arXiv:2302.00379v1 [cs.HC] 1 Feb 2023

用于双变量分析和电子跃迁研究的连续散点图算子

Mohit Sharma、Talha Bin Masood、Signe S. Thygesen、Mathieu Linares、Ingrid Hotz，*IEEE* 会员和 Vijay Natarajan，*IEEE* 会员

摘要——分子因吸收或发射光而发生的电子跃迁，是一种复杂的量子力学过程。研究电子跃迁对于新型材料的设计发挥着重要作用。此类研究中一项常见但颇具挑战的任务，是确定电子跃迁的性质，即分子中的哪些亚组通过提供或接受电子参与跃迁，随后还要考察不同跃迁或分子构象下供体-受体行为的变化。本文提出一种分析双变量场的新方法，并展示其在电子跃迁研究中的适用性。该方法基于两种新型算子：连续散点图（CSP）透镜算子和 CSP 剥离算子，可对双变量场进行有效的可视分析。这两种算子既可单独使用，也可结合使用，以辅助分析。这些算子促使我们设计控制多边形输入，以提取空间域中感兴趣的纤维曲面。我们还为 CSP 添加定量度量，以进一步支持可视分析。我们研究了不同的分子系统，并展示 CSP 剥离算子和 CSP 透镜算子如何帮助识别和研究分子系统中的供体与受体特征。

索引词—双变量纤 维分析、连续散点图、纤维曲面、控制多边形、可视分析、电子跃迁。

1 引言

本 HE 研究分子对光的吸收或发射所引起的电子跃迁，对于理解其化学和物理性质至关重要 [1]。分子中的电子分布在一系列可用轨道中 [2]。当分子吸收光子时，这些电子会从占据轨道跃迁到未占据轨道，从而改变分子的电子结构。发射光时，跃迁过程则会反向进行。自然跃迁轨道（NTO）是电子激发的一种紧凑表示。它将特定电子跃迁中涉及的轨道进行线性组合，以描述电子从何处激发（空穴 NTO）以及跃迁至何处（粒子 NTO） [3]。

本文旨在为理论化学家关注的一个问题提出解决方案，即分析分子中电子跃迁的性质。典型的电子跃迁研究会探讨激发时不同分子亚组之间电荷局域化的变化，例如：对于分子的某一特定激发态，哪个分子亚组是供体/受体？供体/受体的强度（根据转移的电荷量测量）如何随分子构象的变化而变化？在一系列配合物中，供体/受体行为如何变化？某一给定态能否归类为具有局域激发（发生在子基团内）或电荷转移激发（发生在子基团之间）的特征？为回答这些问题，我们提出一种分析双变量场的新方法，并通过将其应用于不同分子中的电子跃迁研究来展示其有效性。不同于现有的分别研究电荷密度场的方法，我们提出研究由两个标量场——空穴 NTO 和粒子 NTO——构成的双变量场。连续散点图（CSP）是对离散散点图的推广，适用于定义在 n 维空间域 [4] 上的连续多元场。我们引入两个相互独立的算子，即 CSP透镜算子和 CSP 剥离算子，用于分析双变量场。图 1 展示了如何使用这两个算子对一个简单分子进行可视分析。CSP透镜算子直接查询值域空间，以识别感兴趣的特征，例如提取供体区和受体区。随后，计算纤维曲面 [5] ，以可视化相应的空间区域。CSP 剥离算子依据对双变量场空间域的分割进行操作。它根据域中与各个分子亚组相对应的片段剥离 CSP 层。随后，可以对剥离后的 CSP 层进行比较或单独研究。

• *M. Sharma* 和 *V. Natarajan* 任职于印度科学研究所计算机科学与自动化系，地址：班加罗尔。电子邮件：{*mohitsharma, vijayn*}*@iisc.ac.in*。

• *T.B. Masood*、*S. S. Thygesen* 和 *M. Linares* 任职于瑞典林雪平大学诺尔雪平校区科学技术系（*ITN*）。电子邮箱：{*talha.bin.masood, signe.sidwall.thygesen, math- ieu.linares*}*@liu.se*。

• *I. Hotz* 任职于瑞典林雪平大学诺尔雪平校区科学技术系（*ITN*）以及班加罗尔印度科学研究所。电子邮箱：*ingrid.hotz@liu.se*。

1.1 相关工作

分子中的电子密度分布通常通过等值面进行可视化，并辅以分子的球棍模型表示和用于标示电荷转移的其他注释 [6]，[7]。这些技术

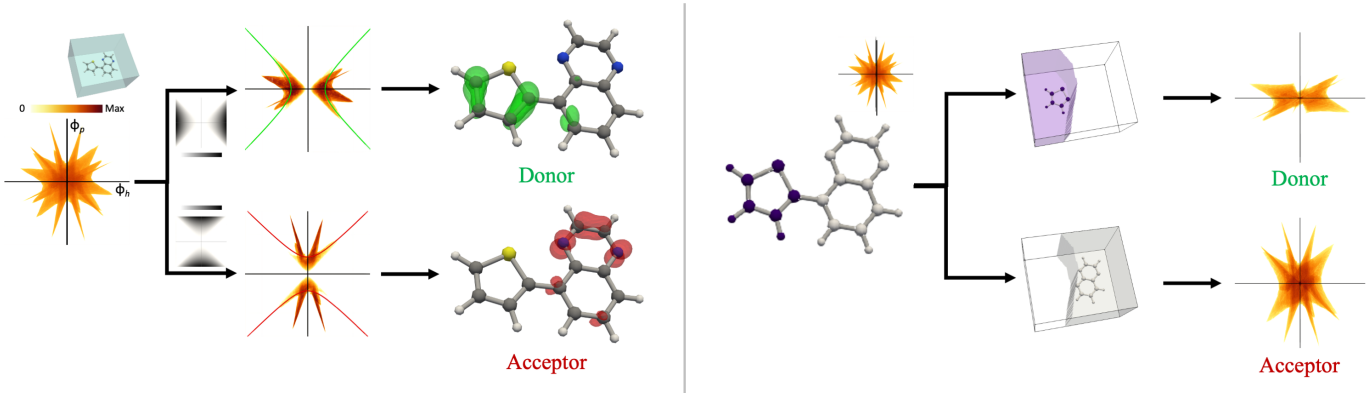

图 1. 研究噻吩喹喔啉分子中的电子跃迁。（左）CSP透镜算子可以查询值域空间，即空穴和粒子 NTO 的 CSP（ϕ_h、 ϕ_p），从而直接提取供体（上方）和受体（下方）区域。结合纤维面提取步骤，该算子提供了一种关联值域空间视图与空间域视图的方法。与查询控制多边形（绿色和红色）对应的纤维曲面显示在该分子的球棍模型上。（右）由域分割驱动的 CSP 剥离算子可以实现从空间域到值域空间的转换。使用 Voronoi 分割得到的、与噻吩和喹喔啉子群对应的剥离 CSP，有助于研究它们的行为。

适用于研究给定状态下的轨道。基于这些技术研究跃迁时，依赖于并排比较 [8]。分析分子子群之间的电荷转移，并将其分类为供体或受体，是研究电子跃迁的关键步骤。一些研究采用定量方法研究电荷转移。Garcia 等人 [9] 和 Bahers 等人 [10] 提出了一组基于电荷密度场逐点差异的指标，用于衡量电荷转移量和偶极矩变化。这些指标的扩展形式可解释为空穴-电子距离 [11], [12]。

在近期的工作中，Masood 等人 [13] 提出了一种自动化方法，通过对电子密度场进行空间分割来量化电荷分布和跃迁。他们将电荷转移表述为一个受约束的优化问题，把分子子群建模为图中的节点，并介绍了用于在原子级和子群级可视化电荷分布与转移的方法。Thygesen 等人提出了一种将该方法扩展到电子跃迁集合的方法 [14]。他们提出了一个基于聚类的流程，用于交互式可视分析与探索。如上所述，既有工作要么侧重于对单个电荷密度场进行可视比较，要么侧重于计算分子子群之间转移的电子电荷量并将这些量可视化。相比之下，我们提出了一种基于双变量场分析的方法，用于研究这些跃迁。

将离散散点图推广到连续标量场 [15]，并将等值面推广到纤维曲面 [5]，催生了双变量场和多元场可视化的新方向。CSP 将离散散点图推广到空间连续数据，即定义在 n维空间域 [4]上的多元场。它能够呈现密集的可视化效果，并能很好地扩展到大型数据集。后续关于 CSP 中不连续性的研究，建立了不连续性与空间域中连通分量数量之间的关系，并展示了其在双变量场可视分析中的适用性 [16]。对各个标量场之间关系的研究已用于在多变量情境下识别有趣的等值 [17]，这延续了等值面统计在单变量场 [18]中的应用。Carr 等人 [5]将纤维定义为等值面在双变量场中的推广，并引入纤维曲面这一分隔曲面，它由一组纤维构成。他们展示了纤维曲面在研究电子密度及其导出场，以及表征分子中的化学键方面的适用性。后续研究着重提升纤维曲面计算 [19]的正确性和效率，并探索了各种应用 [20], [21], [22]。Tierny 等人 [20]基于 Reeb 空间 [23] 对域进行分割，并利用这些分区剥离 CSP，以揭示其连通结构。

本文提出了一种通用方法，用于对双变量场进行可视分析，并采用 CSP 和纤维曲面表示。供体与受体电荷量的空间分布是研究电子跃迁所需的两个主要量。绘制的 CSP 中的取向、密度及其他形状特征，为这两个量之间的关系提供了可视化表示。随后，利用纤维曲面提取相应的空间区域。

1.2 贡献

我们提出了一种新颖的双变量场可视分析方法，旨在开发有效的方法来支持电子跃迁研究。我们采用包括 CSP 和纤维曲面在内的技术，开发用于探索双变量场的方法，既能在空间域中进行探索，也能在值域空间中进行探索。本工作的主要贡献包括

1）一种 CSP透镜算子，可根据特定应用的特征对值域空间进行查询。2）一种 CSP 剥离算子，可根据用户指定的域分割提取 CSP 的不同层。3）一种由 CSP透镜算子引导的控制多边形选择过程，有助于提取感兴趣的纤维曲面。4）一种可单独或联合使用这两个算子的可视分析流程。

5）对 CSP 进行量化，以支持可视分析。6）针对两个分子系统开展的案例研究，展示了该流程在支持电子跃迁研究方面的实用性和有效性。

一篇前期论文介绍了 CSP 剥离算子，并将其应用于研究两个分子系统中的电子跃迁 [24]。在这一扩展版本中，我们进一步介绍了 CSP透镜算子，该算子为可视分析流程融入了新的维度；详细说明两个算子如何独立使用及协同使用；提出新的量化方法，以帮助理解算子的输出；使用纤维曲面可视化 CSP透镜算子的输出；并增加了案例研究，以展示扩展流程的实用性。

2 背景

本节简要介绍二元场分析与可视化技术，并概述电子密度场、轨道以及作为本研究重点的两个分子系统。

二元场。 多元场是在空间域上定义的一组标量值函数。当在该域上定义两个标量场时，便构成一个特定的双变量场 $\mathcal{M}$。

$$f = \{f_1, f_2\} : \mathcal{M} \to \mathbb{R}^2.$$

两个标量场 f_1 和 f_2 可以彼此独立，也可以相互关联。研究双变量场有助于了解这两个场之间的关系，同时也能理解各个标量场的特征。

图 2(a)展示了来自拓扑工具包 TTK [25]的合成数据集。该简单连通的体域由一组四面体表示， f_1 是点的 x 坐标， f_2 是点在 $\mathcal{M}$中的 y 坐标。

连续散点图。CSP 是值域空间中的一种密度图，将散点图的概念推广到空间连续的多变量数据 [4]。它与直方图和等值面统计 [18], [26]密切相关。值域空间中点 $(f_1 = s_1, \ f_2 = s_2)$ 处的密度称为点密度，并映射为颜色。图 2(b) 展示了合成双变量场的 CSP。CSP 是一种很好的表示方式，可用于识别空间域中的感兴趣区域，并可作为选择这些区域的实用界面。

纤维。 纤维 [5] 是等值面在双变量场中的推广。给定一对标量值 $(s_1, \ s_2)$，纤维$\mathcal{F}$ 表示 $\mathcal{M}$ 中映射到 $(s_1, \ s_2)$的点的集合，其映射由 f, $\mathcal{F} = f^{-1}(s_1, \ s_2)$给出。图 2(c) 显示了 $f_1^{-1}(s_1)$的橄榄色等值面，以及 $f_2^{-1}(s_2)$的粉色等值面。纤维是这两个等值面的交集，以黑色显示。图 2(b) 所示 CSP 中的黑点对应于图 2(c) 中的黑色纤维。

纤维曲面。 值域空间中位于一条连续曲线上的一组 CSP 点的原像是一组纤维。这组纤维构成一个纤维曲面。图 2(d)中的蓝色半透明表面是将图2(b)中蓝色三角形的边作为原像得到的。请注意，黑色纤维位于纤维曲面内部。

控制多边形。 蓝色三角形被称为控制多边形，因为它可用于选择 CSP 中感兴趣的区域，并在空间域中显示相应的纤维曲面。根据查询需要，控制多边形可以是开放或闭合的多边形，甚至可以是一条线段。相应纤维曲面的连通性也会随之变化。

电子跃迁与轨道。 分子轨道是描述电子在分子中的位置和波动行为的波函数。电子密度场表示电子出现在给定位置的概率，可以由轨道导出。吸收光后，分子的电子结构受到影响，电子从占据轨道激发至未占据轨道。化学家使用一种称为自然跃迁轨道（NTO）的电子跃迁紧凑表示形式 [3], ，它被定义为参与特定电子跃迁的轨道的线性组合。NTOs 有两种类型：空穴 NTO（ϕ_h）表示电子在激发过程中离开的轨道，而粒子 NTO（ϕ_p）对应于电子所占据的轨道。我们分析由两个 NTOs 组成的双变量场（ ϕ_h，ϕ_p ），以研究分子中的电子跃迁。

分子系统。 本文研究两个案例：噻吩-喹喔啉（TQ）和铜配合物。分子被视为多个亚组的集合。分子系统中的一个子群是由一组原子组成的集合，在电子跃迁研究中，这些原子表现为一个整体。子群信息由化学家提供。TQ由两个子群组成，即噻吩和喹喔啉；它们在有机电子学领域中既可独立使用，也可结合起来制备导电聚合物。噻吩以供给电子而闻名，而喹喔啉则接受电子。图 1展示了TQ系统。左侧的五元环是噻吩子群，右侧是喹喔啉。在本研究中，我们考虑该分子的不同几何构象。我们研究的第二个分子系统是一组铜配合物。这些配合物的配体有所不同。如图 10顶行所示，所有铜配合物均包含三个子群：位于中心的铜（Cu）、作为固定子群的菲咯啉（PHE），以及在菲咯啉（PHE）、二甲氧基菲咯啉（PHEOME）和二膦配体（XANT）之间变化的第三个子群。

3 电子跃迁的双变量分析

双变量场（ϕ_h，ϕ_p）的 CSP 可通过纤维曲面进行查询，以识别具有显著供体或受体特征的区域。识别与显著供体或受体行为相对应的控制多边形一直是一项挑战。要选出合适的控制多边形，必须对 CSP 进行细致的目视检查，而且往往需要多次尝试才能成功。这一难题促使研究人员开发了一种技术和工具，可直接查询 CSP 并提取有意义的区域。我们将这种基于范围的查询算子称为 CSP

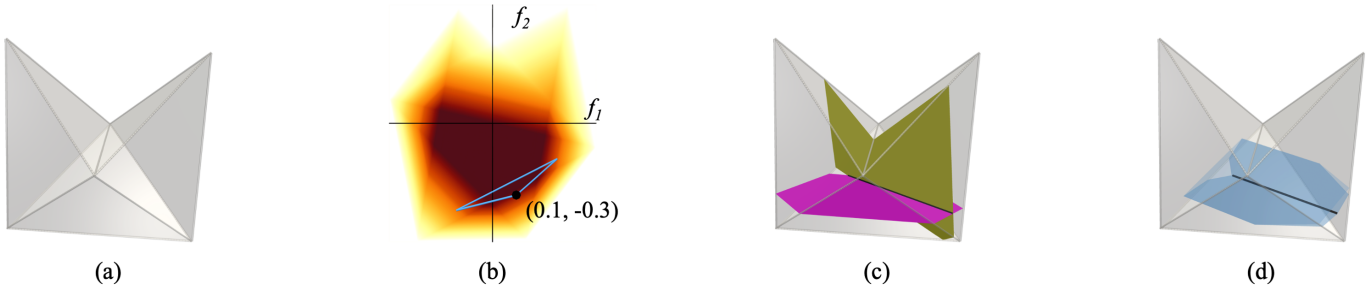

图 2。（a）一个合成双变量场，f_1 为 x 坐标，f_2 为 y 坐标。（b）该双变量场的 CSP。选中了一个蓝色控制多边形，其中包含黑点$(0.1, -0.3)$。（c）f_1 的橄榄色等值面对应等值 0.1，f_2 的粉色等值面对应等值 -0.3。两个等值面沿黑色线段相交，该线段是对应于$(0.1, -0.3)$的纤维。（d）对应于该控制多边形的蓝色纤维曲面包含黑色纤维。

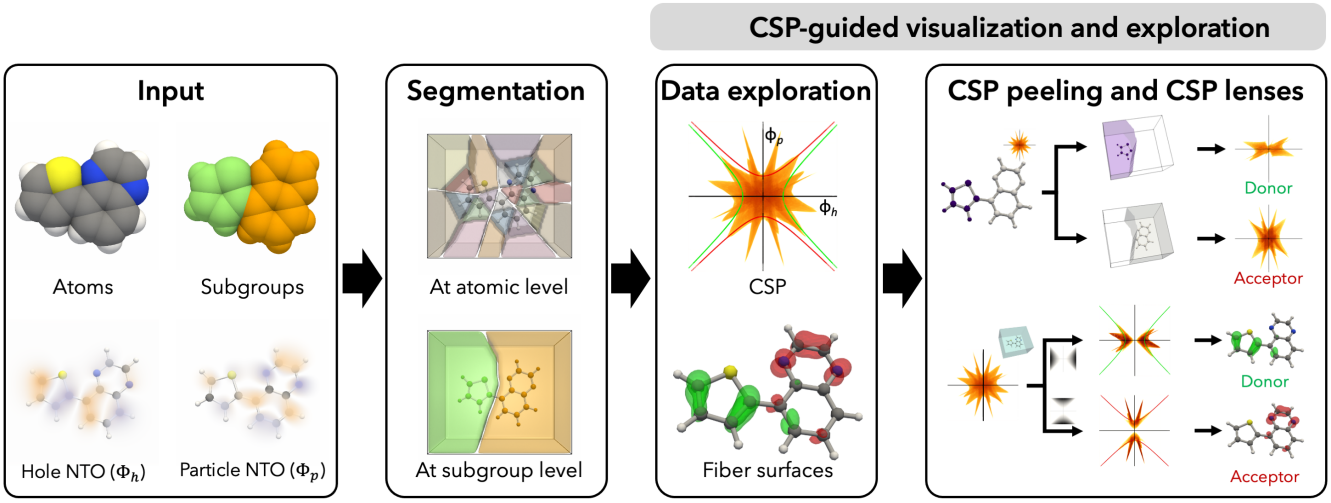

图 3。可视分析工作流。分子结构、NTO 场和子群描述可作为输入。加权 Voronoi 分割用于识别原子区域。对应于某个分子亚组的分段由原子区域的并集计算得出。可通过纤维曲面探索双变量场的 CSP，也可使用 CSP 剥离和透镜算子进行系统分析以及给体-受体强度比较。剥离后的 CSP 可用于直观分析供体和受体行为。透镜算子可在整个分子中全局提取供体区和受体区。对于本文展示的所有 CSP，我们都使用了一致的色图（），并采用对数刻度映射。

透镜。CSP 透镜可缩小搜索空间，并帮助识别感兴趣区域。图 1（左）展示了 TQ 分子系统的一个示例，其 CSP 具有独特的星形结构。我们使用供体透镜和受体透镜查询 CSP 的供体区和受体区。在供体 CSP 中选择一个控制多边形后，会生成一个纤维曲面，用于表示空间域中的供体点。选取了两对横跨 CSP 尖峰的分段线性曲线（红色和绿色）作为控制多边形。

绿色纤维曲面延伸穿过噻吩子群（供体），红色纤维曲面延伸穿过喹喔啉子群（受体）。这些观察以及对 CSP 的进一步探索使我们认识到，子群作为供体或受体的行为以模式的形式编码在 CSP 中，可用作电子跃迁的描述符。这促使我们提出 CSP 剥离算子的概念。我们提出一种智能剥离算子，将其应用于空间域的分割，以生成对应于各个子群的 CSP。这个过程可以想象成从 CSP 中剥离不同层，从而揭示感兴趣的各个分子子群的贡献。CSP 剥离算子能够直接呈现单个原子或原子组的跃迁模式，从而简化探索过程。它显示了选定的一组子群对 CSP 的贡献，并支持对这些贡献进行比较。图 1 中的示例很简单，两个轴上分别呈现出明显且占主导地位的供体区域和受体区域。剥离算子的输出可能较为复杂，需要深入研究，但确实有助于开展系统性探索。本文所有图中的 CSP 均使用相同的坐标轴和色图（对数刻度）。

4 可视分析流程

图3概述了可视分析流程，该流程处理输入的双变量场，以及用于确定空间域分割的应用特定信息。对于电子跃迁研究应用，双变量场由一对 NTO 构成，分子结构信息（原子位置、半径、键的信息）可作为输入。

4.1 CSP镜头算子

分析双变量场时，一个常见的挑战是识别 CSP 中有趣的模式，以便通过纤维曲面提取所需的空间区域。我们

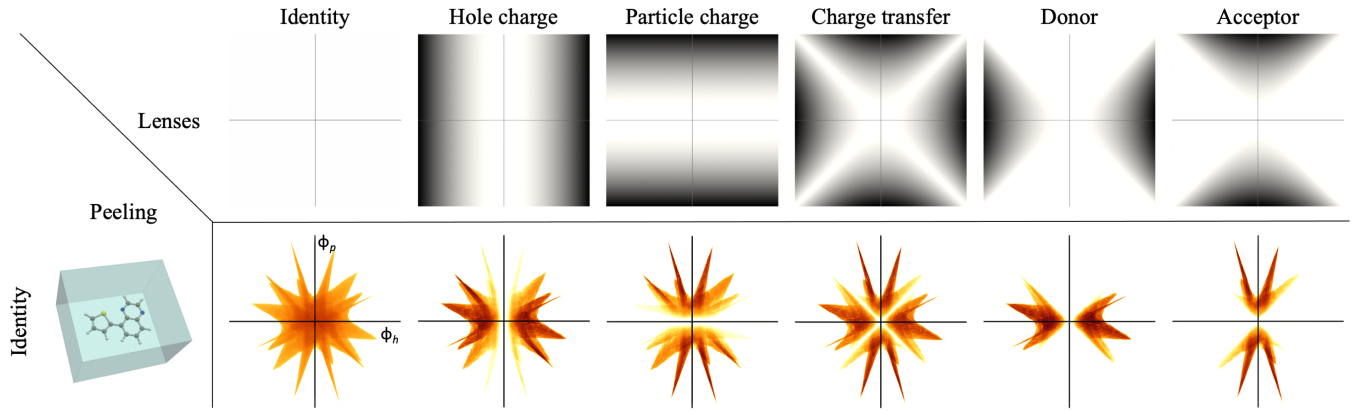

图 4. 应用于 TQ 分子系统的 CSP 透镜算子。顶排显示与不同透镜算子对应的掩膜。底排显示将透镜算子应用于整个分子上双变量场的 CSP (ϕ_h， ϕ_p) 后的结果。所有透镜均旨在排除靠近原点的区域。

将 CSP 透镜算子作为所提出的可视分析流程中 CSP 引导的可视化与探索阶段的第一种方法。与通过目视识别模式相比，CSP 透镜能够以自动化方式直接查询 CSP。CSP 透镜算子通过在 CSP 上应用具有不同权重的掩膜来定义。掩膜中每个点的权重取决于具体查询。图 4 展示了 x 轴上不同透镜对应的掩膜，重点用于研究电子跃迁。供体、受体及其他透镜查询会转化为定义掩膜的不同数学表达式，如下所列。在每个表达式中， N 表示 CSP 中的点总数。

$$
\begin{aligned}
Identity\ lens &= 1_i \quad \forall i \in [0, N-1] \\
Hole\ charge\ lens\ (H_L) &= |\phi_{h_i}|^2 \quad \forall i \in [0, N-1] \\
Particle\ charge\ lens\ (P_L) &= |\phi_{p_i}|^2 \quad \forall i \in [0, N-1] \\
Charge\ transfer\ lens &= |H_L - P_L| \\
Donor\ lens &= \max(H_L - P_L, 0) \\
Acceptor\ lens &= \max(P_L - H_L, 0)
\end{aligned}
$$

令 d_i 表示 CSP 中每个点 i 处的点密度。CSP透镜算子定义为掩膜与点密度的逐点乘积。例如，空穴电荷透镜算子得到一个空穴电荷 CSP:

$$Hole\ charge\ CSP = d_i \cdot |\phi_{h_i}|^2 \quad \forall i \in [0, N-1]$$

解释。 应用 CSP 透镜算子的结果也是一个 CSP。图 4 所示、用于电子跃迁的 CSP 透镜算子会将 CSP 划分为供体区域和受体区域。例如，电荷转移透镜通过计算粒子 NTO 与空穴 NTO 之间的差值，得出转移至或转出特定点的电荷量。供体透镜提取 CSP 中电荷损失为正的区域，受体透镜则提取电荷增益为正的区域。还要注意，所有列出的透镜算子都通过在掩膜中使用较低的值来排除原点附近的区域。靠近原点的点映射到很低的空穴 NTO 和粒子 NTO 值。这些点对应于远离原子、靠近域边界的空间点。在原点附近选择控制多边形

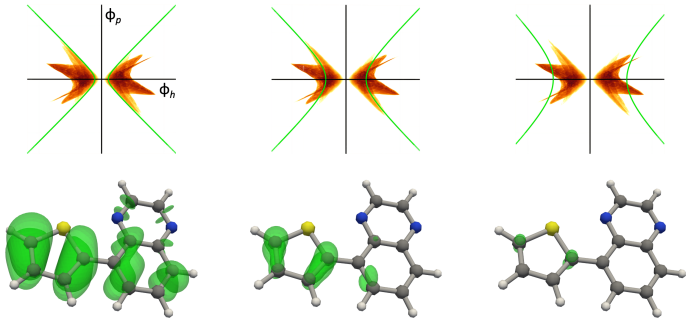

图 5. 使用纤维曲面探索 CSP。随着控制多边形（绿色曲线，顶排；从左至右）远离原点，相应的纤维曲面（绿色，底排；从左至右）逐渐缩小并向原子靠近。最右侧 CSP 中的控制多边形表示的供体比其他供体更强。相应的纤维曲面突出显示了相较于其他位置能够提供更多电荷的空间点。

会生成覆盖整个分子的纤维表面。我们关注的是分析亚组以及靠近原子的区域的行为。随着我们远离原子附近，供体电荷量和受体电荷量都会减少。CSP 中靠近原点的点会映射到域中的这类区域，因此可能对分析没有帮助。在 CSP 中排除这一区域可以缩小搜索空间。

CSP透镜算子普遍适用于所有双变量数据分析，并不局限于电子跃迁应用。该算子需要经过定义，使其能够分割出与目标特征相对应的值域空间。在电子跃迁应用中，化学家希望找到供体区和受体区，以理解特定的跃迁。在这种特定情况下，掩膜可以用精确的数学表达式定义。可视分析流程只要求将掩膜表示为值域空间上的标量函数。

4.2 CSPlens与纤维曲面

控制多边形选择过程可由透镜算子的输出引导。CSPlens

算子的效用会随着对相应控制多边形的纤维曲面的可视化而提升。

控制多边形选择。 控制多边形的形状、位置和方向很大程度上取决于研究目标。CSP透镜算子有助于将注意力引向特定区域，从而缩小控制多边形选择的搜索空间。例如，图 5 展示了特定分子构象下供体透镜的输出。在该 CSP 的非空区域内描绘控制多边形，即可提取供体纤维曲面。缩小搜索空间有助于合理放置控制多边形。在本文考虑的示例或案例研究中，我们希望比较空间位置的供体强度和／或受体强度。我们选择与表示特定供体或受体强度的纤维曲面相对应的控制多边形 k，即空间域中满足 $|\phi_h|^2 - |\phi_p|^2 = k$ 的点。在二维值域空间中，该方程定义了图 5 所示的曲线（等值线），它是一条以原点为中心、以 k 为半长轴的双曲线。相应的纤维曲面可视为供体强度（$|\phi_h|^2 - |\phi_p|^2$）场的等值面，而控制多边形则是与供体透镜算子相关联、等值为 k 的掩膜函数等值线。CSP 在二维网格的顶点处采样。因此，等值线以分段线性曲线表示，并作为纤维曲面计算的控制多边形（通常为开放曲线） [19]。在本文余下部分，我们用“控制多边形”一词指代这些掩膜函数等值线。与距离原点较远的控制多边形相比，靠近原点的控制多边形对应较弱的供体纤维曲面。我们观察到，受体透镜也有类似的行为。一般而言，透镜表示某种特定特征。我们可以为透镜算子关联一个或多个模板控制多边形，例如基于上文讨论的等值线，或基于特定应用的特征。

引入第二个算子的动机。 CSP 透镜算子会在整个 CSP 上全局执行给定查询。若没有额外信息，透镜算子仅支持沿一个轴（图 7 中的 x 轴）进行查询，即在值域空间中查询。我们引入第二个探索轴，以支持对双变量场进行进一步分析。这个第二探索轴基于对空间域的查询，具体而言，是对域进行分割。图 1（左）中的供体（绿色）区域与受体（红色）区域彼此分离良好。供体属于单个五元环噻吩，受体则属于喹喔啉。所考察的分子是一个简单的双子基团系统，在这种特定的几何构象下，其中一个子基团充当供体，另一个充当受体。图 6 中的分子系统是同一分子的另一种构象，其中噻吩充当纯供体，而喹喔啉同时充当供体和受体。由供体 CSP 透镜算子输出生成的纤维曲面覆盖了噻吩和喹喔啉子群。这表明供体 CSP 由两个重叠层构成，每个子群对应一层（见图 6 中的插图）。若要分别突出显示噻吩和喹喔啉的两个供体纤维曲面，就需要一个额外的算子来划分 CSP

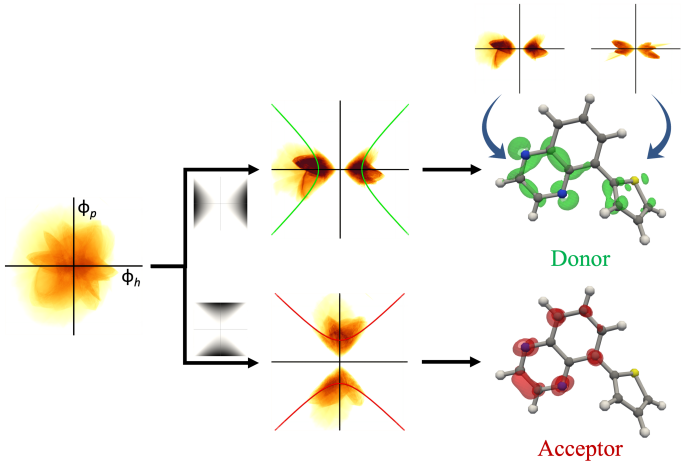

图 6. 使用 CSP透镜算子提取的供体区和受体区，以及对应的纤维曲面（TQ-120°）。在此构象中，喹喔啉既是供体也是受体。插图显示了与两个子基团对应的供体CSP 层。

该算子基于对域进行分割，或者更具体地说，用于剥离重叠的 CSP 层。

4.3 CSP 剥离算子

现在，我们介绍第二种算子，它通过基于域分割提取不同层来分析 CSP。该算子支持沿第二个域定向轴进行探索。分割由用户指定，并取决于具体应用。CSP 剥离算子的结果是将双变量场的 CSP 限定在域的输入分段内。

分割。 分子亚组由构成分子的原子子集表示。根据先前的工作 [13]，，我们计算加权 Voronoi 镶嵌 [27]，以便将分子划分为原子区域。镶嵌算法的输入点集由原子位置和半径组成。现在，每个分子亚组所占据的体积表示为原子区域的并集。与各亚组对应的体积区域定义了分子的分割，并构成 CSP 剥离算子的输入。如有需要，也可以采用其他几何分割或基于拓扑的分割。假定构成感兴趣的各亚组的原子可作为输入提供给可视化管线。

解释。 剥离 CSP 的解释取决于具体应用以及所提出的一组查询。在电子跃迁应用中，首要目标是分析所考察的每个子基团的供体或受体行为。如果剥离后的 CSP 与 X 轴对齐，或具体而言，仅由满足 $|\phi_h| > |\phi_p|$ 的区域构成，那么我们将该子基团归类为供体。水平线$\phi_p = 0$ 意味着在域内相应区域中，粒子 NTO 等于零，且没有电荷增益。相反，该区域失去了电荷，因为空穴 NTO $\phi_h \neq 0$。类似地，如果 CSP 与 Y 轴对齐，那么域内的相应区域代表受体。在图 1（右）中，噻吩被归类为供体，而喹喔啉被归类为受体。

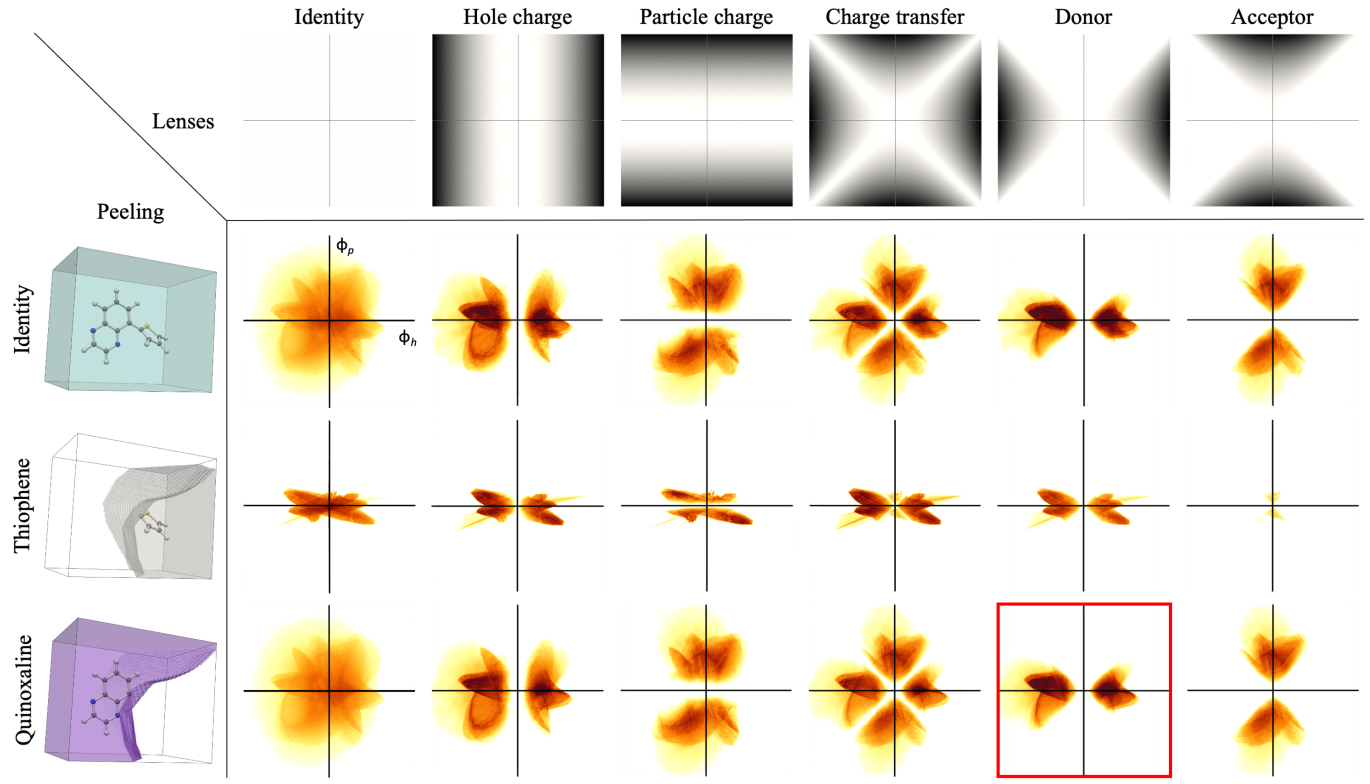

图 7. 沿 X 轴基于 CSP 透镜算子的探索，以及沿 Y 轴基于 CSP 剥离算子的探索。联合应用这两种算子，可提取对应于单个子群的供体和受体 CSP。高亮显示的（红色）CSP 是喹喔啉子群特有的供体 CSP。

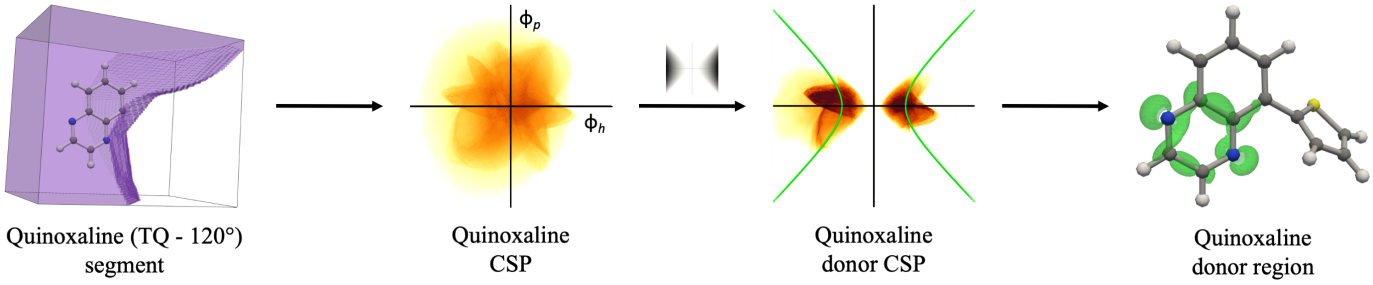

图 8. 同时应用 CSP 剥离算子和透镜算子，以提取子群特有的供体区域。对喹喔啉进行域分割，可生成其剥离后的 CSP 层。可在该剥离层内应用供体透镜算子。此外，在供体 CSP 中选取控制多边形，有助于提取限定于喹喔啉的供体纤维曲面。

不同子基团的 CSP 所覆盖面积相差较大，这或许有助于推断哪个子基团是更强的供体或受体。或者，同一子基团在不同分子中呈现一致的 CSP，则表明该子基团具有独特性质。例如，我们在图 10 中比较了不同配合物中铜的行为。剥离还有助于识别电子跃迁的性质。局域激发（LE）指空穴和电子自然跃迁轨道均位于同一子基团内的情形；电荷转移激发（CT）则指这些 NTO 位于不同子基团内的情形。通过比较单个子群的 CSP，可以识别 LE。如果除一个子群外，所有子群的贡献都很小，那么我们可以得出结论，该电子跃迁局限于一个子基团。例如，我们将 Cu-PHE-PHEOME 中的态 10 识别为 LE 态，见图11。

4.4 联合应用 CSPlens 和剥离算子

CSP 透镜算子和剥离算子可根据应用需求，分别（单轴）或同时（双轴）应用，以探索双变量场。CSP 剥离算子可作为第二个算子，接续 CSP 透镜算子使用，如图 7 所示。Y 轴显示各子基团剥离后的 CSP。X 轴上的查询可以独立进行，针对整个分子对应的 CSP，也可以针对各个子基团进行。这类查询有助于识别子基团内的供体区域和受体区域。例如，我们能够分割喹喔啉子基团内的供体区域和受体区域。喹喔啉子基团内的供体 CSP 已高亮显示（红框）。图 8 展示了如何利用从该 CSP 中提取的纤维曲面来突出显示供体区域。与仅使用透镜算子生成的图 6 相比，绿色纤维曲面仅限于喹喔啉子基团。

4.5 用户输入

要生成图 7 所示的矩阵，用户需指定透镜算子（X 轴，列）和域分割（Y 轴，行）。如图 8 所示，用户可以选择特定的 CSP 进行进一步分析。控制多边形可以手动选择；如果能够用数学方式定义，也可以自动选择。在此应用中，给体强度是研究的关键属性，并可用于推导局域激发和电荷转移等其他特征。用户可以手动设置和更改该属性，以生成相应的控制多边形和纤维曲面。本文所示的所有可视化均通过 ParaView [28] 和 TTK [25] 进行交互和生成。

4.6 量化

如图 1 所示，CSP 透镜算子便于进行值域查询，而 CSP 剥离算子便于进行基于域的查询。这两个算子的使用都依赖于对结果进行后续目视检查。在某些情况下，仅靠目视检查可能不足以进行全面分析。图 10 中，通过目视观察水平对齐的 CSP，足以推断铜在这三种分子中充当供体，但我们无法确定它们的供体强度顺序。我们提出了有助于解决这一问题的定量指标。为 CSP 中的每个点 i 赋予权重 w_i，并将其累加，以获得 CSP 的度量 Δ，

$$\Delta = \sum_{i=1}^{N} d_i \cdot w_i$$

这里，d_i 表示点密度，N 是点的总数，取决于 CSP 的分辨率。权重 w_i 根据我们希望量化的具体属性赋予。点密度 d_i 决定了点 i 对该属性的贡献。Δ 也可以视为通过 Federer 余面积公式 [26], [29]对域中所有纤维进行积分。

我们要量化的属性与 CSP 透镜算子所捕获的特征密切相关。常数权重 $w_i = 1$ 表示恒等透镜，其结果值 Δ 等于空间域的体积。对于电子跃迁，权重 $w_i = |\phi_{h_i}|^2$ 表示空穴电荷透镜算子的掩膜函数，相应的 Δ 等于子基团的空穴电荷。为了计算特定子基团的“给体强度”，我们用该子基团损失的总电荷减去其获得的总电荷。这个量等于供体透镜算子与受体透镜算子的掩膜函数之差，$w_i = |\phi_{h_i}|^2 - |\phi_{p_i}|^2$。现在将给体强度定义为

$$\Delta = \sum_{i=1}^{N} d_i \cdot (|\phi_{h_i}|^2 - |\phi_{p_i}|^2)$$

在本文其余部分中，术语 Δ 始终指给体强度。

计算。 CSP 可使用 TTK 计算。使用此实现计算出的 CSP 的准确度取决于其图像分辨率。同样，CSP 的分辨率决定了量化的准确度。CSP 表示的分辨率越高，Δ 的准确度就越高，但生成高分辨率 CSP 的过程需要大量计算。

由于上述问题，我们采用基于二维离散直方图的实现来计算给体强度。所有直方图均绘制在 1000×1000 网格上，其中 X 轴表示 ϕ_h，Y 轴表示 ϕ_p。空间域中的一个顶点会映射到直方图中相应的分箱，其函数值则四舍五入到该分箱的中点。这种舍入会在定量指标的计算中造成近似误差。我们的实验表明，由中点近似造成的给体强度误差介于（± 0.001，± 0.032）之间。有关给体强度计算方法的详细说明以及列出误差的表格，请参阅补充材料。

5 结果

现介绍两个案例研究的结果。两个算子揭示了供体-受体行为，以及这种行为随分子的不同几何构象和一系列分子复合物中不同配体而发生的变化。案例研究所考察的分子复合物已得到充分研究。可视分析得到的见解有助于确认其中一些已知性质。电子跃迁使用 Gaussian 软件包 [30] 计算，空穴和粒子自然跃迁轨道则通过内部开发的脚本生成。CSP 和纤维曲面使用 TTK [25]计算。方法开发、案例研究的确定和结果解释均是在与一位理论化学家的密切合作下完成的。

5.1 案例研究 1：噻吩-喹喔啉

第一个案例研究使用 CSP 剥离算子，考察 TQ 的不同几何构象，如图 9 第一行所示。我们的分析聚焦于该分子的第一激发态。噻吩（五元环）通常被视为给体亚组，但正如本研究所示，这一性质会随亚组之间的二面角而变化。π-键共轭（电子在分子中的离域）可能会被打断（在 90° 时），从而在不同角度下产生不同类型的激发：局域激发或电荷转移激发。CSP 分析结果如图 9 所示。

π-键共轭在 0° 和 180° 时达到最大，因为轨道在整个分子上完全离域。这两个角度对应的 CSP 几乎完全相同，因此能够反映这两种构象之间的相似性。与 0° 和 180°对应的噻吩剥离 CSP 沿 X 轴排列，这表明噻吩是给体亚组；喹喔啉 CSP 则更多地沿 Y 轴排列，表明在这两种构象中它都是受体。噻吩 CSP 覆盖的面积从 0° 到 60° 逐渐向原点收缩，并在 90°时缩至最小。这表明噻吩的空穴和电子自然跃迁轨道均有所减小，因此随着二面角增大，电子也从噻吩转移到喹喔啉的程度也随之降低。这种变化符合预期，因为在 90° 时，π-键共轭最小。当

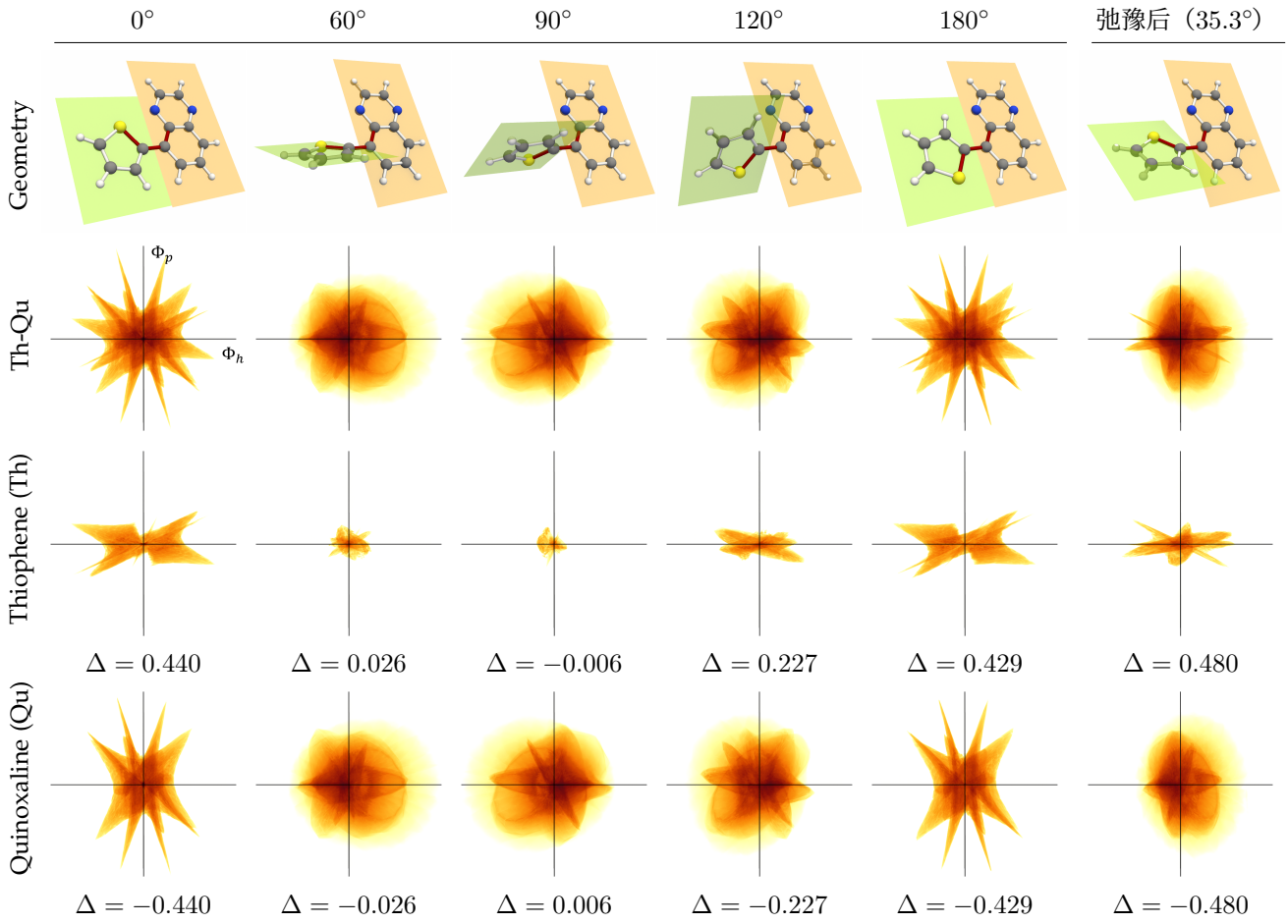

图 9. CSP 剥离算子有助于分析 TQ（绿色平面—噻吩，橙色平面—喹喔啉）在二面角变化所对应的态1构象下的情况。在 60° 和 90° 构象中，噻吩的剥离后 CSP 覆盖的区域较小，表明喹喔啉内发生局域激发。90° 表现出从噻吩到喹喔啉的电荷转移最少。在其他分子构象中，噻吩表现为供体。

二面角进一步增大至 120°时。60° 和 90° 时的喹喔啉 CSP 与分子 CSP 相似，而噻吩 CSP 仅覆盖原点附近的一小块区域。这表明这些构象发生了局域激发，且主要发生在喹喔啉内部。到 120°时，体系又转变为电荷转移激发。在弛豫几何构型中，分子处于能量最优的二面角 (35.3°)，此时我们观察到噻吩充当供体，这也符合预期。

子基团 CSP 标注了一个表示相应片段给体强度的量。我们观察到，对于 0° 和 180°，噻吩和喹喔啉的给体强度相近。对噻吩计算得到的 Δ 值支持不同几何构型下给体强度的相对排序，

$$0^\circ \approx 180^\circ > 120^\circ > 60^\circ > 90^\circ.$$

通常认为，共轭程度越高越有利于电荷转移，但其行为也取决于轨道对齐的具体情况。我们注意到 $\Delta_{Th(35.3^\circ)} > \Delta_{Th(0^\circ)}$。仅凭目视检查，很难断定在弛豫几何构型中给体强度最高。

给体强度的量化有助于化学家以精确的方式比较电荷转移量。Δ 值补充了通过目视检查获得的信息，反之亦然。Δ 值有助于确定该亚组整体上是作为供体还是受体，但可视分析还能提供更多见解。在这个案例研究中，仅计算 Δ 值无法判断在 60° 和 90° 构象中，哪一个亚组发生了局域激发。这是因为参与电子跃迁的两个亚组的 Δ 值都很小。不过，CSP 有助于消除这种歧义。喹喔啉的 CSP 比噻吩的分布更广，表明激发发生在前者中。对于弛豫几何构型，仅凭可视分析可能会错误地将这次跃迁判定为局域激发，因为喹喔啉的 CSP 看起来与整个分子的 CSP 相似，而噻吩 CSP 的贡献可能会被认为很小。不过，Δ 值表明，噻吩向喹喔啉提供的电荷足够大，与 0° 和 180°构象中的情况相当。因此，借助量化，我们可以得出结论：这显然是电荷转移情形。对于 120°处的构象，我们观察到一个 Δ 值，表明电荷从噻吩转移到喹喔啉。然而，噻吩的 CSP 主要沿给体轴延伸，而喹喔啉的 CSP 则沿两个轴延伸，这表明该跃迁必定是喹喔啉上的局域激发（图 6）与噻吩向喹喔啉的电荷转移的混合。专家早已知道

专家认为，平面构象（0° 和 180°）会促进 π 电子在整个分子中的离域，因此有利于两个亚组之间的电荷转移。由此看来，观察到 90° 构象中没有电荷转移（Δ）并不令人意外。有趣的是，非平面的弛豫几何构型呈现出最大的 Δ，但其数值接近 0° 和180° 构象中的情况，这表明平面性并非解释所观察到的电荷转移量的唯一标准。

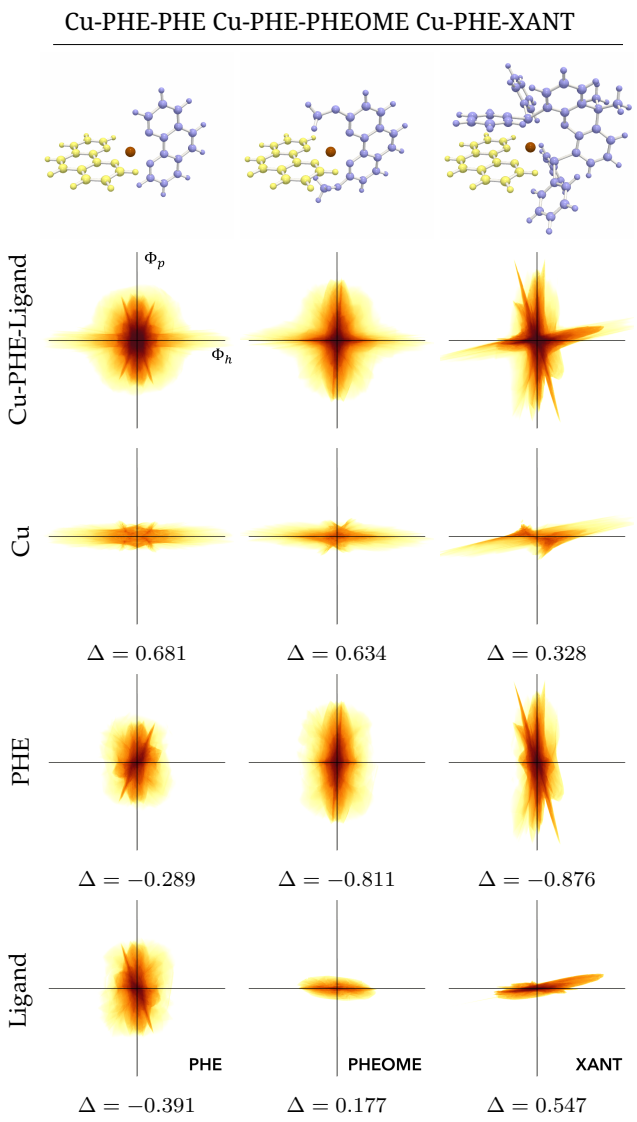

图 10. CSP 剥离算子有助于分析具有不同配体构型的铜配合物，且所有配合物均处于态1。在所有配合物中，铜充当供体，PHE 充当受体。Cu-PHE-PHE 中来自铜的电荷转移具有对称性。

5.2 案例研究 2：铜配合物

在本案例研究中，我们聚焦于一系列用于发光应用的铜配合物。这些配合物由一个中心铜原子和周围的两个配体组成。其中一个配体在所有配合物中都相同（菲咯啉，PHE），另一个配体则各不相同：菲咯啉（PHE）、二甲氧基菲咯啉（PHEOME）、二膦（XANT）、二苯基菲咯啉（PHEPHE）以及

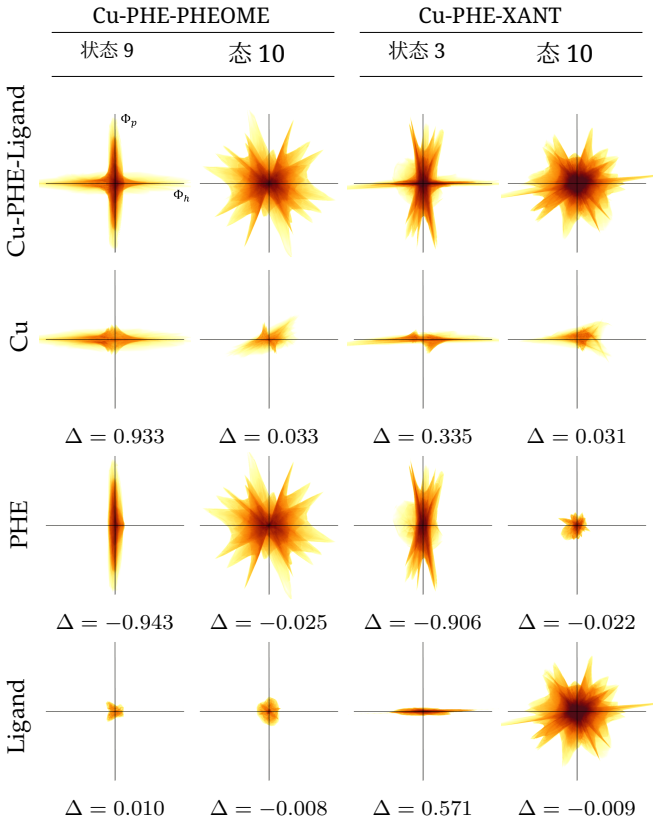

图 11. CSP 剥离算子有助于比较不同的激发态。对于 Cu-PHE-PHEOME，我们观察到态 9 中发生电荷转移，态 10 中发生 PHE 内部的局域激发。对于 Cu-PHE-XANT，我们在状态 3 中观察到电荷转移激发，在态 10 中观察到 XANT 内部的局域激发。

二甲基菲咯啉（PHEME）。配合物中电子跃迁的特性决定了它们的性质。识别这些跃迁并对其进行详细研究，有助于设计新型配体候选物。

改变配体。首先，我们研究改变第二个配体的影响，重点关注每个分子的第一激发态，见图 10。在所有构型中，铜都表现为供体，这符合预期。对于所有构象，铜的标注量也均为正值，即$\Delta_{Cu} > 0$。CSP 表明 PHE 表现为受体，其方向与垂直轴一致，并且 $\Delta_{PHE} < 0$。一个有趣的观察是，在 Cu-PHE-PHE 中，电荷转移预计是对称的，即铜分别向两个 PHE 配体转移电荷。通过各个 PHE 配体的 CSP 可以观察到这种行为。在 Cu-PHE-PHEOME 中，铜和 PHEOME 都是供体。预计铜的给体强度更高。铜在 X 轴上的跨度更大，表明其原子区域中的 ϕ_h 数值更大。不过，仅凭目视检查 CSP 并不足以断定铜确实是更强的供体。铜和 PHEOME 的 CSP 看起来都同样接近原点，但给体强度有助于证实铜比 PHEOME 是更强的供体（$\Delta_{Cu} > \Delta_{PHEOME}$）。在 Cu-PHE-XANT 中，铜和 XANT 都表现为供体。预计 XANT 的给体强度高于铜，但再次仅凭目视检查不足以得出这一结论。我们观察到 $\Delta_{Cu} < \Delta_{XANT}$，这有助于证实这一结论。此外，此处报告的给体强度与先前报告的数值一致 [13]。

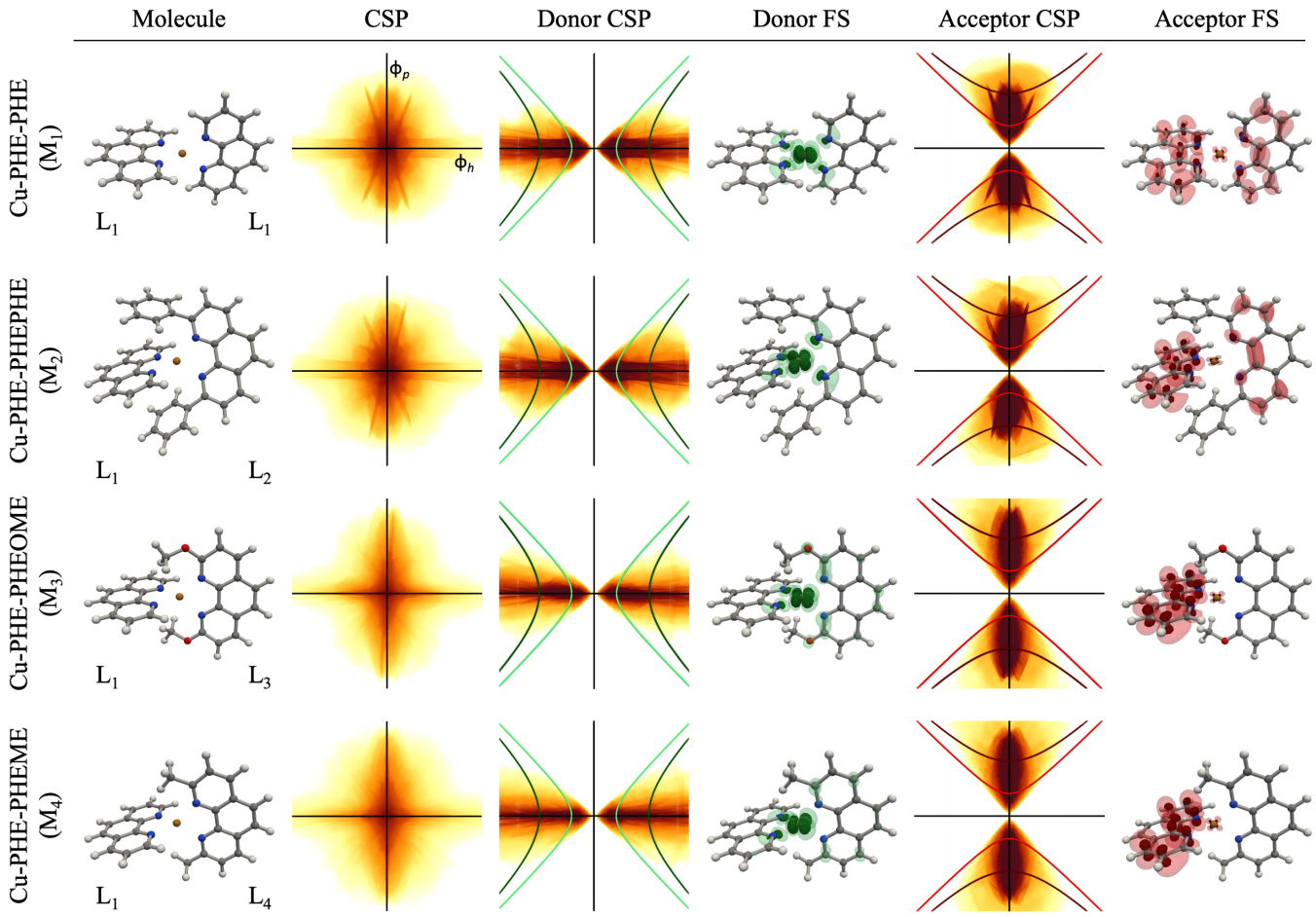

图12. CSP透镜算子有助于研究添加取代基后 L_1 行为的变化，从而得到配体 L_2，L_3，和 L_4。浅绿色和浅红色控制多边形表示相较于颜色较深的对应多边形，较弱的给体和受体行为。红色纤维面延伸至 L_1 和 L_2，它们表现出受体行为。该配体在 M_3 和 M_4中表现出给体行为。

表征激发。现在，我们比较 Cu-PHE-PHEOME 和 Cu-PHE-XANT 这两种配合物在不同激发态下的行为，旨在表征激发的性质，即局域激发还是电荷转移。图11展示了基于 CSP 剥离算子的可视分析结果。对于 Cu-PHE-PHEOME，我们观察到态 9 中存在电荷转移激发。铜和 PHE 的 CSP 分别表现出供体和受体行为。由此可以得出结论，电荷从铜显著转移至 PHE。然而，在态 10 中，分子与 PHE 的 CSP 相似。此外，其他子基团的贡献似乎较低，这表明 PHE 内部发生了局域激发。 Δ 数值与目视观察结果相符。在 Cu-PHE-XANT 的状态 3 中，我们观察到电荷从铜和 XANT 转移至 PHE；在态 10 中，则观察到 XANT 内部发生局域激发。 Δ 数值再次证实了这些行为。在状态 3 中，铜和 XANT 失去的电荷由 PHE 获得。对于态 10，我们观察到较小的 Δ 数值，这支持局域激发的判断；但仅凭 Δ 值，我们无法确定是哪个子基团发生了局域激发。在本例中，发生局域激发的是 PHE，因为与另外两个子基团相比，PHE 的 CSP 沿两个轴的分布更为扩展。

借助给体和受体CSP透镜，研究第一激发态的配合物 Cu-PHE-PHE (M_1)、Cu-PHE-PHEPHE (M_2)、Cu-PHE-PHEOME (M_3) 和 Cu- PHE-PHEME (M_4)。图 12 展示了各个分子的结构。在所有分子中，PHE (L_1) 位于左侧，铜位于中央。第三个子基团（右侧）从上到下依次为 PHE (L_1)、PHEPHE (L_2)、PHEOME (L_3) 和 PHEME (L_4)，具体取决于添加到 L_1 的取代原子。本研究旨在考察具有不同取代基的 L_1 的行为。我们分别使用给体和受体透镜提取给体 CSP 和受体 CSP。浅绿色和红色控制多边形表示其给体强度和受体强度低于深色控制多边形。对于 M_1 和 M_2，对应于浅色和深绿色控制多边形的纤维曲面均包围铜原子或其相邻原子，这表明无论给体区域强弱如何，都位于铜原子附近。这一观察结果表明，Cu 是这两个分子中唯一的给体，并且在某种程度上，其行为影响了邻近区域。默认情况下，L_1 和 L_2 应为受体。对应于红色控制多边形（浅色和深色）的纤维曲面分布于这两个分子中的 L_1 和 L_2 上。这表明，通过添加取代基将 L_1 转化为 L_2

变化的取代基。现在，我们比较四种

并不会改变给体行为。在 M_3 和 M_4 中，我们观察到相当一部分红色纤维面位于 L_1 内，因此唯一的受体子群是 L_1。在这两个分子中，Cu 是主要给体。一个有趣的观察结果是，在向 L_1 添加取代基后，L_3 和 L_4 也呈现出较弱的给体纤维曲面（绿色），而且这种行为不再局限于 Cu 的近邻。这表明取代基影响了整个子基团，使其表现出给体行为，尽管其给体强度远低于 Cu。与 CSP 剥离算子不同，CSP透镜算子无需预先掌握子群信息，因为该算子直接作用于值域空间。此处仅展示分子结构以供参考。为便于进一步分析，生成的输出 CSP 通过纤维曲面与域相连。在本案例研究中，每个给体/受体CSP 均与给体/受体纤维面相连。

6 结论

本文介绍了两种用于双变量数据分析的基于CSP的算子。这两种算子为双变量场的分析提供了一个新方向。CSPlens算子是一种直接查询值域空间的简单快捷方法，还能简化并指导控制多边形选择过程。CSP 剥离算子有助于根据用户指定的域分割提取 CSP 的各层。给体强度经过量化，且取决于两个 NTO 场。场之间的关系决定了控制多边形的选择，而不是通过交互方式手动选择。我们通过详细的案例研究展示了这两种算子和可视分析流程的有效性。未来，我们计划将这种分析方法扩展到其他应用，并将该方法推广至多场数据。

致谢

本研究部分由印度-瑞典联合网络项目（DST/INT/SWD/VR/P-02/2019）、VR 资助项目 2018-07085、印度教育部、印度 DST 的斯瓦纳贾扬蒂奖学金（DST/SJF/ETA-02/2015-16）、Mindtree讲席研究资助以及瑞典研究理事会（VR）资助项目 2019-05487 提供支持。SST 隶属于瓦伦堡人工智能、自主系统与软件项目（WASP）。计算工作使用了瑞典国家计算基础设施（SNIC）在 NSC 提供的资源，部分经费由 VR 资助协议（编号 2018-05973）提供。

参考文献

[1] H. W. Kim、K. Kim、S. W. Park 和 Y. M. Rhee，“用于研究复杂分子系统电子光谱学与动力学的量子化学”，载于《分子光谱学：量子化学方法》。Wiley Online Library，2019 年，第 1 卷。[2] R. S. Mulliken，“多原子分子的电子结构与价键。II. 一般考量”，《物理评论》，第 41 卷，第 1 期，49–71 页，1932 年 7 月。[3] R. Martin，“自然跃迁轨道”，《化学物理杂志》，第 118 卷，4775–4777 页，2003 年 3 月。[4] S. Bachthaler 和 D. Weiskopf，《连续散点图》，IEEE《可视化与计算机图形学汇刊》，第 14 卷，第 6 期，第 1428–1435 页，2008 年。[5] H. Carr、Z. Geng、J. Tierny、A. Chattopadhyay 和 A. Knoll，《纤维曲面：将等值面推广至双变量数据》，计算机图形学论坛，第 34 卷，第 3 期，第 241–250 页，2015 年。[6] W. Humphrey、A. Dalke 和 K. Schulten，《VMD——可视分子动力学》，分子图形学期刊，第 14 卷，第 38 页，1996 年，第 33 页。[7] J. E. Stone、D. J. Hardy、J. Saam、K. L. Vandivort 和 K. Schulten，《GPU 加速计算与分子轨道交互式显示》，载于《GPU 计算宝石：翡翠版》，GPU 计算应用系列。爱思唯尔公司，2011 年，第 5–18 页。[8] M. Haranczyk 和 M. Gutowski，《分子轨道及相关电子密度的可视化》，化学理论与计算期刊，第 4 卷，第 5 期，第 689–693 页，2008 年。[9] G. Garcia、C. Adamo 和 I. Ciofini，《利用含时密度泛函理论和电荷转移指数评估推拉型染料的效率》，物理化学化学物理，第 15 卷，第 20 210–20 219 页，2010 年。[10] T. L. Bahers、C. Adamo 和 I. Ciofini，《电荷转移激发空间范围的定性指数》，化学理论与计算期刊，第 7 卷，第 2498–2506 页，2011 年。[11] C. A. Guido、P. Cortona、B. Mennucci 和 C. Adamo，《关于电荷转移分子激发的度量：一种简单的化学描述符》，计算化学期刊，第 9 卷，第 7 期，第 3118–3126 页，2013 年。[12] L. Huet、A. Perfetto、F. Muniz-Miranda、M. Campetella、C. Adamo 和 I. Ciofini，《用于分析电荷转移现象的通用基于密度的指数：从模型到蝴蝶分子》，化学理论与计算期刊，第 16 卷，第 4543–4553 页，2020 年。[13] T. B. Masood、S. S. Thygesen、M. Linares、A. I. Abrikosov、V. Natarajan 和 I. Hotz，《分子电子密度与跃迁的可视分析》，计算机图形学论坛，第 40 卷，第 3 期，2021 年。[14] S. S. Thygesen、T. B. Masood、M. Linares、V. Natarajan 和 I. Hotz，《利用层次聚类探索电子跃迁集合的细节层次》，计算机图形学论坛，第 41 卷，第 3 期，第 333–344 页，2022 年。[15] A. Sarikaya 和 M. Gleicher，《散点图：任务、数据与设计》，IEEE《可视化与计算机图形学汇刊》，第 24 卷，第 1 期，第 402–412 页，2017 年。[16] D. J. Lehmann 和 H. Theisel，《连续散点图中的不连续性》，IEEE《可视化与计算机图形学汇刊》，第 16 卷，第 6 期，第 1291–1301 页，2010 年。[17] S. Nagaraj 和 V. Natarajan，《多场数据中的关系感知等值面提取》，IEEE《可视化与计算机图形学汇刊》，第 17 卷，第 2 期，第 182–191 页，2010 年。[18] H. Carr、B. Duffy 和 B. Denby，《关于直方图和等值面统计》，IEEE《可视化与计算机图形学汇刊》，第 12 卷，第 5 期，第 1259–1266 页，2006 年。[19] P. Klacansky、J. Tierny、H. Carr 和 Z. Geng，《四面体网格的快速精确纤维曲面》，IEEE《可视化与计算机图形学汇刊》，第 23 卷，第 7 期，第 1782–1795 页，2016 年。[20] J. Tierny 和 H. Carr，《用于双变量 Reeb 空间计算的雅可比纤维曲面》，IEEE《可视化与计算机图形学汇刊》，第 23 卷，第 1 期，第 960–969 页，2016 年。[21] C. Blecha、F. Raith、G. Scheuermann、T. Nagel、O. Kolditz 和 J. Maßmann，《利用纤维曲面分析黏土岩中通用核废料处置库的热-水-力耦合模拟》，载于《2019 IEEE 太平洋可视化研讨会》，2019 年，第 189–201 页。[22] F. Raith、C. Blecha、T. Nagel、F. Parisio、O. Kolditz、F. G¨unther、M. Stommel 和 G. Scheuermann，《利用不变量空间的纤维曲面进行张量场可视化》，IEEE《可视化与计算机图形学汇刊》，第 25 卷，第 1131 页，2019 年，第 1 页，第 1122 页。[23] H. Edelsbrunner、J. Harer 和 A. K. Patel，《分片线性映射的 Reeb 空间》，载于第二十四届计算几何年度研讨会论文集，2008 年，第 242–250 页。[24] M. Sharma、T. B. Masood、S. S. Thygesen、M. Linares、I. Hotz 和 V. Natarajan，《用于电子跃迁可视分析的分割驱动剥离》，载于 IEEE 可视化会议论文集，《IEEE VIS 2021 短论文》。IEEE，2021 年，第 96–100 页。[25] J. Tierny、G. Favelier、J. A. Levine、C. Gueunet 和 M. Michaux，《拓扑工具包》，IEEE《可视化与计算机图形学汇刊》，第 24 卷，第 1 期，第 832–842 页，2018 年。

[26] C. E. Scheidegger、J. M. Schreiner、B. Duffy、H. Carr 和 C. T. Silva，《重新审视直方图和等值面统计》，*IEEE*《可视化与计算机图形学汇刊》，第 14 卷，第 1666 页，2008 年，第 6 期，第 1659 页。[27] F. Aurenhammer，《幂图：性质、算法与应用》，*SIAM* 计算期刊，第 16 卷，第 1 期，第 78–96 页，1987 年。[28] U. Ayachit，《*ParaView* 指南：并行可视化应用程序》，2015 年。[29] F. Morgan，《几何测度论：入门指南》，2000 年。[30] M. J. Frisch、G. W. Trucks、H. B. Schlegel、G. E. Scuseria、M. A. Robb 等，《Gaussian 16》，2016 年，Gaussian公司，康涅狄格州沃灵福德。



Mohit Sharma 是印度科学学院班加罗尔分校计算机科学与自动化系的博士生。他获得了印度信息技术学院海得拉巴分校计算机科学与工程专业的技术硕士学位。他的研究兴趣包括科学可视化、计算拓扑学及其应用。目前，他正从事多场数据可视化研究。



Talha Bin Masood是瑞典林雪平大学的博士后研究员。他在印度科学学院班加罗尔分校获得计算机科学博士学位。他的研究兴趣包括科学可视化、计算几何、计算拓扑学，以及这些领域在各类科学领域中的应用。



Signe S. Thygesen 是瑞典林雪平大学科学可视化专业的博士生。她毕业于隆德大学，获得工程物理理学硕士学位。她的研究兴趣包括科学可视化和拓扑数据分析，以及它们在科学领域中的应用。在近期的研究中，她开发了用于探索和可视化表示分子电子跃迁的方法。



Mathieu Linares 于2005年在法国马赛的保罗·塞尚大学获得理论化学博士学位，并在此期间开发了一种价键方法。2006年，他前往蒙斯（比利时）的新材料化学实验室进行博士后研究，研究溶液中及表面上的自组装建模。随后，他先后在林雪平大学计算物理组（2008—2009年）以及理论化学组

和瑞典斯德哥尔摩瑞典皇家理工学院（2010年）工作。目前，他在林雪平大学同时担任有机电子学实验室和科学可视化组的副教授。他的主要研究兴趣包括手性、溶液中及表面上的自组装、有机材料的光电性质，以及分子可视化。



Ingrid Hotz 现任瑞典林雪平大学科学可视化教授。她在德国凯撒斯劳滕大学计算机科学系获得博士学位。她的研究兴趣包括数据分析和科学可视化，涵盖从基础研究问题到应用中可视化问题的有效解决方案。



Vijay Natarajan 是印度科学研究所班加罗尔分校计算机科学与自动化系的Mindtree讲席教授。他在杜克大学获得计算机科学博士学位。他的研究兴趣包括科学可视化、计算拓扑和计算几何。目前，他正在开发用于时变数据和多场数据可视化的拓扑方法，并研究其在生物学、材料科学和气候科学中的应用。