



ACESSO ABERTO

Data de Recebimento:
05/04/2025

Data de Aceite:
24/05/2024

Data de Publicação:
11/06/2025

***Autor correspondente:**

Renato Massaharu Hassunuma,
Doutorado em Odontologia (área
de concentração Biologia Oral),
Rua Luís Levorato, 140 - Chá-
caras Bauruenses, Bauru - SP,
17048-290. Telefone de contato:
(14) 3312-7000. E-mail: rhassu-
numa@gmail.com.

Citação:

CARAMELLO, V.C et al. Color
picker: aplicação para atri-
buição de nomes de cores em
simulações computacionais de
biomoléculas. **Revista Mul-
tidisciplinar em Educação e
Meio Ambiente**, v. 6, n. 2, 2025.
[https://doi.org/10.51161/integrar/
rema/4597](https://doi.org/10.51161/integrar/rema/4597)

COLORPICKER: APLICAÇÃO PARA ATRIBUIÇÃO DE NOMES DE CORES EM SIMULAÇÕES COMPUTACIONAIS DE BIOMOLÉCULAS

Victor Cotrim Caramello^a, Renato Massaharu Hassunuma^a, Patrícia Carvalho Garcia^a, Sandra Heloisa Nunes Messias^b

^a Universidade Paulista, Câmpus Bauru. Rua Luís Levorato, 140 - Chácaras Bauruenses, Bauru - SP, 17048-290.

^b Universidade Paulista – UNIP, Câmpus Paraíso. Rua Vergueiro, 1211, 8º andar – Paraíso, São Paulo – SP, CEP: 01504-001.

RESUMO

Introdução: Alguns softwares de simulação computacional de biomoléculas como, por exemplo, o *RasMol*, apresentam uma quantidade limitada de cores cujos nomes são preestabelecidos pelos seus desenvolvedores. **Objetivo:** Analisar o programa *Color Picker* como ferramenta para atribuição de nomes de cores usadas para representar biomoléculas inteiras ou suas partes. **Material e métodos:** Foram analisados os sistemas de notações de cores e os padrões de cores disponibilizados pelo programa *RasMol*. Foi verificado a aplicação do software *Color Picker* na atribuição de nomes de cores para representações de biomoléculas. Na última etapa, foi discutida a importância da compreensão dos conceitos de espaço de cores e indução de cor na escolha de cores usadas em representações de biomoléculas. **Resultados:** Foi verificado que usando códigos de sistemas cores como RGB e HEX, é possível utilizar o programa *Color Picker* para atribuição de nomes de cores não predefinidos pelo programa *RasMol*. **Conclusões:** O *Color Picker* pode ser uma ferramenta facilitadora para a atribuição de nomes de cores para softwares de simulação computacional. Entretanto, vale ressaltar que existem tons de cores que possuem o mesmo nome no *Color Picker*. Desta forma, sugere-se que na atribuição do nome de cores seja usado o código RGB ou HEX, no intuito de definir precisamente o tom correto de uma cor.

Palavras-chave: Bioinformática. Simulação por computador. Percepção de cores.

ABSTRACT

Introduction: Some biomolecule computer simulation software, such as *RasMol*, have a limited number of colors whose names are pre-established by their developers. **Objective:** To analyze the *Color Picker* program as a tool for assigning names to colors used to represent entire biomolecules or their parts. **Material and methods:** The color notation systems and color

DOI: 10.51161/integrar/
rema/4597

Editora Integrar© 2024.

Todos os direitos reservados.

standards provided by the RasMol program were analyzed. The application of the Color Picker software in assigning color names to biomolecule representations was verified. In the last step, the importance of understanding the concepts of color space and color induction in the choice of colors used in biomolecule representations was discussed. **Results:** It was verified that using color system codes such as RGB and HEX, it is possible to use the Color Picker program to assign names to colors not pre-defined by the RasMol program. **Conclusions:** The Color Picker can be a facilitating tool for assigning color names to computer simulation software. However, it is worth noting that there are color tones that have the same name in the Color Picker. Therefore, it is suggested that when assigning color names, the RGB or HEX code be used, in order to precisely define the correct tone of a color.

Keywords: Bioinformatics. Computer simulation. Color perception.

1 INTRODUÇÃO

As representações visuais de estruturas moleculares são significativamente importantes na análise de dados biomoleculares. Desde a sua criação por Sayle e Milner-White em 1995, o programa computacional *RasMol* se destacou como um dos softwares mais utilizados no desenvolvimento de representações gráficas de moléculas. Suas capacidades de gerar imagens de alta qualidade para publicações e de oferecer algumas análises de estruturas moleculares são amplamente reconhecidas (Pikora, Gieldon, 2015).

Apesar de o *RasMol* ter sido originalmente desenvolvido há mais de duas décadas, este software continua sendo amplamente usado por diversos pesquisadores em estudos recentes. Alguns exemplos de publicações importantes da última década são os estudos realizados por: Topno e Khan (2016) ao demonstrar a estrutura do complexo NS3helicase/NTPase do vírus da encefalite japonesa; Kathera *et al.* (2017) ao observar estruturas de diferentes proteínas da *Escherichia coli* Nissle 1917 obtidas por modelagem molecular; Shan *et al.* (2018) ao apresentar a estrutura do receptor de vitamina D; Biswas *et al.* (2023), ao analisar as alterações estruturais na proteína PPM1D, entre outros.

Estes são apenas alguns exemplos de pesquisas realizadas ao longo da última década que ressaltam a ampla utilização e a versatilidade do *RasMol* na observação e análise de estruturas moleculares de diferentes classes de biomoléculas.

Ao analisar a última versão divulgada do Manual do *RasMol* (versão 2.7.5) (Bernstein, 2009), é possível observar que a mesma apresenta alguns recursos de aplicação de cores em biomoléculas. O esquema de cores do *RasMol* apresenta apenas 24 opções de cores com nomes definidos. O padrão de cores CPK utilizado para identificação de átomos apresenta mais 13 cores com nomes identificados. O padrão de cores *Shapely* utilizado para identificação de resíduos de aminoácidos apresenta mais 28 cores. Contabilizando os valores, observa-se que o *RasMol* apresenta um total de 65 opções de cores com nomes predefinidos pelos desenvolvedores e que podem ser utilizados na descrição das cores usadas para representar a estrutura de biomoléculas.

Vale ressaltar que esta limitação na atribuição de nomes de cores não é exclusiva do software *RasMol*. Outros programas de simulação computacional de biomoléculas como o *PyMOL* (Schrödinger, 2024), o *Jmol* (Jmol, 2024) e o *Chimera* (Pettersen *et al.*, 2004), além de uma outra infinidade de programas utilizados para observação tridimensional de biomoléculas, também apresentam um número limitado de cores com nomes previamente estabelecidos.

Mesmo possuindo uma limitação no número de cores com nomes definidos, todos estes programas

permitem que sejam utilizadas uma infinidade de cores usando padrões como RGB, hexadecimal, CMYK, entre outros, na representação das imagens de biomoléculas. Entretanto, quando se utilizam cores personalizadas, cujos nomes não são predeterminados pelos desenvolvedores do software, existe um problema na atribuição do nome das cores utilizadas. Idealmente, o usuário não deve atribuir um nome de forma empírica, uma vez que a percepção de cores varia de pessoa para pessoa. Desta forma, como um pesquisador pode atribuir o nome a uma determinada cor usada para representar uma biomolécula e que não teve seu nome definido pelo desenvolvedor?

Assim, o objetivo principal desta pesquisa é analisar a aplicação do *Color Picker*, um programa computacional que funciona na maioria dos navegadores de internet, como recurso facilitador para atribuição de nomes de cores em ilustrações digitais de biomoléculas desenvolvidas usando programas de simulação computacional, como o *RasMol*.

2 MATERIAL E MÉTODOS

A presente pesquisa foi realizada em entre março de 2024 a março de 2025, sendo realizada a partir da coleta de informações bibliográficas, com objetivo exploratório, de natureza básica, usando como fontes secundárias o manual do software *RasMol* (Bernstein, 2009), as informações disponíveis no site do programa *Color Picker* e demais publicações obtidas por meio de levantamento bibliográfico.

Na primeira etapa da pesquisa, foram analisados os sistemas de notações de cores usados pelo programa *RasMol*, que correspondem aos códigos usados para indicar cada cor usada no programa.

Na segunda etapa, foram analisados os padrões de cores disponibilizados pelo programa *RasMol*, que correspondem aos conjuntos de cores com nomes predefinidos pelos desenvolvedores do software.

Na terceira etapa, foi analisado o software *Color Picker*, sendo verificado como o mesmo pode ser utilizado na atribuição de nomes de cores usadas para representação de biomoléculas no programa *RasMol*.

Na última etapa foi discutida a importância da compreensão dos conceitos de espaço de cores e indução de cor na escolha de cores usadas em representações de biomoléculas, no intuito de justificar a importância da utilização de outras cores no *RasMol*, além das predefinidas pelos programadores.

3 RESULTADOS E DISCUSSÃO

3.1 Compreendendo as notações de cores no programa *RasMol*

Para definir as cores de átomos, cadeias e moléculas, o programa computacional *RasMol* adota o sistema de notação de cores RGB (Hassunuma, 2017). O sistema RGB é utilizado para produção de imagens não impressas, como as exibidas em telas de computador e outros dispositivos móveis. No sistema RGB, as três cores primárias são vermelho, verde e azul, as quais são incorporadas em cada pixel da tela do computador. O sistema RGB é aditivo, assim, a combinação de cores primárias aumenta a luminosidade da cor mesclada, ou seja, a torna mais próxima do branco. O sistema RGB especifica a quantidade de vermelho, verde e azul a ser misturada para obter cada uma das 16,8 milhões de cores possíveis. As cores são definidas em um intervalo de 0 (ausência de cor) a 255 (cor total). Por exemplo, a cor vermelha é obtida por meio da notação “255, 0, 0”, a amarelo por “0, 255, 0”, a azul por “0, 0, 255”, a branca por “255, 255,

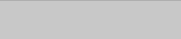







255” e a preta por “0, 0 , 0.”

No Manual do RasMol, as mesmas cores do sistema RGB também são descritas na notação hexadecimal, a qual possui um código de seis caracteres iniciado pelo símbolo *hashtag* (#). Nesta notação o número 255 é notado como FF e as cores vermelha, azul e verde são determinadas por dois caracteres consecutivos. Assim, a cor vermelha é “#FF0000”, verde é “#00FF00”, azul é “#0000FF”, branco é “#FFFFFF” e preto é “#000000” (Plante; Cushman, 2020).

3.2 Compreendendo os padrões de cores no programa RasMol

O *RasMol* apresenta três padrões principais de cores: *CPK*, *Shapely* e *Colours* (Souza; Hassunuma, 2016). O esquema de cores CPK é frequentemente adotado por químicos e se baseia nas cores usadas em modelos de plástico desenvolvidos por Corey, Pauling e posteriormente modificado por Kultun (Hassunuma, 2017). Este padrão de cores com as notações nos sistemas RGB e hexadecimal está apresentado no Quadro 1.

























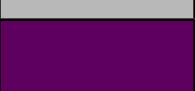
Quadro 1 - Esquema de cores CPK

Elemento	Cor	Amostra da cor	Notação RGB	Notação Hexadecimal
Carbono	Cinza claro		[200,200,200]	C8C8C8
Oxigênio	Vermelho		[240,0,0]	F00000
Hidrogênio	Branco		[255, 255,255]	FFFFFF
Nitrogênio	Azul celeste		[143,143,255]	8F8FFF
Enxofre	Amarelo		[255,200,50]	FFC832
Fósforo, ferro e bário	Laranja		[255,165,0]	FFA500
Cloro, boro	Verde		[0,255,0]	00FF00
Bromo, zinco, cobre, níquel	Marrom		[165,42,42]	A52A2A
Sódio	Azul		[0,0,255]	0000FF
Magnésio	Verde folha		[34,139,34]	228B22
Cálcio, manganês, cromo, alumínio, titânio, prata	Cinza escuro		[128,128,144]	808090
Flúor, silício, ouro	Dourado		[218, 165, 32]	DAA520
Iodo	Púrpura		[160, 32, 240]	A020F0
Lítio	Vermelho tijolo		[178, 34, 34]	B22222
Hélio	Rosa		[255, 192, 203]	FFC0CB
Demais	Rosa profundo		[255,20,147]	FF1493

Fonte: Bernstein, 2009.

O *RasMol* também adota o esquema de cores *Shapely*, proposto por Bob Fletterick e aplicado principalmente para estudos da estrutura primária de proteínas e ácidos nucleicos. Neste esquema, cada resíduo de aminoácido ou de nucleotídeo de ácido nucleico é identificado por uma única cor (Hassunuma, 2017), conforme apresentado no Quadro 2 nas notações RGB e hexadecimal.

Quadro 2 - Esquema de cores Shapely





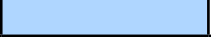



















Resíduo	Abreviatura	Cor	Amostra de cor	Notação RGB	Notação Hexadecimal
Alanina	ALA	Verde médio		[140,255,140]	8CFF8C
Glicina	GLY	Branco		[255,255,255]	FFFFFF
Leucina	LEU	Verde oliva		[69,94,69]	455E45
Serina	SER	Laranja médio		[255,112,66]	FF7042
Valina	VAL	Roxo claro		[255,140,255]	FF8CFF
Treonina	THR	Laranja escuro		[184,76,0]	B84C00
Lisina	LYS	Azul royal		[71,71,184]	4747B8
Ácido aspártico	ASP	Rosa escuro		[160,0,66]	A00042
Isoleucina	ILE	Verde escuro		[0,76,0]	004C00
Asparagina	ASN	Salmão claro		[255,124,112]	FF7C70
Ácido glutâmico	GLU	Marrom escuro		[102,0,0]	660000
Prolina	PRO	Cinza escuro		[82,82,82]	525252
Arginina	ARG	Azul escuro		[0,0,124]	00007C
Fenilalanina	PHE	Cinza oliva		[83,76,66]	534C42
Glutamina	GLN	Salmão escuro		[255,76,76]	FF4C4C
Tirosina	TYR	Marrom médio		[140,112,76]	8C704C
Histidina	HIS	Azul médio		[112,112,255]	7070FF
Cisteína	CYS	Amarelo médio		[255,255,112]	FFFF70
Metionina	MET	Marrom claro		[184,160,66]	B8A042
Triptofano	TRP	Marrom oliva		[79,70,0]	4F4600
Adenina	A	Azul claro		[160,160,255]	A0A0FF
Citosina	C	Laranja claro		[255,140,75]	FF8C4B
Guanina	G	Salmão médio		[255,112,112]	FF7070
Timina	T	Verde claro		[160,255,160]	A0FFA0
Estrutura principal	Backbone	Cinza claro		[184,184,184]	B8B8B8
Região especial	Special	Roxo escuro		[94,0,94]	5E005E

Indefinido	Default	Roxo médio		[255,0,255]	FF00FF
------------	---------	------------	---	-------------	--------

Fonte: Bernstein, 2009.

O RasMol ainda apresenta o esquema de cores Colours o qual permite que o usuário utilize 24 cores predefinidas por meio do comando Select. Desta forma, se for desejado, por exemplo, colorir uma molécula inteira na cor amarela, deve-se combinar os comandos Select all e Colour yellow (Souza; Hassunuma, 2016). As 24 opções de cores do esquema Colours estão apresentadas no Quadro 3 nas notações RGB e hexadecimal.

Quadro 3 - Esquema de cores Colours

Nome da cor	Comando	Amostra de cor	Notação RGB	Notação Hexadecimal
Amarelo	<i>Yellow</i>		[255,255,0]	FFFF00
Amarelo matiz	<i>Yellowtint</i>		[246,246,117]	F6F675
Azul	<i>Blue</i>		[0,0,255]	0000FF
Azul celeste	<i>Skyblue</i>		[58,144,255]	3A90FF
Azul matiz	<i>Bluetint</i>		[175,214,255]	AFD7FF
Branco	<i>White</i>		[255,255,255]	FFFFFF
Ciano	<i>Cyan</i>		[0,255,255]	00FFFF
Cinza	<i>Grey</i>		[125,125,125]	7D7D7D
Laranja	<i>Orange</i>		[255,165,0]	FFA500
Magenta	<i>Magenta</i>		[255,0,255]	FF00FF
Marrom	<i>Brown</i>		[175,117,89]	AF7559
Ouro	<i>Gold</i>		[255,156,0]	FC9C00
Preto	<i>Black</i>		[0,0,0]	000000
Púrpura	<i>Purple</i>		[160,32,240]	A020F0
Rosa	<i>Pink</i>		[255,101,117]	FF6575
Rosa matiz	<i>Pinktint</i>		[255,171,187]	FFABBB
Rosa quente	<i>Hotpink</i>		[255,0,101]	FF0065
Verde	<i>Green</i>		[0,255,0]	00FF00
Verde azulado	<i>Greenblue</i>		[46,139,87]	2E8B57
Verde mar	<i>Seagreen</i>		[0,250,109]	00FA6D
Verde matiz	<i>Greentint</i>		[152,255,179]	98FFB3
Vermelho	<i>Red</i>		[255,0,0]	FF0000
Vermelho alaranjado	<i>Redorange</i>		[255,69,0]	FF4500
Violeta	<i>Violet</i>		[238,130,238]	EE82EE

Fonte: Bernstein, 2009.

3.3 O problema da atribuição de cores no programa RasMol

Conforme observado nos Quadros 1 a 3, o software *RasMol* apresenta uma quantidade limitada de cores com nomes predefinidos pelos desenvolvedores. São 16 cores no esquema CPK, 27 no *Shapely* e 24

Colours, considerando ainda que algumas cores como a branca são repetidas nos três esquemas.

Vale ressaltar que para o comando *Colours*, a atribuição de cores por meio de seu nome é possível apenas para as cores predefinidas apresentadas no Quadro 3. As demais cores que estão no Quadro 1 e 2 só podem ser reproduzidas especificando na linha de comando *Colour* as notações em RGB entre colchetes, por exemplo, para a cor cinza claro do esquema CPK é usado o comando `colour [200,200,200]`. É importante mencionar que o programa *RasMol* reconhece exclusivamente o sistema RGB para definição de cores, não reconhecendo outros comandos que utilizem a notação hexadecimal ou outros sistemas de notação de cores.

Desta forma, quando é utilizada uma determinada cor que não está preestabelecida pelo *RasMol*, existe um problema para definir o seu nome. Por exemplo, a cor definida por meio do comando `colour [100,100,100]` não aparece nos Quadros 1, 2 e 3. Então, como atribuir o nome desta cor sem utilizar padrões empíricos?

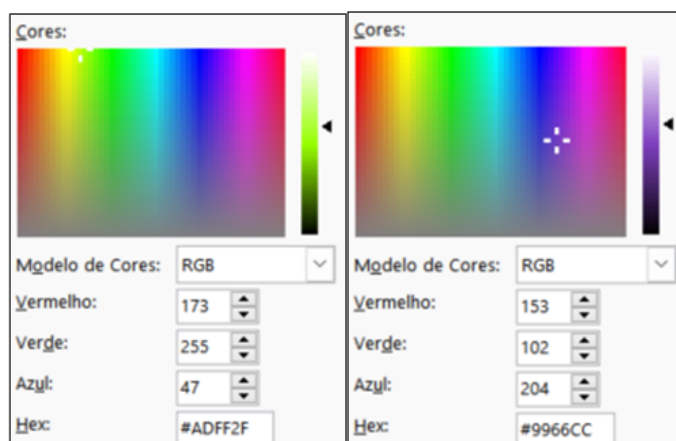
3.4 Resolvendo o problema da atribuição de nomes utilizando o programa Color Picker

Para explicar como o programa *Color Picker* pode ser utilizado na atribuição de nomes de cores para moléculas representadas em simulações computacionais, usamos como modelo o arquivo 2HIU.pdb (Hua et al., 2024), que apresenta informações referentes à estrutura da insulina humana. Este arquivo PDB foi utilizado para o desenvolvimento de um script para o programa *RasMol*.

Devido ao fato de o arquivo PDB 2HIU apresentar informações referentes às duas cadeias da molécula de insulina humana, foram escolhidas duas cores para representar cada delas. Foram escolhidos tons de cores que não estivessem presentes nos padrões *CPK*, *Shapely* ou *Colors*, apresentados anteriormente nos Quadros, 1, 2 e 3, respectivamente.

Assim, foram escolhidas de forma aleatória, as cores RGB [173,255,47] e [153,102,204] usando o software Microsoft PowerPoint (Figura 1).

Figura 1 – Escolha de cores



Fonte: Autores, 2025.

Observe na Figura 1, que o software PowerPoint converte os valores RGB para o padrão de cores Hex, o qual também pode utilizado no servidor Color Picker. Uma vez estabelecidas as cores a serem utilizadas para representar as cadeias da insulina, foi desenvolvido um script para visualização da molécula no software RasMol e que está apresentado no Quadro 4.

Quadro 4 – Script com os comandos usados e suas funções na visualização da insulina humana

Comando	Função do comando
load 2HIU.pdb	Carrega o arquivo 2HIU.pdb no programa
wireframe off	Desabilita o modo de exibição wireframe no qual a molécula é exibida inicialmente no RasMol
select */1	Seleciona apenas os átomos do modelo 1
trace 500	Exibe os átomos selecionados no modo Trace 500, que representa a ligação de carbonos alfa vizinhos como se estivessem unidos por um cordão. O número usado indica o grau de espessura.
select *a	Seleciona apenas os átomos da cadeia a
colour [173,255,47]	Colore as estruturas selecionadas, no caso os carbonos alfa da cadeia a, na cor RGB [173,255,47]
select *b	Seleciona apenas os átomos da cadeia b
colour [153,102,204]	Colore na cor RGB [153,102,204] as estruturas selecionadas, no caso os carbonos alfa da cadeia b

Fonte: Autores, 2025.

A partir dos comandos apresentados no Quadro 4, foi desenvolvido no RasMol a representação da molécula de insulina, conforme apresentado na Figura 2.

Figura 2 – Cadeias da insulina humana representadas em cores diferentes

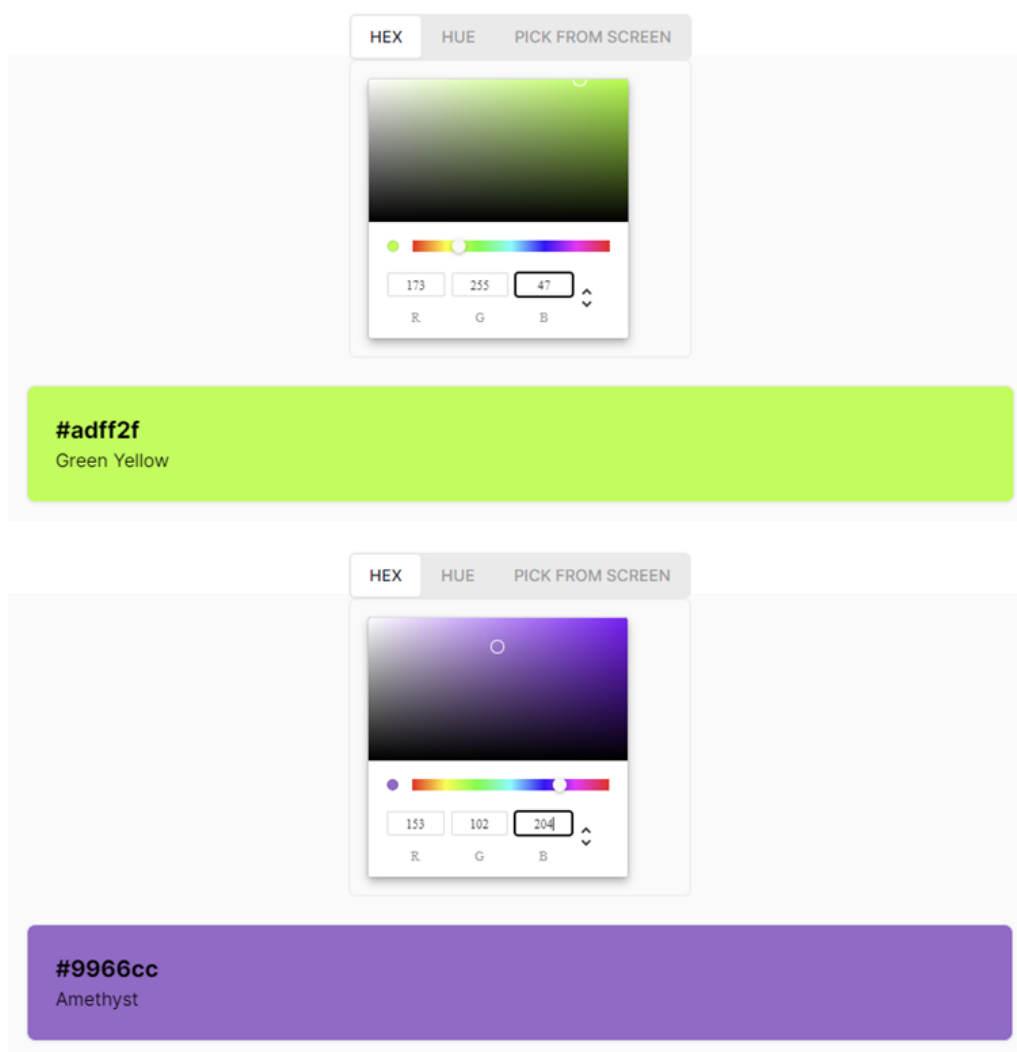


Fonte: Autores, 2025.

As duas cores usadas na Figura 2 não apresentam nome predefinido pelo RasMol. Sendo assim, para a atribuição de nomes destas cores, foi utilizado o servidor Color Picker (Disponível em: <https://>

imagecolorpicker.com/). Ao acessar o site do servidor, o usuário deve escolher o Menu Color Picker e escolher o padrão de cores RGB ou HEX. Após isso, basta digitar os valores de cada cor para os padrões RGB ou HEX para que o servidor indique o nome da cor analisada (Figura 3).

Figura 3 – Determinação de nomes das cores usadas na Figura 2.



Fonte: Color Picker, 2025.

Desta forma, é possível afirmar que na Figura 2, a cadeia A da insulina humana está representada na cor amarelo esverdeado (*Green yellow*), enquanto a cadeia B está apresentada na cor ametista (*Amethyst*). A cor usada na representação da cadeia A corresponde a um excelente exemplo da importância do uso do servidor *Color Picker*, uma vez que esta cor pode ser considerada um tom de amarelo para algumas pessoas, enquanto para outras pode se assemelhar a um tom de verde.

3.5 A importância dos conceitos de espaço de cores e indução de cor na escolha de cores usadas em representações biológicas

A nomeação de cores é considerada tradicionalmente como um reflexo de como as pessoas percebem as cores. Entretanto, estudos sugerem que o nome dado às cores também tem como base a necessidade

comunicativa (Zaslavsky *et al.*, 2020).

Desta forma, considerando que, dependendo de como a pessoa percebe ou deseja se expressar, ela pode atribuir um nome a uma cor de acordo com critérios pessoais e parciais. Por isso, é importante que, principalmente quando usados em publicações científicas, os nomes das cores usadas tenham um nome predeterminado pelos desenvolvedores utilizando alguma metodologia. Por esse motivo, no presente estudo sugerimos a utilização do software *Color Picker* como referência para atribuição de nomes de cores usadas na simulação computacional de biomoléculas.

Dados biológicos podem ser apresentados na forma de gráficos, tabelas e até representações moleculares, como é o caso do presente trabalho. A escolha de cores na apresentação desses dados biológicos é uma questão didática importante quando se considera a sua finalidade, que consiste em tornar uma informação mais compreensível possível. Assim, as cores não devem sobrecarregar, obscurecer ou dificultar a análise de uma descoberta científica (Hattab; Rhyne; Heider, 2020).

Entretanto, na escolha de cores é importante também entender que as cores são percebidas de formas diferentes pelas pessoas. Um exemplo clássico corresponde à imagem de um vestido que viralizou nas redes sociais em 2015 (*#thedress*), em que as pessoas se dividiram em duas populações: uma que identificou o vestido como azul e preto e outra que observou as cores branco e dourado (Aston *et al.*, 2020).

A ambiguidade na percepção de cores também foi motivo de discussão nas redes sociais com a imagem de *#theshoe*, em que uma parcela de pessoas percebeu um determinado tênis com couro cinza com cadarços turquesa, enquanto outros relataram observar o couro em rosa com cadarços brancos. Estudos indicam que essa diferença na percepção de uma cor se deve ao fato de que a cor estimada de um objeto por um observador muda de acordo como ele estima a intensidade de luz (Morimoto; Fukuda; Uchikawa, 2021).

Desta forma, estes são apenas dois exemplos de como é possível comprovar que as pessoas percebem as cores de forma diferente, dependendo não apenas das propriedades da superfície do objeto, mas também da interação do objeto com a luz e como o sistema visual de cada indivíduo percebe a luz refletida (Aston *et al.*, 2020; Morimoto; Fukuda; Uchikawa, 2021).

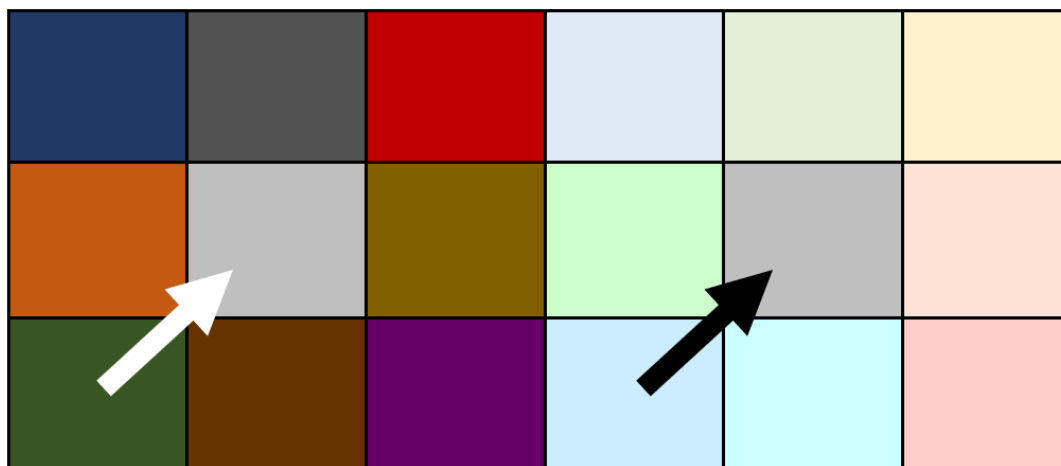
Um importante fator a ser considerado na escolha de cores é o **espaço de cores**, que corresponde ao modelo usado para identificar as cores por meio de números, como os apresentados anteriormente: os padrões de cores *CPK*, *Shapely e Colors*. Usando tais valores numéricos, o usuário é encorajado a escolher cores diferentes, por meio de um espaçamento numérico entre elas. Isso é diferente, por exemplo, de outras ferramentas tradicionais como a roda de cores, que incentiam a seleção de cores de forma intuitiva (Hattab; Rhyne; Heider, 2020).

O espaço de cores pode ser observado no exemplo utilizado na presente pesquisa. Ao observar novamente a Figura 2, é possível notar que as cadeias foram representadas em cores bastante contrastantes. Considerando esse exemplo, o contraste observado se deve ao espaço entre as cores selecionadas. Assim, a cor amarelo esverdeada (*Green yellow*) possui o código RGB [173,255,47], o qual apresenta valores numéricos bastante distantes da cor ametista (*Amethyst*) cujo código é [153,102,204].

Outro fator a ser considerado é a **indução da cor**, que corresponde a um fenômeno físico em que a cor percebida é influenciada pelas cores que estão ao seu redor e também da iluminação empregada. Assim, interessante, um objeto cinza pode ser observado como verde ou vermelho dependendo das cores dos objetos que estão ao seu redor (Otazu; Cerda-Company, 2022).

A indução de cor pode ser compreendida ao se observar a Figura 4. Os dois quadrados centrais apontados pelas setas branca e preta estão coloridos usando a mesma cor RGB [191,191,191]. Entretanto, o quadrado apontado pela seta branca parece ser mais claro que o quadrado apontado pela seta preta. Isso acontece porque o quadrado apontado pela seta branca está rodeado de outros quadrados de cores mais escuras, enquanto o quadrado apontado pela seta preta está rodeado por quadrados de cores mais claras. Desta forma, é possível observar a indução da cor, ou seja, a forma como percebemos as cores de um objeto está relacionada com as cores dos objetos que estão ao seu redor.

Figura 4 – Exemplo de indução da cor.



Fonte: Autores, 2025.

Assim, os conceitos de **espaço de cores** e **indução de cor** são tópicos importantes a serem considerados na escolha de cores em simulações computacionais de biomoléculas, no intuito de o usuário poder escolher cores contrastantes em relação ao fundo e aos componentes da biomolécula. Assim, o uso de cores contrastantes pode facilitar a visualização de estruturas moleculares. Desta forma, a compreensão destes conceitos reforça a importância da utilização de programas como *Color Picker* para ampliar o uso de cores e facilitar a atribuição de nomes de cores além daquelas predefinidas em programas de simulação computacional de biomoléculas.

6 CONSIDERAÇÕES FINAIS

A maioria dos programas de simulação computacional de biomoléculas oferece uma quantidade limitada de cores com nomes predefinidos. No intuito de solucionar este problema, o *Color Picker* se mostrou como um excelente recurso para atribuir nomes a cores para ilustrações digitais produzidas por programas de simulação computacional como o *RasMol*.

Entretanto, foram observadas algumas limitações no programa, como o fato de que o programa atribui nomes iguais para cores muito próximas. Por exemplo, a cor [0,0,0] corresponde ao preto (black). Entretanto, de [0,0,1] a [0,0,42], a cor é chamada de preto russo (Black russian); de [0,0,43] a [0,0,95] a cor é denominada estratos (Stratos). Assim, é possível perceber que será atribuído o mesmo nome para tons com valores RGB muito próximos.

Uma forma possível para solucionar este problema é a adoção do código RGB, HEX ou outro

padrão após o nome da cor atribuída pelo Color Picker. Por exemplo, uma das cores utilizadas no presente trabalho poderia ser denominada ametista (Amethyst) [153,102,204]. Assim, torna-se possível utilizar o nome de uma cor utilizada em um programa de simulação computacional, definindo de forma específica o tom utilizado para colorir uma determinada estrutura.

CONFLITO DE INTERESSE

Não há conflito de interesse na presente pesquisa.

REFERÊNCIAS

ASTON, S.; DENISOVA, K.; HURLBERT, A.; OLKKONEN, M.; PEARCE, B.; RUDD, M.; WERNER, A.; XIAO, B. Exploring the determinants of color perception using #thedress and its variants: the role of spatio-chromatic context, chromatic illumination, and material-light interaction. **Perception**, v. 49, n. 11, p. 1235-51, 2020 Nov. Disponível em: <https://pmc.ncbi.nlm.nih.gov/articles/PMC7672784/>. Acesso em: 26 out. 2024.

BERNSTEIN, H. J. **Manual RasMol 2.7.5**. 2009 Apr. 17. Disponível em: <http://www.openrasmol.org/doc/rasmol.html>. Acesso em: 03 mar. 2024.

BISWAS, S.; MANEKAR, S.; BAKSHI, S. R. A case study on PPM1D and 9 other shared germline alterations in a family. **Asian Pac. J. Cancer Prev.**, v. 24, n. 6, p. 2129-33, 2023 Jun. Disponível em: <https://www.ncbi.nlm.nih.gov/pmc/articles/PMC10505862/>. Acesso em: 03 mar. 2024.

HASSUNUMA, R. M. **Guia de comandos em software de simulação computacional de biomoléculas**. Bauru: Canal 6 Editora, 2017.

HATTAB, G.; RHYNE, T. M.; HEIDER, D. Ten simple rules to colorize biological data visualization. **PLoS Comput. Biol.**, v. 16, n. 10, p. e1008259, 2020 Oct. 15. Disponível em: <https://pmc.ncbi.nlm.nih.gov/articles/PMC7561171/#sec002>. Acesso em: 26 out. 2024.

HUA, Q. X.; GOZANI, S. N.; CHANCE, R. E.; HOFFMANN, J. A.; FRANK, B. H.; WEISS, M.A. NMR structure of human insulin in 20% acetic acid, zinc-free, 10 structures. 23 out. 2024. Disponível em: <https://www.rcsb.org/structure/2HIU>. Acesso em: 25 out. 2024.

JMOL: an open-source Java viewer for chemical structures in 3D. Disponível em: <https://jmol.sourceforge.net/>. Acesso em: 03 mar. 2024.

KATHERA, C.; DULLA, E. L.; CHINAHADRI, V. P.; RAMESH, T. S. M., BASAVARAJU, S., JASTI, P. Proteomic characterization and bio-informatic analysis of differentially expressed E. coli Nissle 1917 proteins with response to cocoti wine stress. 3 **Biotech.**, v. 7, n. 2, p. 151, 2017 Jun. 08. Disponível em: <https://www.ncbi.nlm.nih.gov/pmc/articles/PMC5465054/>. Acesso em: 03 mar. 2024.

MORIMOTO, T.; FUKUDA, K.; UCHIKAWA, K. Explaining #theShoe based on the optimal color hypothesis: The role of chromaticity vs. luminance distribution in an ambiguous image. **Vision Res.**, v. 178, p. 117-23, 2021 Jan. Disponível em: <https://pmc.ncbi.nlm.nih.gov/articles/PMC7116573/>. Acesso em: 27 out. 2024.

OTAZU, X.; CERDA-COMPANY, X. The contribution of luminance and chromatic channels to color assimilation. **J. Vis.**, v. 22, n. 6, p. 10, 2022 May 3. Disponível em: <https://pmc.ncbi.nlm.nih.gov/articles/>

PMC9160498/. Acesso em: 26 out. 2024.

PETTERSEN, E. F.; GODDARD, T. D.; HUANG, C. C.; COUCH, G. S.; GREENBLATT, D. M.; MENG, E. C.; FERRIN, T. E. UCSF Chimera - a visualization system for exploratory research and analysis. **J. Comput. Chem.**, v. 25, n. 13, p. 1605-12, 2004 Oct. Disponível em: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/jcc.20084>. Acesso em: 03 mar. 2024.

PIKORA, M.; GIELDON, A. RASMOL AB - New functionalities in the program for structure analysis. **Acta Biochim. Pol.**, v. 62, n. 3, p. 629-31, 2015 Sep. 30. Disponível em: <https://ojs.ptbioch.edu.pl/index.php/abp/article/view/1773/408>. Acesso em: 03 mar. 2024.

PLANTE, T. B.; CUSHMAN, M. Choosing color palettes for scientific figures. **R. P. T. H.**, v. 4, n. 2, p. 176-80, 2020 Feb. Disponível em: [https://www.rpthjournal.org/article/S2475-0379\(22\)01983-5/fulltext](https://www.rpthjournal.org/article/S2475-0379(22)01983-5/fulltext). Acesso em: 16 mar. 2024.

SCHRÖDINGER. PyMOL by Schrödinger. 2024 Jan. 18. Disponível em: <https://pymol.org/2/>. Acesso em: 03 mar. 2024.

SHAN, L.; KANG, X.; LIU, F.; CAI, X.; HAN, X.; SHANG, Y. Expression of vitamin D receptor in bronchial asthma and its bioinformatics prediction. **Mol. Med. Rep.**, v. 18, n. 2, p. 2052-60, 2018 Aug. Disponível em: <https://www.ncbi.nlm.nih.gov/pmc/articles/PMC6072178/>. Acesso em: 03 mar. 2024.

SOUZA, A. R.; HASSUNUMA, R. M. **Desenvolvimento de scripts em software de simulação computacional para visualização de biomoléculas**. São Paulo: Cultura Acadêmica, 2016.

TOPNO, R.; KHAN, S. A. Anchoring of NS3 helicase/NTPase receptor. **Tropical Biomedicine**, v. 33, n. 1, p. 180-9, 2016 Mar. Disponível em: <https://www.msptm.org/files/Vol33No1/180-189-Siraj-A-Khan.pdf>. Acesso em: 03 mar. 2024.

UCFS CHIMERA: an extensible molecular modeling system. 2024 Feb. 02. Disponível em: <https://www.cgl.ucsf.edu/chimera/download.html>. Acesso em: 03 mar. 2024.

ZASLAVSKY, N.; KEMP, C.; TISHBY, N.; REGIER, T. Communicative need in colour naming. **Cogn. Neuropsychol.**, v. 37, n. 5-6, p. 312-24, 2020 Jul.-Sep. Disponível em: <https://www.tandfonline.com/doi/full/10.1080/02643294.2019.1604502>. Acesso em: 27 out. 2024.