

УДК: 514.87

## ОСОБЕННОСТИ ПОСТРОЕНИЯ ГЕОМЕТРИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ КРИСТАЛЛОВ НА ОСНОВЕ ЯЧЕЕЧНОГО МЕТОДА

В.В. Карабчевский, А.В. Пашинская  
Донецкий национальный технический университет  
[anna.pashinskaya@mail.ru](mailto:anna.pashinskaya@mail.ru)

*В статье рассмотрен способ генерации в трехмерном пространстве кристаллов в виде трех- и четырехугольных призм, приведены алгоритмы построения отрезка прямой и отсека плоскости, принципы роста кристаллов, примеры визуализации объема моделирования и его сечения, полученные с применением пакетов Mathcad и 3ds MAX.*

**Цели и задачи статьи.** Необходимо разработать методы построения в трехмерном пространстве кристаллов, заданных набором ребер (отрезки прямых) и граней (треугольные и четырехугольные отсеки плоскостей), рассмотреть возможные способы визуализации результата моделирования – трехмерной схемы распределения кристаллов и пространстве и двухмерного изображения, являющегося плоским сечением пространства моделирования.

**Анализ исследований и публикаций.** Разработке способов геометрического моделирования возникновения, роста и взаимодействия многогранников, а так же моделирования кристаллизации как прикладного приложения, в настоящее время уделяется немало внимания: комбинированный подход геометрического анализа и численных методов [1] позволил получить двухмерные изображения кристаллов, трехмерное изображение кристаллов может быть получено по методам, изложенным в [2-3], система построений в трехмерном ячеечном пространстве подробно рассмотрена в [4]. В приведенной статье изложено развитие геометрических методов, опубликованных в [5-6].

**Принципы геометрической модели.** Условия для разработки модели можно описать следующим образом: рассматриваем только самопроизвольное зарождение кристаллов, форма зародышей ограничена прямоугольными и треугольными призмами, в расплаве нет примесей, пространство моделирования является трехмерным, разбитым на отдельные ячейки – области кубической формы с длиной стороны, равной единице. Каждый зародыш кристалла

задається набором ячеек. Ячейкой-источником назовем ячейку пространства, из которой возможно предпринять шаг единичной длины, ячейкой-претендентом – ячейку пространства, находящуюся в шаге единичной длины от ячейки-источника. В процессе роста зародыш сохраняет форму до тех пор, пока не сталкивается с другими зародышами. Иначе рост на месте столкновения граней прекращается. Рост граней происходит вдоль нормалей к их поверхностям.

Построение зародыша разбито на несколько этапов, рассмотрим самые важные из них – построение ребра (отрезок прямой) и построение грани (отсек плоскости).

Пусть отрезок задан точками  $(x_1, y_1, z_1)$ ,  $(x_2, y_2, z_2)$ . При построении отрезка возможно два варианта: отрезок параллелен одной из осей координат, отрезок занимает общее положение. В первом варианте рассчитываем приращения  $dx=x_1-x_2$ ,  $dy=y_1-y_2$ ,  $dz=z_1-z_2$ , выбираем ось, для которой данная разность не равна нулю. Допустим, что  $dx \neq 0$ ,  $dy=0$ ,  $dz=0$ . Тогда поиск координат  $(x, y, z)$  следующих точек реализуется следующим образом:

$$x=x_1; y=y_1; z=z_1$$

Пока  $(x < x_2)$

{  $x=x+1$ ; ставим точку  $(x, y, z)$  }

Во втором случае воспользуемся модифицированным алгоритмом Брезенхема. Суть модификации состоит в двух последовательных использований данного алгоритма для двухмерного случая. Для корректной работы алгоритма Брезенхема проводится предварительная сортировка осей координат по уменьшению длины шага вдоль оси: пусть существует три оси  $X$ ,  $Y$ ,  $Z$  и вектор приращений  $(dx, dy, dz)$ , тогда отсортированными назовем оси, для которых верно утверждение  $dx \geq dy \geq dz$ . Для первого прохода алгоритма делаем развёртку простым счётным циклом по самой длинной стороне вектора, т.е. по оси  $X$ , вычисляя приращения  $dy$ . В свою очередь, второй проход вычисляет приращения  $dz$  по приращению координат  $dy$ , вычисленному ранее. Схема вычислений для отрезка, заданного точками  $(x_1, y_1, z_1)$ ,  $(x_2, y_2, z_2)$ , выглядит следующим образом:

$$dx = \text{abs}(x_2 - x_1); // \text{длины путей по координатным осям}$$

$$dy = \text{abs}(y_2 - y_1);$$

$$dz = \text{abs}(z_2 - z_1);$$

сортировка осей  $(X, Y, Z)$ ; //  $dx \geq dy \geq dz$ .

рассчитываем единичные направления движения  $sx, sy, sz$ ;

ставим точку  $(x_1, y_1, z_1)$ ;

$$d = 2 * dy - dx; // \text{задаем пару «x»-«y»}$$

$$d_1 = 2 * dy;$$

```
d2 = 2*(dy-dx);  
dd = 2*dz-dy; // задаем пару «y»-«z»  
dd1 = 2*dz;  
dd2 = 2*(dz-dy);  
x=x1+sx;  
y=y1;  
z=z1;  
для i=1; i≤dx; i++, x+=sx  
{ // первый «брезенхем», в счётном цикле  
  если d>0  
  { d+=d2;  
    y+=sy;  
    // был выполнен шаг по средней оси -Y'.  
    // второй «брезенхем»  
    если dd>0  
    { dd+=dd2;  
      z+=sz;  
    } иначе dd+=dd1; // конец второго  
  }  
  «брезенхема»  
  } иначе d+=d1; // конец первого «брезенхема»  
  ставим точку(x,y,z)  };
```

Заполнение ячеек, принадлежащих грани, происходит по методу штриховки. Т.к. нам известны координаты точек, лежащих на ребрах кристалла, то, используя любой известный алгоритм построения отрезка прямой в пространстве, можно соединить эти точки отрезками. В этом случае грань постепенно «заштриховывается».

Гранями кристалла являются трех- или четырехугольные отсеки плоскости, задающиеся соответственно отрезком и точкой или двумя отрезками. Рассмотрим случай построения треугольной грани. Пусть точки ребра  $\in$  множеству  $edge = \{e_1, e_2, \dots, e_n\}$  размерностью  $n$ , причем  $e_i = \{x_i, y_i, z_i\}$ , где  $(x_i, y_i, z_i)$  – координаты  $i$ -й точки ребра, и точка  $A(x, y, z) \notin edge$ . Схема вычислений выглядит следующим образом:

```
для i=0; i<n; i++  
{ построение прямой по алгоритму Брезенхема для точек с  
координатами (x,y,z) и (e_i[x], e_i[y], e_i[z]);  
}
```

При построении грани, являющейся четырехугольными отсеком плоскости, и заданной множествами  $edge1 = \{e1_1, e1_2, \dots, e1_n\}$  и  $edge2 = \{e2_1, e2_2, \dots, e2_n\}$ , имеющими одинаковую размерность  $n$ , схема вычислений выглядит так:

```
для i=0; i<n; i++
```

{ построение прямой по алгоритму Брезенхема для точек с координатами  $(e1_i[x], e1_i[y], e1_i[z])$  и  $(e2_i[x], e2_i[z], e2_i[z])$ ;  
}

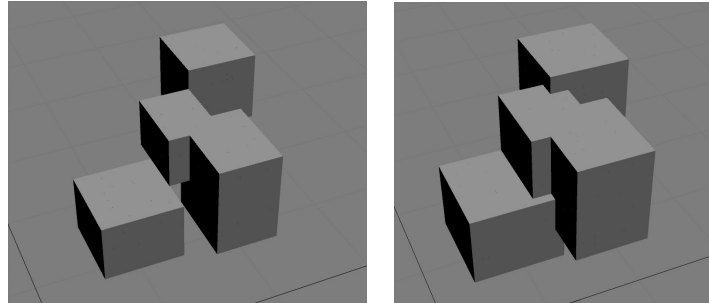
При заполнении внутреннего пространства кристалла используется стандартный алгоритм заливки. Рост кристалла реализован как движение вдоль нормалей ячеек кристалла. Для ячейки с координатами  $(x, y, z)$  и нормальями  $n1=\{a_1, b_1, c_1\}$ ,  $n2=\{a_2, b_2, c_2\}$ ,  $n3=\{a_3, b_3, c_3\}$  координатами ячеек-претендентов будут такие координаты:  $(x+a_1, y+b_1, z+c_1)$ ,  $(x+a_2, y+b_2, z+c_2)$ ,  $(x+a_3, y+b_3, z+c_3)$ ,  $(x+a_1+a_2, y+b_1+b_2, z+c_1+c_2)$ ,  $(x+a_1+a_3, y+b_1+b_3, z+c_1+c_3)$ ,  $(x+a_3+a_2, y+b_3+b_2, z+c_3+c_2)$ ,  $(x+a_1+a_2+a_3, y+b_1+b_2+b_3, z+c_1+c_2+c_3)$ . Если ячейка-претендент свободна, то помечаем ее, как занятую. При этом она будет наследовать нормали ячейки-источника. Ячейка-источник помечается как внутренняя, дальнейшее перемещение из нее становится невозможным.

Результатом описанных вычислений является множество значений  $Point=\{p_1, p_2, \dots, p_v\}$ , где  $v=N \cdot M \cdot K$ ,  $N, M, K$  – целочисленные размерности пространства по осям  $X, Y, Z$ ;  $pi=\{x_i, y_i, z_i, normal_i\}$  – множество точек, в котором  $x_i, y_i, z_i$  – координаты точки,  $normal_i$  – множество соответствующих ей нормалей;  $normal_i=\{nor_1, nor_2, nor_3\}$  – множество с максимальной размерностью равной 3, в котором каждый элемент  $nor_i$  описывает нормаль с параметрами  $\{a_i, b_i, c_i\}$ , причем  $normal_i$  может быть пустым или неполным (в случае если соответствующая ячейка внутренняя или принадлежит грани).

**Расчет и визуализация.** Результат расчета сильно зависит от точности вычислений при округлении величин. Поэтому, согласно изложенным принципам, было проведено моделирование в системе Mathcad. Визуализацию результата можно проводить любыми удобными средствами, поддерживающими функции считывания из файла и функции работы с графикой, т.к. результирующие множества записывались в файл с расширением txt. В данной работе результаты вычислений используются для построения изображения в среде 3ds MAX. Все приведенные изображения показывают результат зарождения и роста кристаллов, грани которых расположены параллельно плоскостям координат или повернуты на некоторый угол  $\alpha$  вокруг оси  $OZ$ , а так же их сечения плоскостью, параллельной плоскости  $OX$ .

На рис.1 показано положение кристаллов после генерации (а) и после одного этапа роста (б). Ячейка отображается как куб, с длиной стороны равной единице. На рис. 2 показана визуализация призм с треугольным основанием с помощью кубов (а), сфер (б), точек(в). На

рис. 3 представлена візуалізація кристаллів в виде призм с четырехугольным основанием. Каждый кристалл повернут вокруг оси  $OX$ .



а)

б)

Рисунок 1 – Візуалізація кристаллів при  $\alpha=0$  с помощью кубов

**Выводы и перспективы.** Существующая программная реализация геометрической модели зарождения и роста кристаллов обладает рядом ограничений (по форме кристаллов и их положению в пространстве), для повышения точности результата желательно использование специализированных математических пакетов. Задачу визуализации результата целесообразно отделить от задачи моделирования роста кристаллов, т.к. допускается использование различных методов отображения множества точек. Дальнейшее развитие модели должно проходить в двух направлениях: повышение скорости вычислений, расширение списка допустимых форм кристаллов.

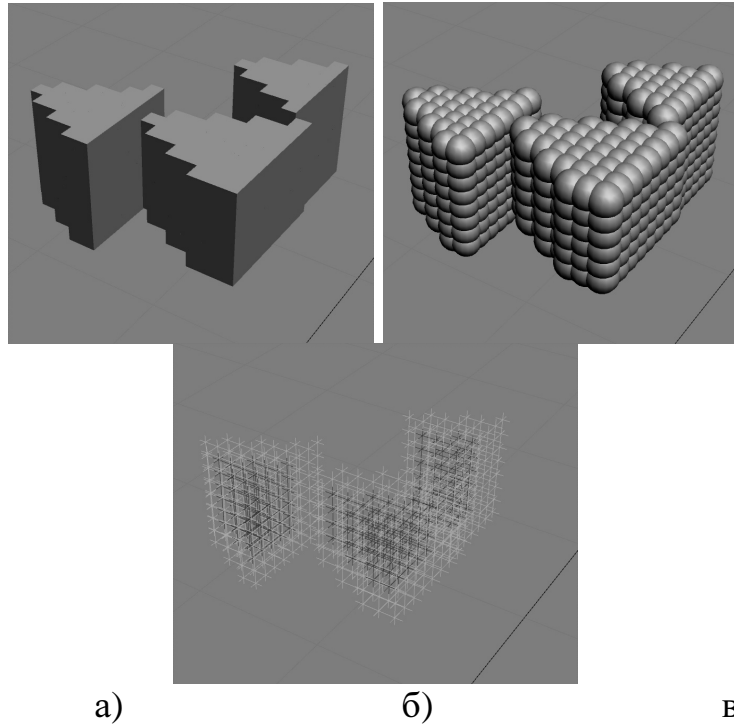


Рисунок 2 – Визуалізація кристалів в виде трикутних призм  
с помощью кубов (а), сфер (б), точек(в)

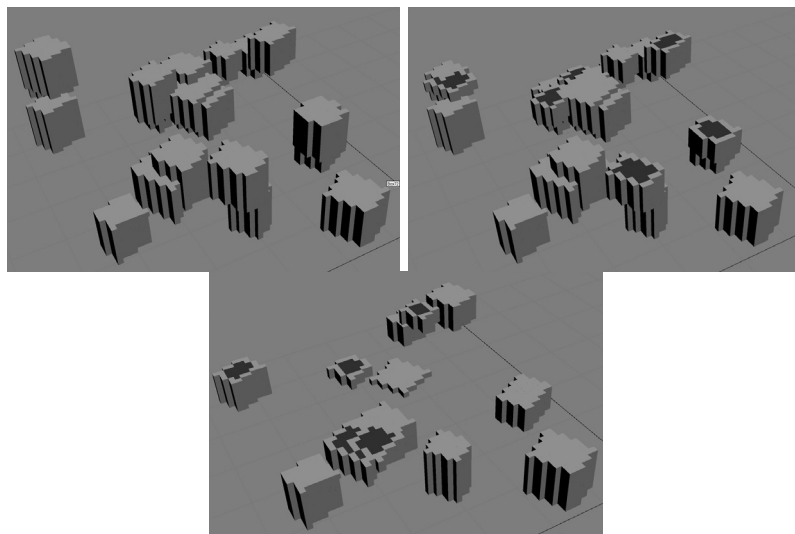


Рисунок 3 – Визуалізація кристалів при  $0 < \alpha < 30$  с помощью  
кубов

#### Список литературы

1. M. Grujicic, G. Cao, R.S. Figliola. Computer simulations of the evolution of solidification microstructure in the LENS<sup>TM</sup> rapid fabrication process. – Applied Surface Science 183, 2001, pp. 43-57
2. C.E. Krill III, L.-Q. Chen. Computer simulation of 3-D grain growth using a phase field Model – Acta Materialia 50, 2002, pp. 3057-3073
3. Бреднихина А.Ю. Разработка средств геометрического моделирования и

научной визуализации для поддержки обучения и исследований в области кристаллографии: автореферат дис. кандидата технических наук : 05.13.18 / Бреднихина Анна Юрьевна; [Место защиты: Ин-т вычисл. математики и мат. геофизики]. – Новосибирск , 2009,16 с.

4. Jan Müller. Volume Modelling And Rendering Based On 3D Voxel Grids, 2005, [электронный ресурс] - <http://fullebooks.net>

5. Карабчевский В.В., Пашинская А.В. Геометрическое моделирование роста кристаллов в расплавах. – Міжвідомчий науково-технічний збірник «Прикладна геометрія та інженерна графіка». Випуск 85. – К:КНУБА, 2010 р. – с. 19-24.

6. Карабчевский В.В., Пашинская А.В. Особенности воксельной модели процесса роста многогранников. – Міжвідомчий науково-технічний збірник «Прикладна геометрія та інженерна графіка». Випуск 87. – К:КНУБА, 2011 р. – с. 149-153.

Получено 10.09.2011