

СИСТЕМА ТРЕХМЕРНОГО ОТОБРАЖЕНИЯ КОНФИГУРАЦИИ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ КЛАСТЕРОВ

А.Н. Коварцев, В.С. Смирнов

Самарский государственный аэрокосмический университет им. С.П. Королёва

Описана система, позволяющая строить трехмерное изображение и проводить визуальный анализ конфигурации металлических кластеров. Платформой разработки послужила среда Matlab 2012, функционирующая в операционной системе Windows 8.

Введение

Одной из практических и теоретических задач нанотехнологий является оптимизация структуры атомных и молекулярных кластеров, цель которой - нахождение лучших в некотором смысле объемных конфигураций наноразмерных частиц. Оптимальные конфигурации кластеров могут строиться с использованием разных моделей межатомного взаимодействия, каждая из которых по-своему описывает поведение атомов в кластерах, учитывая межатомные силы. Одной из наиболее используемых моделей является так называемый «кластер Морса». Эта модель позволяет описывать различные конфигурации металлических кластеров и находить среди них оптимальные, имеющие минимальную потенциальную энергию меж-атомных связей (на рис. 1 приведены примеры подобных конфигураций с сайта Кембриджского университета [1]).

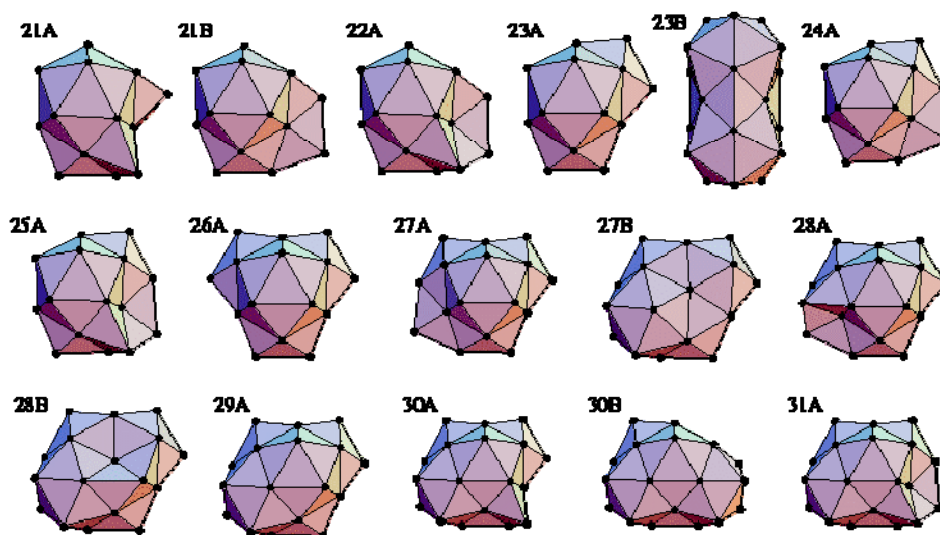


Рис. 1. Примеры оптимальных конфигураций металлических кластеров

В предлагаемом сообщении обсуждаются вопросы разработки системы конструирования и трехмерной визуализации кластеров Морса. Создание такого графического интерфейса с набором средств визуального анализа поможет исследователю находить оптимальные конфигурации многоатомных кластеров. В частности, при развитых средствах визуального анализа для поиска оптимальной конфигурации можно опереться на интуицию пользователя созданной системы, применять различные эвристики для реконфигурирования кластера.

1. Платформа разработки

Всякий комплекс программ можно оценить двумя критериями: точность и удобство. Точность означает, что при поступлении на вход комплекса допустимых входных значений, на его выходе будут получены верные результаты. Нередко лишь эта сторона является главной заботой разработчиков программного обеспечения, тогда как удобству работы с вычислительной системой уделяется гораздо меньше внимания. Напротив, в задании на разработку рассматриваемой системы задачи обеспечения наглядности и удобства интерфейса были едва ли не более высоки, чем требования к точности результатов вычислений потенциалов энергетических полей.

Фундаментальные вопросы организации интерфейса «человек-компьютер» рассмотрены в монографиях [2-4]. В рассматриваемой задаче основу интерфейсной компоненты программной системы составляет подсистема изображения и визуального анализа трехмерных структур. Построение 3D-образов сложных тел (у нас кластеров) тесно связана с технологией триангуляции трехмерных поверхностей.

Анализ показал, что среди доступных сред программирования надлежащим комплексом возможностей обладает платформа – «математическая лаборатория» MATLAB [5]. В ее стандартном инструментарии присутствуют функции, позволяющие построить триангуляцию Делоне для множества точек на плоскости или в трехмерном пространстве (рис. 2).



Рис. 2. Триангуляция Делоне, используемая при построении трехмерных выпуклых оболочек множества точек

В вычислительных экспериментах было установлено, что возможности и мощность выбранной платформы достаточны для реализации разрабатывавшейся системы. Однако при использовании стандартных инструментов MATLAB для триангуляции Делоне вокруг интересующих нас кластеров можно было обрисовывать лишь трехмерную выпуклую оболочку, когда впадины поверхности сглаживаются. Эта картина не соответствует действительной природе металлических кластеров.

2. Базовый алгоритм трехмерной визуализации

Укрупненная блок-схема алгоритма, строящего трехмерные изображения металлических кластеров с учетом того, что поверхность кластера может быть невыпуклой, содержать впадины, а также участки, где несколько внешних точек кластера лежат в одной плоскости, приведена на рис. 3.

Предложенное решение основывается на использовании физических соображений о положении атомов кластера, построения специальной базовой системы координат для точек кластера, применение векторной оптимизации для классификации точек кластера и др.

Визуальный анализ построенных кластеров показал адекватность воспроизведения поверхности кластеров, включая их выпуклости и впадины.

3. Апробация системы

Для оценки качества созданной программной системы проведено сравнение полученных трехмерных моделей металлических кластеров с вариантами оптимальных

конфигураций металлических кластеров, полученными в Кембриджском университете [1]. Изображения кластеров типа 34В и 34С, полученные с помощью построенной программной системы приведены на рис. 4.



Рис. 3. Алгоритм построения трехмерной оболочки кластера

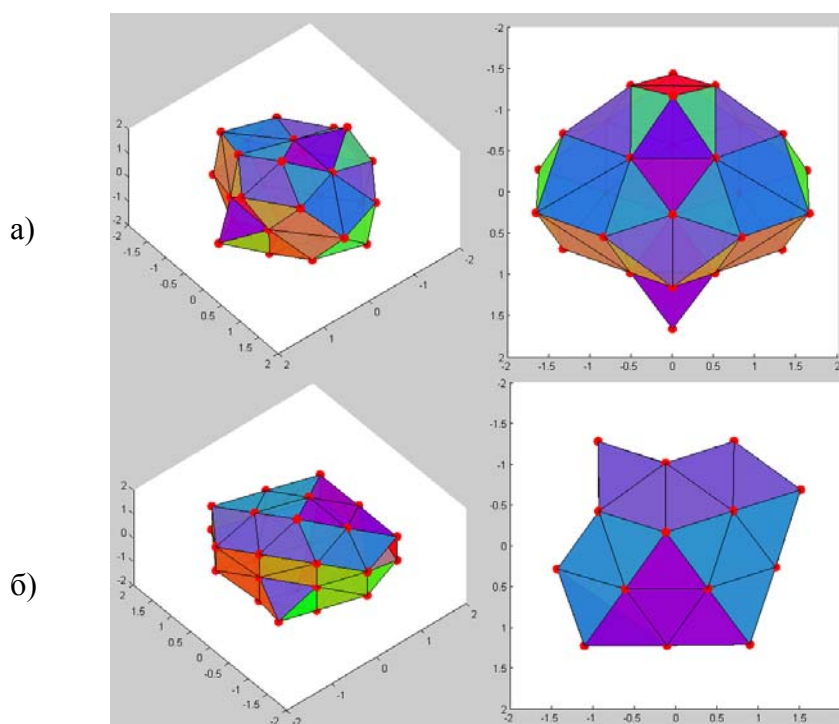


Рис. 4. Полученные изображения металлических кластеров типа 34В (а) и 34С (б)

Визуальный анализ построенных кластеров показал совпадение результатов работы независимо от созданных программных комплексов, включая все характерные особенности (выпуклости и впадины) трехмерных моделей кластеров.

Заключение

Разработанная система трехмерного отображения и визуального анализа многоатомной молекулы – металлического кластера является необходимой частью программного обеспечения для поиска оптимальной конфигурации молекулярно-атомных кластеров с минимальной энергией. Предполагается (и эксперименты это подтверждают), что удобный многофункциональный интерфейс системы окажется пригодным по крайней мере для эвристического поиска возможностей улучшения свойств конфигураций кластеров.

Литература

1. <http://doye.chem.ox.ac.uk/jon/structures/Morse/pictures.html>.
2. Коутс Р., Влейминк И. Интерфейс «человек-компьютер»: Пер. с англ. – М.: Мир, 1990. – 501 с.
3. Зенкин А. Основы когнитивной компьютерной графики. - М.: Наука, 1991. - 344 с.
4. Раскин Д. Интерфейс: новые направления в проектировании компьютерных систем: Пер. с англ. – СПб: Символ-Плюс, 2004. – 272 с.
3. <http://www.mathworks.com/products/matlab>.