

Программный комплекс для изучения кристаллических агрегатов для Интерактивной системы обучения "Кристалл"

Анна Бреднихина
Новосибирский государственный университет

Цель работы

Цель работы – создание многофункционального программного комплекса, предназначенного для моделирования *процесса образования и методов анализа* сложных *кристаллических агрегатов*, состоящих из сростков различных и/или однотипных кристаллов.

Разработанный комплекс планируется внедрить в свободно доступную в сети Internet Интерактивную систему обучения (ИСО) "КРИСТАЛЛ" (<http://ggd.nsu.ru/Crystal>), применяемую в учебном процессе на геолого-геофизическом факультете Новосибирского государственного университета.

Основная функциональность данного программного комплекса – это моделирование изменений внутренней и внешней структуры кристаллических агрегатов в зависимости от условий роста, а также расчет изображений тонких срезов модельных агрегатов в поляризованном свете.

Основные задачи:

- предоставить аппарат, позволяющий изучать процесс образования кристаллических агрегатов, а также в дальнейшем и предсказывать их внешнюю форму, структуру и свойства в зависимости от исходных характеристик и условий роста;
- предоставить средство для расчета изображений для сравнения результатов моделирования с реальными изображениями кристаллических агрегатов, наблюдаемыми с помощью петрографического микроскопа.

Актуальность работы

Практически в каждом ВУЗе есть курсы по кристаллографии и минералогии, в которых рассматриваются проблемы роста кристаллов, излагаются теории роста и т.д. Основой проблемой таких курсов является то, что нельзя продемонстрировать сам процесс, нельзя пояснить на примере как изменяются свойства кристаллов в зависимости от различных условий. Основным решением такой проблемы могут быть только компьютерные модели.

В сети Internet существует несколько программных продуктов, позволяющих моделировать рост кристаллов, например Shape 7.2 (<http://www.shapesoftware.com>). Однако все они являются платными, что создает серьезные проблемы для их использования в образовательном процессе. Данная работа направлена на разработку свободно доступного программного продукта, интегрированного в существующую информационно-справочную систему ИСО "КРИСТАЛЛ". В первую очередь данный программный пакет *ориентирован на преподавателей и студентов*

геолого-минералогических специальностей, занимающихся в области роста кристаллов и анализе минералов, а также просто лиц, например, коллекционеров, заинтересованных в изучении кристаллов, как естественных, так и искусственных.

Несмотря на то, что наиболее востребованными в промышленности являются монокристаллы, кристаллические агрегаты имеют значительно большее распространение в природе и значительно чаще получают в процессе искусственного роста. Для большинства областей кристаллические агрегаты неприменимы из-за сложной структуры, которую сложно анализировать и еще более сложно предсказать.

В настоящее время область применения кристаллических агрегатов ограничена производством солнечных энергетических элементов. Но даже в данной сфере говорят о том, что необходимо средство для предсказания некоторых характеристик получаемых солнечных панелей, связанных с их внутренней структурой. Как показала 4^{ая} Азиатская конференция по росту кристаллов и технологиям выращивания, специалисты данной области уделяют особое внимание структурным характеристикам и проводят исследования на основе экспериментов. Однако в данной области серьезный вклад могут внести теоретические исследования, математическое моделирование и, в особенности, компьютерное моделирование.

Таким образом, компьютерное моделирование роста кристаллических агрегатов, разработка математических моделей их роста являются новыми и важными направлениями, как в кристаллографии, так и в математическом моделировании. Исследования и разработки в данных направлениях могут увеличить интерес к кристаллическим агрегатам в целом, расширить область их применения, например, в нелинейной оптике лазеров, а не только в производстве солнечных панелей.

Новизна

Для разработки комплекса для исследования кристаллических агрегатов требуется разработка моделей их образования и методов исследования.

В теории роста кристаллов известно множество моделей роста кристаллов, рассматривающих рост на различных масштабах времени и пространства [1]. Однако большинство из них предназначены для моделирования роста одиночного кристалла и в основном (к исключениям можно отнести вероятностные модели) не применимы для моделирования роста кристаллических агрегатов.

3D модель роста кристаллов на подложке – частный случай, с которого мы начали моделирование. Интерес к росту кристаллических агрегатов возникал и ранее в различных областях. Например, специалисты компьютерной графики интересовались визуальными эффектами ледяных узоров на стекле. Они создали модель изменения внешней формы узора со временем [2], но ледяные узоры на окне – лишь частный случай роста кристаллов. Также известны разработки по моделированию изменения

внешней формы кристаллов. Например, в программном продукте Shape 7.2 (<http://www.shapesoftware.com>) имеется модуль для построения формы эпитаксиального сростка или двойника. Этот модуль позволяет моделировать процесс, когда растет только одна грань. Для этого случая в ShapeSoftware разработали геометрическую модель, с помощью которой на основе объединения внешних форм определяется внешняя форма сростка (или двойника). Данная модель основана на чисто геометрическом подходе без учета особенностей роста решетки, что в корне неправильно и может в случае параллельных граней дать совершенно неверные результаты. Также известны двумерные модели образования сростков кристаллов [3], но их экстраполяция на трехмерный случай не дает корректной модели особенностей роста кристаллической решетки в трехмерном пространстве.

Таким образом, разработка трехмерных моделей роста кристаллических агрегатов с учетом особенностей роста кристаллической решетки в пространстве, основанных на физике твердого тела, является новаторской в теории роста кристаллов и в области численных методов.

Что касается моделирования процесса исследования кристаллических агрегатов, а в частности визуального исследования их тонких срезов, то основной становится задача визуализации, базирующаяся на физически корректных моделях взаимодействия света с кристаллами. Данная задача является частью компьютерной графики. В данной области известны работы по моделированию распространения света в кристаллах [4], однако данные работы используют стандартное для компьютерной графики трехкомпонентное представление света (RGB – красный, синий, зеленый). В случае кристаллов данный подход является неверным, поскольку кристаллы по-разному взаимодействуют со светом с различными спектральными характеристиками (например, дисперсия и плеохроизм). Поэтому и моделирование необходимо вести с учетом спектра распространяющегося света.

Таким образом, моделирование с учетом спектральных характеристик оптических явлений, возникающих при взаимодействии с поляризованным светом и лежащих в основе исследований с помощью петрографического микроскопа, является новой задачей как в области кристаллографии и кристаллооптики, так и в области компьютерной графики.

Имеющийся задел

На протяжении более 10 лет существует ИСО "КРИСТАЛЛ", в которой содержится огромная база данных о форме кристаллов различных минералов и их оптических характеристиках. Данная система является гибкой и легко расширяемой.

В 2005-2006 году была разработана и внедрена в ИСО "КРИСТАЛЛ" компьютерная модель петрографического микроскопа [5], предназначенная для изучения оптических явлений, наблюдаемых в тонких сечениях

одиноким анизотропным кристаллом в поляризованном свете различных свойств. Данная модель ориентирована на кристаллы с малой анизотропией. С 2006 года в нашем коллективе ведется разработка физически корректной модели взаимодействия света с анизотропными кристаллами [6]. На данный момент разработана модель взаимодействия света с границей "изотропная среда – одноосный кристалл", "одноосный кристалл – одноосный кристалл". Разработан алгоритм визуализации одноосных кристаллов с учетом спектральных характеристик и выполнена его тестовая реализация.

С 2007 года нами ведется разработка геометрической модели роста кристаллических агрегатов в стационарных условиях на бесконечной подложке, которая рассматривает данный процесс на макроскопическом уровне. В рамках данной модели исходные кристаллы представляют собой выпуклые многогранники, расположенные на подложке, грани которых в процессе растут послойно в направлении нормалей с постоянными скоростями. На настоящий момент завершена разработка математической модели образования агрегатов, состоящих из двух кристаллов, разработаны и реализованы алгоритмы расчета внешней формы и внутренней структуры сростков для данного случая. Разработан алгоритм расчета внешней формы и внутренней структуры сростка для простейших случаев – агрегатов, образованных одинаково ориентированными кристаллами одинаковой формы [7].

Основные этапы работы

Разработка прототипа программного комплекса:

- Разработка алгоритмов расчета внутренней и внешней структуры агрегатов, состоящих из трех и более кристаллов.
- Разработка алгоритмов визуализации тонких срезов кристаллических агрегатов, наблюдаемых в параллельном поляризованном свете.
- Разработка прототипа модуля расчета структуры кристаллических агрегатов.
- Разработка прототипа модуля расчета изображений срезов в поляризованном свете.

Реализация конечной версии программного комплекса (разработка соответствующих Internet-приложений) и внедрение его в ИСО "КРИСТАЛЛ".

Ожидаемые результаты

1. Математическая модель поверхностно гладкого роста кристаллических агрегатов, состоящих из трех и более кристаллов.
2. Алгоритм расчета структуры кристаллических агрегатов на основе данной модели.
3. Алгоритм расчета изображений тонких срезов произвольных сечений кристаллических агрегатов в поляризованном свете.
4. Публикация статей по данной модели и алгоритмам.

5. Создание и внедрение программного комплекса в ИСО "КРИСТАЛЛ".

Востребованность

Предполагается, что предложенный программный комплекс, как уникальная разработка, будет иметь социальное влияние, а именно на сферу образования. Предложенный программный комплекс ориентирован в первую очередь на преподавателей и учащихся (студентов, школьников), интересующихся ростом кристаллов и методами их изучения. Предполагается, что данный программный комплекс будет использоваться в качестве учебного пособия как часть ИСО "КРИСТАЛЛ" для курсов кристаллографии, минералогии, петрографии, а также специализированных курсов по росту кристаллов:

- для объяснения общих закономерностей роста кристаллов, образования кристаллических сростков,
- пояснений зависимостей структуры от условий роста,
- для демонстрации примеров того, как выглядят отдельные кристаллы и агрегаты в целом и при наблюдении их в петрографическом микроскопе,
- для обучения работе с петрографическим микроскопом.

Литература:

1. H. Muller-Krumbhaar, Yu. Saito. Crystal growth and solidification / Surfactant Science Series, Vol. 89. CRC Press – 2000. С. 853-854.
2. Theodore Kim and Ming C. Lin. Visual simulation of ice crystal growth / Proc. ACM SIGGRAPH, Eurographics Symposium on Computer Animation 2003. С. 86-97.
3. П.Н. Гаврюшкин. Kinematics of crystal shape transformation from unstable to equilibrium state / Вестник молодых ученых "Ломоносов". Том 3. МГУ, 2006. С. 112-122.
4. Keith Primdahl. Fresnel Reflectance, Anisotropic Absorption, and Polarization in Rendering, to Show Crystallographic Effects // Представлено на CS348B, Image Synthesis Symposium, Stanford University, 2005.
5. В.А. Дебелов, А.Ю. Рубцова (Бреднихина), С.З. Смирнов. Компьютерная модель петрографического микроскопа // Труды XVI Международной конференции по компьютерной графике и ее приложениям Графикон-2006. Новосибирск-2006. С. 293-297.
6. Д.С. Козлов. Рендеринг изотропных полупрозрачных объектов с учётом поляризации луча // Материалы конференции-конкурса "Технологии Microsoft в теории и практике программирования". Новосибирский государственный университет. Новосибирск-2008.
7. Anna Brednikhina, Victor A. Debelov. On a geometric model of crystal growth on a flat substrate // Journal of Crystal Growth. Изд-во Elsevier. doi:10.1016/j.jcrysgr.2008.09.086 (в печати).