# Визуализация Пятикомпонентных Систем в Проекциях Пентатопа

В.И. Луцык, В.П.Воробьева, А.Э.Зеленая
Улан-Удэ, Отдел физических проблем БНЦ СО РАН

Для изображения многокомпонентных систем используются многомерные полиэдры. С возникновением компьютерной графики появилась необходимость проанализировать использовавшиеся ранее алгоритмы их визуализации и создать соответствующие программные продукты. Проиллюстрируем наши результаты в этой области на примере пятерных изобарных диаграмм состояния, изображаемых пятимерной призмой с основанием в виде четырехмерного пентатопа и ортогональной ей осью температур.

Визуализировать пентатоп можно разрезами или проецированием из исходного четырехмерного пространства x-y-z-u в трех- (xyz, xyu, xzu, yzu) и двухмерные (xy, xz, yz, иx, иу, uz) пространства- Вид проекций зависит от расположения пентатопа и определяется по трем его вершинам. При известных координатах двух вершин необходимо знать расположение еще одной вершины (она может быть с ними а одной координатной плоскости, может принадлежать ребру параллельной плоскости, ...). Тогда координаты третьей и последующих вершин рассчитываются по длине ребра (по расстоянию между двумя точками n-мерного пространства);

$$d^2 = \sum_{i=1}^{n} (x_i - y_i)^2 \qquad (1)$$

1. Пусть C совпадает с началом координат, AC лежит на оси x, ABC принадлежит плоскости xy (такая установка рассматривалась В.П. Радищевым и Ф.М. Перельман [1-2]). Тогда, рассчитывая по (1), получим следующие координаты вершин пентатопа

| Координаты | Вершины | | | | |
|---|---|---|---|---|---|
| | A | B | C | D | F |
| x | 1 | 1/2 | 0 | 1/2 | 1/2 |
| y | 0 | $\sqrt{3}/2$ | 0 | $\sqrt{3}/6$ | $\sqrt{3}/6$ |
| z | 0 | 0 | 0 | $\sqrt{2/3}$ | $\sqrt{3}/6\sqrt{2}$ |
| u | 0 | 0 | 0 | 0 | $\sqrt{5}/2\sqrt{2}$ |

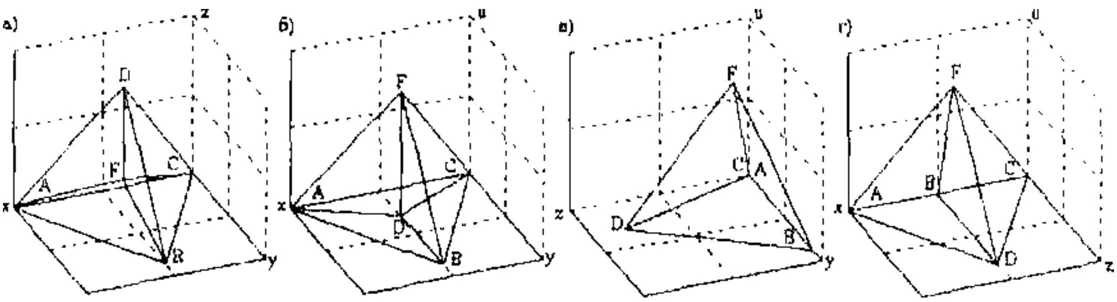

Рис. 1. Трехмерные проекции: а)xyz; б)xyu; в)yzu; г)xzu

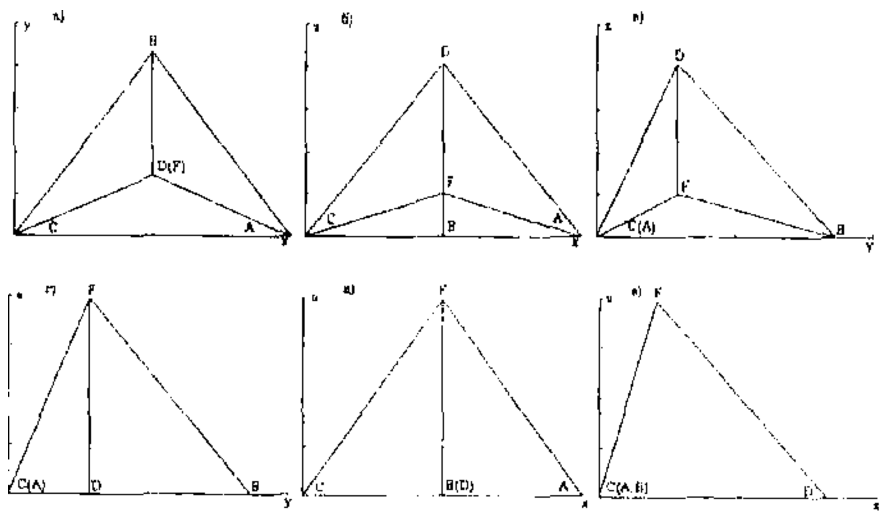

Рис.2. Двухмерные проекции: а)xy; б)xz; в)yz; г)yu; д)xu; е)zu

Трехмерная проекция (рис. 1) представляет собой тетраэдр с пятой вершиной: в его центре (а), в центре грани на плоскости xy (б), в центре координат (в) или посредине ребра на оси x (г). Двухмерные проекции - треугольники различной формы с определенным расположением остальных двух вершин (рис. 2). Из них только проекция на плоскость xu (рис. 2,е) обладает свойством оптимальности [2, с. 11].

2. Д.А. Петров [3] рассматривал такое положение тетраэдра, когда AC в плоскости xy параллельно оси x, $y_C = y_A = 1/2$, а BD || xy. Полученные трехмерные проекции - три тетраэдра и квадратная пирамида. Пятая вершина расположена либо внутри тетраэдра, либо совпадает с одной из вершин на оси y или плоскости xz. Двухмерные проекции - квадрат и треугольники, один из которых тоже относится к оптимальным.

Если AC повернуть в плоскости xy так, что $x_A = y_C = 1/\sqrt{2}$ и $y_A = x_C = 0$, то получим трех- и двухмерные проекции, аналогичные рассмотренным выше.

3. Еще один вид установки, когда угол между AC в плоскости xy и осью x составляет 45°, а ребро BD||xy, рассматривался в [5]. Трехмерные проекции выглядят как тетраэдр с пятой вершиной в центре и три квадратные пирамиды. Двухмерные проекции - 3 квадрата и 3 треугольника со свойствами оптимальности (по Ф.М. Перельман).

4. Еще один вариант установки [4] - центр декартовой системы координат совпадает с центром тетраэдра, а плоскость xy параллельна основанию ABC. Избавившись от отрицательных значений получаем проекции совпадающие с первым вариантом установки.

Часто возникает необходимость повернуть трехмерную проекцию пентатопа относительно системы координат для лучшей иллюстрации проецируемых на него фазовых равновесий. Принцип поворота пентатопа основан на алгоритме, рассмотренном в [5] для тетраэдра. Сначала определяем начальное положение пентатопа. Пусть A совпадает с началом координат, AC лежит на оси x, ABC - в плоскости xy. Вращение вокруг вершины A осуществляется изменением: угла α между осью x и проекцией ребра AC на плоскость xy, угла β между AC и плоскостью xy и угла γ между AB и плоскостью xy. Координаты вершин B и C определяются из соотношения между декартовыми и сферическими координатами, а для нахождения координат D и F составляется система уравнений по (1).

Еще один вариант установки рассмотрен в [6], где центр тетраэдра совпадает с началом координат (O), а одна из вершин (A) лежит на оси z. Координаты вершин определяются из соотношения между декартовыми и сферическими координатами, аналогично первому случаю. Уравнения задаются относительно: α - угол AOB; φ - угол между координатной плоскостью zy и плоскостью, содержащей O, A и B; θ - угол между OA и осью z.

-для A: $x_A = 0$; $y_A = 0$; $z_A = r$;

-для B: $x_B = r * \sin\alpha * \sin\varphi$; $y_B = r * \sin\alpha * \cos\varphi$;

$r_B = r * \cos\alpha$;

Координаты C и D получим подставляя (φ+120°) и (φ+240°) в уравнения для B. После поворота тетраэдра вокруг оси y на угол θ получим набор новых координат, связанных со старыми соотношением:

x'=x*cosθ+z*cosθ; y'=y; z'=-x*sinθ+z*cosθ.

Изменение φ и θ определяет поворот тетраэдра относительно координатных осей.

На базе рассмотренных алгоритмов расчета вершин пентатопа создано программное обеспечение, которое отображает его трех- и двухмерные проекции при четырех вариантах установки, генерирует проекции пентатопа при вводимых пользователем координат любых трех вершин, позволяет повернуть трехмерную проекцию пентатопа относительно системы координат в зависимости от вводимых углов α,β и γ.

Такой подход плодотворен для визуализации не только пентатопа (и проецируемых в него свойств пятикомпонентных смесей), но и других многомерных полиэдров [7].

Работа выполнена при поддержке РФФИ: проекты 96-05-66036 и 98-03-32844а.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. В.П.Радищев. О применении геометрии четырех измерений к построению равновесных физико-химических диаграмм // Изв. СФХА. -1947. -Т.15, № 5. –С. 5-35.

2. Ф.М.Перельман. Изображение химических систем с любым числом компонентов. М.: Наука. -1965. -100 С.

3. Д.А.Петров. Четверные системы (новый подход к моделированию и анализу). М.: Металлургия. -1991. -284 С.

4. А.И.Малахов. Теоретические основы многомерной геометрии и их приложения. Изд-во Саратовского ун-та.-1990.-112 С.

5. В.И.Луцык, В.П.Воробьева. Отображение машинной графикой диаграмм четверных систем в проекциях концентрационного тетраэдра // Ж. неорг. химии. -1994. -Т. 39, № 5. -С. 850-854.

6. Armienti P. Tetrasez: An interactive program in Basic to perform tetrahedral diagrams// Computers and Geosciences, -1986.-V.12, №2.-P.229-241.

7. А.Э.Зеленая, В.И.Луцык, В.П.Воробьева. Проективные особенности многомерных полиэдров в барицентрической системе координат //Тезисы Всероссийской научно-техн. конференции "Роль геометрии в искусственном интеллекте и системах автоматизированного проектирования ", 25-28 июня 1996, Улан-Удэ. –С. 133-136.

## Visualizafion Of Five-component Systems On The Pentatop's Projections

*V.I. Lulsyk, V.P. Vorob'eva. A.E. Zelenaya*

Multicomponent polyhedrons have been used in different fields (materials science, petrology, metallurgy, chemical technology) to plot points representing multicomponent mixtures. Inside the polyhedron different quantitative properties (their projections) may be plotted too. The algorithms to rotate and to produce any 2D and 3D projections of pentatop as the most simple polyhedron are discussed.

E-mail: lutsyk@bien.buriatia.su