

Възможности на езика за описание на виртуални обекти VRML 2.0 при изобразяване на кристални структури и морфология

Томас Керестеджиян, Радостина Атанасова

Kerestedjian, T., R. Atanassova. 2000. Using virtual reality description language VRML 2.0 in crystal structure and morphology representations – *Geochem., Mineral. and Petrol.*, **37**, 107-110.

Abstract. Computer representations of crystal structure and morphology are substantial for deeper understanding of mineral features and behaviour. In the field of static representations many software tools are known. The real usefulness, however, comes with introducing dynamic representations. Becoming a standard the virtual reality modeling language VRML, its version 1.0 is used in some pieces of structure and shape modeling software. However, it is rather restricted in comparison to VRML 2.0. A methodology for converting VRML 1.0 to VTML 2.0 applied to output files of E. Dowty's SHAPE and ATOMS is proposed. A number of substantial crystallographic improvements possible in VRML 2.0 are described in addition. Examples of VRML 2.0 files implementing some of the proposed features are given on supporting web page.

Keywords: crystal structure, crystal morphology, computer modeling, VRML

Address: Geological Institute, Bulgarian Academy of Sciences, 1113 Sofia, Bulgaria; E-mail: thomas@geology.bas.bg

Ключови думи: кристална структура, кристална морфология, компютърно моделиране, VRML

Адрес: Геологически институт, Българска академия на науките, 1113 София, България

Увод

За онагледяване на кристалната морфология и структура са създадени многобройни компютърни програми със своите предимства и недостатъци. Целта на тази работа е с помощта на професионални програми за изчертаване на кристална структура и морфология и възможностите на езика за описание на виртуални обекти VRML 2.0 (Virtual reality modeling language) да се представи подход за визуализация на кристалографски зависимости при изобразяването на кристални структури и минераложки достоверни модели на поведение на минералите. Използвани са профе-

сионалните програми SHAPE и ATOMS на Dowty (SHAPE Software Co, 1997.). С програмата SHAPE могат да се изчертават прости и комбинационни кристални форми, срастъци, взаимоотношения на епитаксия, зони на растеж и др. Представянето на даден кристал може да се комбинира с изчертаване на стереографската му проекция и изобразяване на кристалографски оси, а може да се представи и като стереодвойка. Програмата ATOMS позволява представяне на структури от различен вид – молекулни, полимерни и кристални. Описанието на кристалната структура е

според правилата на International Tables for Crystallography. Статичното изображение генерирано с тези програми, обаче, е недостатъчно информативно при по-задълбочено изучаване на обекта. За построяване на модел, който да е полезен при изучаване и уточняване на детайлите в кристалната структура и морфология, съвременните средства за визуализация дават големи възможности. Езикът за виртуални обекти VRML 1.0 се използва за създаване на изходни файлове от програмите ATOMS и SHAPE. С помощта на тези файлове, генерираните структури и форми могат да се представят в динамичен режим – с движение на указателя (мишката), обектът се ротира с две степени на свобода при фиксиран център, позволявайки поставянето му в произволно избрано положение (Атанасова, Керестеджиян, 1999). При това движението се извършва плавно, което дава възможност на наблюдателя да проследи пътя на изменение на положението на обекта.

Състояние на проблема

Възможностите на VRML 1.0 са силно ограничени по отношение на следните елементи на динамичното представяне:

1. Изборът на цвят за представяния обект е ограничен в рамките на това, което е създадено с SHAPE или ATOMS;
2. Цветът на фона може да е само бял или черен;
3. Не могат да се добавят реалистични текстурни елементи - важен елемент при представянето на кристална морфология;
4. Силно ограничена е възможността за текстова информация - само фиксирани надписи, дефинирани като тримерни обекти, движещи се в зрителното поле заедно с изучавания обект и често закриващи важни негови части. При липса на надписи, от друга страна, се затруднява възприемането на картината, особено при изобразяване на сложни кристални структури;
5. VRML 1.0 не позволява да се дефинира списък от фиксирани гледни точки,

отговарящи на определени (стандартни или специфични) проекции. Заедно с липсата на надписи, такива изображения на кристалографски обекти се превръщат в слабо информативни и непрофесионални;

6. Създавани от формалната логика на програмите ATOMS и SHAPE, VRML 1.0 файловете са разточителни по отношение на обема информация, което е причина за забавено зареждане и изпълнение. Използването на такива обемни файлове в компютърна мрежа е бавно и в определени случаи невъзможно;

7. Няма възможност за интерактивност, т. е. не може да се зададе поведение на кристалния обект.

Решение на изложените проблеми

Изложените проблеми намират решение при използване на новата версия на езика – VRML 2.0. Професионалните програми SHAPE и ATOMS създават резултат, базиран на огромна изчислителна работа и дългогодишния опит на кристалографи в тази област, но е необходима преработка на получаваните VRML 1.0 файлове към синтаксиса на VRML 2.0.

VRML 2.0 е в значителна степен по-високо структуриран език. Това позволява дефинирането на важните кристалографски обекти да се изнесе в една постоянна заглавка на файла. По този начин, списъкът от координати и параметри на кристалографските обекти остава единствената информация, която е необходимо да се пренесе от генерирания VRML 1.0 файл. Това може да се осъществи с помощта на елементарна програма за превод, работеща на принципа - разпознай, прочети, запиши. След получаване на VRML 2.0 версия на желания кристален обект чрез представения подход има възможност към него да се добави цялата функционалност, която тази версия на езика предлага:

1. *Цвят на обекта.* Дефиницията за цвят на обекта е концептуално променена във VRML 2.0, в сравнение с VRML 1.0, поради което дефиницията за цвят създавана с

SHAPE и ATOMS не може да бъде директно използвана. За сметка на това, новата версия на езика позволява дефиниране на допълнителни цветове, зависещи от положението на обекта спрямо наблюдателя и "светлинния източник". Това дава възможност да се изобразяват отблясъци от стени, което допринася за реалистичния вид на изображението. Например, малки кристални стени стават ясно видими, при подходяща ротация към "светлинния източник". Тази възможност, съчетана с цифрова информация за ъгъла на ротация, позволява симулиране на виртуална отразителна гониометрия.

2. *Цвят на фона.* VRML 2.0 предлага 16 млн. цвята за фон.

Оператор: Background {sky color RGB}

3. *Текстури.* Във VRML 2.0 е възможно изобразяване на кристални повърхности с фотореалистични текстури, дефинирани от истински цифрови изображения на реални кристали.

Оператор: texture ImageTexture {url "texture.jpg"}

4. Проблемът с *надписите* на кристалните обекти е изключително важен, тъй като надписите носят съществена информация. Във VRML 2.0 този проблем може да се реши по два начина. Единият начин е изнасяне на текстовата информация в Status bar на брауъра, при поставяне на указателя (мишката) върху съответния елемент на изображението. Това е предпочитаният от нас начин.

Оператор: Anchor {description "текст"}

Другият начин е изобразяване на текст в зрителното поле, но в този случай качеството му силно зависи от разрешителната способност на екрана и на хардуерно различни компютри изглежда по различен (най-често неудачен) начин.

5. VRML 2.0 позволява дефинирането на списък от фиксирани гледни точки (ъгъл на наблюдение), даващи предимството с щракване на указателя обектът да се наблюдава по определена *кристалографска посока*. Наблюдателят получава текстова инфор-

мация за посоката, т. е. надпис – по оста *a*, по оста *b* или клинографска проекция и т. н. Оператор: DEF name Viewpoint {orientation xyz position al be ga description "text"}

6. VRML 2.0 позволява дефинирането на специфични потребителски оператори, с чиято помощ могат еднократно да се зададат и наименоват отделни елементи на кристалографския обект. При този подход се отстранява необходимостта от дефиниране качествата на материала (цвят, блясък, характеристика на повърхността и др.) за всеки елемент от изображението. Дефиницията дадена веднъж важи за всички съподчинени обекти. С тази и някои допълнителни възможности на структурната концепция на VRML 2.0, обемът на файла значително се съкращава, при което се повишава скоростта му на зареждане и изпълнение.

Възможността обектите да бъдат наименовани позволява референции към тях, ползата, от които ще изясним в следващата точка.

7. *Интерактивност.* Особено интересна във VRML 2.0 е възможността за дефиниране на интерактивни сензори, свързани с кристалографския обект или елемент от него. При попадане на указателя (мишката) върху даден елемент (event IsOver) или действие върху него (event IsActive – щракване на клавиш), сензорът свързан с този елемент разпраща към останалите елементи (или избрана част от тях с оператора ROUTE) информация за настъпилото събитие. Тази информация може да се обработи от съответна подпрограма – JavaScript, за да предизвика определено поведение на останалите елементи на обекта.

7.1. *Touch sensor.* Контактният сензор информира обектите в изображението, когато указателя попадне върху него. Това може да се използва по различни начини. Например, при попадане на указателя върху дадена кристална стена тя може да промени цвета си и да изпрати параметрите на новия цвят към всички стени от тази форма, т. е. всички стени от дадена форма ще бъдат откроявани. Този подход, приложен към

кристална структура, дава визуална индикация за кратността и положението на Wyckoff позициите. Друго приложение на този сензор е различаване на атоми от един вид в различни позиции например позициите M1 и M2 при минералите от групата на шпинела.

7.2. Sphere sensor. Този сензор позволява ротация на свързания с него обект около центъра му, при движение на указателя с натиснат клавиш. За разлика от ротацията с основните функции на брауъра, тук може да се ротира отделен елемент около собствения му център. Приложението на този сензор изглежда съмнително, по отношение на единични обекти, но ако имаме система от кристалографски свързани елементи, този сензор изпраща ротационните си параметри към всички свързани обекти и предизвиква тяхната ротация. Тази ротация може да е зададена по кристалографска посока, чрез съответния скрипт за трансформация (по съответна симетрична операция), например, структурата на марказит се трансформира в структура на пирит, чрез завъртане, на определен ъгъл връзките S-S през една.

Друго приложение може да бъде екранното генериране на кристални агрегати тип сфероид с движение на различните индивидите около център.

7.3. Cylinder sensor. Сензорът разпраща информация за ротация на обект около зададена ос. Това позволява интерактивно генериране на кристални срастъци по определена срастъчна ос. При изобразяване на кристални структури, оставяме на читателят да си представи многобройните приложения, които синхронната ротация на структурни елементи около ос може да създаде.

7.4. Plain sensor. Позволява трансляцията на обект по ос в дадени рамки. Този сензор предоставя огромни възможности при изобразяването на кристални структури, тъй като осите и диапазоните на предвижване на

обекта по тях могат да бъдат задавани без ограничения. Например може да се изобрази размножаването на атом по симетрични позиции, при преминаването му от общо в специално положение, деформиране на полиедри от структурата, преходи на атоми между специфични позиции и мн. др.

Заклучение

Описаните средства и особено интерактивността превръщат кристалографския обект, изобразен с VRML 2.0 от обикновено динамично изображение в инструмент за онагледяване на кристалографски зависимости. Създаването на интерактивни средства позволява проиграване на химично-кристалографски сценарии (Le Bail, 1996), както и на различни модели на поведение на минералите. Освен очевидното приложение в процеса на обучение по кристалография, такъв инструмент предлага улеснение, дори на опитни кристалографи при разрешаване на конкретни кристалографски задачи.

Литература

- Атанасова, Р., Т. Керестеджиян. 1999. Кристални структури и морфология на минералите в компютърни изображения – В: *Проблеми на минерогенезиса*, Сб. резюмета, С., 2.
- Dowty, E. 1997. ATOMS for Windows and Macintosh Version 4.0. Instruction Manual. Kingsport, 169 p.
- Dowty, E. 1997. SHAPE for Windows and Macintosh Version 4.0. Instruction Manual. Kingsport, 270 p.
- International Tables for X-Ray Crystallography. 1990. 4th. Kluwer, Vol. A.
- Le Bail, A. 1996. VRML as a tool for exploring complex structures. In: *The XVII Congress and General Assembly of the International Union of Crystallography*, Seattle.

Приета на 27. 04. 2000 г.

Accepted April 27, 2000