

АВТОМАТИЗАЦИЯ ПРОЕКТИРОВАНИЯ

УДК 658.512.011.56

Л.В. Бочкарева¹, М.В. Кирейцев²

МЕТОД ПОСТРОЕНИЯ ВИРТУАЛЬНОЙ МОДЕЛИ НАНОМАТЕРИАЛОВ

Рассмотрены особенности моделирования наноматериалов. Выполнен анализ современных программных средств (ПС), с помощью которых проектируются материалы на уровне нанообъектов. Предложен алгоритм построения и 3D-отображения кристаллических решеток наноматериалов. Рассмотрены особенности разработки ПС в среде автоматизированного синтеза Rational Rose.

Введение

В современных условиях становится актуальным создание программного обеспечения (ПО), позволяющего моделировать заданные материалы на уровне нанообъектов. Необходимость в подобном ПО вызвана появлением материалов с уникальными механическими свойствами, новыми функциями и областями применения. Это произошло благодаря введению в материал наноструктурного уровня воздействия, после чего потребовались методики компьютерного моделирования, оценки физико-механических свойств, динамики, прочности материалов и конструкций на их основе [1, 2].

Большинство ПС, используемых для моделирования материалов, создавалось из расчета на структурные уровни макро- и микроразмеров. Поэтому возникают проблемы в ходе применения таких программных продуктов для решения задач из области наноматериалов.

С целью создания качественного ПО и усовершенствования процесса его разработки были использованы инструментальные средства автоматизации. Для моделирования предметной области на рынке программных продуктов представлен широкий спектр CASE-средств [3]. Наиболее важными их характеристиками считаются комплексный подход к разработке ПО и использование единой унифицированной нотации на всех стадиях создания программного продукта, как это реализовано в Rational Rose [4]. Проект будущей системы дает возможность значительно сократить время ее разработки, уложиться в бюджет, получить представление о поведении и взаимодействии ее модулей, а также избежать многих ошибок на последующих этапах разработки. Кроме того, автоматизация процесса проектирования позволяет расширить набор функций и область применения ПО.

1. Анализ программных средств, моделирующих наноматериалы

Рассмотрим несколько наиболее популярных программных продуктов, предназначенных для моделирования наноматериалов и конструкций на их основе. Существующее ПО можно разделить на две группы в зависимости от методов, в нем реализованных. Это – химико-физические пакеты и инженерно-прикладные пакеты.

К первой группе относятся такие популярные ПС, как ChemicalOffice, HyperChem, НК-100-1В и XMD [5–7]. Моделирование материалов выполняется в них методами молекулярной динамики и квантово-химическими подходами, позволяющими быстро и с высокой точностью строить кристаллические решетки, состоящие из миллионов атомов. Главным достоинством этих пакетов является возможность обработки больших массивов физико-химических данных. Однако сложность и узкая специализация названных методов требуют представления данных во внутреннем фиксированном формате, расчета потенциалов межатомного взаимодействия, многие из которых определить трудно, а иногда и невозможно. Все это снижает интерес к указанным ПС среди инженеров-механиков и специалистов из других прикладных областей.

Среди инженерно-прикладных программных пакетов наиболее известны MatLab, Nastran и ANSYS [8–9], которые предназначены для решения широкого круга инженерных задач с по-

мощью метода конечных элементов. При этом их первоначальная ориентация на иные структурные уровни усложняет адаптацию и применение названных ПС к наноматериалам. Например, в случае сложной топологии конструкции, созданной на основе наночастиц, образуется большое количество конечных элементов, которые требуют неоправданно много расчетного времени и применения алгоритмов оптимизации, не реализованных в пакетах.

Анализ программных продуктов показал, что в настоящее время исследования в области моделирования наноматериалов ведутся в основном с помощью двух групп методов: молекулярной динамики и конечных элементов. Оптимальным вариантом представляется ПО, разработанное на основе обоих подходов [2], когда каждый из них применяется для выполнения своей части моделирования.

2. Особенности моделирования наноматериалов

В настоящей работе материал представляется в виде 3D-графической модели его кристаллической решетки, заполняющей указанный объем. Наноструктурированный материал как объект моделирования определяет ряд требований, предъявляемых к используемой среде разработки:

1. Обеспечение уровня отображения, гарантирующего быстрое, качественное и многократное воспроизведение наночастиц с возможностью их объединения в более крупные структуры.

2. Наличие средств, позволяющих представлять наночастицы материала на заданных уровнях детализации с реалистичным отражением их поведения.

3. Поддержка различных методов и алгоритмов расчета параметров наноматериалов в процессе их моделирования, синтеза и тестирования.

На практике выполнение перечисленных требований сопряжено с рядом проблем, которые можно разделить на несколько групп.

Проблема моделирования появляется как результат влияния следующих факторов:

– сложности математических расчетов при построении модели кристаллической решетки и физико-механических параметров наноматериалов из-за многоуровневой архитектуры и количества связей между наночастицами;

– неполноты информации о моделируемых физических процессах и связи различных наночастиц с объектами большего размера, что ограничивает сходство модели с реальностью;

– необходимости соблюдения требования размерности параметров наноматериалов.

Проблема ограниченных технических возможностей появляется вследствие поиска компромисса между быстродействием и точностью работы алгоритмов построения моделей наноструктур. Для расчетов и отображения большого количества атомов и связей между ними требуются мощные графические средства, а для сохранения результатов моделирования необходимы значительные объемы дискового пространства.

Проблема гибкости и многофункциональности применительно к нанообъектам означает, что при проектировании топологии материала, последующем расчете его свойств, а также при изменении начальных условий или модели может происходить потеря или искажение данных. Поэтому целесообразно разрабатывать ПО с «открытым кодом» и гибкой архитектурой с помощью CASE-средств, позволяющих быстро совершенствовать имеющиеся программы.

3. Проектирование ПО в среде автоматизированного синтеза Rational Rose

Выбирая в качестве среды разработки Rational Rose, можно получить ряд преимуществ:

- поддерживать весь жизненный цикл создания ПС;
- опираться на объектный подход к проектированию и программированию ПС;
- сократить ручное кодирование за счет автоматической генерации кода приложения;
- получить возможность повторного использования созданного ПО;
- добиться высокой репрезентативности ПС благодаря применению языка UML, на котором строится модель системы [10].

Опыт традиционной «ручной» разработки ПС показал, что самым длительным и сложным для исполнения является создание проекта будущей системы. В ответ на это Rational Rose предлагает проектировщику ряд диаграмм, автоматизированное построение которых позволяет

сразу же получить представление о системе в целом и об отдельных ее компонентах. Обычно разработка начинается с диаграммы сценариев, на которой определяется список требований к системе и множество выполняемых ею функций. На диаграмме Use case (рис. 1) варианты использования  описывают все то, что происходит внутри системы, а действующие лица  определяют тех, с кем она должна взаимодействовать. Кроме того, были построены диаграммы состояний и взаимодействий объектов системы, а также диаграмма ее компонентов.

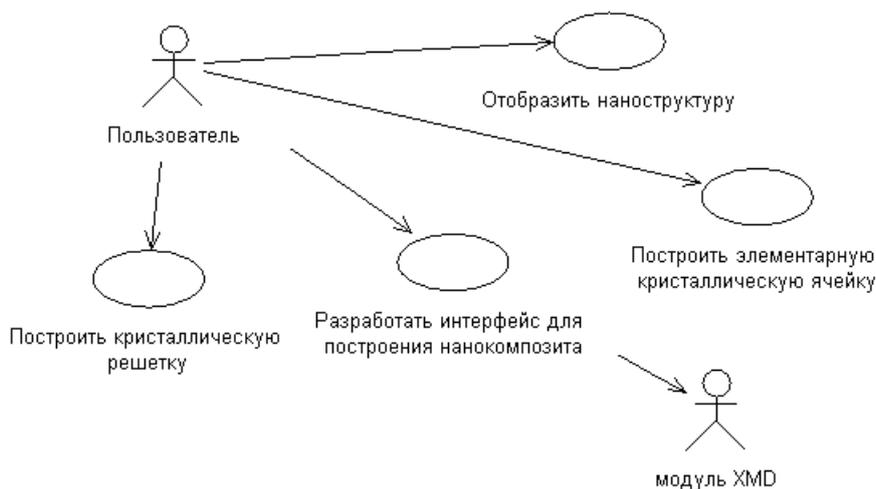


Рис. 1. Диаграмма Use case

Проект, представленный в виде совокупности вышеперечисленных диаграмм, явился основой для разработки диаграммы классов, по которой автоматически генерируется код приложения. На диаграмме Class проектируемой системы (рис. 2) отражается внутренняя структура системы, описываются наследование и взаимное положение классов относительно друг друга путем определения между ними связей различных типов.

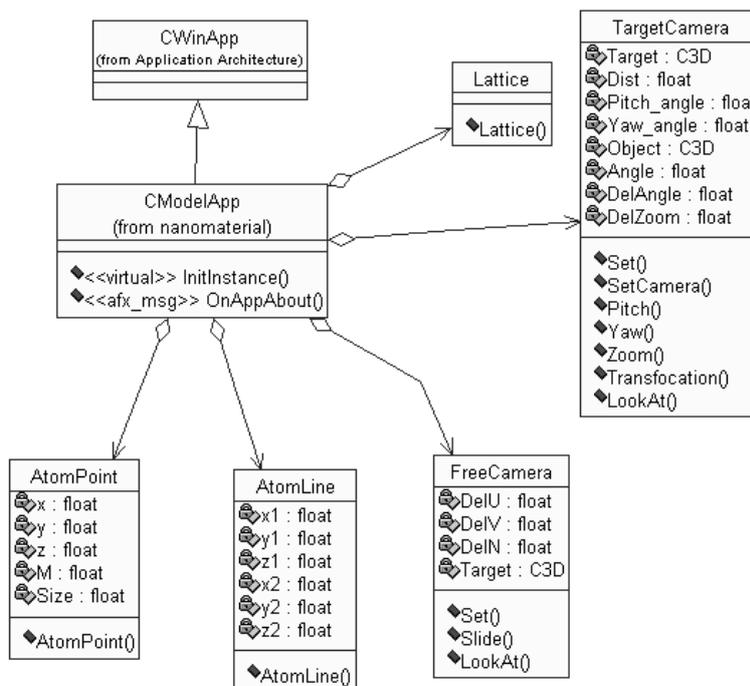


Рис. 2. Фрагмент диаграммы Class

В случае программирования на языке Microsoft Visual C++ разработчик получает дополнительные возможности – доступ ко всей иерархии классов библиотеки MFC. Тогда с помощью мастера создания приложений автоматически строится шаблон приложения, в котором классы наследуются из библиотеки MFC. На диаграмме изображено, что главный класс приложения CModelApp наследуется из библиотечного класса CWinApp. Связи CModelApp с остальными классами показывают, что они содержатся в главном классе приложения. На диаграмме вместе с атрибутами и операциями представлены следующие классы: *AtomPoint* – содержит информацию о позиции атома в кристаллографических координатах и выполняет перевод из них в декартовы координаты; *AtomLine* – определяет связь, соединяющую два атома в кристаллографических координатах, и переводит эту информацию в декартовы координаты; *Lattice* – используется для построения кристаллической решетки; *TargetCamera* и *FreeCamera* – применяются для отображения наноматериала и выполнения заданных эффектов визуализации.

На заключительном этапе разработки системы автоматически строится приложение на языке Microsoft Visual C++, включающее шаблоны созданных классов, которые необходимо наполнить содержанием. Большая часть кода приложения относится к модулям построения и отображения элементарной кристаллической ячейки и кристаллической решетки, выполняющим универсальные функции в процессе моделирования наноматериалов. Поэтому созданное ПО может использоваться и в других подобных разработках.

4. Построение моделей наноматериалов

Процесс создания моделей наноматериалов включает в себя выполнение двух этапов: расчет кристаллической решетки материала и ее отображение. Рассмотрим каждый из них.

В основу построения кристаллической решетки положена элементарная кристаллическая ячейка и одна из 14 решеток Браве [11]. В сочетании они однозначно определяют физические и химические свойства моделируемого материала. Независимо от геометрической формы (параллелепипед, шар, пирамида) выбранный объем заполняется по одному и тому же принципу. Процесс заполнения реализуется при помощи трех циклов, каждый из которых представляет собой движение вдоль одной из осей трехмерного декартова пространства. В результате каждая кристаллическая ячейка получает свои относительные координаты, соответствующие счетчикам циклов. Затем в зависимости от типа заполняемого объема каждый атом ячейки проверяется на принадлежность данному объему.

При построении решетки атомы, у которых хотя бы одна из кристаллографических координат равна 1, не рассматриваются. Это позволяет избежать повторного отображения одних и тех же атомов, т. е. лежащих на гранях элементарной ячейки, и в результате повысить быстродействие работы программы.

Первоначально все связи между атомами в решетке представлены как векторы координатных сфер. Для оптимизации процедуры отображения выполнено исключение повторяющихся связей, которые задаются парами соответствующих им атомов, а не векторами. В дальнейшем это упростит построение нанокompозита, поскольку уже будет известно, как связаны между собой атомы. Отображение кристаллической решетки выполняется при помощи функций графической библиотеки OpenGL, являющейся одним из самых популярных программных интерфейсов для разработки приложений в области двухмерной и трехмерной графики. Отображение ведется на основе данных из двух массивов:

- с координатами всех атомов решетки;
- пар индексов первого массива, т. е. связей.

Все атомы, прошедшие проверку на принадлежность заданному объему, хранятся в списке. Для очередного атома-кандидата определяются расстояния от него до всех атомов в списке. Для каждого из них имеется внутренняя переменная, в которой хранится количество связей атома на текущем шаге алгоритма. Если какое-нибудь из найденных расстояний равно радиусу минимальной координатной сферы, то для обоих атомов (списочного и проверяемого) наращиваются значения внутренних переменных, а в массиве связей сохраняются значения, соответствующие индексам атомов в массиве атомов кристаллической решетки. Атом удаляется из списка, когда значение его перемен-

ной становится равным количеству атомов в первой координатной сфере, т. е. количеству связей атома данной решетки. Кроме того, он удаляется из списка, если очередной атом-кандидат расположен на расстоянии одного горизонтального слоя кристаллических ячеек от него. Для этого введена переменная, в которой для каждого атома хранится значение счетчика по второму из трех циклов, т. е. значение относительной y -координаты кристаллической ячейки. Как только соответствующая координата атома-кандидата становится больше y -координаты какого-либо атома в списке, он удаляется, так как больше не может иметь связей.

С целью апробации работы созданного ПС при построении наноструктурированного композиционного материала были выбраны наночастицы на основе углерода (рис. 3) и алюминий (рис. 4). Алюминий (или его сплавы) является легким и прочным материалом, широко используемым в промышленности. Однако его прочностные свойства уступают таким материалам, как сталь или титан. Поэтому алюминиевые детали дополнительно упрочняют наночастицами, например углеродными нанотрубками. При этом количество наночастиц, особенности их конструкционного и технологического применения в новой детали неизвестны и требуют всесторонней оценки с помощью методов моделирования.

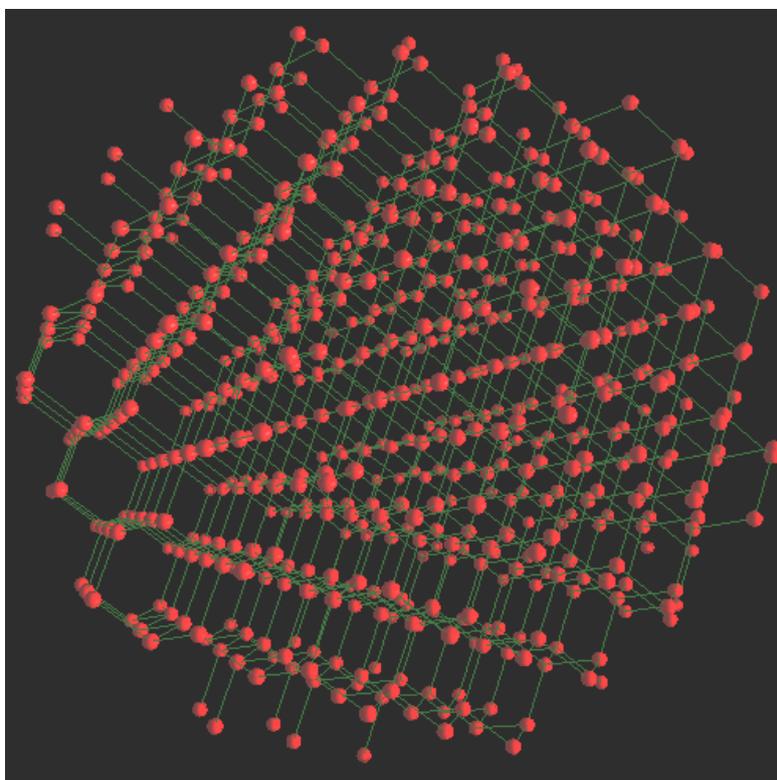


Рис. 3. Пример работы программы при построении сферы с радиусом 15 нм, заполненной атомами углерода

На основе однородных кристаллических решеток выполняется построение нанокомпозитов. На рис. 5 показано, как приблизительно будет выглядеть решетка алюминия с внедренными в нее наночастицами углерода. Сначала строится по отдельности каждая из решеток, затем выбирается место в наноструктуре алюминия, куда будет помещаться атом или частица углерода. Указанный атом алюминия совмещается с атомом углерода или центром его наночастицы. Вытесненные атомы алюминия смещаются согласно законам квантово-химического взаимодействия. Главной проблемой моделирования является построение структуры нанокомпозита на границах различных материалов. Поэтому получение окончательного результата будет проводиться с привлечением модуля XMD, который поможет вычислить потенциалы заданных атомов, определить связи между ними и корректно построить композит с точки зрения законов молекулярной динамики и материаловедения.

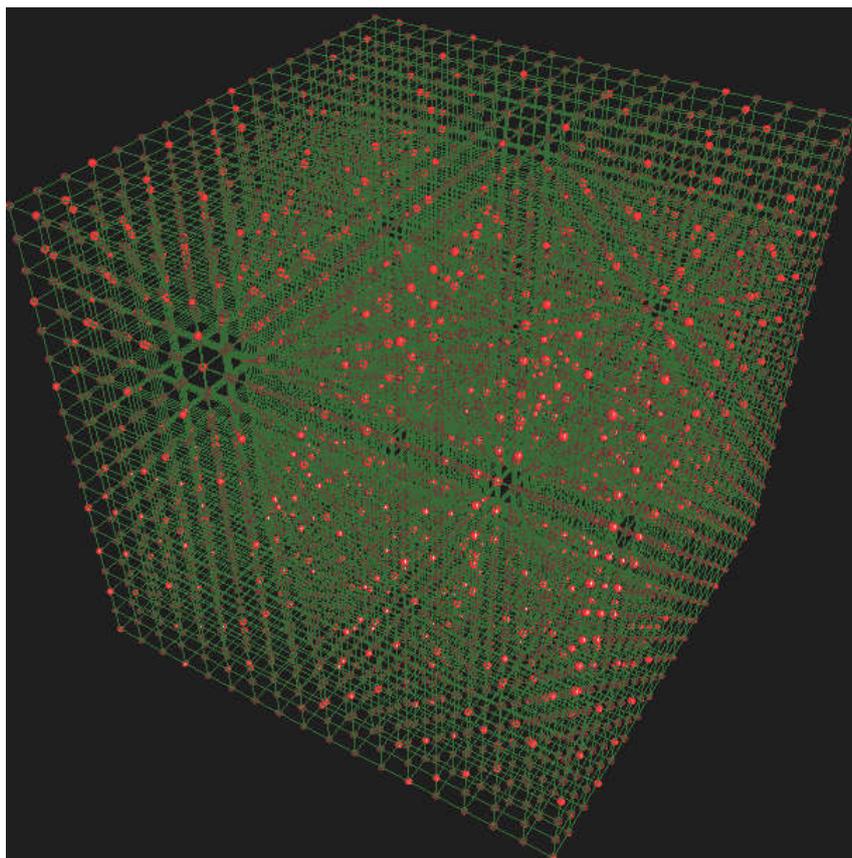


Рис. 4. Куб с длиной ребра 100 нм, заполненный атомами алюминия.

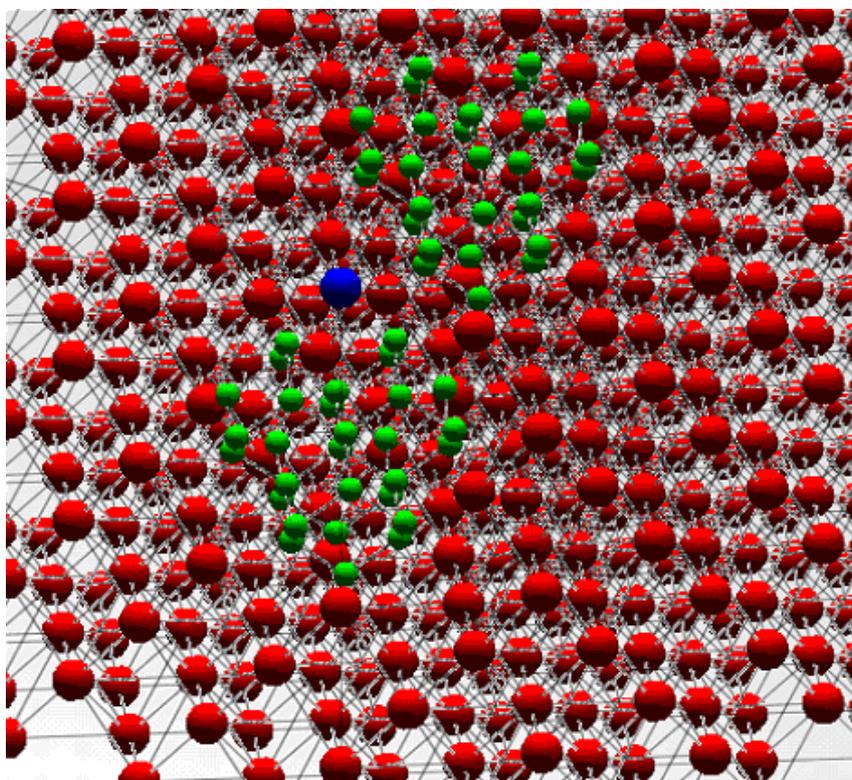


Рис. 5. Алюминий, упрочненный наночастицами углерода

Заключение

Результатом выполненной работы явилось ПС для расчета и отображения моделей наноматериалов. ПС можно считать универсальным как по функциям, выполняемым его программными модулями, так и по возможности построения разных наноматериалов. Поскольку рассматриваемая область считается достаточно новой и не до конца изученной, дальнейшие исследования планируется проводить в двух направлениях:

- строить различные нанокompозиты на основе методов молекулярной динамики;
- моделировать свойства материалов, упрочненных наночастицами, с помощью метода конечных элементов [12].

Результаты тестирования, полученные на компьютерах с разной конфигурацией, показали дееспособность созданного ПС, так как оно корректно строит и отображает наноструктуры, состоящие из миллионов атомов. При этом наиболее требовательным ПО оказалось к вычислительной мощности компьютера, которая влияет на работу математического модуля при нахождении связей в кристаллических решетках. Поэтому в дальнейшем будут привлечены программные и аппаратные средства, позволяющие выполнять параллельные вычисления.

Для получения максимального эффекта от применения средств автоматизации разработки ПО в дальнейшем Rational Rose может использоваться совместно с другими продуктами компании Rational Software, позволяющими охватить весь жизненный цикл прикладных программных систем [13, 14], например, Rational Test – для создания сценариев тестирования ПО, Rational SoDa – для создания документации, Rational Clear Case – для управления версиями. Это даст возможность создавать сложные программные системы быстрее, качественнее и легче.

Работа выполнена в рамках проекта ИНТАС № 04-83-3067 под руководством профессоров В.И. Махнача (Беларусь), В. Компиша (Словакия) и Х. Альтенбаха (Германия).

Список литературы

1. Bhushan, B. Handbook of Nanotechnology / B. Bhushan. – New York: Springer-Verlag, 2004. – 1220 p.
2. Westmoreland, P. Applications of Molecular and Materials Modeling / P. Westmoreland. – Baltimore, Maryland, 2002. – 300 p.
3. Вендров, А.М. CASE-технологии. Современные методы и средства проектирования информационных систем / А.М. Вендров. – М.: Финансы и статистика, 1998. – 176 с.
4. Трофимов, С.А. CASE-технологии: практическая работа в Rational Rose / С.А. Трофимов. – М.: Бинوم-Пресс, 2002. – 288 с.
5. Сайт университета Делавера. – Режим доступа: <http://www.udel.edu/chemicaloffice.html>. – Дата доступа: 29.05.2006.
6. Сайт Hypercube, Inc. – Режим доступа: <http://www.hyper.com>. – Дата доступа: 29.05.2006.
7. Нанотехнологический комплекс НК-100-1В / М.А. Ананян [и др.] // Нейрокомпьютеры и их применение // Сб. докл. 5-й Всерос. конф. – М., 1999. – С. 342–345.
8. Рычков, С.П. MSC.visual NASTRAN для Windows / С.П. Рычков. – М.: ИТ-пресс, 2004. – 552 с.
9. Басов, К.А. ANSYS в примерах и задачах / К.А. Басов; под общ. ред. Д.Г. Красковского. – М.: КомпьютерПресс, 2002. – 224 с.
10. Ларман, К. Применение UML и шаблонов проектирования / К. Ларман. – М.: Издательский дом «Вильямс», 2001. – 496 с.
11. Kittel, C. Introduction to solid state physics / C. Kittel. – New York: John Willey and Sons, Inc., 1956. – 560 p.
12. Continuum mechanics approach and computational modelling of submicrocrystalline and nanoscale materials / M.V. Kireitseu [et al.] // Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures. – Vol. 13, № 4. – 2005. – P. 312–329.

13. Трофимов, С.А. Rational XDE для Visual Studio.NET / С.А. Трофимов. – М.: Бином-пресс, 2004. – 340 с.

14. Крачтен, Ф. Введение в Rational Unified Process / Ф. Крачтен. – М.: Издательский дом «Вильямс», 2002. – 367 с.

Поступила 14.12.05

¹Белорусский государственный университет
информатики и радиоэлектроники,
Минск, П. Бровки, 6
e-mail: l_silver@mail.ru

Объединенный институт проблем
информатики НАН Беларуси,
Минск, Сурганова, 6

²University of Sheffield,
United Kingdom, Sheffield
S1 3JD

L.V. Bochkareva, M.V. Kireitseu

DESIGN METHOD OF NANOMATERIALS VIRTUAL MODEL

This paper reviews software tools for modeling materials. An analysis of available nano-technology-oriented software was done in order to identify the research directions. An advanced algorithm for calculations and 3D simulations of nanomaterials has been developed. Features of software development in CASE Rational Rose are considered.