



УДК 004.925.8

**Е. В. ПОПОВ, д-р техн. наук, проф., проф. кафедры инженерной графики и информационного моделирования**

## **ВИЗУАЛИЗАЦИЯ МИНИМУМОВ 5D-ПОВЕРХНОСТИ С ПОМОЩЬЮ МОДЕЛИ ЛЮМИГРАФ**

ФГБОУ ВО «Нижегородский государственный архитектурно-строительный университет».

Россия, 603952, г. Н. Новгород, ул. Ильинская, д. 65.

Тел.: (831) 430-54-92; эл. почта: popov\_eugene@list.ru

*Ключевые слова:* многомерная функция, гиперповерхность, Люмиграф, растровое изображение, воксельная модель.

---

*В статье описывается графическая модель Люмиграф. Модель предназначена для визуализации табличных гиперповерхностей размерностью 5D. Визуализация таких гиперповерхностей важна по ряду причин, связанных с некоторыми научными проблемами. Например, важной задачей в физике или химии является поиск экстремумов гиперфункций, полученных в ходе квантово-механических расчетов. Кроме того, представляется перспективным использовать модель для решения задачи поиска пути с наименьшей энергией между локальными экстремумами многомерной гиперповерхности. Модель Люмиграф состоит из двух параллельных координатных плоскостей, с каждой из которых связана 2D-система координат. На основе «концепции дополнительного экрана», введенной ранее автором, с использованием модели классического Люмиграфа, разработан метод построения воксельных моделей областей гиперповерхности. Визуализируемые области получены путем отсечения части гиперповерхности гиперсферами с центрами в точках ее минимумов (также могут рассматриваться и максимумы). Полученные таким образом изображения гиперповерхности и зон ее минимумов имеют хорошее качество и высокий уровень наглядности, позволяющий специалистам адекватно исследовать характер полученной табличной гиперфункции и поведение ее экстремумов.*

---

### **Введение**

Активно развиваемое в настоящее время направление под названием научная визуализация занимается разработкой методов и средств визуализации, в том числе многомерных данных. Автором работы [1] систематизированы и классифицированы проблемы визуализации, возникающие при обработке результатов экспериментальных данных в различных отраслях человеческой деятельности в вычислительной газовой динамике. Автор также сформировал перечень часто возникающих задач визуального представления многомерных числовых выходных данных. В работах [2-4] описаны механизмы обработки и визуализации наборов многомерных данных, полученных в результате натуральных и численных экспериментов.

Цель визуализации данных – сделать их хорошо читаемыми и понимаемыми. Анализ обычно позволяет сфокусироваться на обобщении данных и проверке гипотез, визуализация же носит более исследовательский характер. С помощью визуализации можно осуществить обзор данных, выявить частые закономерности и редкие выбросы, проверить проблемы качества и связать отдельные точки



данных с общими данными. В то же время визуализация не является заменой другим видам и методам исследования, а должна являться необходимым их дополнением. В данной статье сделан акцент на многомерных данных – то есть данных, которые могут быть представлены в виде таблиц, поскольку это один из наиболее распространенных типов данных, и его визуализация актуальна практически для всех научных областей и доменов. В строках таблицы обычно перечислены элементы данных, в то время как столбцы предоставляют различные переменные данных, записанные для каждого элемента. Таблицы в их простой версии являются отличным инструментом для отображения небольших объемов данных, а также для редактирования и преобразования данных. Однако они вряд ли обеспечивают хороший обзор или выявляют закономерности и выбросы. В частности, в химии квантово-химические вычислительные методы становятся полезными инструментами для решения некоторых химических проблем, а также для изучения механизма реакции перед сложными, дорогостоящими или иногда невозможными экспериментами. Обычно проблема сводится к нахождению экстремальных множеств поверхности потенциальной энергии (*PES*), связанных с так называемым «молекулярным конформным ландшафтом» [5-6]. Результаты подобных расчетов, как правило, представлены не аналитическими выражениями, а в виде многомерных таблиц, что существенным образом усложняет отыскание экстремумов *PES* и их визуализацию.

Квантово-механические расчеты вызывают необходимость наличия специального программного инструмента, главной задачей которого должна являться постпроцессорная обработка результатов расчетов. Данный вид обработки результатов выполняет две основные функции, а именно: определяет все минимумы табличных значений *PES*, рассчитанных квантово-химическими методами, и визуализирует эти минимумы. Основными требованиями для визуализации являются ясность функции и ее поведение в рассматриваемом диапазоне, способность отображать все минимумы функции, найденные в ее области, и способность наблюдать функциональную модель с любой точки зрения. В большинстве случаев максимальный размер гиперповерхности ограничен четырьмя независимыми переменными и одной зависимой (*5D*-гиперповерхность). Получение результатов для гиперповерхностей размерностей больших, чем *5D*, связано с неоправданным ростом потребности мощностей современных аппаратных и программных вычислительных средств.

Квантово-механические расчеты табличной многомерной *PES* обычно связаны, как уже было отмечено, с чрезвычайно высокими затратами. Поэтому они обычно, даже в случае *5D*-гиперповерхности, проводятся на разреженной сетке аргументов, на основе которой формируется многомерная таблица, это с одной стороны. С другой стороны, многомерные таблицы очень трудно анализировать с точки зрения нахождения минимумов энергии. В этом случае единственный способ повысить надежность расчета без увеличения временных затрат – это уплотнить сетку на этапе последующей обработки. Уплотнение исходной сети производится с использованием многомерной интерполяции данных, как, например, показано в работе [7]. Однако следует отметить, что интерполяция приводит к появлению новых точек сетки, в которых значения функций являются приближенными и должны быть дополнительно проверены вычислительными или экспериментальными методами.



### Описание модели Люмиграф

Известно, что все программы вычислительной химии имеют слабую визуализацию своих расчетов. Особенно это относится к области энергетических расчетов молекулярных структур в зависимости от торсионных углов между атомными связями [6]. Большинство существующих программ постпроцессоров типа *ViewMol3D*, *ChemCraft*, *PMViewMol*, *GaussView*, *Molden* и других, не способны визуализировать трехмерную энергетическую гиперповерхность и ее экстремумы. Перечисленные постпроцессоры, включая *GaussView*, ограничиваются визуализацией энергетической поверхности только в *2D*-пространстве. *3D* и более сложные гиперповерхности в них не реализованы. Поэтому для визуализации *3D* и более гиперповерхностей, в частности, полученных на основе расчетов энергии с помощью *GAUSSIAN*, требуется разработка методов и подходов визуализации гиперповерхностей для анализа их экстремумов, в частности, как наиболее важных их качеств. В настоящее время программных средств, который позволяет ученым визуализировать и находить минимумы функций, обычно не составляет труда в случае *3D* и *4D*, но затруднена в случае *5D*-гиперповерхностей.

Авторы работы [5] для визуализации гиперфункции четырех независимых аргументов (*5D*), заданных в табличной форме, предложили специальный инструмент – Люмиграф. Термин был введен Гётлером в работе [8] для описания обычного параметризованного двухплоскостного светового поля (2ПП), дополненного геометрией объекта для процесса восстановления светового потока.

Задача визуализации гиперповерхности была первоначально поставлена следующим образом: визуализировать гиперповерхность так, чтобы были видны ее экстремумы, в частности минимумы. В работе [7] была реализована схема отображения всех найденных минимумов исследуемой гиперфункции в виде отрезков, моделирующими точки в *4D*-пространстве, как показано на рис. 1 цв. вклейки.

Однако такое представление минимумов было признано неудачным, поскольку, во-первых, сами минимумы видны нечетко, и, во-вторых, гиперповерхность и характер ее формы остается скрытым.

В работе [7] описана «концепция дополнительного экрана», которая заключается в том, что между двумя плоскостями Люмиграфа размещается третья плоскость, им параллельная. Далее вычисляются точки пересечения отрезков прямых линий, моделирующих дискретные точки гиперповерхности, которые окрашиваются в цвета, соответствующие цветовой легенде. При этом появляется возможность получения растрового изображения на *2D*-экране.

На рис. 2 цв. вклейки приведено растровое изображение проекции всей *5D*-гиперповерхности на дополнительный экран. Изображение было получено путем построения точек пересечения всех известных *5D*-точек гиперповерхности, смоделированных прямыми линиями, с плоскостью дополнительного экрана при этом сами *5D*-точки на рис. 2 скрыты.

### Недостатки модели Люмиграф

Использование дополнительного *2D*-экрана имеет существенный недостаток, который заключается в том, что растровое изображение представляет собой всего лишь проекцию гиперповерхности, которая, во-первых, не дает представления о расположении минимумов (а в общем случае экстремумов) относительно *4D*-системы координат, а во-вторых, о форме гиперповерхности в



целом. При этом проекция и ее качество зависит существенным образом от расположения дополнительного экрана между плоскостями Люмиграфа.

После процедуры уплотнения результирующих расчетных данных по схеме, описанной в работе [6], на выходе получается таблица размерности  $n \times n \times n \times n$  (величину  $n$  будем далее называть плотностью модели гиперповерхности) Развитие схемы дополнительного экрана, описанной выше, заключается в одновременном размещении  $n$  дополнительных экранов в пространстве между двумя координатными плоскостями Люмиграфа, как показано на рис. 3. Как видно, данная модель представляет собой воксельную модель функции четырех аргументов плотностью  $n \times n \times n \times n \times n$ , которая, во-первых, являясь весьма грубой в силу большого объема компьютерной памяти для ее реализации, во-вторых, не дает никакого представления о распределении экстремумов в области ее задания.

Вывод, который можно сформулировать из рассмотрения изображения на рис. 3 цв. вклейки, такой: для повышения наглядности анализа распределения экстремумов (и, в частности, минимумов)  $5D$ -гиперповерхности следует ограничиться визуализацией только зон гиперповерхности, непосредственно прилегающих к точкам экстремумов. Рассмотрим подобный подход более подробно на примере минимумов гиперповерхности.

#### **Концепция отображения гиперсфер**

Предположим, что вокруг точек каждого экстремума описана гиперсфера радиусом  $R$ . Данная гиперсфера пересекает гиперповерхность по многомерной линии, которая является гиперокружностью того же радиуса  $R$ . Если теперь выделить из состава всех вокселей, которые составляют воксельную модель гиперповерхности (рис. 3 цв. вклейки) только те, которые попадают внутрь полученной гиперокружности, то можно получить картину, которая представлена на рис. 4 и 5 цв. вклейки, где в качестве примера приведено изображение с двух ракурсов воксельного представления области гиперповерхности вокруг ее главного минимума.

Все вычисления при построении модели, представленной на рис. 4 и 5 цв. вклейки, осуществляются по следующей схеме. Первоначально для каждой точки гиперповерхности из общего количества  $n \times n \times n \times n$  вычисляются значения переменных (в нашем случае это величины  $D1, D3, D5, D6$ ) в произвольной точке поверхности, но в месте расположения текущего дополнительного  $2D$ -экрана (таких экранов –  $n$ ) по формуле, которая представляет собой вариант многомерной линейной интерполяции:

$$Arg_k = Ar_k + \Delta Ar_{kn} \cdot L \cdot t, \quad (1)$$

где  $Ar_k$  – величина, последовательно принимающая значения аргументов, в нашем случае  $D1, D3$ ;

$\Delta Ar_{kl}$  – разница между парами переменных  $D1, D3$  и  $D5, D6$  в двух плоскостях Люмиграфа;

$k$  – номер аргумента, в нашем случае меняется от 1 до 2;

$L$  – расстояние между координатными плоскостями Люмиграфа (в нашем случае 1.0);

$t$  – безразмерный параметр, значения которого находятся в диапазоне от 0 до 1 в зависимости от положения дополнительного экрана.

К СТАТЬЕ Е. В. ПОПОВА  
«ВИЗУАЛИЗАЦИЯ МИНИМУМОВ 5D-ПОВЕРХНОСТИ  
С ПОМОЩЬЮ МОДЕЛИ ЛЮМИГРАФ»

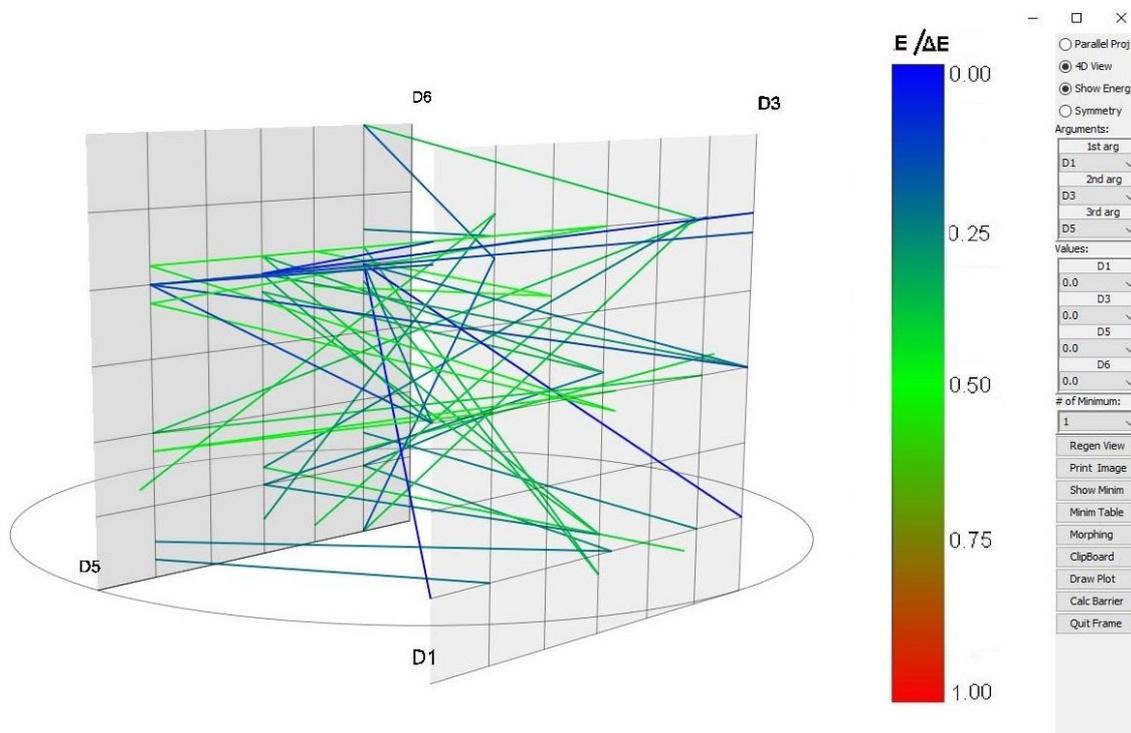


Рис. 1. Минимумы 5D-гиперповерхности в пространстве Люмиграфа

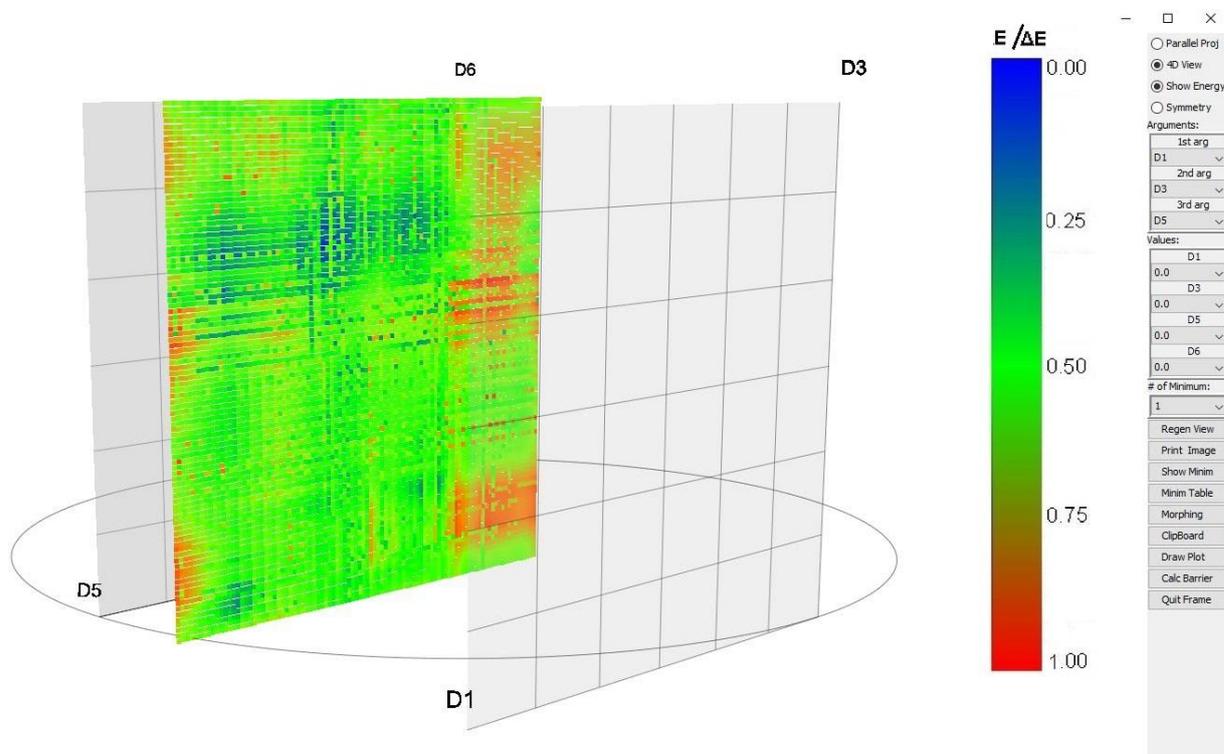


Рис. 2. Проекция 5D-гиперповерхности на «дополнительный 2D-экран»

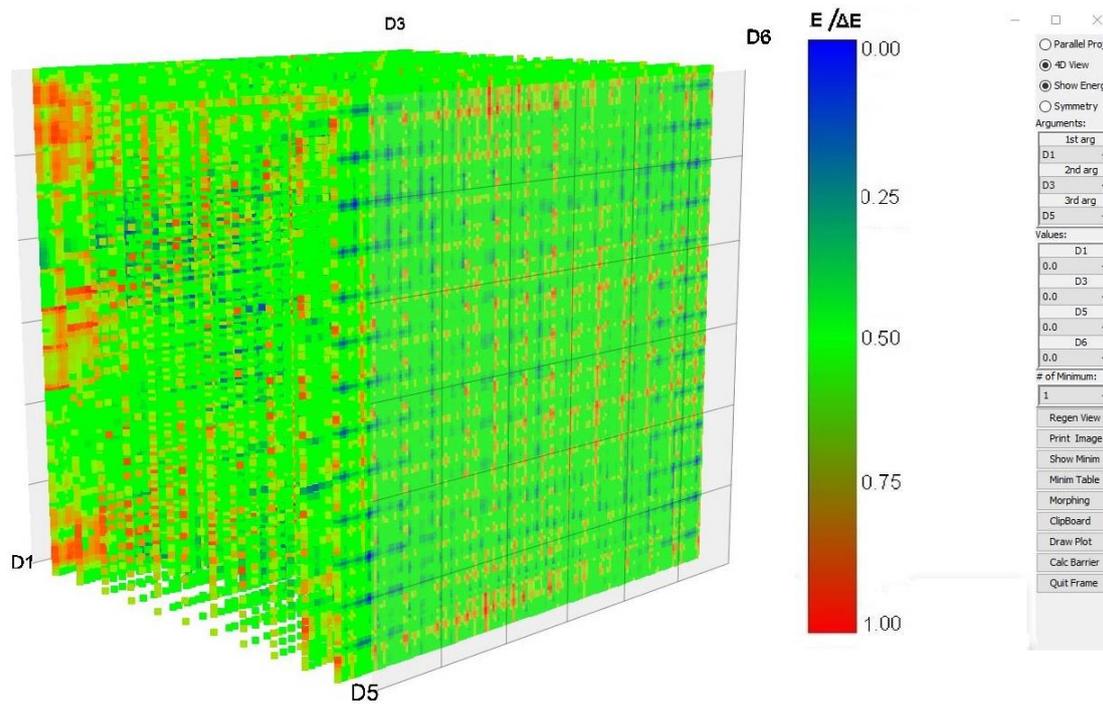


Рис. 3. Проекция 5D-гиперповерхности на «дополнительный 2D-экран» (другой ракурс)

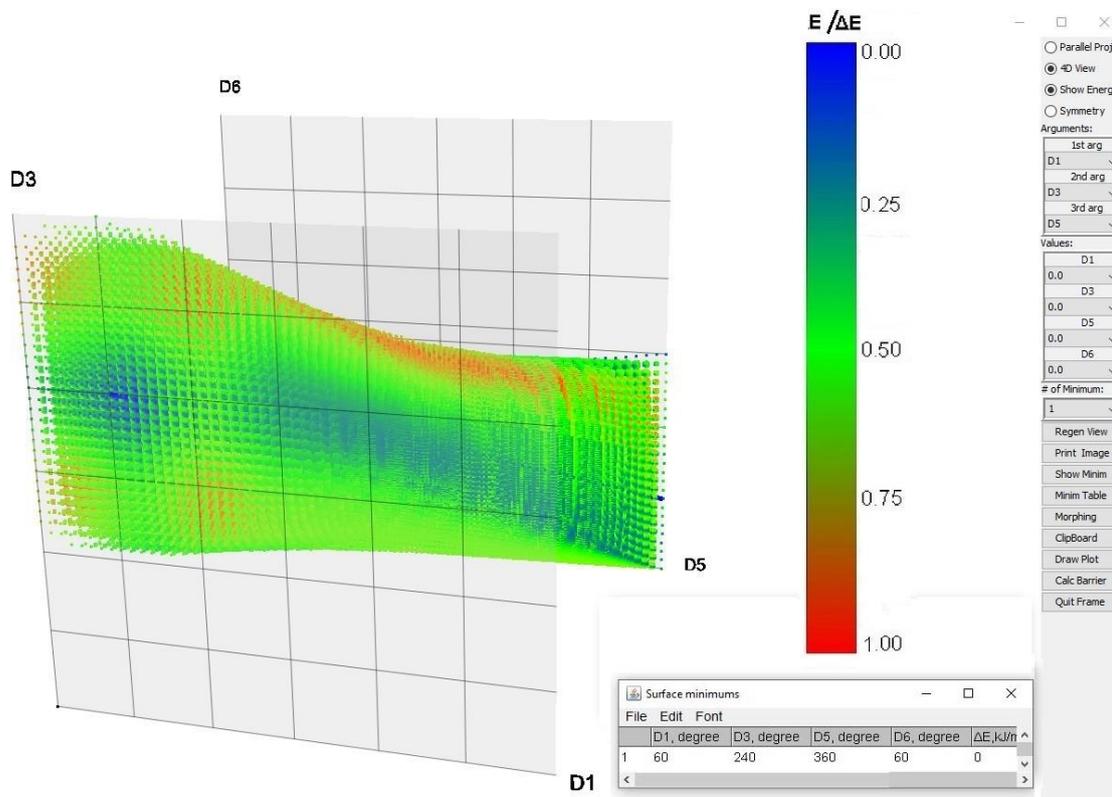


Рис. 4. Гиперповерхность, окруженная гиперсферой относительного радиуса  $R = 0.33$  в области главного минимума

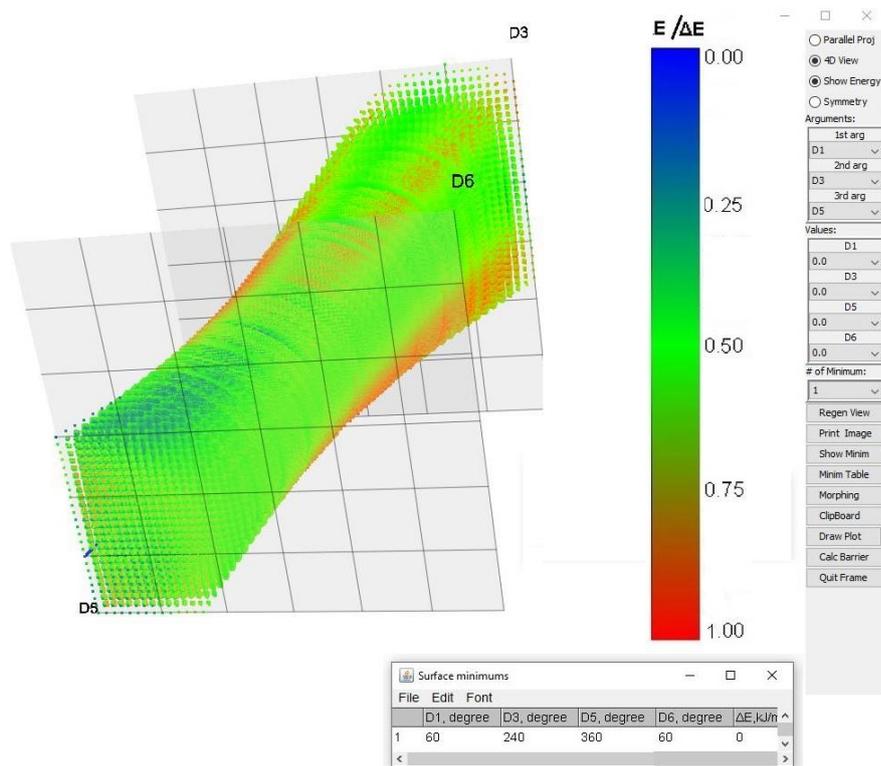


Рис. 5. Гиперповерхность, окруженная гиперсферой относительного радиуса  $R = 0.33$  в области главного минимума (другой ракурс)

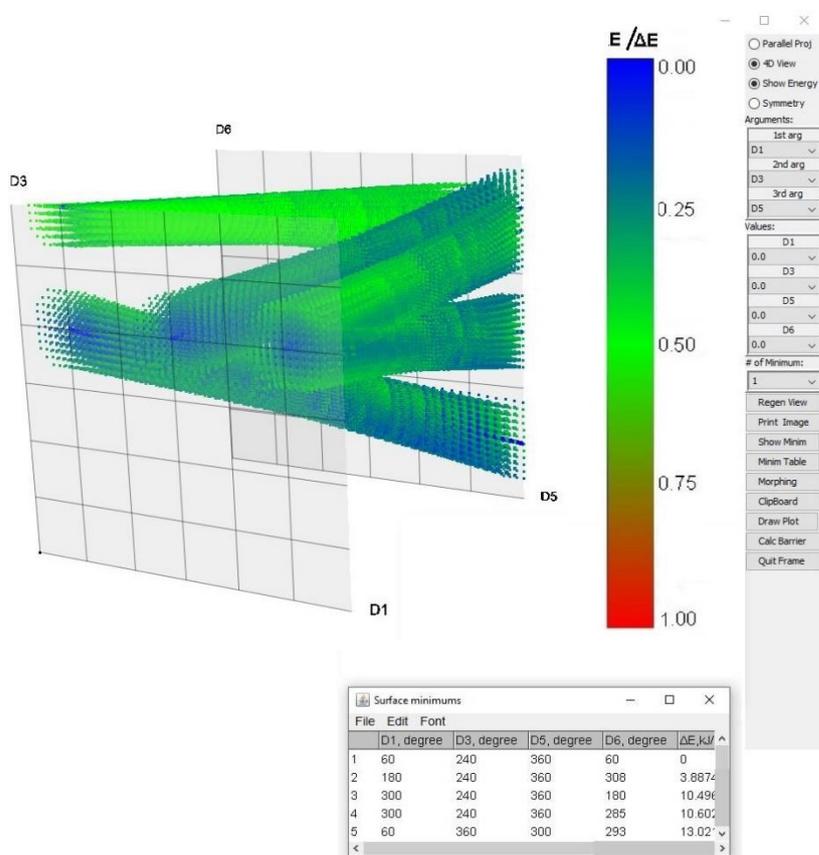
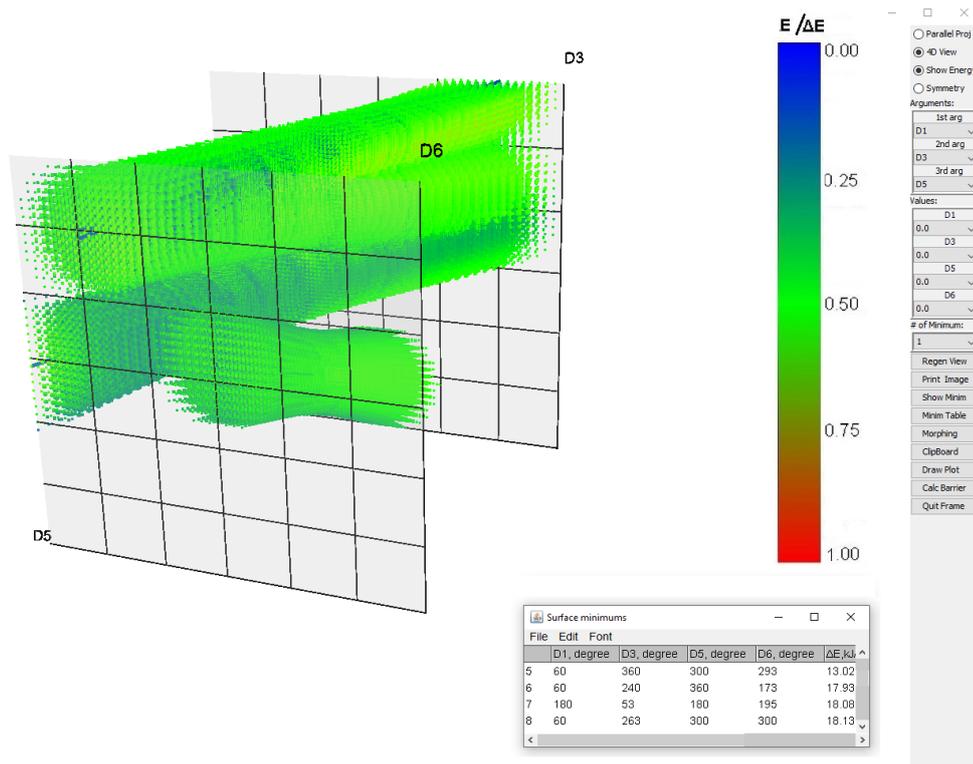


Рис. 6. Первые пять минимумов при  $n = 48$  и  $R = 0,0625$



переменные  $D1$ ,  $D3$ ,  $D5$  и  $D6$  изменяются в пределах  $0^\circ$ – $360^\circ$

Рис. 7. Минимумы в диапазоне №5 – №8 при  $n = 48$  и  $R = 0,125$



Затем, учитывая значения переменных, вычисленных по формуле (1), определяется расстояние от каждой точки гиперповерхности до интересующего минимума по следующей формуле:

$$Dist = \sqrt{\sum_{k=1}^m (Arg_k - Min_k)^2}, \quad (2)$$

где  $Dist$  – расстояние текущей точки гиперповерхности от исследуемого минимума;

$Min_k$  – значения координат в точке исследуемого минимума в текущей плоскости Люмиграфа, вычисляемые по формуле (1), но при значениях аргументов для этого минимума.

Точка гиперповерхности, удовлетворяющая неравенству  $Dist \leq R$ , визуализируется в модели Люмиграф в соответствии с цветовой легендой, отражающей значение функции в данной точке, в противном случае она игнорируется. Как видно из представленного описания, величинами  $n$  и  $R$  можно варьировать в определенных пределах с целью достижения наиболее удобного для исследователя изображения при экономии вычислительных ресурсов.

На рис. 6 цв. вклейки представлено изображение пяти минимумов исследуемой гиперповерхности, построенные при плотности  $n = 48$  и  $R = 0,0625$ . На рис. 7 цв. вклейки представлено изображение минимумов той же гиперповерхности в диапазоне номеров минимумов 5–8 при плотности  $n = 48$  и  $R = 0,125$ .

На всех рисунках переменные  $D1$ ,  $D3$ ,  $D5$  и  $D6$  изменяются в пределах  $0^\circ$ – $360^\circ$ , а величина  $E / \Delta E$  является отнормированным уровнем энергии молекулярной структуры при соответствующих значениях независимых аргументов.

### Программная реализация

В процессе выбора программного инструментария для реализации проекта проводился детальный анализ современных платформ разработки. По результатам комплексной оценки функциональных возможностей и ограничений различных решений в качестве базовой технологии был определен язык *Java* [9] с дополнительным модулем *Java 3D* [10], оптимально соответствующий поставленным задачам.

Современные веб-технологии, особенно платформа *Java*, кардинально трансформировали подходы к созданию и внедрению программных продуктов. Ключевое преимущество *Java* – принцип «один раз разработал – работает везде» – существенно минимизирует трудозатраты и финансовые издержки, традиционно возникающие при адаптации ПО под различные аппаратные конфигурации.

Эволюция *Java* способствовала превращению браузерной модели в эффективную платформу для построения интернет-решений и корпоративных интранет-систем. В условиях активного развития веб-ориентированных приложений особую актуальность приобретает вопрос комплексного внедрения мультимедийных технологий в браузерную среду. Современные тенденции показывают, что разработчики стремятся к упрощению интерфейсов программирования, в то время как конечные пользователи ожидают интуитивно понятных и легко поддерживаемых решений.



Параллельно с прогрессом в области программного обеспечения, достижения в создании специализированных интегральных схем (*ASIC*) и повышение уровня интеграции компонентов сделали возможным широкое распространение аппаратных решений с поддержкой трехмерной визуализации и мультимедийных функций. Это открывает новые перспективы для отображения сложных многомерных структур с размерностью до пяти измерений.

### **Заключение**

В работе рассматривается подход к графическому отображению сложных многомерных поверхностей с выделением их ключевых точек (максимумов и минимумов) при помощи модификации модели Люмиграфа. Стандартная реализация Люмиграфа обладает существенным недостатком – она ограничивается отображением данных в виде системы прямых линий, что значительно снижает информативность представления. Даже при использовании цветового кодирования критические точки функции остаются плохо различимыми на изображении.

Для решения этой проблемы разработан новый подход с применением вспомогательной проекционной плоскости, расположенной параллельно основным координатным осям Люмиграфа. На этой плоскости формируется цветное растровое изображение, на котором четко выделяются все особенности многомерной поверхности. Цветовая гамма изображения соответствует заранее определенной шкале значений. Данная методика, получившая название «технология дополнительной проекционной плоскости», позволяет существенно повысить наглядность представления сложных математических функций, обеспечивая четкую визуализацию всех ее характерных точек и особенностей поведения.

Данный подход применим для визуализации *5D*-гиперповерхности, представленной четырьмя независимыми аргументами и одной зависимой переменной, однако, вопрос с выбором расположения дополнительного экрана относительно плоскостей Люмиграфа приходится решать в каждом конкретном случае отдельно. Кроме того, изображение на дополнительном экране не всегда позволяет исследователю составить общее представление о поведении всей гиперповерхности. Результаты визуализации экстремумов *5D*-гиперповерхности, описанные в данной статье с использованием гиперсфер, следует признать полезным и удовлетворительным для исследования свойств гиперповерхностей данной размерности, заданных таблично.

### **БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК / REFERENCES**

1. Chan W. W. Y. A Survey on Multivariate Data Visualization. *Encyclopedia of Environmetrics*, 2006.
2. Keim D. A., Kriegel H.-P. Visualization Techniques for Mining Large Databases: A Comparison, *IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering*, 1996, Vol.8, № 6, P. 923–938.
3. Bondarev A. E. On visualization problems in a generalized computational experiment. *Scientific Visualization*, 2019, Vol. 11, № 2, P. 156–162. URL: <http://doi.org/10.26583/sv.11.2.12>.
4. Bondarev A. E., Galaktionov V. A., Shapiro L. Z. Processing and visual analysis of multidimensional data. *Scientific Visualization*, 2017, Vol. 9, № 5, P. 86–104. DOI: [10.26583/sv.9.5.08](http://doi.org/10.26583/sv.9.5.08).



5. Popov E. V., Batiukov A. A., Vogt N., Popova T. P., Vogt J. Visualization and Minima Finding of Multidimensional Hypersurface. Isaias, & K. Blashki Interactivity and the Future of the Human-Computer Interface. Hershey, PA: IGI Global, 2020, P. 282–309. DOI: 10.4018/978-1-7998-2637-8.ch015.

6. Popov E., Batiukov A., Vogt N., Popova T., Vogt J. Visualization and Analysis of Molecular Potential Energy Surface (Pes) and Its Minima. IADIS International Conference Interfaces and Human Computer Interaction. Porto, 2019, P. 411–415.

7. Popov E., Popova T., Batiukov A., Vogt N. Visualization of Multidimensional Hypersurface Extrema by Lumigraph. Scientific Visualization, 2020, Vol. 12, № 2, P. 1–8. DOI: 10.26583/sv.12.2.01.

8. Götler S. [et al.] The Lumigraph. In Computer Graphics, Annual Conference Series (Proc. SIGGRAPH '96), 1996, P. 43–54.

9. Niemeyer P., Knudsen J. Learning Java (4th ed.). O'Reilly Media, Inc., 2013.

10. Selman D. Java3D Programming. Austin, TX: Manning Publications Co., 2013.

**POPOV Evgeniy Vladimirovich, doctor of technical sciences, professor, professor of the chair of engineering graphics and information modeling**

#### **VISUALIZATION OF 5D SURFACE MINIMA BY LUMIGRAPH MODEL**

Nizhny Novgorod State University of Architecture and Civil Engineering.

65, Iljinskaya St., Nizhny Novgorod, 603952, Russia.

Tel: (831) 430-54-92; e-mail: popov\_eugene@list.ru

*Key words:* multidimensional function, hypersurface, Lumigraph, raster image, voxel model.

---

*The paper describes the Lumigraph graphical model. The model is designed for visualization of 5D tabular hypersurfaces. Visualization of such hypersurfaces is important for a number of reasons related to some scientific problems. For example, an important task in physics or chemistry is searching for extrema of hyperfunctions obtained in the course of quantum mechanical calculations. In addition, it seems promising to use the model to solve the problem of finding a path with the least energy between local extrema of a multidimensional hypersurface. The Lumigraph model consists of two parallel coordinate planes, each of which is associated with a 2D coordinate system. The disadvantages of the classical Lumigraph are shown and the reasons for this are formulated. To overcome these disadvantages, the authors introduce the "concept of an additional screen", based on which a method is then developed for constructing voxel models of hypersurface regions obtained by cutting off a part of the hypersurface with hyperspheres centered at the points of its minima (maxima can also be considered). The images of the hypersurface and its minimum zones obtained in this way are of good quality and have a high level of clarity, allowing specialists to adequately study the nature of the obtained tabular hyperfunction and the behavior of its extrema.*

---

© **Е. В. Попов, 2025**

Получено: 24.03.2025 г.