

国际计算机图形会议译文集

(1986)

下 册

湖北省暨武汉市计算机学会汉阳分会

一九八八年三月

联接体动画中关键帧动画法与 算法动画法的综合运用

加拿大蒙特利尔大学MIRA实验室

L. Forest, N. Magnenat-Thalmann, D. Thalmann

摘 要

大多数作者把三维计算机动画片分成关键帧动画片以及算法动画片两种类型。本文的目的是介绍不同技术的综合运用问题。关节的动作是由连接的角控制的, 这些角必须随BODYM-OVING(一个参数关键帧系统)计算的值变化。然而, 也有可能让一个或多个角遵循某一算法法则。这种方法具有极大的优点: 大多数角可以由关键帧法来加以控制。事实上这样做更经济。然而, 根据选择的角度实现关节的动画可以取得逼真的效果。

关键词: 关键面、动画片、插值、演员、子演员。

引 言

大多数作者 (Hanrahan and Sturman 1985; Park 1982; Magnenat-Thalmann 1985, Steketee and Badler 1985; Zeltzer 1985, 把三维计算机动画片划分成两大类, 即关键帧动画片和算法动画片。

关键帧动画片:

关键帧动画是根据动画制作人提供的一组关键帧自动地产生中间画面。

下面介绍关键帧动画片的两个基本方法:

1. 通过插入关键帧图象本身获得中间画面。Steketee, Badler (1985) 称这种技术为以图象为基础的关键帧动画, Zeltzer (1985) 则称它为形状插值。这一种早在1971年由Bartnyk 和 Wein 推出的老技术。线性插补算法产生出一些不理想的效果, 例如, 运动不平坦, 运动速度不连贯, 旋转失真等。Baecker (1969)、Wein (1976)、Reeves (1981)、Kochanek and Barterls (1984) 等人先后提出若干弥补方法, 但是据Steketee和Badler (1985) 说, 现在尚未有一种完全令人满意的方法去解决插补的图象与被造型的物体之间的偏差。

2. 产生较佳图象的方法是插补物体模型本身的参数。Park (1982) 和 Steketee 以及 Badler (1985) 称这种技术为参数关键帧动画。Zeltzer 称它为关键变换动画。在一个参数模型中, 动画制作人先要指定一组合适的参数值来产生出关键帧, 然后对参数进行插补, 最

后从插补的参数分别地构成一幅幅图象。

算法动画片

Zeltzer (1985) 称这种动画为算法动画, 其他作者 (Lansdown 1982, Magnenat—Thalmann) 则称之为造型动画片, 在这种动画中动作由算法描述。物理定律应用到人体参数中 (例如关节角)。我们可以通过象 ASAS (Reynolds 1982) 中的程序设计的方法或采用 MIR-ANIM 系统中 (Magnenat—Thalmann, Thalmann 1983) 面向导演的交互式方法来实现这些定律对于动画的控制。利用这样一种方法, 任何一类定律都可以应用到参数中去。例如关节角度的变化可以用运动定律或动力学定律控制。后一种方法最近由几个作家作过介绍 (Badler¹ 1984, Armstrong 和 Green 1985, Armstrong 和 Green 1985, Wilhelms and Barsky 1985)。

几种方法的比较

这几种不同的方法各具有优、缺点。我们在图 1 中用几个指标进行对照。

方 式	动画片质量	CPU 时间	人工干预	通用性	存 在 的 困 难
形状插补	取决于关键帧的数目	取决于点的数目以及插补法则	很长 缺乏创造性	很差	经常不真实除非使用许多关键帧或较复杂的插补法则
参数插补	取决于关键帧的数目	取决于参数的多少	较短 较有创造性	较好	要找出最佳的参数
运动算法的动画	取决于物理定律, 通常不真实	取决于定律但较便宜	可能困难取 决人机接口	很好	真实不容易找出规则
动力学算法的动画	非常真实	很 昂 贵	可能受限制	好	完全基于动态的模型, 对很长的顺序来说, 是非常昂贵

图 1 几种动画方式的对照表

从这张表中, 我们可以很清楚地看出, 没有哪种方式比所有其它的方式更优越, 特别是效率高的方法 (较少地占 CPU 时间) 并不能提真实的动画片, 除非人的干预很重要 (例如, 形状插补很多关键帧)。

我们提出的方法是以上述几种方法为基础的一种综合性方法。我们的经验表明, 对于无人物动画片, 最好是采用面向导演的动画片系统 MIRANIM 中的算法动画法。对于有人物的动画片, 我们决定使用基于参数的关键帧动画方法。然而我们认为, 只有综合几种方法才能提供高质量高效率的动画片。所以我们集以上不同方法为一体, 提出了一种综合法。总之, 我们的原则是:

```

if 参数的动画片是可能的
then 使用它
else if 运动算法的动画片是可接受的

```

then 使用它

else 利用以动态分析或机器人为基础的算法动画方法。

实际的方法:

在MIRALab中, 我们所使用的主要动画片系统是被广泛应用的、面向导演的MIRANIA系统, 这个系统主要由以下三个部份组成。

1. 物体造型和图象合成系统BODY—BUILDING
2. 面向导演的动画编辑程序MEDIT
3. 以导演为基础的子语言CINEMIRA-2

(Magnent-Thalmann and Thalmann 1985a)

MIRANIM最近已与多路动画片系统MUTAN (Fortin等1983年) 联通接口。后者是一个在1983年设计并实现了一个新系统: BOBY-MOVING, 这是一个参数的关键帧动画片系统, 在该系统中人体主要是由各个关节的角度控制的。

下面几节将描述BODY—MOVING以及它是如何与MIRANIM系统接口的。我们将特别介绍如何采用关键帧动画技术和算法动画同时地拼合出一个三维的人体。

参数关键帧动画系统BODY—MOVING

BODY—MOVING 是一个交互式程序, 它允许用户为一给定的三维人体建立一个任意的动作序列, 实际上动作由50个关节角控制, 如图2所示。

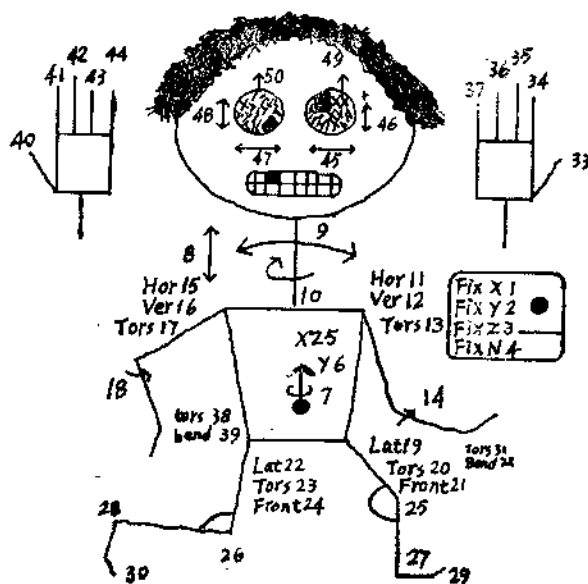


图2 关节角度

可以通过由该序列中原有关键帧修改对任何一个关键帧来说, 可以按这些角的值的办法指定一个关键帧。以垂直方向修改这些值。对每一关键帧中的某一给定的参数, 可水平地进行修改。动画片绘制人员可以观察任何一个关键帧或插补帧的参数值, 也可获得一张任意帧的人体的线框图。

- | | |
|------------------|------------------|
| 〔1〕 建立一个新序列 | 〔2〕 修改现行序列 |
| 〔3〕 从一个文件中读出一个序列 | 〔4〕 在一个文件中写入一个序列 |
| 〔5〕 插入现行序列 | 〔6〕 示出中间画面 |
| 〔7〕 产生一个线框图 | 〔8〕 示出现行序列 |
| 〔9〕 建立人体尺寸 | 〔10〕 示出人体各关键点 |
| 〔11〕 水平地补值 | 〔12〕 移动一个关键位置 |
| 〔13〕 增补一个关键位置 | 〔14〕 删除一个关键位置 |
| 〔15〕 终止会话 | |

图3 菜单命令表

对每一参数的插值可用线性方法或利用双三次样条计算出来。

固定点：

称为固定点的参数允许用户在 (Fixedx, Fixedy, Fixed 2) 位置上加入给出的关键点。当手臂运动时, 画面的效果表现为整个人物都在运动。在一个动作序列中, 固定的关键点可以改变位置, 例如。人在步行时固定点可以从一只脚变换到另一只脚。图4示出一个带有关键值的例子, 图5示出插补的人物。

面部：

人物的面部也可以参数化, 但可以对每个参数给出的独立的或任意数目的关键值。这种方法不同于身体或手臂运动中使用的方法。因为身体动作比面部动作更需要整体协调。



图4 行走：关键值

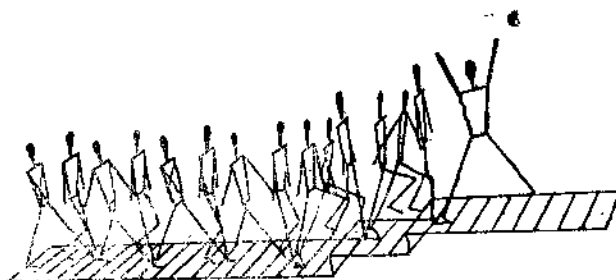


图5 行走：关键值与中间画面
(图6略)

三维浓淡的人体与服装

三维人体的动作设计好后，人物需要用许多曲面覆盖。为此，我们力图把各个曲面拓朴结构完全地从线框模型中分离中。这意味着人体各部份可以采用直纹面设计。例如，旋转曲面，任意形式的曲面或由数字化投影获得的三维重构曲面。图7示出两个不同曲面组（7b和7c）的线框模型（7a），我们的系统根据线框模型转换曲面，保证在两个不同的曲面之间自然连贯性。曲面的变换是根据独立于线段长度的参考系统的变化进行的。就是说，对于同一组曲面来说，不同尺寸的若干个人体可以根据框模型的线段长度获得，不同长度的线段长度如图8所示。

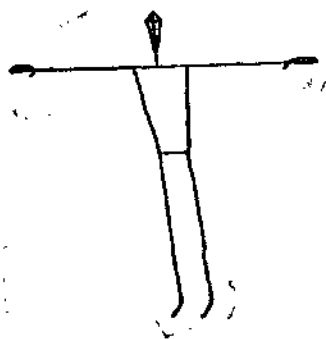


图7a 线框模型

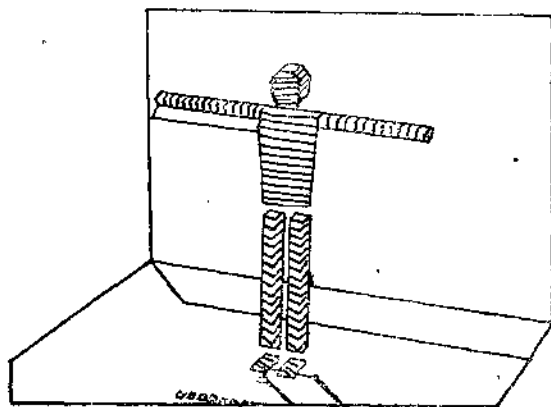


图7b 曲体模型

例如，设：在肘弯节与腕关节之中有一个关键点；当我们变动参考系统时，应注意这两个部分都可能是弯曲的，这意味着在保证连贯性的同时，曲面必须在关节外侧延伸，并在腕部弯曲，其原理如图9所示。

采用这样一种方法，还可能为任何一个三维人体制作一套服装，利用下页方法可以加速这个过程。

1. 取一个人体的复制品
2. 用剪取算法剪掉所有必要的部份
3. 取放大因子 $1+e$ ，保证服装遮盖整个人体
4. 给服装着色，或用图象映射或三维凸射，使服装具有纹理

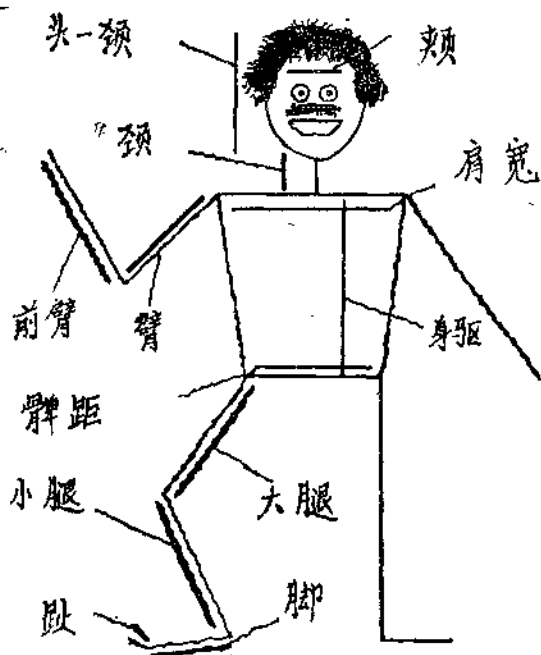


图8 段长度

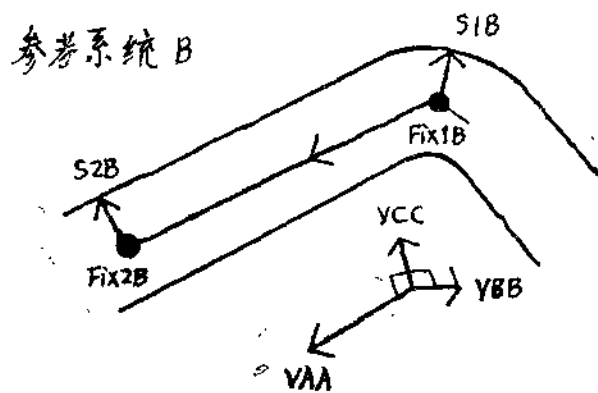
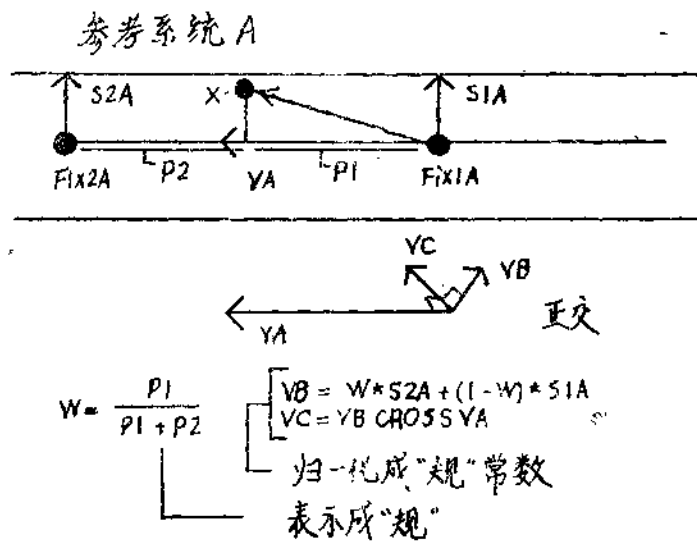


图 9

实现综合方法的要求:

BODY—MOVING 系统是用MIRA—SHADING (Magnenat—Thalman 等1984) 语言编写的。它有两种输出文件。

1. 供所有画面用的线框人体的文件。
2. 由关键位置组成的顺序文件。

在第一个情况下,可以用一个很小的CINEMIRA—2程序显示出动画片。CINEMIR—2本身是一个动画块,它在每一帧上读出相应的线框人物体,并且用现行的ANIMEDIT摄像机参数将其显示出来。在用推、摇、滚等技术实现的动画预映重放时,这一方法特别实用。利

用前面介绍的方法，把线框图转换成曲面。

顺序文件的两个用途：

1. 允许用BODY—MOVING进行交互式的编辑。
2. 允许不用技术的综合利用。

我们对不同的技术进行综合利用的方法是：关键的角度必须根据由BODY—MOVING计算的值变化，但也可以有一个或更多的角遵循ANIMEDIT编辑定义的规律和用CINEMIRA—2子程序编程规则。综合利用的方法采用的策略是，接口模式由CINEMIRA—2语言编写，以便任何一个用BODY—MOVING设计的人体都可以看作ANIMEDIT中的子演员，这种子演员具有50个真实的参数17个三维向量参数编为一组，每一参数为一个角度值。每个向量参数有一个参数名供识别，例如LEFTSHOULDER是控制肩膀动作的三维向量如果设有为这个参数定义规则就采用其插值。如果为这个参数定义了规则，就运用这个法则而对插值计算出的值可以置之不理。

这个方法具有很多的优点，大多数角可以用关键帧法来控制，事实上，这样做开销不是很大，然而，对角度选择可得到更逼真的效果。例如，可以运用以力学为基础的法则，采用类似于阿姆斯特朗和格林（1985，1985a）提出的方程式。当然，要按照动态分析的法则去获得一个角，必须补充一些力学特性如物质、力、惯性、转矩等。在我们的事例中，人体内在的特性象物质，惯性转矩等将在BODY—BUILDING中生成曲面时给出。力和转矩必须指定为ANIMEDIT内法则的参数。在作周期性运动时，采用某种法则（如人在挥动手臂时计算手的角度）优于关键帧计算法。

利用我们的方法，只有在绝对必要时，才采用开销大的计算。

综合利用的方法还有另外一种重要的用途：在ANIMEDIT演员和BODY—MOVING产

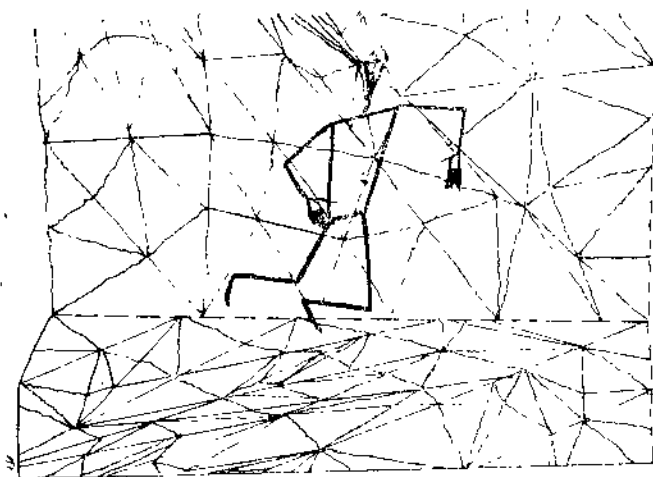


图10A 线框图的一个动作

生的人体之间的关系。这个典型的事例是什么时候由演员数据中获得人体参数（角度）值。例如ANIMEDIT演员是一个球，人体用头接住这个球，在这种情况下，人体的动作有关球的数据控制。这解决这个问题，我们的方法是：预先定义，在任何一关键帧返回到任一参数值的函数。

可以把人体看作是一个子演员，并且取一个演员。该演员可以在ANIMEDIT中的变换是通过整体变换实现的。如平移、旋转、切变、定比例、颜色转换、弯曲、拖曳等。象这样的几个演员可以用算法动画法，摄象机，灯光，装饰等实现其它演员一道同时出现在同一景中。图10、图11就是例子。

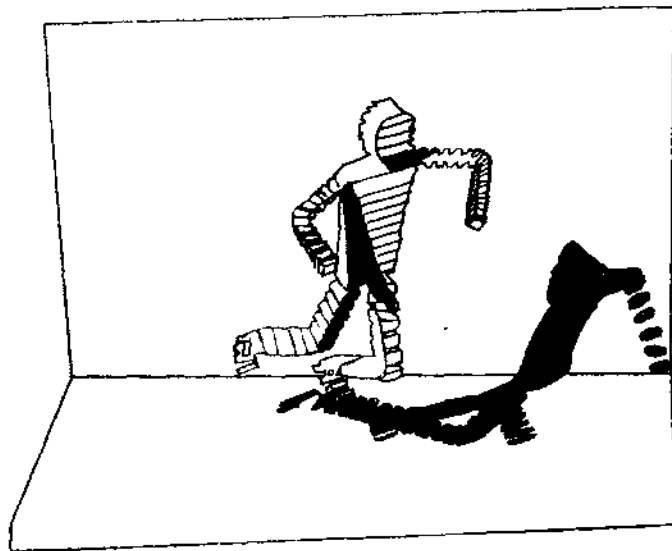


图11 曲子图（同一动作）

参 考 文 献

- [1] Armstrong WW, Green M (1985) The Dynamics of Articulated Rigid Bodies for Purposes of Animation, The Visual Computer, Vol. 1, No4, pp.231-240.
- [2] Armstrong WW, Green M (1985a) Dynamics for Animation of Characters with Deformable Surfaces, Computer-generated Images (Eds. N Magnenat-Thalmann and D Thalmann), Springer Tokyo Berlin Heidelberg New York, pp.203-208.
- [3] Badler NI (1984) Design of a Human Movement Representation Incorporating Dynamics, Technical Report, Department of Computer and Information Science, University of Pennsylvania.
- [4] Baecker R (1969) Picture-driven Animation, Proc. AFIPS Spring Joint Computer Conf., Vol. 34, pp.273-288.

- [5] Burtnyk N, Wein M (1971) Computer-generated Key-frame Animation, *Journal of SMPTE*, 80, pp.149-153.
- [6] Burtnyk N, Wein M (1976) Interactive Skeleton Techniques for Enhancing Motion Dynamics in Key Frame Animation, *Comm.ACM*, Vol. 19, No10, pp.564-569.
- [7] Fortin D, Lamy JFL, Thalmann D (1983) A Multiple Track Animator System for Motion Synchronisation, *Proc. ACM SIGGRAPH/SIGART Interdisciplinary Workshop on Motion, Representation and Perception*, Toronto, pp.180-186.
- [8] Hanrahan P Sturman D (1985) Interactive Animation of Parametric Models, *The Visual Computer*, Vol. 1, No4, pp.260-266.
- [9] Kochanek D, Bartels R (1984) Interpolating Splines with Local Tension, Continuity and Bias Tension, *Proc. SIGGRAPH '84*, pp.33-41.
- [10] Landsdown J (1982) Computer-aided Animation, a Concise Review, *Proc. Computer Graphics '82, Online Conf.*, pp.279-290.
- [11] Magnenat-Thalmann N, Thalmann D (1983) The Use of High Level Graphical Types in the MIRA Animation System, *IEEE Computer Graphics and Applications*, Vol. 3, No 9, pp.916.
- [12] Magnenat-Thalmann N, Thalmann D (1985) *Computer Animation, Theory and Practice*, Springer, Tokyo New York Berlin Heidelberg.
- [13] Magnenat-Thalmann N, Thalmann D (1985a) Controlling Evolution and Motion using the CINEMIRA-2 Animation Sublanguage, *Computer-generated Images*, Springer Tokyo Berlin Heidelberg New York, pp.249-259.
- [14] Magnenat-Thalmann N, Thalmann D, Fortin M (1985) MIRANIM, An Extensible Director-Oriented System for the Animation of Realistic Images, *IEEE Computer Graphics and Applications*, Vol. 5, No 3, pp.61-73.
- [15] Magnenat-Thalmann N, Thalmann D, Fortin M, Langlois L (1984) MIRA-SHADING, A Language for the Synthesis and the Animation of Realistic Images, *Frontiers in Computer Graphics* (Ed, TL Kunii), Springer Tokyo Berlin Heidelberg New York, pp.101-113.
- [16] Parke FI (1982) Parameterized Models for Facial Animation, *IEEE Computer Graphics and Applications*, Vol.2, No9, pp.61-68.
- [17] Reeves W (1981) Inbetweening for Computer Animation Utilizing Moving Point Constraints, *Proc. SIGGRAPH '81*, Vol.15, No3, pp.263-269.
- [18] Reynolds CW (1982) Computer Animation with Scripts and Actors, *Proc. SIGGRAPH'82*, pp.283-296.
- [19] Steketee SN, Badler NI (1985) Parametric Keyframe Interpolation Incorporating Kinetic Adjustment and Phrasing Control, *Proc. SIGGRAPH '85*, pp.255-262.

[20] Wilhelms JP, Barsky BA (1985) Using Dynamic Analysis to Animate Articulated Bodies such as Humans and Robots, Computer-generated Images (Eds. N Magnenat-Thalmann and D Thalmann), Springer Tokyo Berlin Heidelberg New York, pp.209-229.

[21] Zeltzer D (1985) Towards an Integrated View of 3D Computer Animation, The Visual Computer, Springer, Vol. 1, No4, pp.249-259.

张莉莉 译

王世运, 校

网格级造型中分子形体嵌套与动画

法国拓扑结构与动态系统研究所

J—E Dubis, S、Y、yue, J—P Doucet

摘 要

本文介绍了一种能够实现各种不同结构化形体(分子体)和特性形体(单电子特性、静电势等)表示法三维或二维图形显示的计算机系统。计算空间是与分子坐标相联系的,所以要在被组构成一个三维网格的表示空间中加以综合性处理。有了三维网格坐标,我们就能够通过会话式图形子系统实行布尔运算和几何运算,能够产生出直接图象,子图象和组合图象,处理数据及图象。本文提出的多级造型系统—POLYMOD能对通常需要作大量计算的造型实行快速的原始动画操作。

关键字: 表示空间, 分子多级造型, 三维网格, 布若运算, 组合图象。

导 言

在我们对世界的观察中,化学和生物学起着十分特殊非常引人注目的作用。在宏观世界中,物体运动缓慢,平静,活动范围无限大。但是,这个世界中的各种物体却是真实的。与此相反,在微观世界中,物体运动相互关联,但带有一定偶然性。微观物体十分小,与普通的宏观物体不可同日而语。

微观世界

微观世界是分子,原子和电子的世界。为了说明分子的运动,我们应能构造出每一个分子,使之动画化,进行实际观察。在分子虚构阶段,我们必须产生出一种符号表示,观察隋性物质和生物的活动情况。分子具有物理形态,所以我们不仅要把这种形态甚至分子的特性也都直观地表示出来。我们对分子运动的了解是以对分子形态的识别为基础的,因此,我们应对这些对话形式作深入的了解。宇航员能进入宇宙航行,建筑师能观察到他所设计的房屋。而化学家却看不到分子,即使是大分子也无法观察出来。

分子理论上的形态

为了说明分子世界的本质，人们提出了分子世界各成分的若干表示方法。例如，人们根据理论或推理方法提出了分子的一般形式。这种形式既可以是一种表示符号，也可以看成是分子的“真实”形态。虽然恢复这种表示法的物理面貌是十分重要的，但形态表示法仍然是不可缺少的。在人们所掌握的有关分子的知识中，示意图和公式是极为重要的部分。这就是分子计算机图形（MCG）能够成为解释分子世界的不可缺少的补充工具的原因。

分子计算机图形是从第一批分子式开始的，它被人们看成是分子的真正表意图形，而且发展速度很快，几乎与化学基本概念的详细文字说明是同步发展的。分子计算机图形因能理论上的概念作形象化表述，并能将一些通俗的描述运用于计算机辅助概念化面表现得更为直观化。

分子计算机图形的形成及其特点

计算机图形问世后，化学成为静态和动态图形系统的理想潜在应用领域。计算机图形在这一领域的应用基本上是以生物大分子开始的（MAC Program 1966）（2）。最初，因为难以实现分子信息的交换，所以化学家们只得将图形公式翻译成某种语言，然后变换成系统代码。这项工作是在DARC系统上实现的（3—5）。我们早在一九六六年就提出所有文件编制工作均应采用图形形式的问答方式。我们当时采取的办法是先生成图形公式的网络矩阵和DARC拓扑码，然后用户借用图形输入输出设备与位于字符数据库和图象数据库中间的大型数据库进行通信（6、7）。文件无论有多大，但它只涉及到分子化学中的某个方面。虽然我们在分析物质世界的全部特点时需要考虑多种表示方法，但此时只用到其中很小一部分。分子计算机图形目前出现的复杂情况能方便地运用化学的形态结构化表示法或特性表示法加以分析。目前，这两种表示法均依赖于复杂的图形支撑能力，有时还需要作复杂的计算。

分子信息源与分子计算机图形

我们能够运用理论方法（量子力学、分子力学等）或实验方法（X—光、核磁共振、反应等）获得分子的结构化形态及表现分子特性的形态，但无论采用哪种方法均需利用变量逼近法。所以，我们运用对话式图形对不同的情况进行说明。“先找出解决问题的方法，然后作直观比较，这是运用计算机图形观察问题的法宝。更确切地说，计算机图形应能够在需要时把某些固定的环境显示在屏幕上，能在人机对话时把握住直观感觉的关键时刻。因为这时一幅特定的图象可能会产生出一种具有创造性的新思想。”（8）

颜色虽然能帮助我们识别数据，但环境往往会因为出现的信息太多（距离，角度，曲面、局部地点等）而显得异常复杂。假若此时没有一种适当的工具对各类不同信息加以处理，准确无误地检出这些信息，并在某特定时间快速显示出必要的信息，则图形显示器的负

担就会过重。分子计算机图形具有这样的一些输出（能完成字符插入，缩放，剪取等）。但是这些只是处理分子“活动木偶”的有用工具（9）。分子“活动木偶”已通过不同的软件程序实现了动画化。为了把“活动木偶”的相关动作贯通起来，必须提供合适于它们活动及便于控制它们的舞台。这种舞台应布置得很周密，便于可能会被使用的表示法完成相互变换。

三维工作空间

POLYMOD提供了这样的舞台，能按照不同表示法完成多级造型的交互作用。此系统虽然是一种专用系统，但仍不失为具有高度综合性的分子图形和计算管理通用系统。所组成的三维工作空间可以看成是一个工作框（BOX），或者是一个三维分子图形窗口或一个三维帧（FRAME）。工作空间内嵌入不同的分子表示。如果分子线度过大，则采用分子结构变换办法，运用此框对大分子如蛋白质分子进行扫描。

针对两种不同情况，工作框有以下两种不同的工作方式：

1) 静态方式。三维分子图形窗口用来对一种或若干种结构（分子体及特性形态）完成几何运算和布尔运算。

2) 动态方式。设计动态模拟，通过动画观察研究造型的相互影响。

应该说明的是，安排这类三维空间的目的是为了能够处理有关分子形态的数值信息，使用户能采用对话方式来观察分子的几何形态和拓扑形态，无论这些形态是推导出来的还是辅助性的。这时系统应根据用户要求生成有关距离，表面，体积及关系的数字信息。只有合成图象才是实现各种动画的唯一手段。例如，两片相接近的止痛片的三维显示图象是以用来区别它们形态上的差异（图1）。而止痛片的二维分子式只能揭示是否含有甲基。此例子还说明了分子叠加的实际操作中这种简单形体的重要性。若表示法太复杂，如空域填充表示，则产生的直观显示不会这么引人注目。

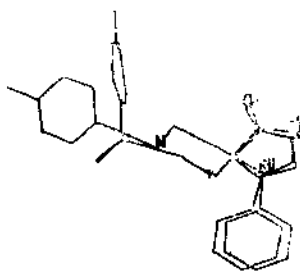


图1 两相接近止痛药图形叠加

化学形体及其基本结构

a) 结构化形态或体

我们利用计算机图形能获得不同复杂程度的表示法。最简单的造型所表示的是原子按一般构成法则构成分子。这些分子在标准状态下具有一定的形状和固定的大小。线型表示法能使我们根据标出的颜色及原子间的关系了解原子的性质。而空域填充表示法的目的在于获得更真实的表示或了解分子的体积。原子的Van der waals半径联运算所获得的曲面被看成是一种分子形态和体积的符号表示（10）。

这些表示法对于确定结构化形态的几何性质是很有价值的。例如，对药物受体相互作用

的研究就是如此。对于孤立的分子，或者在受体接近分子时可能会改变此分子形态情况下，通常要利用这些表示法找出一个特权几何图形（优先形态）。

生物大分子太复杂，其原子无法实现个体化，这时采用完整的表示法很困难，应运用图元（预先设计的标准图形符号）。并对描述性结构化图元作若干简化处理（如利用符号对蛋白质的氨基酸编码）或利用图符（带形、圆柱等）能克服这一困难。这些表示方法集中反映了形态学的基本特征。克服这一问题另一方法是采用计算机技术，采用局部窗口或放大（图3）。

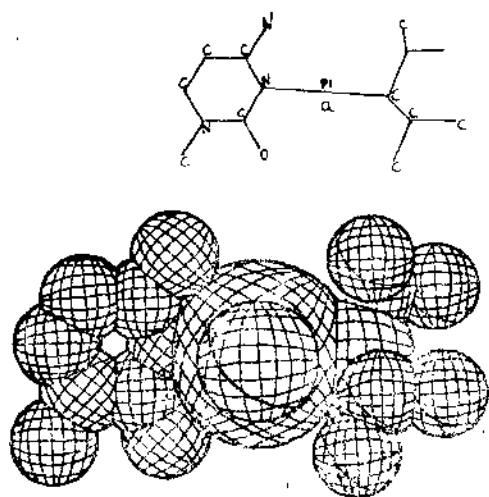


图2 铂络合物的线型表示法和空域填充表示法

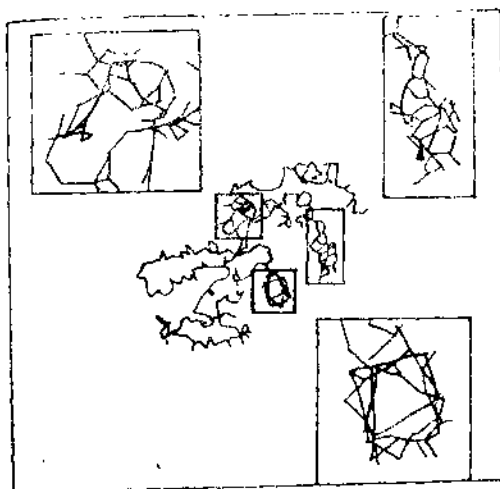


图3 多肽显示图中抽出几部放大

特性形态

分子图形的基本优点之一是能够在分子的符号结构化形态上叠加一个表现分子在所处环境中行为特点的特征形态。采用几何结构表示法（空域填充模型或Van der waals 曲面）能得到相应的拓扑结构和化学或生物效能。但是，利用特性（主要是电子特性）也能做到这一点，因为这种特性反映了分子对外部干扰的敏感性。

亲水性往往只是以原子性质开始进行描述的。但更经常的情况是运用量子化学的电子指数来定义或预测反应系统的作用。因此，电子的空间分布取决于电子密度。分子中电荷分布使得该分子具有相对于相邻分子的静电势。受体或结合部位能感受到的也正是这种静电势（11、12）。

电子畸变密度（即分子与其孤立原子间的电子密度差）能用来与结晶实验数据相比较，所以它们所起的作用十分重要（13）。与磁体形成明显的对照，分子合成图象揭示了两个事实，即从理论分析和实验结果来看，分子是肉眼看不到的，但又是实际存在着的。而磁体本

身是可见的, 磁作用则是不可见的, 只有在把铁粉撒入磁场才能看清磁的作用。

POLYMOD系统

我们所开发的POLYMOD系统能灵活地实现分子行为函数的种种显示, 可用来对电子特性(如分子静电势)作二维或三维直观显示, 还能处理几何结构描述符(距离, 表面, 体积等)。

本系统的一项重要工作是在一个唯一表示空间(R)中研究分子。此空间被划分成一个正交网格, 构成一个三维网格即三维网络。网络的结点作为观察点, 用来计算出所要寻求的特性点。如果此网络中平行于三轴的各线是已知的, 显然, 观察点的下标三元组(i, j, k)是固定的, 它在表示空间中的位置是唯一的。对于中等大小的分子, 采用100×100×100网络, 网络线为0.2Å, 占用计算机的时间会较少, 同时也能达到所要求的精度。

坐标变换程序使表示空间R和计算空间C之间的对应关系得到保证。

—表示空间(R): 用以定义观察点, 局部处理, 图象生成与处理。

—计算空间(C): 与分子的原始坐标系有关。

在定义了此唯一表示空间R后, 我们就有可能使用以不同坐标系表示的各种数据, 便于我们对分子作分析比较。此方法特别适合于由图形子系统控制的简单运算。

有的论文(14)建议用一个虚拟空间来表示分子, 并结合运用二进制编码, 以便能把分子形体看成一个实体, 并用Van der waals半径表示, 进而对其进行布尔运算。我们的系统也能处理定量电子信息, 但采用的是这样的表示法, 即在产生新的直观显示图象之前, 对于量子力学程序不需要占用系统资源。

POLYMOD系统框图如图4所示。图中箭头表示向以下基本处理过程传送主要输入项(分子坐标等)的方向:

—通过BOX(框)生成器生成GEO BOX文件。

—分子波函数运算。

—表示空间R与计算空间C间的坐标变换, 电子特征计算。

—局部处理, 图象生成与处理。

求和运算与电子特性的确定

在STO 3G级上通过GAUSSIAN80程序(版本D)来完成分子波函数运算。分子坐标由结晶结果或能量最小值计算(找出较佳结构)求出。或者通过更简单的办法, 直接从键长度和角度值演绎出来。

在与分子相邻近的P点上, 分子静电势作为一个探针使用, 用来测量该分子与P点单正点电荷间的静电能。此静电势可以看成是一个带正电荷的试剂接近该分子时所感受到的作用力。所以, 它通常被认为是这种相互作用力的品质反作用力指数(11)。

$$VP = - \int \frac{\rho(P')}{r_{pp'}} d\tau(P') + \sum_n \frac{Z_n}{r_{pn}}$$

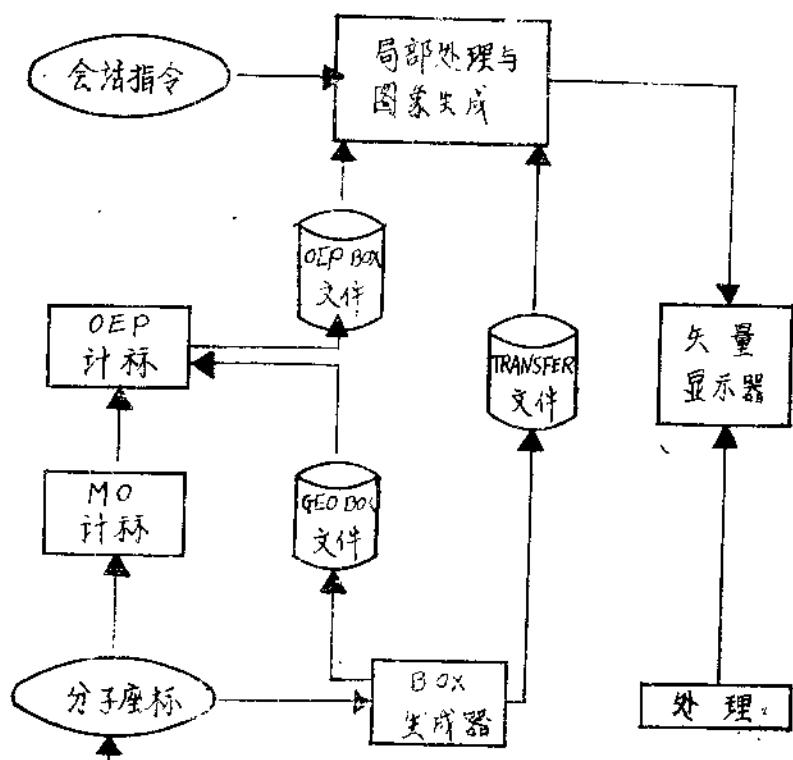


图4 POLYMOD系统框图(箭头表示数据流向)

式中第二项(全部原子核求和公式)表示换点电荷的排斥力。 z_i 是原子核电荷, r_{pi} 是原子核到点电荷间的距离。第一项是整个空间积分运算公式,表示电子点电荷的引力。 $\rho(p')$ 为 p 点上的电子密度, $r_{pp'}$ 为 p 点到电荷间的距离。

计算空间与表示空间

原始数据是通过分子几何图形获得的。这就决定了要用计算空间 C 来完成波函数运算,确定电子特性。在此阶段,能够作几何优化或图形交互式旋转,以求达到较好地处理分子框架图形。然后,选择一个观察窗即框来组构表示空间 R ,具体做法是按照被选择框的边划分网格线,组成一个观察点的三维网络,形成表示空间 R 。

计算空间 C 和表示空间 R 间的对应关系由一个“框生成”程序给予保证。就是说,此程序按原始分子相对应的参考标记(C 空间)来定义表示空间 R 。反之,它能把 C 空间中定义的分子用 R 空间表示出来。然后在计算空间 C 中(原始分子坐标有联系的参考标记)实现观察结点坐标(R 空间中的标记)的平移变换。

因此,需要生成一个“GEO BOX”文件,借以示每一个观察结点。这些结点在 R 空间中要按照其下标三元组的值(i, j, k)即这些点在 C 空间的坐标值大小排序。第二个文件是