

# DAUGIAMAČIŲ DUOMENŲ VIZUALIZAVIMAS TRIMATĖJE ERDVĖJE NAUDOJANT 3D PRIEMONES

Agnė Dzidolikaitė, Julius Žilinskas

Vilniaus universitetas, VU Matematikos ir informatikos institutas

## Įvadas

Daugiamatės skalės – tai vienas iš daugiamačių duomenų vizualizavimo metodų [1]. Šis metodas plačiai žinomas, gal už jį geriau žinomas tik seniau sukurtas pagrindinių komponentų metodas. Daugiamatės skalės priskiriamos prie duomenų dimensijos mažinimo metodų. Nors daugiamatės skalės dažniausiai vartojamos objektams dviejų matmenų erdvėje atvaizduoti, vis labiau populiarėja ir trimatis vaizdavimas. Tai lemia trimačio vaizdavimo priemonių tobulėjimas ir plėtojimas. Šiuolaikinė stereoskopija gerokai pažengusi ir vis atsiranda ją palaikančios naujos techninės bei programinės įrangos. Naujasis stereoskopijos pasiekimas yra autostereoskopija, kai trimatį vaizdą galima stebėti tiesiog kompiuterio monitoriuje ar televizoriaus ekrane. Žinoma, tam reikalingas specialus ekranas, vaizdo plokštė ir atitinkama programinė įranga. Autostereoskopinėms programoms kurti galima pasitelkti OpenGL grafikos biblioteką. Pastaroji įgalina kurti aukšto lygio ir įvairaus sudėtingumo grafines programas. Be autostereoskopinio vaizdavimo, esama ir kitų stereoskopijos metodų, kaip antai: anaglifiniai vaizdai, kurie peržiūrimi spalvotais akiniais, ar paveikslai, sudaryti iš dviejų greta esančių vaizdų. Tokių „dvigubų“ paveikslų peržiūrai nereikalinga jokia papildoma įranga, bet žiūrovas turi žvelgti tam tikru būdu, kad iš dviejų plokštuminių vaizdų susidarytų trimatiškumo įspūdis. Be abejo, kad taip pavyktų pamatyti stereo vaizdą, gali tekti pasitreniruoti.

## Daugiamatės skalės

Dabar plačiau aptarkime daugiamačią skalę, kurios sutrumpintai vadinamos DS. DS – tai metodas, taikomas duomenims analizuoti ir vizualizuoti ekonomikoje, duomenų tyryboje, psichometrijoje, ekologijoje, farmacijoje, medicinoje ir t. t.

DS atvaizduoja panašumus (arba skirtingumus) tarp dviejų objektų kaip atstumą tarp šių taškų mažesnio skaičiaus matmenų erdvėje (dažniausiai  $R^2$  arba  $R^3$ ), vadinamojoje projekcijos erdvėje. Stebint gautą projekciją Euklidinėje plokštumoje arba erdvėje, galima spręsti apie objektų tarpusavio santykį bei jų formuojamas struktūras. Manoma, kad mažai nutolę vienas nuo kito taškai projekcijos erdvėje vaizduoja panašius ir artimus pagal savo požymius objektus.

Pradiniai daugiamačių skalių metodo duomenys yra kvadratinė simetrinė matrica, kurios elementai nusako analizuojamų objektų panašumą (skirtingumą). Paprasčiausiu atveju – tai Euklido atstumų tarp objektų matrica. Tačiau bendroju atveju, tai nebūtinai turi būti atstumai griežtai matematinė prasme.

Vienas daugiamačių skalių metodų tikslų – rasti optimalų daugiamačių objektus atitinkančių taškų (vektorių) vaizdą mažesnio skaičiaus matmenų erdvėje.

Tarkime, kad kiekvieną  $n$ -matį vektorių  $X_i \in R^n$ ,  $i \in \{1, \dots, m\}$ , atitinka mažesnio skaičiaus matmenų vektorius  $Y_i \in R^d$ ,  $d < n$ . Atstumą tarp vektorių  $X_i$  ir  $X_j$ , vadinamą skirtingumu, pažymėkime  $\delta_{ij}$ , o atstumą tarp vektorių  $Y_i$  ir  $Y_j$  –  $d(Y_i, Y_j)$ ,  $i, j = 1, \dots, m$ .

Naudojantis DS algoritmu, bandoma atstumus  $d(Y_i, Y_j)$  priartinti prie skirtingumų  $\delta_{ij}$ . Jei naudojama kvadratinė paklaidos funkcija, tai minimizuojama tikslo funkcija  $E_{DS}$  gali būti užrašyta taip:

$$E_{DS} = \sum_{i < j} w_{ij} (d(Y_i, Y_j) - \delta_{ij})^2.$$

Taip pat dar yra normuotoji mažiausių kvadratų funkcija, kuri lygi

$$\frac{\sum_{i < j} w_{ij} (d(Y_i, Y_j) - \delta_{ij})^2}{\sum_{i < j} w_{ij} \delta_{ij}^2}.$$

Paklaidos funkcija dar vadinama *Stress* (įtempimo) funkcija. Tai yra santykinė paklaida, kurios formulė pateikiama žemiau:

$$E_{Stress} = \sqrt{\frac{\sum_{i < j} w_{ij} (d(Y_i, Y_j) - \delta_{ij})^2}{\sum_{i < j} w_{ij} \delta_{ij}^2}}.$$

Įtempimo funkciją minimizuoti gana sudėtinga, nes:

- yra daug minimumų taškų, o interpretuojant skirtingų lokaliųjų minimumų taškus atitinkančius vaizdus, gaunami skirtingi rezultatai, todėl svarbu rasti globalųjį minimumą ir jį atitinkantį vaizdą;

- praktinių uždavinių minimizavimo kintamųjų skaičius paprastai yra didelis;
- įtempimo funkcija ne visur diferencijuojama;
- įtempimo funkcija yra invariantinė perkėlimo, sukimo ir atspindžių atžvilgiu.

Straipsnyje [4] parodyta DS paklaidos priklausomybė nuo vaizdo erdvės matmenų skaičiaus  $d$ . Pastebėta, kad santykinės paklaidos mažėja didinant vaizdo erdvės matmenų skaičių  $d$ . Beje, paklaida pastebimai mažėja ne tik pereinant nuo vienmatės skalės prie dvimatės, bet ir – nuo dvimatės prie trimatės. Tai svarbu erdvinio vizualizavimo priemonių panaudojimui pagrįsti.

Daugiamatės skales galima vizualizuoti taikant kombinatorinį evoliucinį algoritmą [5]. Šiuo atveju evoliucinė paieška naudojama viršutinio lygmens kombinatorinio uždavinio sprendimui dviejų lygmenų minimizavimo algoritme su miesto kvartalo atstumais. Kėlinių rinkinys  $P$  sudaro individams atstovaujančias chromosomas.

Populiacija vystosi generuojant palikuonį iš dviejų atsitiktinių populiacijos individų. Palikuonio chromosoma randama pagal šią formulę:

$$P_k = (\hat{p}_{k1}, \dots, \hat{p}_{k\beta}, \tilde{p}_{k1}, \dots, \tilde{p}_{k(\gamma-\beta)}, \hat{p}_{k\gamma}, \dots, \hat{p}_{km}),$$

$$k = 1, \dots, d,$$

Čia  $\beta$  ir  $\gamma$  yra du atsitiktiniai skaičiai iš  $\{1, \dots, m\}$ ,  $P_k$  – vieno atsitiktinio esamos populiacijos individo chromosoma, o  $\hat{p}_{k1}$  – skaičiai iš aibės  $\{1, \dots, m\}$ , nepriklausantys aibei  $\{\hat{p}_{k1}, \dots, \hat{p}_{k\beta}, \hat{p}_{k\gamma}, \dots, \hat{p}_{km}\}$  ir surikiuoti kaip ir antro atsitiktinio esamos populiacijos individo chromosomoje.

Palikuonis gerinamas taikant lokalią paiešką, pagrįstą kvadratinio programavimu. Palikuonio tinkamumas lygus įtempimo funkcijos reikšmei atitinkamo apatinio lygmens kvadratinio programavimo uždavinio minimumo taške.

## Erdvinis vaizdavimas

Žodis *stereo* kilęs iš graikų kalbos ir reiškia „susijęs su erdve“. Šiandien dažniausiai kalbama apie stereofoninį garsą. Iš pradžių šis terminas buvo susijęs su stereoskopiniais paveikslais, kurie buvo piešti arba fotografuoti. Siekiant nepainioti su stereofoniniu garsu, kalbant apie paveikslus arba filmus, vartojamas terminas 3D čia 3D reiškia trijų dimensijų (matmenų) vaizdavimą.

Stereoskopija – tai vaizdinės medžiagos atvaizdavimo būdas, suteikiant jai realų trimatiškumo (3D) ir gylio išpūdį. Šis efektas pasiekiamas kiekvienai akiai pateikiant skirtingą paveikslą. Kiekviename paveiksle atvaizduotas tas pats objektas tik pasuktas kiek kitu kampu.

Perspektyva dažnai painiojama su stereosko-

pija. Tai nėra teisinga, nes perspektyvoje trečioji dimensija (gylis) yra „simuliuojama“.

Žmogus gyvena trijų matmenų aplinkoje. Neturėdami erdvės supratimo, mes negalime joje judėti. Mūsų erdvės suvokimas sukuriamas daugiausia akimis. Yra daug būdų orientuotis erdvėje: pagal perspektyvą, spalvą, kontrastą, judesį.

Įprastas paveikslas ant popieriaus arba filmas skirti tik vienai akiai. Nuotrauka, nufotografuota tik su vieno lęšio kamera, neperteikia tikro erdvinio vaizdo ir yra plokščia. Kameroje naudojant du lęšius, imituojamos akys ir gaunamas erdvinis vaizdas. Kai žiūrime į stereoskopinį paveikslą, mūsų smegenyse sukuriamas trimatis vaizdas. Stereoskopinė fotografija kopijuoja žmogaus žiūrėjimą į trimatį objektą, imdama porą fotografijų, atskirtų atstumu, lygiu atstumui tarp žmogaus akių. Tada po vieną fotografiją pateikiama kairei ir dešinei akims ir smegenyse sukuriamas trimatis vaizdas. Tam, kad būtų matomas trimatis vaizdas, kiekviena akis turi matyti šiek tiek kitokią vaizdą. Tikrovėje žmogaus akys yra nutolusios apie 5 centimetrus viena nuo kitos, todėl kiekviena akis mato šiek tiek kitokią vaizdą. Tai vadinama binokulariniu regėjimu. Smegenys „sudedą“ du vaizdus, kad gautų erdvinį vaizdą.

Stereoskopinis vaizdas gaunamas taikant fotografiją, kompiuterius ar lazerius. 3D vaizdai gali būti peržiūrėti naudojantis stereoskopu (pavyzdžiui, skaidrės) arba kompiuterio monitoriuje. Taip pat yra anaglifinių paveikslų (Anaglifiniai vaizdai – tai vaizdai, sudaryti iš dviejų sutampančių vaizdų, kurių vienas paprastai raudonas, o kitas – žalias arba mėlynas. Taip sukuriamas stereoeфекtas. Į šiuos paveikslus reikia žiūrėti pro raudonai žalius arba raudonai mėlynus 3D akinius) bei skaitmeninė stereo-projekcija (reikalingi arba „pasyvūs“ poliarizuoti 3D akiniai, arba „aktyvūs“ skystųjų kristalų akiniai).

Buvo kalbėta apie stereoskopiją. Dabar aptarkime autostereoskopiją. Autostereoskopija vadiname bet kurią metodą, kai 3D turinys peržiūrimas be 3D įrangos, pavyzdžiui, 3D akinių. Angliškai tai vadinama „Glasses-free 3D“ arba „Glasses-less 3D“. Ši nauja pažangi technologija įgalina kiekvieną akį peržiūrėti, būtent, jai skirtą vaizdą, kad būtų sukurtas stereoeфекtas.

Viena iš autostereoskopinių technologijų yra paralaksinis barjeras. Paralaksinis barjeras yra įrenginys, panašus į kaukę, kuris patalpintas priešais skystųjų kristalų ekraną ar šviesos šaltinį, kad nukreiptų pikselių stulpelių skleidžiamą šviesą į kiekvieną akį per jame esančius plyšius. Taigi, kiekviena akis mato skirtingą pikselių aibę, skirtą tai akiai, ir smegenyse susiformuoja trimatis vaizdas. Pagrindinis šio metodo trūkumas – žiūrovas turi būti

tam tikroje, iš anksto nustatytoje vietoje, kad patirtų 3D efektą. Jei judama, prarandama stereoiluzija. Paralaksinis barjeras leidžia persijungti nuo trimačio vaizdo į dvimatį. Tai atliekama nutraukiant įtampas tiekiamą barjerui ir jį išjungiant.

Autostereoskopija taikoma daugelyje sričių. Žinomiausi yra erdviniai paveikslai, filmai ir žaidimai. Paralaksinio barjero metodas naudojamas molekuliniam modeliavimui, oro uostų saugos sistemose.

## OpenGL grafinė biblioteka

OpenGL (angl. *Open Graphics Library*) – tai grafinės kompiuterio techninės įrangos programinė sąsaja [2]. Sąsaja susideda iš maždaug 150 funkcijų, kuriomis galima atvaizduoti grafinius objektus, su jais atlikti įvairias grafines operacijas, transformacijas, kurti aukštos kokybės grafinius vaizdus.

Iš programuotojo pusės OpenGL sąsają galima būtų apibūdinti kaip komandų, leidžiančių aprašyti dvimačius ar trimačius objektus, bei komandų, kurios nustato, kaip objektas vaizduojamas ekrane, t. y. patalpinamas į ekrano buferį, kuris saugomas operatyvinėje atmintyje, rinkinį. OpenGL yra momentinio režimo sąsaja. Tai reiškia, kad objekto aprašymas tolygus jo vaizdavimui į ekraną.

Daugelis grafinių objektų kompiuterinėje grafikoje sudaryti iš dvimačių dalių, kurios vaizduojamos dvimatėje ar trimatėje erdvėje. Dvimačių objektų dydis ir forma nusakomi dvimatėmis skaitinėmis reikšmėmis, susietomis su konkrečia koordinatinių sistema, pavyzdžiui, Dekarto koordinatinių sistema. Dvimatės dalys sudaromos iš primityvių grafinių figūrų (taškų, atkarpų, daugiakampių), kurios dar vadinamos grafiniais primityvais. Kiekvienas grafinis primityvas aprašomas viršūnių taškų koordinatėmis bei tokiais papildomais duomenimis kaip spalva, permatomumo laipsnis ir panašiai. Iš primityvų suformuojami dvimačiai objektai, su kuriais galima atlikti įvairias transformacijas: keisti jų dydį, padėti, formą ir t. t.

Grafiniai primityvai OpenGL metodais gali būti aprašomi viršūnių koordinatėmis, taikant metodą *glVertex()*. Naudojant *glVertex()* metodą, laikomasi reikalavimo, kad šis metodas būtų iškvietas tarp metodų *glBegin()* ir *glEnd()*. Šie metodai nurodo, kada pradedamas ir baigiamas grafinio primityvo aprašymas. Aprašomo primityvo tipas privalo būti nurodomas funkcijoje *glBegin()* ir tam OpenGL bibliotekoje yra dešimt konstantų. Kelios iš jų: `GL_POINTS`, `GL_LINES`, `GL_TRIANGLES`, `GL_POLYGON`.

Pats mažiausias ir nedalomas grafinis primityvas – *figūros taškas* (angl. pixel, picture element). Maksimalus taškų skaičius, kurį galima pavaizduoti

kompiuterio monitoriuje, yra susijęs su monitoriaus skiriamąja geba. Kuo didesnė monitoriaus skiriamoji geba, tuo daugiau taškų galima atvaizduoti. Kompiuterio monitoriaus taško adresas atitinka figūros taško koordinatės. Kompiuterinės grafikos vaizdai ekrane sukuriama atskirai valdant kiekvieno monitoriaus taško švytėjimo intensyvumą ir spalvą.

Kitas grafinis primityvas yra *atkarpos*. Atkarpos aprašomos dviejų taškų, priklausančių tai atkarpai, koordinatėmis (x, y), kur x žymi horizontalų atstumą nuo koordinatinių sistemos atskaitos taško, o y – vertikalų atstumą nuo koordinatinių sistemos pradžios.

OpenGL bibliotekoje atkarpa gali būti aprašoma grafinio primityvo konstanta `GL_LINES`. Ši konstanta žymi, kad pradžios ir pabaigos koordinatėmis bus aprašomos atskiros atkarpos. Atkarpos turi būti aprašomos tarp metodų *glBegin()* ir *glEnd()*.

Tokie grafiniai primityvai, kaip *apskritimai* ir *elipsės*, piešiami naudojant primityvą – atkarpa.

*Daugiakampis* yra pagrindinis paviršiaus primityvas. Daugiakampis gali būti aprašomas kaip atkarpų, besijungiančių galų taškais ir sudarančių uždara kontūrą, rinkinys. Jį taip pat galima aprašyti viršūnių taškais.

OpenGL priemonėmis grafiniams objektams aprašyti galima naudoti tik iškiluosius daugiakampius. Daugiakampiai, kaip ir atkarpos, gali būti aprašomi viršūnių taškų koordinatėmis, naudojant funkciją *glVertex()*. Daugiakampiams aprašyti taip pat naudojamos konstantos, pavyzdžiui: `GL_TRIANGLES`, `GL_QUADS`, `GL_POLYGON`.

Vaizduojamus objektus tenka ir spalvinti. OpenGL bibliotekoje spalvas galima aprašyti keliais formatais, vienas iš jų – RGB. RGB atveju spalva suformuojama maišant trijų spalvų reikšmes: raudonos, žalios ir mėlynos. Jeigu šias spalvas vaizduotume kaip realius skaičius, tai 0.0 reikštų mažiausią, o 1.0 didžiausią reikšmes. Šiuo atveju (1.0, 1.0, 1.0) atitiks baltą spalvą, o (0.0, 0.0, 0.0) – juodą spalvą.

OpenGL biblioteka veikia būsenu principu. Spalvos yra būsenos dalis. Taigi, figūroms piešti bus naudojama nustatyta piešimo spalva ir ji bus naudojama tol, kol nebus pakeista į kitą einamąją spalvą.

OpenGL biblioteka turi ir tam tikrą skaičių naudojimui paruoštų trimačių primityvų, tokių kaip: kubas, kūgis, sfera ir t. t. Taip pat yra ir sudėtingesnių figūrų: arbatinukas, toras. Minėtuosius objektus galima piešti arba kaip karkasines figūras, arba kaip užpildytas figūras.

Trimatėje erdvėje su objektais dažnai atliekamos įvairios transformacijos, pvz., pastumti ar pasukti objektą ir kt.

OpenGL bibliotekoje taško  $(x, y, z)$  postūmio į tašką  $(x', y', z')$  transformacija trimatėje koordinatinių sistemoje atliekama taikant metodą *glTranslate()*.

Trimačių objektų posūkis trimatėje erdvėje atliekamas posūkiu transformacijos veiksmams. Posūkiu transformacija trimatėje erdvėje sudėtingesnė negu dvimatėje, nes sukama ne taško, bet tiesės atžvilgiu. Be to, trimatį objektą ir reikiamas transformacijas trimatėje erdvėje sunkiau įsivaizduoti. Sukimas apie laisvai pasirinktą sukimo ašį trimatėje erdvėje atliekamas sukant apie vieną iš trijų koordinatinių sistemos ašių. Sukant tašką apie koordinatinių sistemos ašį, tą ašį atitinkanti taško koordinatė nekeičiama. Pavyzdžiui, sukant tašką apie  $x$  ašį, keisis taškų  $y$  ir  $z$  koordinatės, o taško  $x$  reikšmė nesikeis.

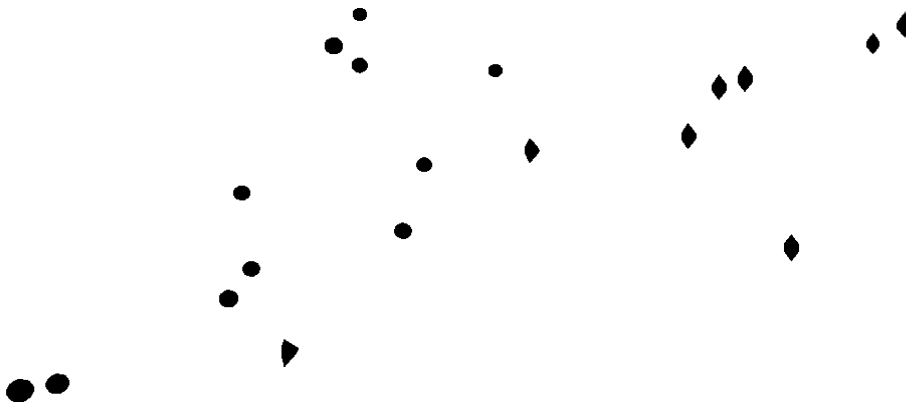
Atliekant kelias posūkiu transformacijas, svarbu nesupainioti jų tvarkos, priešingu atveju, skirsis ir galutiniai rezultatai. OpenGL bibliotekoje posūkiu transformacijas atlieka metodas *glRotate()*.

Nors naudojantis OpenGL grafine biblioteka galima kurti trimačius vaizdus, kompiuterio ekrane matoma trimatės vaizdo dvimatė projekcija. Norint matyti tikrą trimatį vaizdą, reikalinga speciali techninė ir programinė įranga. Neturint tokios įrangos,

taip pat galima kurti trimačius vaizdus. Tada reikia remtis stereofotografijos principu ir pateikti atskirą vaizdą kiekvienai akiai. Norint matyti taip sukurtą vaizdą reikia žiūrėti tam tikru būdu (abi akys lygia-grečiai žiūri į atskirus paveikslus arba akys sukryžiuojamos ir žvelgiama).

### Eksperimentinis tyrimas

Daugiamatės skales galima pritaikyti įvairiems duomenims vaizduoti. Viena iš tokių sričių – farmakologinis sąryšis [3]. Žmogaus organizme prie baltymų molekulių gali jungtis mažesnės ligandų molekulės, kurios yra natūralūs neurotransmiteriai, o taip pat ir vaistai, kurie, jungdamiesi prie baltymų, juos aktyvuoja arba blokuoja. Farmakologinio sąryšio vaizduose daugiakampiais vaizduosime aktyvuojančiuosius, o sferomis – blokuojančiuosius ligandus. Jei ligandai atvaizduoti trimatėje erdvėje, tai, sukant šį vaizdą įvairiomis kryptimis, galima atrasti tokią kryptį, kai bus matoma, jog aktyvuojančiuosius ir blokuojančius ligandus vaizduojančios figūros atsiskiria vienos nuo kitų. Taigi, aktyvuojančiuosius ir blokuojančiuosius ligandus galima atskirti.



1 pav. Farmakologinio sąryšio vaizdas



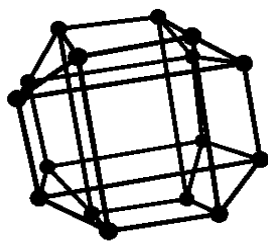
2 pav. Farmakologinio sąryšio vaizdas (žiūrėti per raudonai žalius akinius)

Taip pat trimatėje erdvėje taikant erdviniam vaizdavimui reikalingą techninę (speciali vaizdo plokštė ir erdvinis monitorius, naudojantis paralaksinį

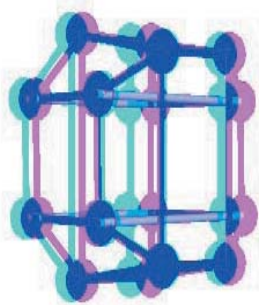
barjerą) ir programinę įrangą pavaizduoti keturmatis ir penkiamatis kubai, vadinamieji hiperkubai. Hiperkubas (daugiamatis kubas) yra kvadrato ir



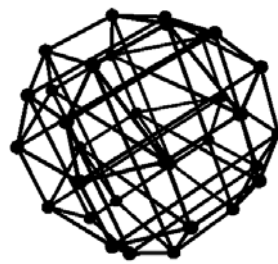
įprasto kubo apibendrinimas daugiamatėje erdvėje. Daugiamačio kubo viršūnių skaičius –  $m = 2^n$ . Sukant hiperkubą erdvėje, galima pamatyti, kaip jis atrodo, ir apžiūrėti iš visų pusių. Taip pat hiperkubų erdvinius vaizdus galima naudoti erdvinei geometrijai (stereometrijai) mokytis. Daugeliui žmonių sunku išivaizduoti didesnių matmenų kubus. Trimatį kubą paprastai lengva išivaizduoti, nes jį dažnai matome savo aplinkoje. Tačiau keturmatį ir didesnių matmenų kubus sunku išivaizduoti. Beje, keturmačio kubo (tesseracto) išvaizdavimą gali palengvinti tai, kad toks kubas gaunamas iš dviejų trimačių kubų, kurių visos viršūnės poromis sujungiamos to paties ilgio atkarpomis (statmenomis visoms kubų briaunoms). Tai yra keturmačio kubo projekcija dvimatėje erdvėje. Projekcija, kaip žinome, yra būdas daugiau matmenų turinčiam objektui atvaizduoti mažiau matmenų turinčioje erdvėje, dažniausiai plokštumoje. Keturmatis ir penkiamatis kubai trimatėje erdvėje – taip pat projekcijos, atitinkamai keturmatės ir penkiamatės erdvių.



3 pav. Keturmatis kubas



4 pav. Keturmatis kubas  
(žiūrėti pro raudonai žalius akinius)



5 pav. Penkiamatis kubas

## Išvados

1. Kadangi DS metodo atvaizdavimo tikslumas gerėja didinant matmenų skaičių, tai erdvinio vizualizavimo priemonės yra tinkamos vaizdams trimatėje erdvėje gauti. 3D vaizdai, kaip minėta, tiksliau nei plokštuminiai vaizdai atskleidžia sąryšius tarp objektų.
2. Stebint farmakologinių duomenų vaizdus, nustatyta, kad trimatėje erdvėje, priešingai nei dvimatėje plokštumoje, farmakologinių duomenis atitinkančių objektų vaizdus galima atskirti ne viena, bet keliomis tiesėmis arba plokštumomis.
3. Stebint hiperkubų projekcijas trimatėje erdvėje, šių kubų struktūra išryškėja aiškiau nei stebint juos dvimatėje plokštumoje. Taip pat hiperkubus galima sukurti apie pasirinktą ašį ar ašis ir apžiūrėti iš visų pusių.

## Literatūra

1. Dzemyda G., Kurasova O., Žilinskas J., 2008, *Daugiamačių duomenų vizualizavimo metodai*. Vilnius: Mokslo aidai.
2. Liutkus G., Lenkevičius A., 2009, *Kompiuterinė grafika su OpenGL*. Kaunas: Technologija.
3. Ruuskanen J.O., Laurila J., Xhaard H., Rantanen V.-V., Vourilouto K., Wurster S., Marjamaki A., Vainio M., Johnson M.S., Scheinin M., 2005. Conserved structural, pharmacological and functional properties among the three human and five zebrafish  $\alpha_2$ -adrenoceptors. *British Journal of Pharmacology*. Vol. 144. Nr. 2. P. 165–177.
4. Žilinskas J., 2008, On Dimensionality of Embedding Space in Multidimensional Scaling. *Informatica*. Vol. 19. Nr. 3. P. 447–460.
5. Žilinskas A., Žilinskas J., 2008, A hybrid method for multidimensional scaling using city-block distances. *Mathematical Methods of Operations Research*. Vol. 68. Nr. 3. P. 429–443.

## VISUALIZATION OF MULTIDIMENSIONAL DATA IN THREE-DIMENSIONAL SPACE USING 3D TECHNOLOGIES

*Agnė Dzidolikaitytė, Julius Žilinskas*

### Summary

The paper discusses visualization of multidimensional data by using 3D technologies. There are various methods for visualization of multidimensional data. This paper discusses multidimensional scaling method. Multidimensional scaling is a data visualization and analysis method widely used in different branches of science, for example, in ecology, medicine, pharmacology, etc. Multidimensional scaling is one of the dimensionality reduction methods where data present in higher dimension space is projected into lower dimension space. The aim of multidimensional scaling is to bring similarities (dissimilarities) between the objects visualised by multidimensional scaling method as close as possible to the distances between the objects of lower dimension. It is done by minimizing objective function:

$$E_{DS} = \sum_{i < j} w_{ij} (d(Y_i, Y_j) - \delta_{ij})^2$$

Where  $w_{ij}$  are weights,  $\delta_{ij}$  are similarities (dissimilarities) of the higher dimension data,  $d(Y_i, Y_j)$  are distances between lower dimension data, and  $i, j = 1, \dots, m$ .

It has been noticed that three dimensional scaling visualize the connections among data more accurately than two dimensional scaling. This justifies the use of stereo visualisation tools. Stereoscopy includes a group of spatial visualization techniques, with autostereoscopy being the most advanced among them, where spatial information is viewed on screen without using 3D equipment, such as 3D glasses.

Viewing stereoscopic programs requires special technical equipment, and stereoscopic images are created using special software. One of the most commonly used graphic libraries is OpenGL which has many various functions and graphical primitives that enable creation of high quality graphical images.

The part of the paper that discusses experimental research presents the images of pharmacological binding affinity and hypercubes. When using stereo tools, it is easier to distinguish between activating and blocking ligands in the image of pharmacological binding. Moreover, when applying spatial visualization, it is easier to perceive the structure of multidimensional cubes. The experimental part of the paper substantiates the use of 3D technologies for the visualization of multidimensional scaling.

**Keywords:** multidimensional scaling, stereoscopy, 3D visualization.

## DAUGIAMAČIŲ DUOMENŲ VIZUALIZAVIMAS TRIMATĖJE ERDVĖJE NAUDOJANT 3D PRIEMONES

*Agnė Dzidolikaitytė, Julius Žilinskas*

### Santrauka

Straipsnyje aptariamas daugiamačių duomenų vizualizavimas 3D priemonėmis. Iš įvairių daugiamačių duomenų vizualizavimo metodų išskirtas daugiamačių skalių metodas. Daugiamatės skalės – tai daugiamačių duomenų vizualizavimo ir analizės metodas, kuris plačiai taikomas įvairiose mokslo šakose, tokiose kaip ekologija, medicina, farmacija ir pan. Daugiamatės skalės yra vienas iš dimensionalumo mažinimo metodų, kai duomenys, esantys didesnės dimensijos erdvėje atvaizduojami į mažesnės dimensijos erdvę. Daugiamačių skalių, arba DS, metodu vaizduojamų objektų panašumai (skirtingumai) siekiami prilyginti mažesnės dimensijos objektų tarpusavio atstumams. Tai atliekama minimizuojant tikslo funkciją:

$$E_{DS} = \sum_{i < j} w_{ij} (d(Y_i, Y_j) - \delta_{ij})^2$$

Čia  $w_{ij}$  – svoriai,  $\delta_{ij}$  – didesnės dimensijos duomenų panašumai (skirtingumai),  $d(Y_i, Y_j)$  – atstumai tarp mažesnės dimensijos duomenų,  $i, j = 1, \dots, m$ .

Pastebėta, kad trimatės skalės tiksliau nei dvimatės atvaizduoja duomenų sąryšius. Tai pagrindžia stereovaizdavimo priemonių panaudojimą. Stereoskopija apima eilę erdvinio vaizdavimo metodų, kurių pažangiausias yra autostereoskopija, kai erdviniai vaizdai peržiūrimi, tarkime, kompiuterio monitoriuje, nenaudojant 3D įrangos, pavyzdžiui, 3D akinių.

Stereoskopinėms programoms peržiūrėti reikalinga speciali techninė įranga, o stereoskopiniai vaizdai kuriami pasitelkiant tam tikrą programinę įrangą. Viena iš dažniausiai naudojamų grafinių bibliotekų yra OpenGL, kuri turi įvairiausių funkcijų bei grafinių primityvų, skirtų kurti aukštos kokybės grafiniams vaizdams.

Ekperimentinio tyrimo dalyje rašoma apie farmakologinio sąryšio duomenų vaizdą bei hiperkubus. Panaudojus stereopriemones, farmakologinio sąryšio vaizde lengviau atskirti aktyvuojančiuosius ligandus nuo blokuojančiųjų. Taip pat taikant erdvinį vizualizavimą, lengviau suprasti daugiamačių kubų sandarą. Ekperimentinė straipsnio dalis pagrindžia 3D priemonių panaudojimą daugiamačių skalių vizualizavimui.

**Prasminiai žodžiai:** daugiamatė skalė, stereoskopija, 3D vizualizacija.

Įteikta 2011-11-12