

Получение стереоизображений в задачах молекулярной динамики

Усольцева Н.В., д-р хим. наук, Ясинский Ф.Н., д-р физ.-мат. наук, Соцкий В.В., канд. хим. наук, Костин М.С., магистр

Представлена разработка систем молекулярного моделирования и стереоскопической трехмерной визуализации, а также методов интеграции данных систем.

Ключевые слова: молекулярные системы, молекулярная динамика, стереоскопическая визуализация, кроссплатформенная интеграция.

The obtaining of stereoscopic vision in molecular dynamics simulations

Usol'tseva N.V., doctor chem. science, Yasinskiy F.N., doctor phys.-math. science, Sotsky V.V., cand. chem. science, Kostin M.S., magisterial

The development of molecular dynamics and stereoscopic 3D systems and also the methods of integration both systems were presented.

Keywords: molecular systems, molecular dynamics, stereoscopic visualization, cross-platform integration.

Введение. Современные методы физических исследований позволяют детально изучать структуру и получать характеристики материалов. Однако этих данных не всегда достаточно для интерпретации нано- и мезоявлений, особенно происходящих за субнаносекундные интервалы времени. Способом решения данной проблемы является создание системы математических моделей, позволяющих получать интересующие характеристики. В то же время обработка результатов численных экспериментов для больших систем представляет довольно сложную задачу. Одним из методов, который способен помочь в такой обработке, является визуальный анализ данных. Однако молекулярные системы, состоящие из большого количества частиц, сложны для восприятия, что делает актуальным разработку систем стереоскопической трехмерной визуализации, позволяющих облегчить обработку численных результатов.

Система молекулярного моделирования. В качестве метода, позволяющего моделировать системы, состоящие из нескольких тысяч частиц, нами был выбран метод молекулярной механики [1]. Основу метода составляет описание исследуемой системы при помощи потенциалов парного взаимодействия. Полная энергия системы складывается из энергии взаимодействия валентных связей, валентных углов, торсионных углов, несвязанных и электростатических взаимодействий:

$$U_{\text{пот}} = \sum_1^N k_r(r-r_0)^2 + k_\alpha(\alpha-\alpha_0)^2 + \frac{V_\varphi}{2}(1+\cos(\varphi n - \varphi_0)) + \left(\frac{A}{r^{12}} - \frac{B}{r^6}\right) + \frac{q_1 q_2}{\epsilon r}.$$

Для моделирования системы необходимо иметь минимальный набор констант упругости, равновесные значения длин валентных связей,

углов, а также параметры несвязанных взаимодействий и заряды на атомах. Индивидуальный подбор этих параметров для каждой молекулы превращает данный подход в сложную задачу, поэтому в практике моделирования пользуются так называемыми силовыми полями. Они представляют собой набор констант, оптимизированных для определенных классов соединений. Это позволяет с определенной степенью достоверности переносить параметры на исследуемую систему. В зависимости от того, в какую функциональную группу входит атом, ему присваивается определенный тип. По типам атомов, входящих в систему, происходит подстановка параметров силового поля. Также в ходе расчетов необходимо однозначно указать, какой потенциал должен быть выбран для данной пары взаимодействующих частиц. Для системы необходимо составить некое однозначное описание. Мы применили матричное описание, когда для системы составляется матрица связей, в которой указывается, какой тип взаимодействия нужно выбирать для данной пары атомов. Заполнение матрицы проводится при помощи графического интерфейса. При этом пользователем определяются начальные координаты и указываются валентно связанные пары атомов.

Для подстановки констант силового поля необходимо провести анализ структуры:

- 1) выделить циклические фрагменты и определить количество атомов, образующих цикл;
- 2) по ближайшему окружению, типу связи и данным о цикличности подставить соответствующие типы атомов. Нами использовались типы атомов, соответствующие силовому полю AMBER [2]. На заключительном этапе по типам атомов заполняется матрица силовых постоянных, которая содержит константы упругости, а также равновесные значения при связях, образующих молекулярную систему (рис. 1).

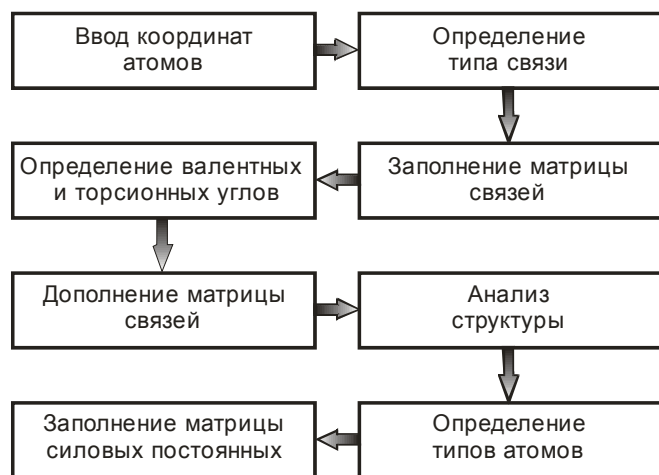


Рис. 1. Анализ молекулярной системы

На данном этапе система получает полное механическое описание, но ее структура не соответствует реальной. Для поиска координат атомов применяют методы оптимизации из условия нахождения минимума потенциальной энергии. При построении системы, если неизвестны координаты всех атомов, для нахождения ее структуры используются методы минимизации. Суть их заключается в поиске низкоэнергетических конфигураций молекулярной системы с помощью численных методов поиска экстремумов функций многих переменных. При этом предполагается, что искомая конфигурация находится в области глобального минимума потенциальной энергии [1]. На практике из-за сложного профиля потенциальной функции поиск глобального минимума превращается в очень сложную вычислительную проблему. Для поиска локальных минимумов потенциальной энергии наиболее широко применяются методы, использующие градиент потенциальной энергии [3, 4]. В нашей системе молекулярно-динамического моделирования применяется комбинация градиентных методов оптимизации (наискорейшего спуска и Флетчера-Ривса).

Когда система получает механическое описание и геометрия ее оптимизирована, можно проводить численные эксперименты методом молекулярной динамики. Основу метода составляет численное решение уравнений второго закона Ньютона для системы взаимодействующих частиц:

$$m_i \frac{d^2 \vec{r}_i(t)}{dt^2} = \vec{F}_i(\vec{r}), \quad i = 1, 2, \dots, N, \quad (1)$$

или

$$\begin{cases} m \frac{d\vec{v}_i}{dt} = \vec{F}_i, \\ \frac{dx_i}{dt} = \vec{v}_i, \end{cases} \quad i = 1, 2, \dots, N, \quad (2)$$

где \vec{r}_i – радиус-вектор i -го атома; m_i – его масса; \vec{F}_i – суммарная сила, действующая на i -й атом

со стороны остальных частиц, которая определяется как частная производная соответствующего потенциала по координатам, взятая с обратным знаком:

$$\vec{F}_i(\vec{r}) = -\frac{\partial U(\vec{r})}{\partial \vec{r}_i}. \quad (3)$$

Здесь $\vec{r} = \{\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_n\}$; $U(\vec{r})$ – потенциальная энергия, зависящая от взаимного расположения всех атомов.

Далее численно решают уравнения движения, вычисляя на каждом шаге все силы, новые скорости и координаты частиц. Для решения этих систем были применены две явные схемы: Эйлера и Рунге-Кутты 2-го порядка [5].

В ходе расчетов важны температурные зависимости. Температура определяется как средняя кинетическая энергия, приходящаяся на одну степень свободы системы:

$$T(t) = \frac{1}{3Nk_B} \sum_{i=1}^n m_i \vec{v}_i^2, \quad (4)$$

где k_B – постоянная Больцмана. Если моделирование системы проводится с наложением упругих связей, то N будет равно количеству атомов, из которых состоит система.

В качестве метода поддержания постоянства температуры системы нами был выбран термостат Берендсена [6]. В данном методе взаимодействие с тепловым резервуаром явно не учитывается, а задается силой трения $\vec{Q}_i = m_i \lambda(t) \vec{v}_i$. Значение коэффициента λ выбирается таким образом, чтобы сила \vec{Q}_i обеспечила изменение энергии системы по закону

$$\frac{dE}{dt} = \frac{1}{\tau_E} (E_0 - E_K(t)). \quad (5)$$

Здесь E – полная энергия изолированной системы (сохраняется при отсутствии взаимодействия с резервуаром); τ_E – характерное время взаимодействия с резервуаром;

$E_K = \sum_{i=1}^N m_i (\vec{v}_i)^2$ – кинетическая энергия системы;

$E_0 = \frac{3}{2} Nk_B T_0$ – константа, равная средней кинетической энергии, соответствующей температуре резервуара T_0 .

Уравнение движения частиц имеет следующий вид:

$$\frac{d}{dt} \vec{p}_i = -\frac{\partial U}{\partial \vec{x}_i} + \lambda(t) m_i \vec{v}_i \quad i = 1, 2, \dots, N. \quad (6)$$

Уравнения движения метода имеют вид

$$m_i \frac{d}{dt} \vec{x}_i = \vec{p}_i \quad i = 1, 2, \dots, N, \quad (7)$$

$$\lambda = \frac{1}{2\tau_E} \left(\frac{E_0}{E_K(t)} - 1 \right). \quad (8)$$

Этот метод успешно применяется для моделирования динамики молекул с большим числом степеней свободы.

Данный метод также используется для выбора схемы интегрирования:

$$\Delta E_{\max} = E^{k-1} - E^k = \frac{1}{\tau_E} (E_0 - E_K(t)) \tau, \quad (9)$$

где ΔE_{\max} – максимально возможное изменение энергии системы за промежуток времени τ (шаг интегрирования) при использовании термостата. Если изменение энергии в процессе расчета больше этого значения, то считается, что порядок точности интегрирования недостаточен. На основании данного критерия происходит переключение со схемы Эйлера первого порядка точности на схему Рунге-Кутты со вторым порядком точности.

Численные эксперименты, проводимые в неограниченном фазовом пространстве, подходят лишь в том случае, если моделируется система, находящаяся в газовой фазе. Однако моделирование систем, находящихся в жидком, мезоморфном или кристаллическом состоянии, требует поддержания в системе постоянных макроскопических характеристик, таких как объем, давление, плотность. Для соблюдения этих условий на систему накладывают ограничения, называемые граничными условиями. Способами ограничения моделируемого фазового пространства являются зеркальные [7] или периодические граничные условия [8].

С применением описанных выше методов нами была разработана система молекулярно-динамического моделирования [9], позволяющая проводить численное моделирование динамики конденсированного состояния вещества.

Система стереоскопической визуализации. В ходе молекулярного моделирования можно получить детальную картину происходящих в системе процессов. В ходе расчетов регистрируются различные численные характеристики молекулярной системы, например такие, как функции радиального атом-атомного распределения, преимущественная ориентация молекул в пространстве [10]. Однако с усложнением структуры и количества молекул в моделируемой системе интерпретация данных становится затруднительной. Решением проблемы интерпретации может быть дополнительный визуальный анализ результатов численного эксперимента.

В случае сложной для восприятия молекулярной системы обычная псевдо 3-мерная визуализация (шаровые и шаро-стержневые модели) может быть малоинформативной. Способом улучшения является система стереоскопической визуализации (ССВ), которая позволяет, используя свойства зрительной системы человека, существенно улучшить восприятие и перспективы моделируемого пространства, а также создать эффект полной 3-мерности объектов. Преимущества данного подхода позволяют облегчить визуальную интерпретацию данных.

При выводе стереоскопических изображений создаются образы, которые визуальнo воспри-

нимаются как трехмерная картина, что дает эффект глубины изображения. В основе подхода учитываются физиологические особенности человека: поскольку зрение бинокулярно, то изображения, воспринимаемые левым и правым глазом, отличаются друг от друга, что определяется межцентровым расстоянием и расстоянием до рассматриваемого объекта. Эта особенность позволяет определять расстояние, объем и взаимное расположение предметов. При взгляде вдаль происходит дивергенция (разведение зрительных осей), а при взгляде вблизи – конвергенция (сведение зрительных осей). Кора головного мозга подавляет физиологическое двоение при переводе взгляда на ближние предметы, и наоборот.

Для вывода стереоскопических изображений был применен анаглифический метод [11], который имеет следующие преимущества:

- 1) отсутствие требований к специальному аппаратному обеспечению (3D дисплеи, шлемы виртуальной реальности);
- 2) низкая стоимость реализации;
- 3) отсутствие необходимости приобретения сторонних лицензий.

Данный метод реализуется следующим образом: каждый глаз получает свою часть стереопары, причем оба изображения совмещены и наложены одно на другое. Для того чтобы каждое изображение можно было наблюдать только одним глазом, используются очки со светофильтрами (например, с красным фильтром для левого и синим – для правого глаза), а изображения создаются, соответственно, оттенками своего фильтра каждое. Таким образом, при прохождении через фильтры каждый глаз получает только противоположное цвету его фильтра изображение. Есть несколько техник создания анаглифов, отличающихся цветопередачей, качеством изображения и возможностью просмотра этих изображений без очков с сохранением приемлемого качества [12].

На рис. 2 показана обобщенная схема формирования стереоизображения с использованием симметричных усеченных зрительных конусов.

Недостатком метода проецирования, представленного на рис. 2, является растущее от центра к краям экрана искажение, вызванное симметричностью конусов. В связи с этим, нами реализован альтернативный алгоритм проецирования с ассиметричными зрительными конусами, который позволяет избежать появления побочных искажений.

Из-за того что стереоэффект достигается цветовой фильтрацией выводимых изображений, была рассмотрена проблема улучшения качества цветопередачи, что особенно важно при визуализации твердотельных объектов. В то же время при использовании каркасно-реберных моделей потери качества либо совершенно не заметны, либо незначительны.

Модификация существующих анаглифических методов позволила существенно уменьшить проявляющиеся при попытке передать цвета, близкие к фильтруемым, эффекты затемнения и мерцания и таким образом снизить зрительную нагрузку на глаза при работе с системой.

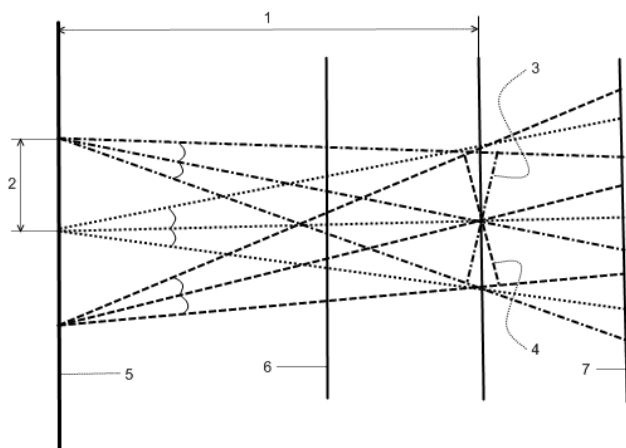


Рис. 2. Схема формирования стереоизображения: 1 – фокусное расстояние (его изменение определяет создание эффекта близости или удаленности объекта); 2 – половина межцентрового расстояния глаз наблюдателя; 3 – образ, предъявляемый левому глазу наблюдателя; 4 – образ, предъявляемый правому глазу наблюдателя; 5 – плоскость, в которой располагается камера наблюдения; 6 – ближняя плоскость отсечения (Near Clipping Plane); 7 – дальняя плоскость отсечения (Far Clipping Plane)

Применяя данные методы можно создавать 3-мерные модели молекулярных систем, которые расширяют возможности визуального анализа данных численного эксперимента.

По своей структуре система стереоскопической визуализации представляет собой программное приложение, предоставляющее возможность интеграции с существующими сторонними расчетными модулями для визуализации полученных в результате расчетов данных. При разработке системы использовались такие открытые технологии и стандарты, как OpenGL, Qt™ Trolltech© (opensource). Создание 3-мерной модели объектов производится с помощью OpenGL команд, а затем осуществляется постобработка с помощью разработанной библиотеки. Таким образом достигается удобство применения системы и простота интеграции при сохранении высокого уровня абстракции интегрируемых систем.

Интеграция. Сложность интеграции, в первую очередь, заключалась в том, что системы разрабатывались на разных языках программирования, существенно отличающихся друг от друга внутренним представлением структур данных и их обработкой. Для кроссязыковой интеграции в целях обеспечения необходимой скорости передачи данных был выбран метод, использующий динамические библиотеки (*.dll, *.o и др.). Уступая в гибкости альтернативным методам, таким, например, как COM, он позволяет обеспечить необходимую скорость передачи данных и существенно более прост в разработке,

предоставляя при этом все необходимые механизмы взаимодействия.

Для облегчения интеграции система была структурирована так, чтобы минимальных изменений было достаточно. Был разработан обобщенный интерфейс передачи данных между системой математического моделирования и модулем интеграции ССВ. Этот интерфейс достаточен для решения широкого круга задач и при необходимости может быть расширен. Модуль интеграции разрабатывается отдельно для каждого стороннего приложения и позволяет определить все необходимые параметры отображения объектов на основе получаемых им данных, а также избежать необходимости полной перекомпиляции всей ССВ, что привело бы как к потерям времени на разработку, так и к чрезмерному усложнению самой системы.

Благодаря использованию выбранного подхода и библиотеки Qt™ для ССВ, результат интеграции легко переносим на другие платформы, так как ССВ может взаимодействовать с различными внутренними форматами динамических библиотек в разных операционных системах.

В рамках упомянутого выше обобщенного интерфейса модулю интеграции передавались данные о координатах элементов системы, их атрибутах и их значениях. На основе полученных данных была произведена настройка отображения моделей системы для конкретного случая, обработанные данные отсылались в модуль визуализации ССВ через внутренний интерфейс, сохраняемый неизменным благодаря декомпозиции системы.

Заключение

Предлагаемая система молекулярно-динамического моделирования позволяет проводить численные эксперименты методом молекулярной динамики и регистрировать изменения состояния моделируемой системы во времени. Благодаря использованию силовых полей эти эксперименты могут проводиться для широкого спектра органических и неорганических соединений. В сочетании с набором использованных методов это дает возможность их применения для нанотехнологических операций, таких как изучение надмолекулярной организации наноматериалов, а также изучение влияния химической структуры на их свойства.

Система стереоскопической визуализации позволяет создавать 3-мерные модели молекулярных систем, которые расширяют возможности визуального анализа данных численного эксперимента.

В процессе интеграции был разработан интерфейс обмена данными между приложениями, который расширяет возможности обеих систем по дальнейшей модернизации.

Список литературы

1. **Allinger N.L., Burkett U.** *Molecular Mechanics* / ACS, Washington DC. – 1982.
2. **A Second** Generation Force Field for the Simulation of Proteins, Nucleic Acids, and Organic Molecules / W.D. Cornell, P. Cieplak, C.I. Bayly et al. // *J. Am. Chem. Soc.* – 1995. – Vol. 117. – P. 5179–5197.
3. **Fletcher R.** *Practical Methods of Optimization* / John Wiley & Sons. – New York, 1980.
4. **Gill P.E., Murray W., Wright M.H.** *Practical Optimization* // Academic Press, Inc. – New York, 1981.
5. **Калиткин Н.Н.** Численные методы. – М.: Наука, 1979.
6. **Molecular dynamics with coupling to an external bath** / H.J.C. Berendsen, J.P.M. Postma, W.F. van Gunsteren et al. // *J. Chem. Phys.* – 1984. – Vol. 81. – P. 3684–3690.
7. **Ying-Kui G., Zeng-Yuan G., Xin-Gang L.** Three-Dimensional Molecular Dynamics Simulation on Heat Propagation in Liquid Argon // *Chinese Phys. Lett.* – 2001. – Vol. 18. – P. 71–73.
8. **Балабанян А.Г., Мазо М.А., Ронова И.А.** Исследование водного раствора полиэтиленоксида методом молекулярной динамики // *Химия и компьютерное моделирование. Бутлеровские сообщения.* – 2002. – № 8. – С. 1–12.
9. **Свидетельство** № 2007613655 об официальной регистрации программы для ЭВМ «Система молекулярно-динамического моделирования LCchem» в Федеральной службе по интеллектуальной собственности, патентам и товарным знакам / Соцкий В.В. – М., 2007.
10. **Allen M.P., Tildesley D.J.** *Computer simulation of liquids* // Oxford University Press. – New York, 1991.
11. **Dubois E.** A projection method to generate anaglyph stereo images // *Proceedings of the Acoustics, Speech, and Signal Processing 2001 on IEEE International Conference.* – 2001. – Vol. 3. – P. 1661–1664.
12. **Bourke P.D.** *Synthetic stereoscopic panoramic images* // *Lecture Notes in Computer Science.* – 2006. – Vol. 4270. – P. 147–155.

Усольцева Надежда Васильевна,
Ивановский государственный университет,
доктор химических наук, профессор, директор НИИ наноматериалов,
телефон (4932) 37-08-08.

Ясинский Федор Николаевич,
Ивановский государственный энергетический университет,
доктор физико-математических наук, профессор, зав. кафедрой высокопроизводительных вычислительных систем,
телефон (4932) 26-98-29.

Соцкий Валентин Викторович,
Ивановский государственный университет,
кандидат химических наук, младший научный сотрудник НИИ наноматериалов,
телефон (4932) 37-08-08.

Костин Максим Сергеевич,
Ивановский государственный энергетический университет,
магистр,
e-mail: max-kostin@yandex.ru