

РАЗРАБОТКА ПРИНЦИПОВ ГЕОМЕТРИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ В ТРЕХМЕРНОМ ПРОСТРАНСТВЕ

В.В. Карабчевский, А.В. Пашинская
Донецкий национальный технический университет

В статье рассмотрены основные принципы генерации трехмерной схемы кристаллизации средствами компьютерной графики. Рассмотрены способы задания параметров кристаллизации, приведен пример структур для обработки данных, алгоритмы построения элементов схемы.

Введение

В настоящее время кристаллизация изучается в разных сферах промышленности, начиная пищевой и заканчивая металлургической. Актуальность решения вопроса о моделировании процессов кристаллизации заключается в сокращении ресурсов, выделяемых на постановку экспериментов с целью отладки производства. Классическими являются методы построения математических моделей отдельных подсистем затвердевающего слитка, основанные на влиянии различных физических явлений в охлаждаемом расплаве — тепло- и массообмена, движения расплава, зарождения и роста кристаллов [1]. На макроскопическом уровне рост может считаться непрерывным процессом, и его можно описывать с помощью дифференциальных уравнений в частных производных [2]. Исследованиями процесса моделирования занимаются так же на базе Новосибирского государственного университета (А. Бреднихина, [3]), Физико-технического института имени А.Ф. Иоффе Российской академии наук (В.А. Лагунов, А.Б. Синани, [4]). Метод численного моделирования исследуется в Московском государственном институте электронной техники В.А. Гончаровым [5], Физико-техническом институте имени А.Ф. Иоффе Российской академии наук (М.В. Богданов, [6]).

Геометрический подход к моделированию процесса роста кристаллов на данный момент является малораспространенным, однако он позволяет использовать только геометрические параметры самих кристаллов, вне зависимости от окружающей среды.

Постановка задачи

Идея предложенного подхода заключается в следующем: в некотором объеме случайным образом генерируются зародыши кристаллов. Каждый зародыш может расти, пока вокруг него есть свободное пространство. Рост грани происходит вдоль

перпендикуляра к ее поверхности. На месте соприкосновения двух и более граней рост прекращается. Опишем алгоритм, используя в качестве примера параллелепипед как одну из возможных форм кристалла.

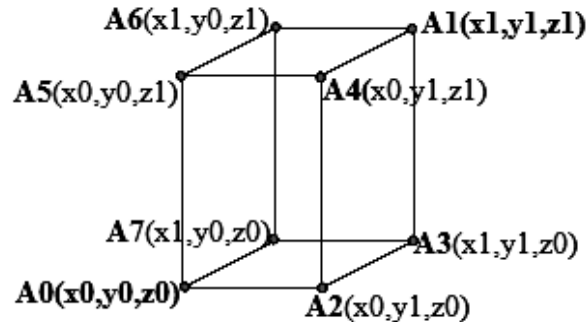


Рис. 1 – Расположение исходных вершин параллелепипеда

Генерация кристаллов в пространстве производится следующим образом: случайным образом генерируем 2 точки $A_0(x_0, y_0, z_0)$, $A_1(x_1, y_1, z_1)$. Строим по ним параллелепипед (рис. 1), ориентированный по осям координат. Далее генерируем три угла поворота (углы Эйлера), вычисляем точку центра фигуры, как середину отрезка A_0A_1 . Переносим центр фигуры в начало координат, осуществляем поворот, умножая последовательно все точки на матрицу поворота, делаем обратный перенос.

Построение ребер можно реализовывать прямым перебором координат x, y, z , последовательно подставляя все возможные значения в уравнение прямой, проходящей через заданные вершины. Однако это неоптимальный вариант. Для повышения быстродействия необходимо найти вектор $n = (x_2 - x_1, y_2 - y_1, z_2 - z_1)$, проходящий через вершины ребер $A(x_1, y_1, z_1)$ и $B(x_2, y_2, z_2)$ и нормировать его, разделив его элементы на величину $\sqrt{(x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2 + (z_2 - z_1)^2}$. Далее двигаясь от точки A к B следует прибавлять к координатам точки A полученные элементы вектора n .

Закрашивание поверхности грани производится с помощью рекурсивного алгоритма. В качестве исходной точки берем произвольную вершину грани. Проверяем, свободна ли она и удовлетворяют ли ее координаты уравнению плоскости, в которую грань вписана. Если да, то закрашиваем ее и повторяем процедуру для всех соседних ячеек (соседними с i -й ячейкой с координатами x, y, z считаются ячейки с координатами $(x-1, y, z)$, $(x+1, y, z)$, $(x, y-1, z)$, $(x, y+1, z)$, $(x, y, z-1)$, $(x, y, z+1)$, $(x-1, y-1, z)$, $(x-1, y+1, z)$, $(x+1, y-1, z)$, $(x+1, y+1, z)$, $(x, y-1, z-1)$, $(x, y-1, z+1)$, $(x, y+1, z-1)$, $(x, y+1, z+1)$).

$(x-1,y,z+1)$, $(x+1,y,z+1)$, $(x+1,y,z-1)$.

Аналогичным образом реализуется заполнение внутренней области объекта: точка центра помечается как внутренняя, далее функция рекурсивно вызывается для всех свободных соседних точек. Соседними считаются те же ячейки, что и при заполнении грани.

Опишем процесс роста грани на примере. Допустим, у нас имеется ячейка грани M с координатами (x,y,z) и нормаль $n(a,b,c)$, причем $\sqrt{a^2+b^2+c^2}=1$. Координаты нового положения ячейки равны $(x+a, y+b, z+c)$. Если дробная часть одной из координат (или любой их комбинации) превысила 0.5, то занятой по-прежнему считается ячейка M , т.е. округление не производится. Однако если после суммирования произошел перенос из дробной части, то ячейка M становится занятой ячейкой (все ее параметры заполняются единицами), ячейка, которая соответствует целой части новых координат, становится граничной (т.е. в нее записываются вещественные числа, задающие координаты).

Для вершин кристалла необходимо проводить предварительное суммирование нормалей всех граней, которым она принадлежит (рис. 2), затем нормировать полученные значения.

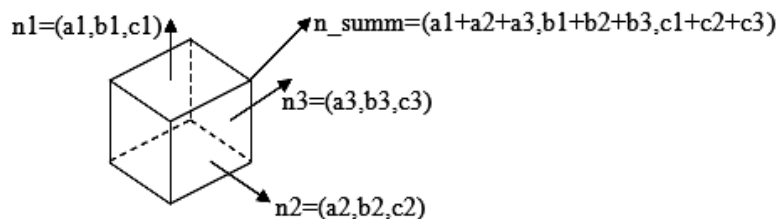


Рис. 2 – Нормаль вершины

Опишем структуры данных, необходимые для программного моделирования. В соответствие каждой ячейке ставится четыре значения: указатель на данные о нормали, точное значение координат x,y,z каждой точки. Первое значение одинаково для всех ячеек, принадлежащих одной грани и является указателем на таблицу значений нормалей.

Каждая точка пространства может находиться в трех глобальных состояниях: ячейка занята кристаллом, ячейка свободна, ячейка является границей раздела жидкости и твердого вещества. Если ячейка свободна либо занята, она имеет заполнитель 0 и 1 соответственно, иначе она содержит координаты точки границы в пространстве.

Пространство, в котором производится моделирование, для повышения наглядности должно содержать большое количество ячеек

(порядка 500^3). Каждой ячейке соответствует 4 вещественных числа. Оптимальным способом хранения такого объема информации является хранение в служебном файле, куда заносятся данные о каждом слое моделируемого объема (к примеру, каждый слой соответствует ячейкам с одинаковой координатой z). Обработка данных производится последовательно, для принятия решения необходимо знать значения не только самой ячейки, но и ее ближайших соседей. Поэтому целесообразно считывать информацию из файла послойно: для $i=1, n-1$ считываем i -й, $i+1$ -й, $i-1$ -й слои. Для первого и последнего слоя соседями являются границы моделируемой области.

Хранение значений нормалей организовано следующим образом: при генерации кристаллов определяются характеристики нормалей к граням кристалла, полученные характеристики заносятся в таблицу, соответствующим ячейкам присваиваются указатели на нужную запись таблицы. Пример такой таблицы для нормалей $p_j=(a_j, b_j, c_j)$, где $j=1, M$ – номер грани (таблица 1):

Таблица 1 – Таблица нормалей

j	a_j	b_j	c_j
1	a_1	b_1	c_1
2	a_2	b_2	c_2
...
M	a_M	b_M	c_M

Для дальнейшего анализа необходимо получить плоское сечение объема. Пользователь должен задать направление плоскости сечения (в виде трех точек) и момент (или несколько моментов) построения сечения. Таким образом, в распоряжении пользователя оказывается несколько временных срезов, показывающих динамику развития процесса.

Дальнейший анализ полученной схемы проводится методами линейного анализа [7]. Значимыми являются следующие величины: количество соприкосновений одного кристалла с другими, количество границ у кристалла с некристаллической структурой (связующим веществом, не принимающим участия в кристаллообразовании), удельная площадь соприкосновений. Данные характеристики замеряются у сгенерированной схемы и у реального образца при условии подобия форм кристаллов и условий их формирования, после чего можно делать вывод о соответствии схемы и реального образца.

В настоящее время реализована упрощенная двумерная модель, демонстрирующая взаимодействие кристаллов на плоскости [8].

Выводы

В данной работе рассмотрены принципы формирования трехмерной схемы кристаллизации. Рассмотрены алгоритмы генерации исходных данных, алгоритмы визуализации результата, структуры хранения и обработки данных. Рост кристаллов рассмотрен с позиции анализа геометрических изменений каждого отдельного элемента и всей системы в целом. Анализ полученных результатов необходимо проводить теми же методами, что и анализ реальных фотоснимков поверхности шлифов образцов. Ведется работа над программной реализацией изложенных в статье принципов.

Список литературы

1. Самойлович Ю. А. Системный анализ кристаллизации слитка. Киев: Наук. думка, 1983. — 248 с.
2. Sunagawa I. Crystals: Growth, Morphology and Perfection / Cambridge University Press – 2004.
3. Бреднихина А. Моделирование роста 2-х кристаллов на подложке. URL: <http://www.ict.nsc.ru/ws/YM2007/12700/Brednikhina.htm>
4. Лагунов В.А., Синани А.Б.. Компьютерное моделирование формирования кристаллической структуры при переходе из аморфного состояния / Физика твердого тела, 2000, том 42, вып. 6
5. Гончаров В.А. Численное моделирование процесса выращивания полупроводниковых кристаллов из расплава методом направленной кристаллизации // Теор. основы хим. технологии. 2001. Т. 35. № 3. С. 257-264.
6. Bogdanov M.V., Ofengeim D.Kh., Zhmakin A.I. Industrial Challenges for Numerical Simulation of Crystal Growth / CEJP 2(1) 2004 183-203.
7. Салтыков С.А. Стереометрическая металлография. Стереологический анализ материалов. – Москва: Металлургия, 1976. -272 с.
8. Karabchevsky V.V. Pashinskaya A.V. Process of crystal growth in liquid melt: modeling and rendering // 16th International Students' Day of Metallurgy, 2009, p.69.

Получено 28.05.09