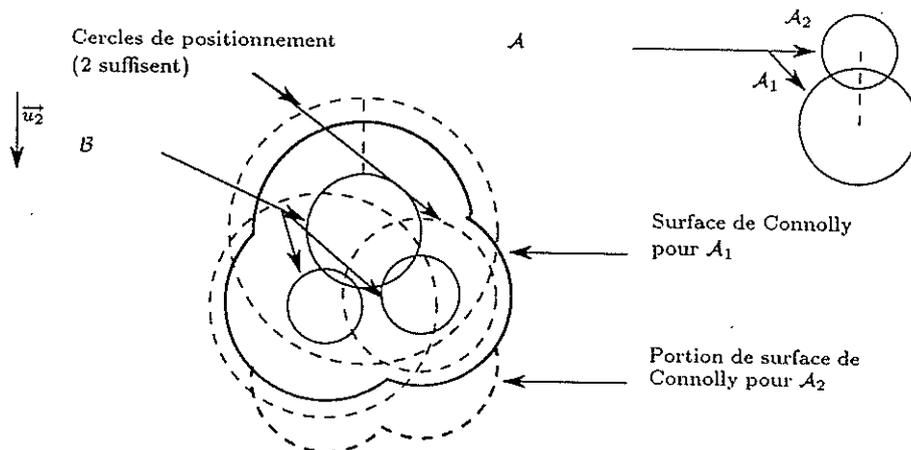


Figure 18 : Positions admissibles de A par rapport à B (uniquement des translations).

du plan E^2 , on note $R_\theta(\mathcal{A}) = \{R_\theta(a) \mid a \in \mathcal{A}\}$ où R_θ désigne une rotation¹⁵ de SO^2 . Dans un premier temps, on va analyser le cas où A ne subit que des translations. Puis on étudiera le cas où A subit n'importe quelle similitude du plan¹⁶. Si l'on note $\partial\mathcal{A}$ le bord de \mathcal{A} , et $\overline{\mathcal{A}}$ le complémentaire de \mathcal{A} , on va d'abord calculer $\overline{\partial\mathcal{A} \ominus \mathcal{B}}$ puis on définira $\mathcal{C}_\mathcal{A}(\mathcal{B})$ par

$$\mathcal{C}_\mathcal{A}(\mathcal{B}) = \partial \bigcup_{\theta \in [-\pi; +\pi[} \overline{\mathcal{A}_\theta \ominus \mathcal{B}}$$

4.2 Algorithme de Calcul des positions admissibles de \mathcal{A} par rapport à \mathcal{B} en autorisant que les translations de \mathcal{A} :

Soit \mathcal{S} une sphère, on note $\mathcal{C}(\mathcal{S})$, le centre de cette sphère et $\mathcal{R}(\mathcal{S})$ son rayon. On note $\mathcal{U}(\mathcal{S})$, l'union des sphères de \mathcal{S} :

$$\mathcal{U}(\mathcal{S}) = \{\mathcal{S}_i, 1 \leq i \leq |\mathcal{S}|\}$$

Dans le formalisme de Minkowski, on cherche à calculer $\overline{\partial\mathcal{A} \ominus \mathcal{B}}$. L'algorithme est alors très simple:

¹⁵En dimension d , on note SO^d le groupe des rotations de E^d . Soit $R_\theta \in SO^d$, on a $R_\theta R_\theta^t = Id$ et $\det R_\theta = 1$.

¹⁶Généralement, on note D^d l'ensemble des déplacements en dimension d .

- Calculer $U_i = \mathcal{U}(\mathcal{S}^{(i)})$ où $\mathcal{S}^{(i)}$ désigne l'ensemble des sphères de \mathcal{B} , de même centre mais de rayon augmenté de $\mathcal{R}(\mathcal{A}_i)$, soit:

$$U_i(\mathcal{S}^{(i)}) = \{S_j'^{(i)}, 1 \leq j \leq m\}$$

avec

$$S_j'^{(i)} = \begin{cases} C(S_j'^{(i)}) = C(\mathcal{B}_j) \\ \mathcal{R}(S_j'^{(i)}) = \mathcal{R}(\mathcal{B}_j) + \mathcal{R}(\mathcal{A}_i) \end{cases}$$

- Choisir le centre d'une sphère de \mathcal{A} , quitte à renuméroter les sphères on prend la sphère 1, comme étant l'origine de calcul des vecteurs translations $\vec{u}_1, \vec{u}_2, \dots, \vec{u}_n$ définis par:

$$\vec{u}_1 = \vec{0}$$

$$\vec{u}_i = \overline{C(\mathcal{A}_i)C(\mathcal{A}_1)}, 2 \leq i \leq n$$

- Calculer la surface définie par:

$$P = \bigcup_{1 \leq i \leq n} T_{\vec{u}_i}(U_i)$$

Le bord extérieur de $P, \partial P$ est un polyarc¹⁷ qui désigne l'ensemble de toutes les positions limites du centre de \mathcal{A}_1 tel que \mathcal{A} soit tangent à \mathcal{B} . Si l'on veut avoir la zone des positions interdites de la molécule \mathcal{A} , il suffit de calculer $P \ominus \mathcal{A}_1$ qui est très facile puisque l'on ne change que le rayon de chaque arc, en l'augmentant de $\mathcal{R}(\mathcal{A}_1)$. Cependant, bien que la succession des arcs de l'union ne change pas, les positions d'intersections changent et donc les angles délimitants les arcs (on peut d'ailleurs utiliser cette propriété pour éviter de calculer au départ toutes les unions: on calcule la première puis on en déduit les autres par un simple parcours: $\Theta(nm + m \log m)$ au lieu de $\Theta(nm \log(nm))$).

Interprétation de la courbe ∂P :

Lorsque l'on se trouve sur un arc venant de $T_{\vec{u}_i}(U_i)$, on sait que la sphère i est tangente à \mathcal{B} , on peut ainsi parcourir ∂P , en connaissant à chaque position la sphère tangente à \mathcal{B} . Lorsque l'on rencontre un point d'intersection d'arcs, on a au minimum 2 arcs qui ont donnés ce point, donc \mathcal{A} sera tangent à \mathcal{B} par au moins deux sphères.

¹⁷ Un polyarc, est un ensemble d'arcs continu fermé.

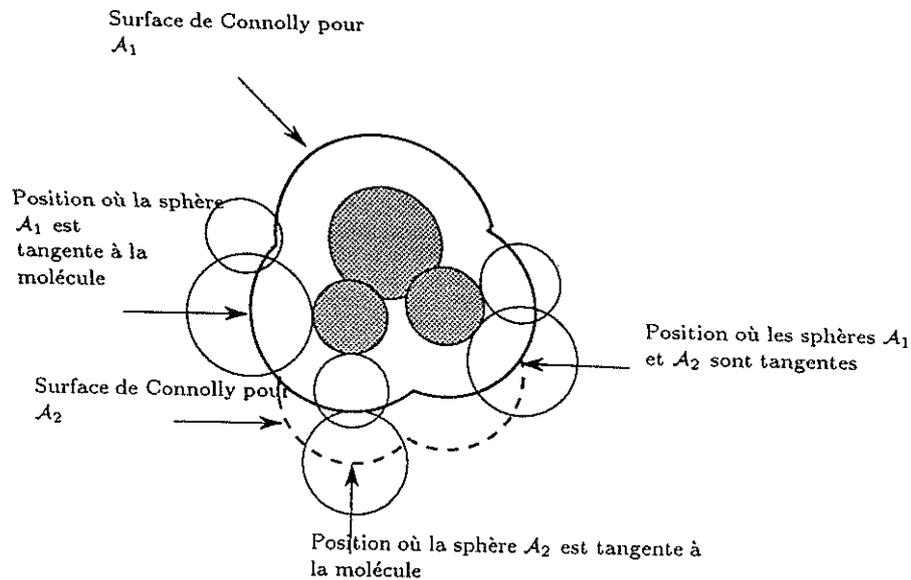


Figure 19 : Interprétation de ∂P .

Complexité:

Au départ, on calcule tous les ensembles de sphères $S^{(i)}$, $1 \leq i \leq n$ en $O(n.m)$ puis on calcule en $O(n)$ les vecteurs de translation, on réalise alors l'union de tous les $S^{(i)}$ en $O(nm \log(nm))$ en utilisant les dualités¹⁸. Comme l'algorithme de calcul de l'enveloppe convexe de n points en dimension 3 se fait de façon optimale en $\Theta(n \log n)$, on en déduit que l'algorithme de l'union de n sphères est en $\Theta(n \log n)$. La complexité de trouver les positions admissibles de \mathcal{A} par rapport à \mathcal{B} en autorisant uniquement les translations de \mathcal{A} est donc en $\Theta(nm \log(nm))$ où n est le nombre de sphères de \mathcal{A} et m le nombre de sphères de \mathcal{B} .

¹⁸Au cours de l'algorithme, on peut détecter le bord externe ∂P sans coût supplémentaire.

4.3 Calcul de $\mathcal{C}_A(\mathcal{B})$:

4.3.1 Calcul de la région limite admissible de deux cercles:

Soit C_1 et C_2 , les deux cercles. Ces deux cercles s'intersectent (donc se chevauchent) ssi

$$d(\mathcal{C}(C_1), \mathcal{C}(C_2)) \leq \mathcal{R}(C_1) + \mathcal{R}(C_2)$$

$d(., .)$ est la distance euclidienne. Ainsi, si on suppose que C_1 est fixe et que l'on cherche à déterminer l'ensemble des positions du centre de C_2 tel que $C_1 \cap C_2 \neq \emptyset$, on trouve un anneau défini par:

$$\mathcal{ANNÉAU} = \begin{cases} \mathcal{C}(\mathcal{ANNÉAU}) = \mathcal{C}(C_1) \\ \mathcal{R}_{grand}(\mathcal{ANNÉAU}) = \mathcal{R}(C_1) + \mathcal{R}(C_2) \\ \mathcal{R}_{petit} \begin{cases} 0 \text{ si } r_2 \geq r_1 \\ r_1 - r_2 \text{ sinon} \end{cases} \end{cases}$$

Supposons que l'on ait $\|\bar{u}\| = c$ où c est une constante bien définie (\bar{u} est le vecteur translation de C_2) par la donnée de la molécule \mathcal{A} . La limite recherchée est l'intersection de la zone admissible avec le cercle centré à l'origine de rayon c .

4.3.2 Calcul de la région admissible d'un arc de cercles avec un cercle

Soit a l'arc de cercle: $a = (r_2, \theta_1, \theta_2)$ que l'on considère en position fixe (x_a, y_a) et C le cercle mobile de rayon r_1 . La zone admissible est alors un objet ayant une forme de "haricot" constituée par deux arcs de cercles: $(r_2 - r_1, \theta_1, \theta_2)$ et $(r_2 + r_1, \theta_1, \theta_2)$ reliés par deux demi-cercles de rayon r_1 . Ainsi, on a calculé $a \ominus C$ qui est la région non-admissible. On en déduit donc aisément $\partial(a \ominus C)$. Si l'on ajoute maintenant la contrainte $\|\bar{u}\| = c$, on peut caractériser la région par au plus deux secteurs angulaires donc 4 angles.

4.3.3 Calcul de la région admissible de deux arcs de cercle:

Considérons désormais $a_1 = (x_{a_1}, y_{a_1}, r_1, \alpha_1, \alpha_2)$ fixe et a_2 mobile défini par $a_2 = (r_2, \theta_1, \theta_2)$. Par rapport à l'étude précédente, on doit tenir compte de la restriction apportée par les angles délimitant a_2 . La surface décrite par l'arc a_2 dont le centre varie sur l'intersection du "haricot" et du cercle centré

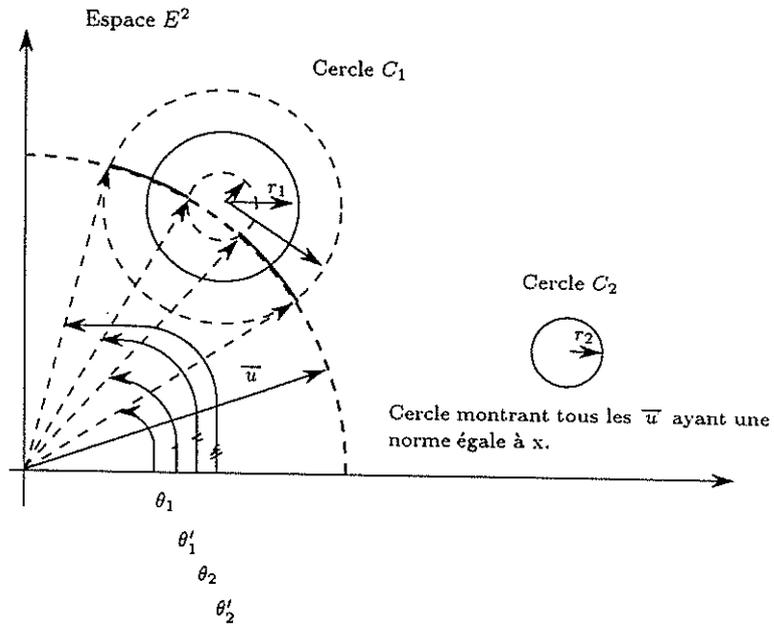


Figure 20 : Etude de la région admissible de deux cercles.

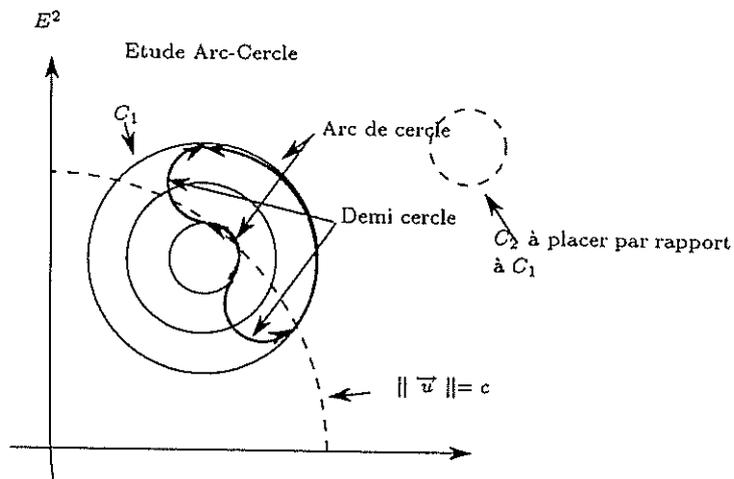


Figure 21 : Etude sur du positionnement d'un cercle sur un arc.

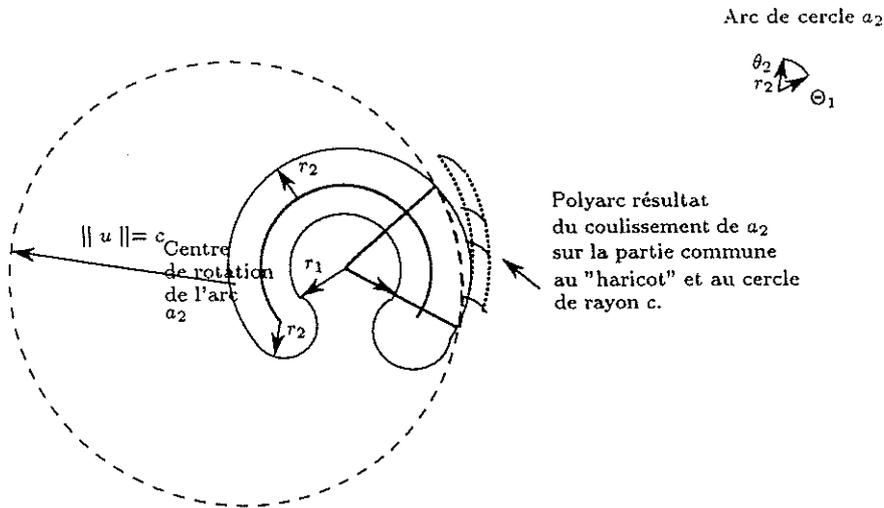


Figure 22 : Etude sur du positionnement d'un arc sur un arc.

à l'origine de rayon c est constituée d'au plus deux 4-polyarcs. Le résultat de l'intersection de ce(s) polyarc(s) avec a_1 donne les secteurs angulaires définissant la région admissible donc par complémentarité la région non-admissible.

4.3.4 Algorithme de calcul de la surface dans $E^2 \times [-\pi; +\pi[$:

Au départ, on calcule l'union des sphères de \mathcal{B} . On obtient le polyarc $P_b = \mathcal{U}(\mathcal{B})$ en $\Theta(m \log m)$. Puis on considère une sphère de \mathcal{A} comme référence, par exemple \mathcal{A}_1 (on peut les renuméroter de toute façon), et on calcule l'union des $(n-1)m$ sphères de $\mathcal{U}_2, \dots, \mathcal{U}_n$, que l'on note \mathcal{N} (on translate \mathcal{U}_3 de $\overline{\mathcal{A}_3 \mathcal{A}_2}, \dots$), en $\Theta(nm \log(nm))$.

Calculer $\partial \bigcup_{\theta \in [-\pi; +\pi[} \overline{\mathcal{A}_\theta \ominus \mathcal{B}}$ revient à construire un objet tridimensionnel de $E^2 \times [-\pi; +\pi[$. Pour θ fixe, on sait calculer P_θ , le polyarc résultat. Lorsque θ varie continûment, la succession des arêtes matérialisant P_θ ne va pas changer jusqu'à rencontrer une position critique où \mathcal{L} la structure combinatoire de P_θ va être modifiée par:

- adjonction d'arête(s)
- suppression d'arête(s)

On crée, au départ un tableau de taille mn^2 de pointeurs initialisés à NULL. On fixe $\theta = x$ et on calcule $P_\theta = P_x$. Pour chaque sommet de P_θ , on a deux arêtes incidentes $a = c_i c_j + 1$, si les deux arêtes n'appartiennent pas au même polyarc (\mathcal{N}, P_θ) , alors on a $a = a_i b_j$ où a_i désigne un arc de \mathcal{N} et b_j

- Disparition d'un arc qui va également changer la structure combinatoire \mathcal{L}
 - Apparition d'un arc de cercle (création d'une arête). Dans la liste \mathcal{L} , on va changer une arête, en créer une et on peut en supprimer plusieurs (cas où l'arc englobait plusieurs arcs).
- Au départ, on calcule les positions critiques en $\Theta(n^2 m)$. Pour chaque position critique, on note le type d'évènement qui se produit:

4.3.5 Construction de $C_A(B)$:

Le calcul de P_θ et \mathcal{N} se fait en $\Theta(n \log n + mn \log(m))$. On calcule alors les positions critiques que l'on tri et range dans \mathcal{Q} en $\Theta(n^2 m \log(n^2 m))$. Puis on fait évoluer le système en $n^2 m$ étapes, chacune en temps $O(1)$. La complexité générale de l'algorithme est donc de $\Theta(n^2 m \log(n^2 m))$.

Complexité:

où $\varphi(\cdot)$ et $\phi(\cdot)$ sont déterminées par le calcul des positions critiques.

$$0 \leq \theta \leq \varphi(\theta)$$

Pour

$$\begin{aligned} x &= x_1 + r \cdot \cos(\phi(\theta) + \theta), \\ y &= y_1 + r \cdot \sin(\phi(\theta) + \theta), \end{aligned}$$

Pour trouver les positions critiques, on regarde pour chaque arc de \mathcal{N} toutes les positions intersectantes avec les arcs de $\mathcal{U}(B)$. Il y a donc au pire $\Theta(n^2 \cdot m)$ positions critiques puisque chaque extrémité d'un secteur angulaire génère un cas critique¹⁹. On tri l'ensemble de ces positions critiques (en prenant l'angle 0, par exemple, comme référence) que l'on range dans une file d'attente \mathcal{Q} . On prend alors le premier élément de $\mathcal{Q}:x$. On calcule $\mathcal{L} = P_x$. On peut ainsi construire la surface limitante en passant successivement les positions critiques. La surface limitante est constituée de parties toriques convexes.

¹⁹chaque étude arc-arc donne au maximum 2 secteurs angulaires donc 4 évènements.

un de P_b , sinon on a $a = a_i a_{i+1}$ où $a = b_j b_{j+1}$ et on remplit pour toutes les cases de a_i et toutes les cases de a_{i+1} le pointeur vers ce sommet d'union (respectivement pour b_j, b_{j+1}). A chaque étape (arrivée d'une position critique), on connaît l'événement qui se produit. On peut donc atteindre l'endroit dans la structure \mathcal{L} en temps constant $O(1)$. Comme il y a $\Theta(nm)$ étapes, la construction de $\mathcal{C}_A(\mathcal{B})$ se fait en $\Theta(nm + n \log n + nm \log m + n^2 m \log(n^2 m)) = \Theta(n^2 m \log(n^2 m))$

4.3.6 Analyse des résultats:

Ce résultat est très intéressant puisque dans le cas des polygones non convexes, le calcul de la somme de Minkowski se fait en $O((m^2 n^2 + T) \log(mn))$ où T est le nombre de points de triple contacts. Ce résultat est donc intéressant puisqu'en modélisant les objets par des sphères on peut déterminer le placement de ces objets les uns des autres avec une meilleure complexité.

La dyssymétrie de l'algorithme est due au fait que l'on choisit initialement une molécule dite fixe et une autre mobile. Suivant le choix initial, on n'obtiendra pas les mêmes surfaces d'accessibilité. En effet, supposons deux molécules:

- Une molécule A constituée d'une seule sphère.
- Une molécule B constituée de deux sphères.

Si l'on réalise le placement de A sur B , on va tout simplement obtenir une surface de Connolly. Tandis que si on réalise le calcul de la surface en considérant A fixe et B mobile, on va obtenir A . Les surfaces calculées ne sont donc pas équivalentes bien qu'elles donnent la même solution au placement d'une molécule par rapport à une autre.

4.3.7 Figures obtenues par la Silicon Graphics:

On crée la surface dans E^3 où z varie entre $[-\pi; +\pi[$. En prenant deux molécules simples (molécule 1-molécule 2) ayant respectivement deux et trois atomes on visualise le fait que les surfaces créées ne sont pas identiques.

5 Annexe: Utilisation des programmes.

Préliminaire: On ne décrira dans cette partie que les programmes nécessaires à la compréhension des algorithmes étudiés²⁰.

5.1 Programmes de calcul de l'enveloppe convexe de disques.

5.1.1 Organisation des programmes dans ProgI:

Dans le répertoire *ProgI* on trouve les sous-répertoires suivants:

- *EXEC4*: où sont stockés les programmes
 1. *graphe*: qui prend en entrée un fichier décrivant un d -polytope $\mathcal{P} = EC(\phi(S))$ et renvoie en sortie l'enveloppe convexe $EC(S)$ en dimension $(d - 1)$ calculée à partir du polytope de dimension d (ici, $d = 3$).
 2. *enveloppe*: qui est un programme *XView* réalisant l'interface graphique entre le programme de calcul d'enveloppe convexe de disques et la visualisation des résultats sous *X*.
- *SOURCE*: Dans ce sous-répertoire, se trouve tous les programmes *C* correspondant d'une part au calcul de l'enveloppe convexe de points en dimension 3 et 4, et d'autre part les programmes:
 1. *parcours.c*: module décrivant les différentes façons de parcourir un polytope (parcours exhaustif ou juste sa ceinture).
 2. *graphe.c*: module permettant la lecture des données et la construction du fichier de sortie.
 3. *donnees3d.c*: qui permet la création de jeu de données aléatoires et de fichiers d'entrées.
- *INCLUDE* On y trouve les en-têtes de fichier:
 1. *geometrie.h*: qui décrit la structure de données des objets géométriques manipulés (point,hyperplan,droite,..).
 2. *graphe.h*: qui décrit la structure d'un polytope(graphe d'incidence).
- *LIB4* qui est la bibliothèque des programmes en *.o*

²⁰Pour avoir de plus amples informations sur les programmes, on peut me contacter par e-mail: fnielsen@ensl.ens-lyon.fr

On compile *EXEC4/donnees3d* , *EXEC4/graphe* et *EXEC4/enveloppe* grâce au Makefile qui se trouve à la base du répertoire par:

```
make EXEC4/donnees3d
make EXEC4/graphe
make EXEC4/enveloppe ou bien par
make all
```

5.1.2 Rappel sur l'utilisation des programmes de calcul d'enveloppe convexe de points de Denis BARTHOU [Bar91]:

Le programme *convexe3d* prend les paramètres suivants:

```
convexe3d fichier_source extension Nombre_de_Points
```

Un fichier source est constitué de n points énumérés par leurs coordonnées suivi d'un *indicateur* de fin de fichier qui est : *ZZZ*. L'extension permet de caractériser les fichiers de sortie. Parmi ceux-ci, on en trouve un qui est *imaextension.pf*: Ce fichier est lisible par le programme *surface_cachees*(sous *SUNTOOLS*).

5.1.3 Utilisation de *EXEC4/donnees3d*: formation de fichiers pour *EXEC4/graphe*

Le programme *EXEC4/donnees3d* permet de tirer aléatoirement des points en 3D (la 3^{ème} coordonnée correspondant au rayon ρ_i) et de créer d'une part le fichier de ces points, et d'autre part un fichier d'entrée pour *EXEC4/graphe*. Ce fichier d'entrée permet de donner au programme la structure du polytope. Au départ du fichier, on donne le nombre de points puis la liste de ces points(on peut ainsi référencer ces points de 0 à $n - 1$). Ensuite, on donne le nombre de $(d - 1)$ faces du polytope (ici, donc des 2 faces). On énumère les sommets de chaque en prenant comme convention de mettre au début de chaque face le nombre de sommets la constituant²¹.

5.1.4 L'exécution *EXEC4/graphe* fournit un fichier résultat lisible par *EXEC4/enveloppe*:

Lorsque vous exécutez *EXEC4/graphe*, le programme attend un fichier d'entrée puis exécute le parcours intelligent du polytope afin de ressortir un fichier lisible par *EXEC4/enveloppe* qui a le format suivant:

²¹ En effet, en 3D, il peut y avoir des faces a plus de 3 sommets: il suffit de prendre plus de trois sphères tangentes au même hyperplan support!

²²On peut également avoir la structure de l'enveloppe convexe en donnant successivement les arcs et les segments définissant l'enveloppe convexe.
²³L'interface graphique choisie est *XView* sous *OPENWINDOW*. On peut se procurer gratuitement *XView* sur les bandes du M.I.T. (Massachusetts Institute of Technology).

- **LIB4:** Endroit où se trouve les fichiers .o
- **INCLUDE:** L'en-tête du programme `conolly.c` est `conolly.h` qui décrit la structure de données utilisée.
- **SOURCE:** On y trouve les sources des programmes, c'est-à-dire, `visualisation.c` et `conolly.c`
- **EXEC4:** Lieu où sont stockés les exécutable. Le programme `visualisation` est l'outil final de calcul des surfaces de Connolly ²³

Les programmes correspondants au surfaces de Connolly sont regroupés dans le répertoire *ProgIII* Ce répertoire est subdivisé en 4 sous-répertoires qui sont:

5.2 Programmes de calcul des surfaces de Connolly.
 5.2.1 Organisation des données:

L'interface graphique n'est qu'un outil de représentation des résultats obtenus auparavant. Il charge à chaque modification du "Nom de fichier" des données qu'il traduit en pixel et affiche à l'écran. On peut grâce au bouton gauche de la souris obtenir des renseignements sur la position des segments. L'icône "Chaos" permet de refermer temporairement l'application.

5.1.5 Utilisation de l'interface graphique sous *XView:visualisation* des résultats:

- Nombre de sommets de l'enveloppe convexe.
- Liste de ces sommets.
- Liste des segments²² constituant l'enveloppe convexe des disques terminé par un indicateur de fin de fichier qui est:
 -1.0 -1.0
 -1.0 -1.0

Le Makefile se trouve dans *ProgIII* et on compile le programme principal par l'appel:

```
make EXEC4/visualisation
```

5.2.2 Utilisation de *EXEC4/visualisation*:

On lance, sous *OPENWINDOW*, *EXEC4/visualisation* qui fait apparaître une fenêtre graphique *XView*. Par défaut, le programme prend le repertoire courant comme étant celui de l'origine des données. Il faut alors charger une *molécule* en sélectionnant l'option "Nom du fichier" puis en appuyant sur *[Return]* qui valide votre choix. Il apparaît à l'écran la molécule dessinée en couleur (on peut l'avoir en NOIR et BLANC en sélectionnant "couleur: non", ce qui permet de faire des sorties imprimantes visibles, ...). Il suffit, alors, de donner un rayon de Connolly, par exemple 1.0, puis de sélectionner le bouton **Surface de Connolly** pour avoir les sphères de Connolly de la molécule. On obtient alors la surface de Connolly en appuyant sur le bouton "Arcs—Sphères" qui commute le mode de représentation. On peut alors visualiser cette molécule sous différents angles et zoom grâce aux sliders...

5.2.3 Format d'un fichier entrée:

Les fichiers qui sont traités se présentent sous la forme:

- Nombre de sphères
- Liste des sphères: 2.56 3.05 1.5 par exemple. On donne (x, y, \mathcal{R}) .

5.3 Sortie des résultats sous format JpDraw:

Dans la visualisation des résultats, on a la possibilité de récupérer la sortie graphique dans un fichier au format JpDraw²⁴. Il suffit alors de lancer JpDraw comme suit:

```
jpdraw4 -X 8 -Y 8 -F nom_du_fichier
```

On obtiendra, alors un, dessin inscrit dans une fenêtre de 8 cm sur 8 cm.²⁵ Il suffira alors de supprimer les deux carrés par R13 (le carré de la fenêtre et le carré mis pour avoir la même échelle sur l'axe X et Y).

²⁴logiciel de dessins de Jean-Pierre Merlet sous X et SUNTOOLS

²⁵Il faut donner comme option une fenêtre carrée.

Table des figures

1	Dualité par rapport à O'	6
2	Exemple d'enveloppe convexe de disques - Sortie Latex de EXEC4/enveloppe	9
3	Exemple d'enveloppe convexe de sphères en dimension 3.	10
4	Immersion de l'espace E^d dans l'espace E^{d+1}	11
5	Bipyramide à représenter sous son graphe d'incidence	13
6	Graphe d'incidence codant le polytope	14
7	Détermination d'un segment de l'enveloppe convexe.	16
8	Détermination d'un segment de l'enveloppe convexe.	17
9	Tangentes communes à deux cercles.	18
10	Calcul des tangentes communes extérieures.	19
11	Enveloppe convexe d'un ensemble de disques de \mathcal{D}^2	20
12	Exemple de surfaces de Connolly.	22
13	Surface de Connolly en dimension 3.	22
14	Lien entre le calcul de d'une surface de Connolly et l'union de sphères.	23
15	Représentation des sphères de Connolly sur un ensemble de sphères.	25
16	Représentation des arcs de Connolly (molécule 4).	25
17	Représentation des sphères de Connolly (molécule 4).	26
18	Positions admissibles de \mathcal{A} par rapport à \mathcal{B} (uniquement des translations).	28
19	Interprétation de ∂P	30
20	Etude de la région admissible de deux cercles.	32
21	Etude sur du positionnement d'un cercle sur un arc.	32
22	Etude sur du positionnement d'un arc sur un arc.	33

Bibliographie

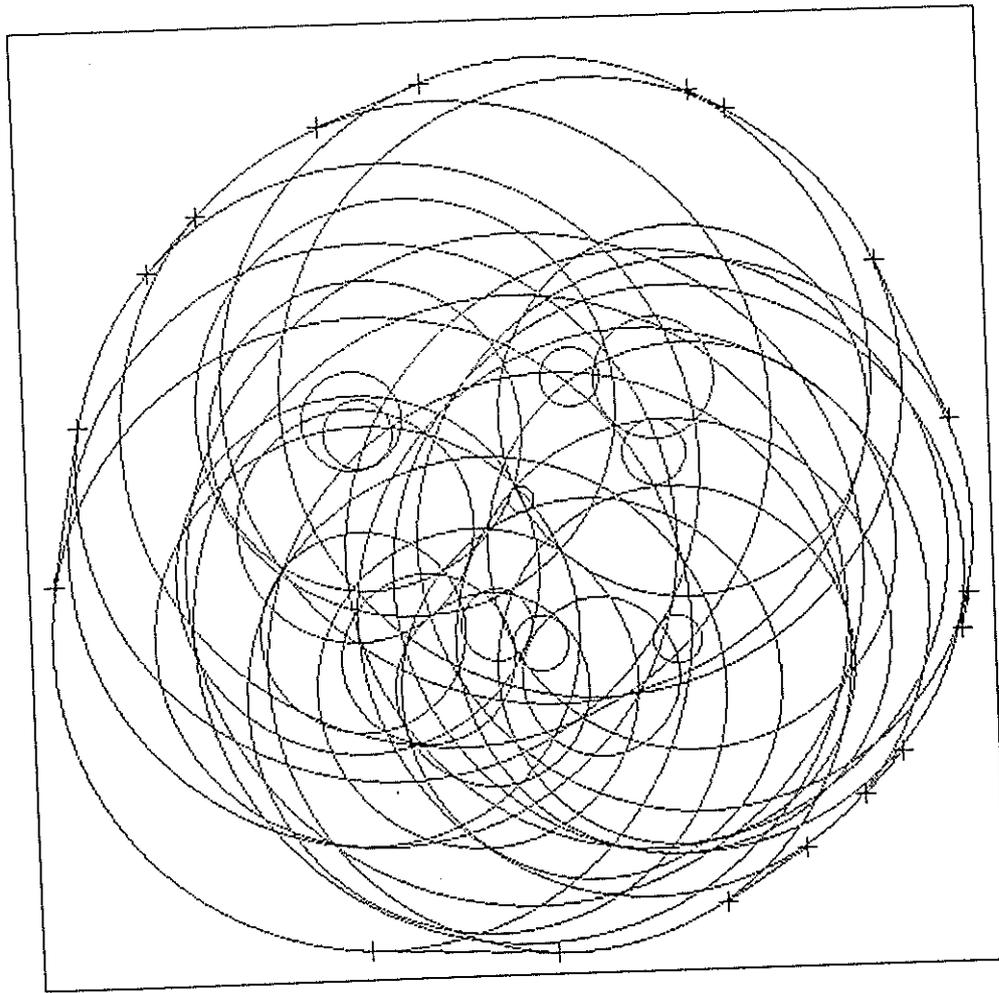
- [Bar91] D. Barthou. Programmation du calcul de l'enveloppe convexe d'un nuage de points en dimensions 3 et 4 par un algorithme randomisé. Rapport de magistère, INRIA, BP93, 06902 Sophia-Antipolis, France, 1991.
- [BCD⁺92a] J-D. Boissonnat, A. Cérézo, O. Devillers, J. Duquesne, and M. Yvinec. An algorithm for constructing the convex hull of a set of spheres in dimension d . In *Proc. 4th Canad. Conf. Comput. Geom.*, August 1992.
- [BCD92b] J-D. Boissonnat, A. Cérézo, and J. Duquesne. An algorithm for constructing the convex hull of a set of spheres. In *IFIP Conference on Algorithms and efficient computation*, September 1992.
- [BDD92] J-D. Boissonnat, O. Devillers, and J. Duquesne. Computing connolly surfaces. In *IFIP Conference on Algorithms and efficient computation*, September 1992.
- [Brö83] A. Brönsted. *An Introduction to Convex Polytopes*. Springer-Verlag, New York, NY, 1983.
- [BY93] J-D. Boissonnat and M. Yvinec. *Structures et algorithmes géométriques*. To appear, 1993.
- [Duq92] J. Duquesne. Algorithmes géométriques pour les sphères. Rapport de dea informatique et applications, Ecole Normale Supérieure, Paris, France, 1992.
- [Grü67] B. Grünbaum. *Convex Polytopes*. Wiley, New York, NY, 1967.
- [Pas82] I. Paschinger. Konvexe Polytope und Dirichletsche Zellenkomplexe. Thesis, Institut für Mathematik, Universität Salzburg, Austria, 1982.
- [PS85] F. P. Preparata and M. I. Shamos. *Computational Geometry: an Introduction*. Springer-Verlag, New York, NY, 1985.
- [BLO90] I. Bloch. Reconnaissance des formes tridimensionnelles, applications aux molécules chimiques. Dec. 1990. PhD, Ecole Nationale Supérieure des Télécommunications, France.

- [SAN91] M. Sanner. Modélisation de surfaces moléculaires. In *Journées Gros Plan*, Université de Lille, Dec. 1991.
- [SEI81] R. Seidel. *A convex hull algorithm optimal for point sites in even dimensions*. Tech. Rep. 14, Dep. of Comp. Sc., Univ. British Columbia, Vancouver, 1981.
- [LK] Andrew R. Leach and Irwin D. Kuntz *The Conformational Analysis of Flexible Ligands In Macromolecular Receptor Sites*.

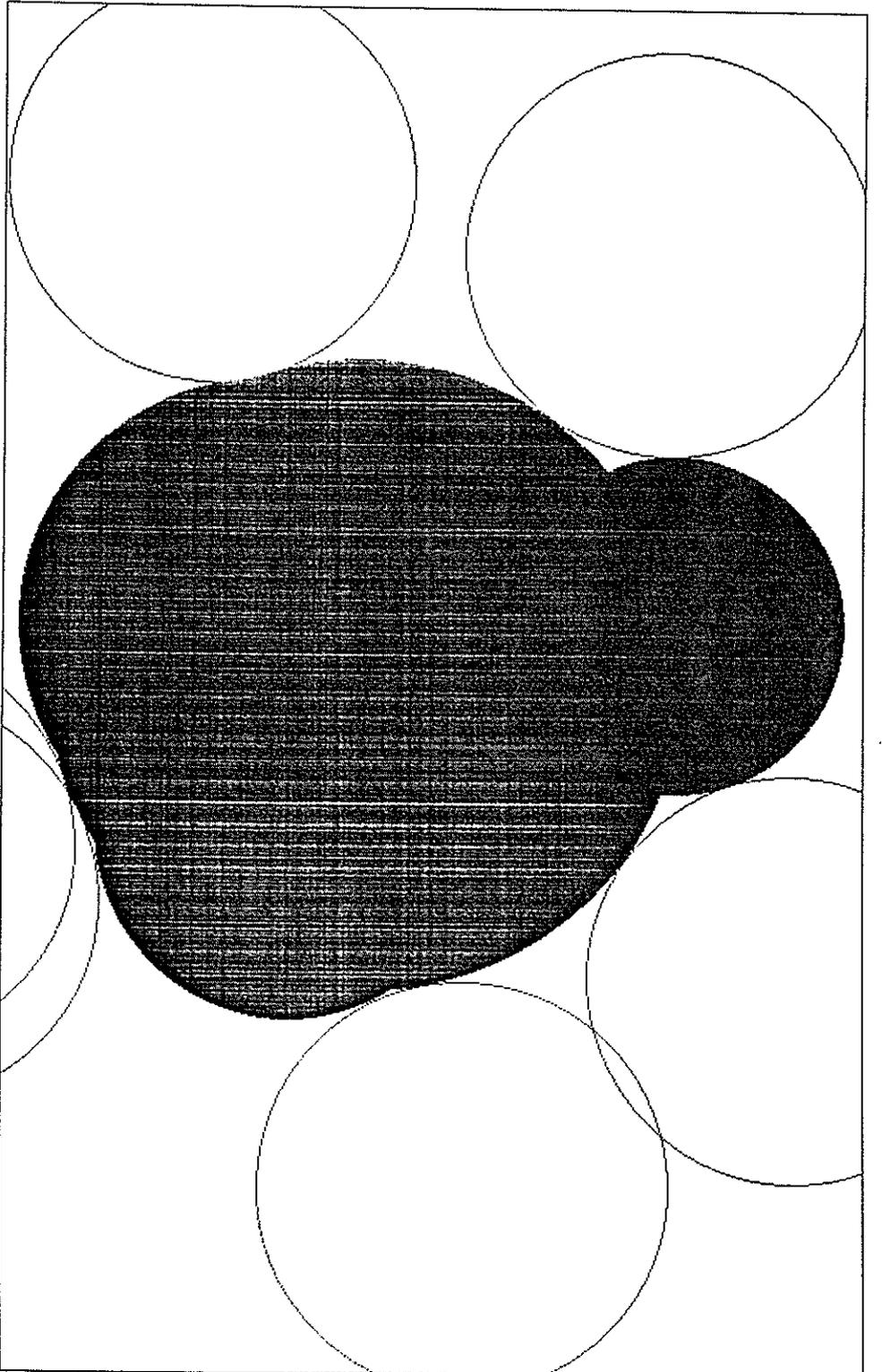
Quitter

Nom du fichier: /u/alcor/1/stagiaires/nielsen/Prog/n1.res

Chaos



Coordonnées des points en appuyant sur le bouton gauche.



Rotation 0 0 1 1 1 1 359 Zoom 0 -5 5 Ech. auto.)

Nom du fichier: molécule2

Nom du repertoire: /u/alcor/1/stagiaires/nielsen/ProgIII

Animer)

Rayon de Conolly: 1.0

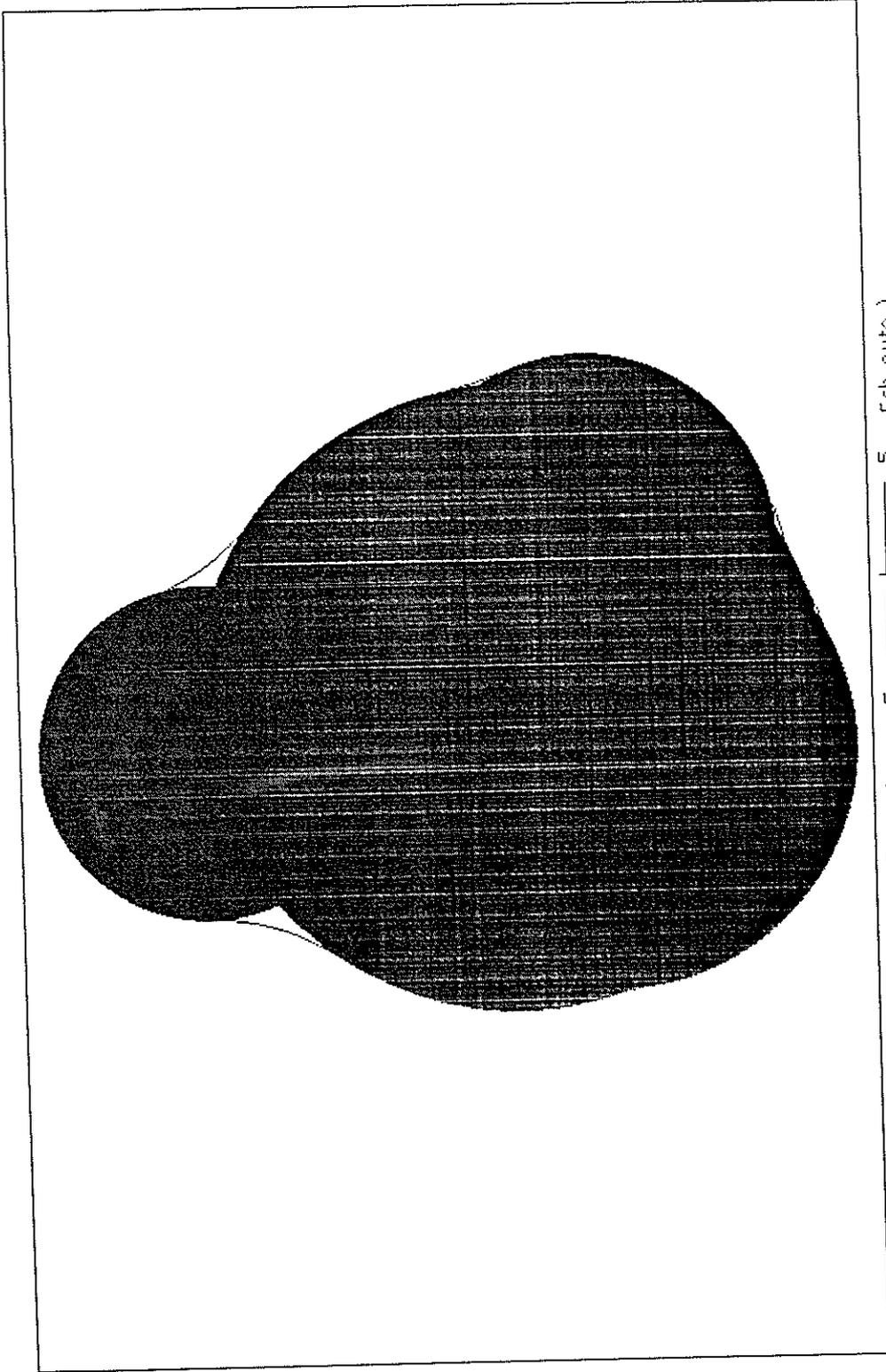
Surface de Conolly)

Informations)

Arcs/Spheres)

Couleur: oui non

Quitter)



Rotation 0 0 359 Zoom 0 -5 5 Ech. auto.)

Nom du fichier: molecule2.

Nom du repertoire: /u/alkor/1/stagiaires/nielsen/ProgIII

Animer)

Rayon de Conolly: 1.0

Surface de Conolly Informations) Arcs/Spheres) Couleur: oui non Quitter)

