

А
СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА

3534 / 2-80

28/7-80

P11-80-281

Г.Б.Щенкова

ПОСТРОЕНИЕ ГРАФОВ И ИЗОПОВЕРХНОСТЕЙ
В ПРОСТРАНСТВЕ

1980

I. ВВЕДЕНИЕ

Для решения многих задач современной науки используются различные возможности, предоставляемые вычислительной техникой. Например, построение изолиний на графическом устройстве применяется для большого класса задач, таких, как получение магнитных полей ускорителей и больших магнитов, построение карт электронной плотности молекул, изображение рельефа местности, составление карты погоды и т.п. Для этого обычно используют рисунок изолиний,

представленный в виде двумерной карты /рис.1/. Однако в отдельных случаях значительно удобнее пользоваться трехмерным изображением. Так, в задаче расшифровки структуры молекулы сложного соединения трехмерная карта электронной плотности позволяет ясно представить строение отдельного фрагмента данной молекулы, определить точное пространственное положение скелета главной цепи молекулы. В случае задания геометрической поверхности в виде числовых величин в узлах прямоугольной трехмерной сетки также можно с успехом применить описанный ниже алгоритм.

Данная работа выполнена на примере задачи построения модели пространственной структуры молекулы белка пепсина, расшифрованной в Институте молекулярной биологии АН СССР^{1/}. В процессе решения этой задачи сначала был рассчитан предвари-



Рис.1. Изолинии, представленные в виде двумерной карты.



Рис.2. Пример изображения трехмерной карты электронной плотности со стиранием невидимых линий.

тельный скелет исследуемой молекулы^{/2/}. Затем был задан некоторый фрагмент молекулы, который воспроизводится на графическом устройстве. С этой целью для изображения графа на ленте графопостроителя или на экране дисплея был разработан алгоритм, который может быть с успехом применен также и для решения других задач /например, для построения схем, графиков и т.п./. Далее имеется возможность сравнить исследуемый фрагмент молекулы с соответствующим фрагментом трехмерной карты электронной плотности, на основе которой был рассчитан скелет. В зависимости от потребностей исследователя можно получить как совместное изображение

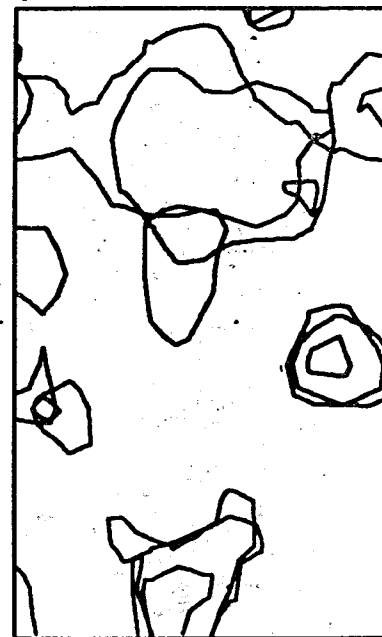
карты и скелета, так и рисунок карты или скелета в отдельности. При этом для получения трехмерного изображения существуют три способа воспроизведения невидимых линий, которые могут изображаться в виде сплошных и пунктирных линий, или оставаться невидимыми. Алгоритм удаления невидимых линий достаточно прост и будет описан ниже.

Весь комплекс программ, реализующий данные алгоритмы, написан на языке ФОРТРАН. Работа проводилась в ОИЯИ в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации на ЭВМ ВЭСМ-6, имеющей в составе внешних устройств графопостроитель CALCOMP и графический дисплей СИГДА на удаленной дисплейной станции^{/3/}.

В данной статье описываются:

- структура входных данных для представления изоповерхностей в пространстве и изображение на графическом устройстве получаемого результата,
- алгоритм получения поверхностей уровня,
- алгоритм стирания невидимых линий,
- входные данные для представления графа и их изображение на графическом устройстве,
- алгоритм получения изображения графа,
- программы, реализующие эти алгоритмы.

Рис.3. Пример изображения трехмерной карты электронной плотности без стирания невидимых линий.



2. ПОСТРОЕНИЕ ПОВЕРХНОСТЕЙ УРОВНЯ

2.1. Структура входных данных для представления поверхностей уровня и изображение на графическом устройстве получаемого результата

Описанный ниже алгоритм позволяет строить линии уровня /изолинии/ для действительной функции трех переменных $T(X, Y, Z)$, определенной в узлах прямоугольной равномерной сетки (X_i, Y_j, Z_k) , $(i = 1, \dots, NX)$, $(j = 1, \dots, NY)$, $(k = 1, \dots, NZ)$. Функция $T(X, Y, Z)$ записывается в виде матрицы M на внешнем носителе. В результате работы программ на графическом устройстве воспроизводятся кривые линий уровня. Примеры изображения изолиний показаны на рис.2 и 3.

2.2. Алгоритм получения изображения поверхностей уровня

Построение изоповерхностей в пространстве начинается с выбора оси, вдоль которой будут производиться двумерные осевые сечения поверхности. С помощью одной из двух специальных программ /для получения сечений по двум другим осям/ матрица M переформируется в соответствии с выбранной осью. Здесь имеется возможность задания изображения как всей поверхности, так и отдельных ее частей. После этого на графическом устройстве строится первое двумерное сечение^{/4/} выбранного фрагмента поверхности заданного уровня. Все последующие сечения вдоль выбранного направления выдаются с учетом того, что любая изображаемая в текущий момент точка может быть закрыта предыдущими сечениями и будет невидима. Алгоритм стирания невидимых линий описан в разделе 2.3. Блок-схема программы, воспроизводящей данный алгоритм, дана на рис.4.

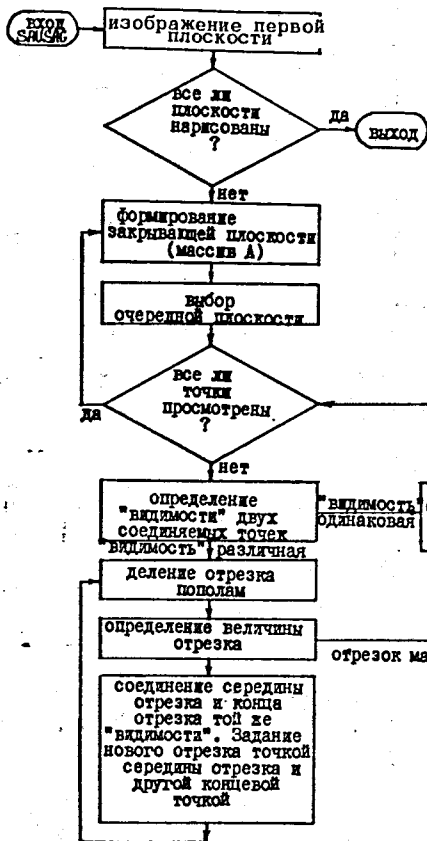


Рис.4. Блок-схема программы построения изоповерхностей в пространстве.

2.3. Алгоритм удаления невидимых линий

При выполнении программы, реализующей алгоритм удаления невидимых линий, в памяти вычислительной машины отводится

двумерный массив A /закрывающая плоскость/, по размерности совпадающий с размерностью выводимых двумерных плоскостей сечения. После того как получено изображение

первой плоскости сечения, в отведенный массив A заносится матрица, задающая эту плоскость. Во время получения изображения последующих плоскостей значение функции в каждой очередной вычисленной

точке рисунка сравнивается со значением функции в соответствующей точке, определенным по величинам в соответствующих узлах массива A . Например, если рассматривается некоторая точка с координатами (X_k, Y_k) второй выводимой на графическое устройство плоскости сечения, определенная методом линейной интерполяции по узлам (i, j) , $(i+1, j)$, $(i, j+1)$, $(i+1, j+1)$, где $NX1 \leq i \leq NX2$, $NY1 \leq j \leq NY2$ и $NX1$, $NX2$, $NY1$, $NY2$ - границы выбранного фрагмента, то значение функции в точке (X_k, Y_k) массива A вычисляется тем же методом по тем же самым узлам. И если искомая величина функции в выбранной точке окажется больше, чем величина функции в той же точке второй плоскости, то точка считается невидимой; если меньше, то она изображается на графическом устройстве.

При построении очередной кривой без дополнительного анализа принимается следующее утверждение: если две точки не видны, то и отрезок, соединяющий эти точки, невидим; если обе точки видны, то и отрезок, их соединяющий, виден. Это иногда приводит к некоторым неточностям рисунка. Если же необходима большая точность в исполнении изображения, то можно воспользоваться несколько модифицированным алгоритмом, определяющим дополнительно, видны или нет внутренние точки отрезка. Количество таких точек берется с учетом длины отрезка и разрешающей способности графического устройства. При этом внутренние точки рассматриваются только у тех отрезков, значение функции T в граничных точках которых попадает в некоторую заданную окрестность величины изображаемого уровня. Использование этого варианта построения рисунка приводит к дополнительным расходам машинного времени. Если же при использовании "быстрого" варианта одна точка видима, а другая нет, то определяется - видима или нет точка середины отрезка. Середина отрезка и концевая точка с той же видимостью соединяются в соответствии с заданным типом характера соединения и тем, видны или нет эти точки. Вторая половина отрезка делится пополам. Точка середины рассматривается аналогично. Деление отрезка пополам происходит до тех пор, пока получившийся отрезок не окажется меньше разрешающей способности графического устройства.

После того как построено очередное сечение, закрывающая плоскость переформируется. Для этого сравниваются значения функции в соответствующих узлах последней построенной плоскости сечения и массива A . Пусть значение функции T в узле $(i, j, 2)$ плоскости сечения равно t_1 , а значение функции T в узле (i, j) массива A равно a_1 . Если $t_1 > a_1$, то $T(i, j)$ в узле массива A переопределяется и $T(i, j) = t_1$; если $t_1 \leq a_1$, то $T(i, j)$ остается равным a_1 . Построение всех последующих плоскостей происходит аналогично.

3. ИЗОБРАЖЕНИЕ ГРАФА

3.1. Описание входных данных для представления графа в пространстве и их изображение на графическом устройстве

Граф в пространстве задается некоторой функцией $Q(X_i, Y_j, Z_k)$, $(i=1, \dots, NX)$, $(j=1, \dots, NY)$, $(k=1, \dots, NZ)$, заданной в узлах равномерной трехмерной сети. При этом различаются только два значения функции $Q: \{Q > 0; Q \leq 0\}$. Происходит соединение только тех точек, в которых $Q > 0$. Функция $Q(X_i, Y_j, Z_k)$ записывается

0	0	0	5	0	0	0	0	5	0	5	1	0	0	0	0
0	0	0	1	4	0	0	0	4	0	0	4	0	0	0	0
0	0	0	8	7	0	0	0	0	0	9	0	0	0	0	0
0	0	0	5	2	0	0	0	4	6	2	0	0	0	0	0
0	0	0	3	0	0	0	5	7	6	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	7	0	0	8	3	2	6	3	0
0	0	0	1	2	5	5	0	0	0	0	0	0	0	0	4
0	0	0	0	4	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	8	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	7	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	8	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	8	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	8	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	8	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	8	0	0	0	0	0	0	0
1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2
3	3	3	3	3	3	3	3	3	3	3	3	3	3	3	3
4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4
5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5

Рис.5. Пример задания графа в виде матрицы.

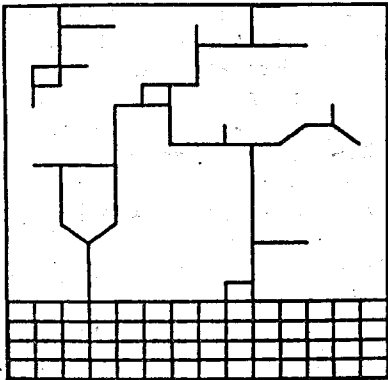


Рис.6. Изображение на графопостроителе этой структуры.

некоторой точки из В равно единице, то точка "к" из множества С исключается. Аналогично рассматривается некоторое множество Н точек, расстояние от которых до "р" равно $\sqrt{3}$. И если существует такая точка "м", принадлежащая Н, что расстояние от "м" до "к" / "к" принадлежит объединению В и С / равно 1, тогда точка "м" из множества Н исключается, а координаты остальных точек заносятся в массив точек соединения.

в форме матрицы на внешнем носителе. Пример задания графа в виде матрицы показан на рис.5. Для удобства восприятия выбран двумерный случай. На рис.6 дано изображение на ленте графопостроителя этой структуры.

3.2. Алгоритм получения изображения графа

Алгоритм начинает свою работу с просмотра всех точек выбранного пространства, и для каждой точки "р", значение функции в которой больше нуля, рассматриваются 26 ее соседей. Сосед точки определяется как некоторая другая точка, отстоящая от исходной не более чем на одну масштабную единицу по трем координатным направлениям. При этом точки-соседи, значение функции в которых больше нуля, ищутся в следующей последовательности: сначала находятся точки, расстояние от которых до "р" равно 1. Их координаты заносятся в массив точек соединения. Обозначим их множество буквой "В". Затем выбираются точки, расстояние от которых до "р" равно $\sqrt{2}$. Это множество обозначим буквой "С". Если найдется такая точка "к", принадлежащая С, что расстояние от этой точки до

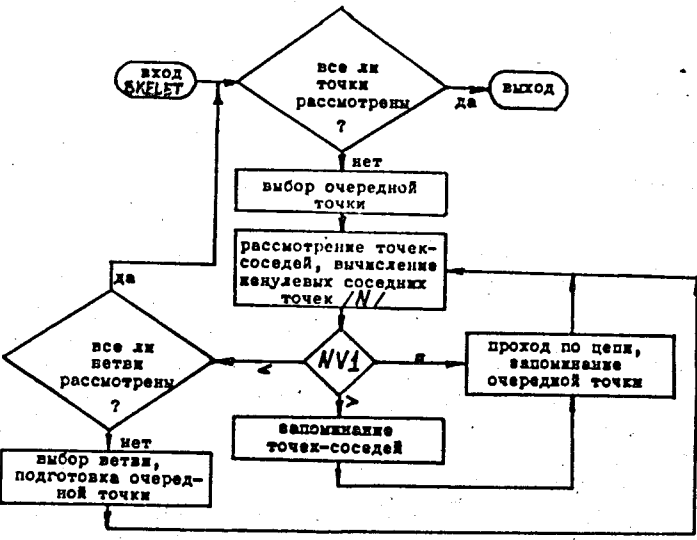


Рис.7. Блок-схема программы построения графа.

После этого точка "р" соединяется с первой точкой из массива соединения /если таковая нашлась/, а остальные переписываются в массив ветвей. В массиве ветвей указываются координаты этих точек и координаты точки "р", с которой ветви, определяемые такими точками, должны быть соединены. Если же в массиве ветвей на очередном шаге не было занесено ни одной точки, то берется последняя точка из массива ветвей и рассматривается аналогично тому, как это было описано выше для точки "р". Работа заканчивается в случае, если массив ветвей оказался пуст и все точки выбранного пространства просмотрены. Блок-схема программы дана на рис.7.

Граф в памяти машины записывается в виде таблицы, в первых трех столбцах которой даны координаты некоторой точки "р", а в трех последних - координаты точки, с которой "р" соединена. Такая запись очень удобна для дальнейшего редактирования графа.

При построении рисунка на графическом устройстве одна скелетная цепь /ломаная линия/ полностью отслеживается. После этого на экран выдается изображение следующей скелетной цепи.

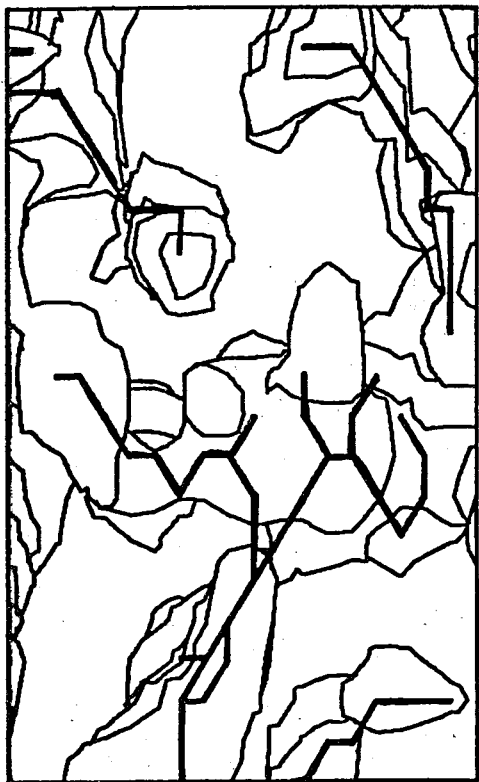


Рис.8. Совместное изображение трехмерной карты плотности и скелета молекулы.

4. СОВМЕСТНОЕ ИЗОБРАЖЕНИЕ ПРЕДВАРИТЕЛЬНОГО СКЕЛЕТА И ИЗОПОВЕРХНОСТИ МОЛЕКУЛЫ БЕЛКА

На основе вышеописанных алгоритмов и программ имеется возможность получить совместное изображение предварительного скелета исследуемой молекулы /2/ и трехмерной карты электронной плотности выбранного фрагмента /рис.8/. При изображении карты можно использовать любой наперед заданный уровень электронной плотности. Это дает возможность достаточно хорошо определить, насколько точно скелет соответствует картам электронной плотности, и, являясь основой для дальнейшего редактирования,

позволяет затем получить на графическом устройстве полную пространственную модель молекулы белка или другого сложного соединения.

В заключение искренне благодарю профессора Н.С.Андрееву и члена-корреспондента АН СССР профессора Н.Н.Говоруна за постановку задачи, постоянный интерес и помощь в работе, а также П.Я.Миронкина за помощь в оформлении рукописи.

ЛИТЕРАТУРА

1. Андреева Н.С. и др. ДАН СССР, 1976, 228, № 2, с.480-483.
2. Щенкова Г.Б. Препринт ИТЭФ, М., 1979, № 146.
3. Кавченко А.В. и др. ОИЯИ, Р10-9325, Дубна, 1975.
4. Щенкова Г.Б. ОИЯИ, 10-13343, Дубна, 1978.

Рукопись поступила в издательский отдел
28 апреля 1980 года.