

Ц841 2  
Щ-524

2463 / 2-78

СООБЩЕНИЯ  
ОБЪЕДИНЕННОГО  
ИНСТИТУТА  
ЯДЕРНЫХ  
ИССЛЕДОВАНИЙ  
ДУБНА



10 - 11343

Г.Б.Щенкова

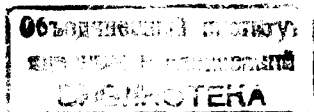
ПОСТРОЕНИЕ ЭКВИПОТЕНЦИАЛЕЙ  
ДЛЯ КАРТ ЭЛЕКТРОННОЙ ПЛОТНОСТИ  
И ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ ПОЛЕЙ

1978

10 - 11343

Г. Б. Щенкова

ПОСТРОЕНИЕ ЭКВИПОТЕНЦИАЛЕЙ  
ДЛЯ КАРТ ЭЛЕКТРОННОЙ ПЛОТНОСТИ  
И ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ ПОЛЕЙ



Шенкова Г.Б.

Ю - 11343

Построение эквипотенциалей для карт электронной плотности и электромагнитных полей

Рассматриваются возможности разработанных в ОИЯИ программ, предназначенных для представления на экране дисплея или на ленте графопостроителя изолиний. В работе описываются: структура входных данных и представление на графическом устройстве получаемого результата; алгоритм получения точек, через которые проходит изолиния, алгоритм порядка соединения полученных точек и программы, реализующие эти алгоритмы.

Методика и программы могут быть использованы для получения изолиний карт электронной плотности для больших молекул белка, магнитных полей ускорителей, больших магнитов, при изображении рельефа местности и т.п.

Весь комплекс программ написан на языке ФОРТРАН и автокоде МАДЛЕН.

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1978

Shchenkova G.B.

Ю - 11343

Construction of Equipotentials for Electron Density Maps and Electromagnetic Fields

Some features of programs developed at JINR and intended for the presentation of isolines on a display screen or on a graph-plotter are considered. The input data structure and presentation of a result on the graph device, the algorithm to obtain points which isolate passes; the algorithm to choose an order for junction of this points and programs which realized this algorithm are described. The programs may be of use to obtain isolines of electron density maps for big molecules of protein, magnetic field of accelerators, big magnets, for representation of relief etc. The program complex is written in FORTRAN language and MADLEN autocode for the BESM-6 computer.

The investigation has been performed at the Laboratory of Computing Techniques and Automation, JINR.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1978

Вычислительные машины применяются в научных исследованиях уже давно, тем не менее методика использования ЭВМ продолжает развиваться, и постоянно расширяется решаемый на них круг задач. В данной работе дается описание алгоритмов и программ для ЭВМ БЭСМ-6, предназначенных для построения посредством ЭВМ различных изолиний.

Методика и программы отрабатывались на примере получения изолиний карт электронной плотности для больших молекул белка, однако они с равным успехом могут быть использованы и при получении магнитных полей ускорителей, больших магнитов, при изображении рельефа местности.

В последние годы активизировались работы по изучению молекул белков. Несколько лет назад в ОИЯИ в лаборатории нейтронной физики с помощью нейтронного дифрактометра по времени пролета приступили к изучению лантан-магниевого нитрата<sup>1/</sup>.

Важным этапом в процессе изучения молекул сложных соединений является получение карт электронной плотности данной молекулы. На основе этих карт строится пространственная модель молекулы. Получение кривых заданного уровня плотности вручную путем использования таблиц распределения плотности в узлах сетки требует больших затрат труда и времени, а полученные при этом карты не имеют достаточной степени точности.

Программы позволяют производить расчет и воспроизводить на ЭВМ (на ленте графопостроителя или на экране дисплея) кривые

электронной плотности для больших молекул белка. Методика позволяет получить на графическом устройстве одну или несколько карт электронной плотности в нужном масштабе, позволяет выделить отдельные участки карт и с большей точностью дает представление о пространственной структуре объекта.

Возможность использования современных ЭВМ для произведения расчетов и построения изображений позволила существенно ускорить по сравнению с традиционными методами процесс исследований и повысить их эффективность за счет появления новых возможностей анализа.

Весь комплекс программ, реализующий данную методику, в основном написан на языке ФОРТРАН (отдельные подпрограммы выполнены на автокоде МАДЛЕН) и используется в настоящее время для получения структуры молекулы белка пепсина. Работа проводилась на ЭВМ БЭСМ-6, имеющей в составе внешних устройств графопостроитель САЛКОМР и графический дисплей СИГДА на удаленной дисплейной станции<sup>/2/</sup>. Программы оформлены в виде стандартных подпрограмм и могут быть включены в библиотеку программ графических устройств.

В данной работе описываются:

- структура входных данных и представление на графическом устройстве получаемого результата,
- алгоритм получения точек, через которые проходит кривая заданного уровня плотности,
- алгоритм выбора порядка соединения полученных точек,
- программы, реализующие эти алгоритмы.

### 1. Структура входных и выходных данных.

Карта электронной плотности задается действительными положительными числами в узлах двумерной квадратной равномерной сетки и записывается в форме матрицы на магнитной ленте. В результате работы программ на графическом устройстве воспроизводятся кривые заданных уровней плотности, соответствующие картам электронной плотности. Примеры задания такой карты и соответствующих ей эквипотенциалей представлены на рисунках 1 и 2. На рисунке 3 изображена одна из карт электронной плотности молекулы белка пепсина.

На рисунке 2 кружочками отмечены места, в которых кривая уровня проходит через узел сетки. Уровни и характер соединения заданы следующим образом: уровень 150 - пунктиром, 200, 300... и т.д. - сплошной линией. На некоторых участках кривых существуют петли, которые в действительности должны отсутствовать. Петли возникают из-за неоднозначности определения кривой на данном

0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	150	150	150	0	0	0	0	0	0	0	0	0	150	0	0	0	0	0	0
150	330	370	150	0	0	0	0	0	0	0	0	0	150	500	150	0	0	0	0
0	150	150	150	150	150	0	0	0	0	0	0	0	0	150	0	0	0	0	0
0	0	0	150	320	246	150	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	150	254	150	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	150	150	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	150	150	150	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	150	230	380	200	150	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	150	293	415	218	150	0	0	0	0	0	0	200	200	0	0	0	0
0	0	0	150	260	240	421	150	0	0	0	0	0	0	200	200	0	0	0	0
0	0	0	0	150	150	150	0	0	0	200	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	200	200	200	200	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	200	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0

Рис. 1

Пример задания карты электронной плотности на сетке.

уровне разрешения. Такие места неоднозначности могут быть преодолены путем увеличения точности задания карт электронной плотности на сетке.

### 2. Программа вычисления точек эквипотенциала.

Эта программа рассчитывает на сетке координаты точек, через которые проходит кривая заданного уровня плотности. При этом за одно обращение к программе вычисления рассматривается только один уровень. Расчет точек производится методом линейной интерполяции.

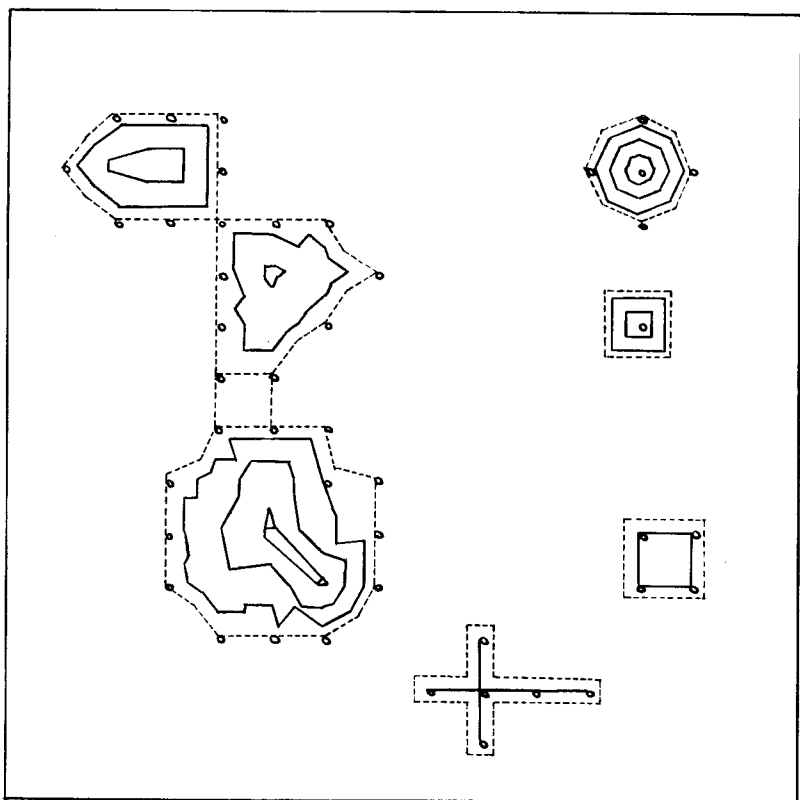


Рис.2

Пример изображения эквипотенциалей на графопостроителе.

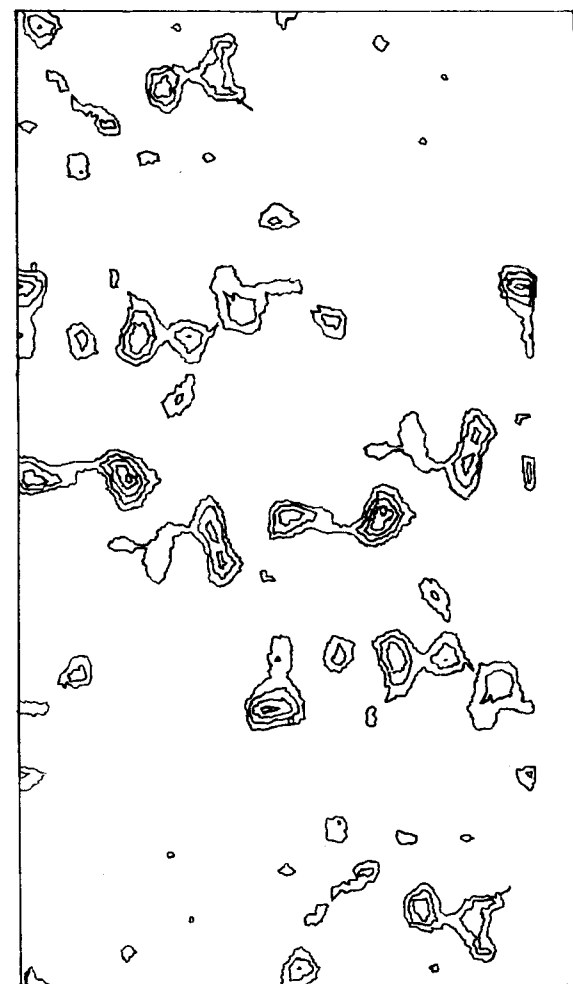
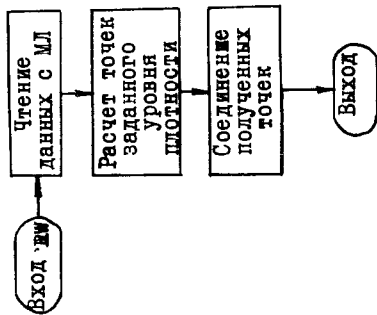
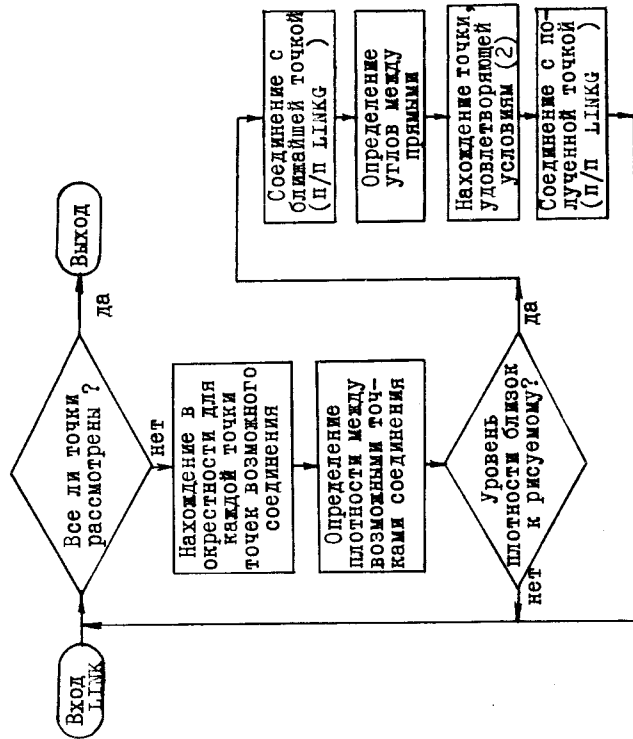


Рис.3

Одна из карт электронной плотности молекулы белка пепсина.



а)



б)

Рис. 4

Блок-схема программ.

Найденные координаты точек, через которые проходит кривая заданного уровня плотности, заносятся в таблицу. Соединение этих точек выполняет подпрограмма LINK, которая будет описана ниже (см. 4). На рисунке 4а изображена блок-схема программы RW.

## 2.1. Входные параметры.

В качестве формальных параметров программы RW задаются следующие параметры: идентификатор матрицы карты электронной плотности, ее размерность, величина плотности рисуемой кривой, характер соединения (пунктиром или сплошной линией), параметры изображения: размеры рисунка и его смещение по X-и Y-координатам на ленте графопостроителя или на экране дисплея.

## 2.2. Расчет точек заданного уровня плотности.

Алгоритм выбора точек заданного уровня плотности состоит в следующем. Последовательно рассматриваются все элементы матрицы. Берутся такие точки, уровень плотности которых выше или равен заданному. Для каждой выбранной точки, назовем ее центральной и обозначим 5 (рис.5), берутся 8 ее соседей. Сосед точки определяется как некоторая другая точка, координаты которой отличаются не более чем на одну масштабную единицу по всем направлениям. Из соседей выбираются те, уровень плотности которых меньше заданного. Координаты искомой точки, расположенной между центральной точкой и ее соседом, находятся по правилам линейной интерполяции:

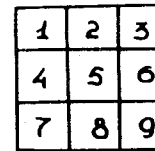


Рис. 5

$$X = \frac{XC + XC * P}{1 + P}; \quad Y = \frac{YC + YC * P}{1 + P}; \quad P = \frac{PI - PI}{PI - PI},$$

где (X,Y)-координаты искомой точки, PI-заданный уровень плотности, (XC,YC)-координаты центральной точки, ПЦ-величина плотности в центральной точке, (XC,YC)-координаты в соседней точке, ПС-величина плотности в соседней точке. Найденные координаты заносятся в таблицу А (рис. 6).

Таблица А точек заданного уровня плотности.

№	1	2	3	4
1	$X_1$	$Y_1$	2	
2	$X_2$	$Y_2$	3	K
...	...	...	...	...
I	$X_I$	$Y_I$	2	
I+1	$X_{I+1}$	$Y_{I+1}$	1	
...	...	...	...	...
J	$X_J$	$Y_J$	1	I + 1
...	...	...	...	...

Рис. 6

### 2.3. Заполнение таблицы точек заданного уровня плотности.

Таблица А организована следующим образом. Первый и второй столбцы занимают соответственно X- и Y-координаты найденных точек, которые передаются подпрограмме LINK (см. 4) для последующего соединения. В третьем столбце отмечается количество соединений, проходящих через данную точку, а в четвертом столбце, если количество соединений было нечетное, отмечается порядковый номер точки по таблице А, с которой произошло последнее нечетное соединение. Если же количество соединений было четное, то содержимое четвертого столбца не имеет значения (см. 4). Заполнением третьего и четвертого столбцов ведаёт подпрограмма LINK (см. 4.2.).

### 3. Правила выбора порядка соединения точек.

После того как найдены все точки, через которые проходит кривая заданного уровня плотности, необходимо определить порядок их соединения. Рассмотрим два случая: когда некоторая точка "I" имела четное число соединений и когда она имела нечетное число соединений. Так как за один просмотр точка может быть соединена не более чем с двумя точками, точка, имеющая четное число соединений, рассматривается как не имеющая соединений. Поэтому для точек с четным числом соединений не существенно, указаны или нет в таблице точки, с которыми она была соединена. Аналогично для точек, имеющих нечетное число соединений. Такая точка рассматривается подобно точке, имеющей только одно соединение.

Пусть точка "I" не имела соединений. Очевидно, что одной из двух точек, с которыми будет соединена точка "I", является ближайшая. Второй точкой, с которой должна быть соединена точка "I", является такая точка, что:

- а) между соединяемыми точками величина плотности не должна существенно отличаться от величины заданного уровня,
- б) радиус кривизны кривой, проведенной через эти три точки, (I) в рассматриваемой точке наибольший,
- в) расстояние до рассматриваемой точки наименьшее.

Необходимость выполнения условия а) очевидна. Так как если между возможными точками соединения уровень плотности значительно отличается от величины заданного, то в таком месте в описываемом пространственном объекте существует либо крутой пик, либо выемка. Далее будем считать, что условие а) всегда выполняется.

Так как в некоторых случаях условия (I) одновременно не выполнимы, дополнительные ограничения будут введены ниже.

Для того чтобы определить кривизну кривой, проходящей через три точки, надо найти аппроксимирующую функцию части кривой плотности, заданной дискретно в трех точках, по формуле:

$$R = \left| \frac{(1 + y'^2)^{3/2}}{y''} \right|,$$

где  $y = \Phi(x)$  — аппроксимирующая функция,  $y'$  и  $y''$  — ее первая и вторая производные. Эту процедуру необходимо проделать для всех возможных точек соединения.

Расчет аппроксимирующей функции и ее производных является достаточно трудоемким процессом, требующим значительных затрат машинного времени. Достаточно вместо радиуса кривизны в данной точке определить угол между прямыми, проходящими через точку "I" и ближайшую и через "I" и предполагаемую точку соединения (прямую, проходящую через две точки "A" и "B" будем обозначать (A,B)). При этом из двух возможных углов двух пересекающихся прямых выбирается тот угол, на сторонах которого лежат данные точки (рис.7).

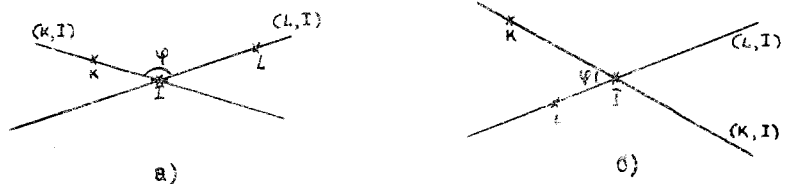


Рис.7

При этом условие (I)-б) заменится на следующее:  
 (I<sup>1</sup>)-б) - угол между прямыми наибольший. Условия а) и в) не изменятся.

Рассмотрим несколько случаев возможного соединения точек на карте электронной плотности. Обозначим точки, попавшие в некоторую заданную  $\epsilon$ -окрестность точки "I" за "A", "B", "C", "E".

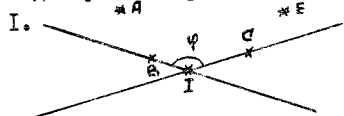


Рис.8

Этот случай является простейшим. Пусть ближайшей к "I" будет "B" (рис.8). Очевидно, что второй искомой точкой является точка "C". Угол между прямыми (B,I) и (C,I) наибольший и расстояние от "C" до "I" меньше, чем от "A" или "E" до "I". Условия (I<sup>1</sup>) выполнены.

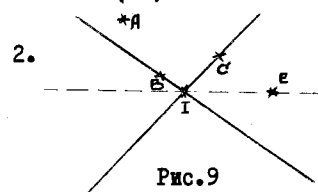


Рис.9

Пусть ближайшей к "I" будет "B" (рис.8). Если бы рисовал человек, то он точку "I" соединил бы с точкой "C". ЭВМ же по условию (I<sup>1</sup>)-б) сначала выбирает точку "E". Затем вследствие этого же условия выбирается точка "C", а потом "A".

Отсюда видно, что необходимо ввести дополнительное ограничение: угол  $\psi$  не должен быть мал. Достаточно, чтобы  $\psi$  не был меньше  $45^\circ$ . Это ограничение хорошо иллюстрируется случаем 3.

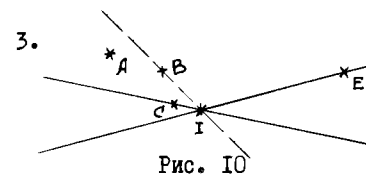


Рис. 10

В этом случае ближайшей точкой к "I" является "C" (рис.10). Второй точкой соединения будет "E". Это единственная точка, которая удовлетворяет условиям, описанным в случае 2.

После того как все возможные случаи разобраны и внесены поправки, условия соединения точек (I) переписываются следующим образом:

- а) между соединяемыми точками величина плотности не должна существенно отличаться от величины заданного уровня,
- б) угол между прямыми наибольший,
- (2) в) угол между прямыми не меньше  $45^\circ$ ,
- г) расстояние между соединяемыми точками наименьшее.

Был разобран случай, когда точка не имела ни одного соединения или имела четное число соединений. Рассмотрим случай, когда точка имеет нечетное число соединений. Тогда вместо ближайшей выбирается точка, с которой данная точка уже была соединена. Вторая точка соединения определяется по алгоритму, описанному выше.

#### 4. Подпрограмма LINK соединения заданных точек.

Подпрограмма LINK последовательно рассматривает по таблице А каждую точку заданной кривой и выбирает из остальных такие точки, которые попадают в некоторую заданную окрестность рассматриваемой точки. Эти точки (назовем их возможными точками соединения) заносятся в таблицу В (рис.11).

В зависимости от количества соединений, какое имела рассматриваемая точка, из таблицы В выбираются одна либо две точки, удовлетворяющие правилам (2), с которыми рассматриваемая точка соединяется.

На рис.3б дана блок-схема подпрограммы LINK .



Таблица В возможных точек соединения.

№	1	2	3	4	5
1	$X_I$	$Y_I$	I	—	—
2	$X_{I_1}$	$Y_{I_1}$	$I_1$	$\sqrt{(X_I - X_{I_1})^2 + (Y_I - Y_{I_1})^2}$	—
...	...	...	...	...	...
J	$X_K$	$Y_K$	K	$\sqrt{(X_I - X_K)^2 + (Y_I - Y_K)^2}$	(I, I <sub>1</sub> ) — (I, K)
...	...	...	...	...	...

Рис. II

#### 4.1. Выбор и заполнение таблицы возможных точек соединения.

Для каждой точки из таблицы А составляется таблица В. Пусть координаты этой точки находятся в таблице А в строке I. Координаты точки "I" заносятся в первый и во второй столбцы первой строки таблицы В. В третьем столбце помещается порядковый номер точки по таблице А. На карте электронной плотности рассматривается некоторая  $\epsilon$  - окрестность точки "I". В начале  $\epsilon$  удобно принять равным минимально возможному расстоянию между двумя точками. Просматривая таблицу А, находим координаты точек, которые попали в эту  $\epsilon$  - окрестность. Координаты очередной точки заносим в таблицу В в первую свободную строку. В четвертом столбце записывается расстояние между этой точкой и точкой "I". В пятом столбце записывается величина угла между прямыми, проходящими через "I" и ближайшую и через "I" и вновь найденную.

Затем рассматриваются  $2\epsilon$ ,  $3\epsilon$ , ...  $\epsilon$  - окрестности точки "I". Координаты всех новых точек, которые попали в эти окрестности, и вся последующая информация также заносятся в таблицу В. Максимальная  $\epsilon$  - окрестность не должна превышать  $\sqrt{2}$  (считается, что сетка задана с шагом единица), то есть максимально возможного расстояния между двумя соседними точками, так как это необоснованно увеличивает время счета и может привести к неправильному соединению точек кривой. При этом, чем больше порядковый номер точки по таблице В, тем дальше она отстоит от точки "I".

#### 4.2. Соединения точки, имеющей четное число соединений.

Если точка имела четное число соединений (что эквивалентно тому, что точка не имела соединений вообще (см.3)), то по таблице В находится ближайшая точка и происходит их соединение при помощи подпрограммы LINKG соединения двух точек на графическом устройстве. При этом для соединяемых точек в соответствующих строках таблицы А в столбце количества соединений число увеличивается на единицу. Так же для найденной точки в четвертый столбец заносится порядковый номер по таблице А рассматриваемой точки. Затем в соответствии с правилами (2) выбирается вторая точка соединения. Аналогичная информация заносится в таблицу А.

#### 4.3. Соединения точки, имеющей нечетное количество соединений.

Если точка имела нечетное количество соединений, то для этой точки по содержанию четвертого столбца соответствующей строки таблицы А определяется порядковый номер точки, с которой соединение уже произошло. Эта точка рассматривается вместо ближайшей. Вторая точка и необходимая информация определяются как и в 4.2.

Использование вышеизложенной методики при построении карт электронной плотности пепсина показало, что она позволяет эффективнее и надежнее по сравнению с традиционными методами воспроизводить необходимые рисунки на графических устройствах, что значительно облегчило процесс исследования. Также рассмотренная методика может быть использована при исследовании поверхностей, для описания рельефа местности.

В заключение автор выражает благодарность члену-корреспонденту АН СССР проф. Н.Н.Говоруну и проф. Н.С.Андреевой за постановку задачи, постоянный интерес и помощь в работе, а также А.П.Сапожникову за полезные обсуждения.

### Литература

1. Балагуров А.М. и др. ОИЯИ, Р14-10383,  
Дубна, 1977.
2. Кавченко А.В. и др. ОИЯИ, Р10-9325,  
Дубна, 1975.

Рукопись поступила в издательский отдел  
22 февраля 1978 года.