

Визуализация средствами графических процессоров (GPGPU) смоделированных атомных структур аморфных сплавов

Александр Дубинец, Евгений Пустовалов, Александр Федорец, Станислав Полищук, Владимир Ткачѳв
Кафедра компьютерных систем

Дальневосточный федеральный университет, Владивосток, Россия
{dubinec.av, pustovalov.ev, fedorec.an, polischuk.sv}@dvfu.ru, vova292@gmail.com

Аннотация

Данная работа посвящена моделированию и визуализации моделей атомных структур аморфных сплавов средствами GPU. Модель аморфного сплава представляется как набор атомов. Визуализация производится в двух вариантах: двумерном, как электронно-микроскопическое изображение и трехмерном как 3d-модель атомов сплава. В первом, случае высокая скорость расчета кадра достигается путем использования возможностей параллельных вычислений, с помощью программного интерфейса CUDA. Для визуализации объемных моделей используется расширение OpenGL, Vertex Array Object (VAO).

Ключевые слова: Визуализация, GPU, CUDA, OpenGL, аморфные сплавы.

1. ВВЕДЕНИЕ

Аморфные металлические и нанокристаллические сплавы (АМС) – перспективный класс металлических материалов, обладающих уникальным сочетанием магнитных, электрофизических, механических и коррозионных свойств. АМС привлекают значительное внимание физиков, работающих в области, как фундаментальных исследований, так и прикладных разработок.

В процессе исследования АМС методами просвечивающей электронной микроскопии, мы получаем изображения структуры, на которых необходимо проанализировать морфологию и атомную структуру. Одним из эффективных инструментов анализа является, моделирование, которое позволяет, создавать модели с заданными параметрами, после чего производится визуализация объекта, как электронно-микроскопического изображения и 3d модели.

В настоящее время требования к программному обеспечению по качеству генерируемых изображений постоянно растут, моделирование, и визуализация атомных структур остается актуальной задачей. Среди наиболее эффективных методов визуализации, выступает: использование графического процессора (GPGPU) в качестве вычислителя, полная загрузка модели на видеоустройство, позволяет избежать медленного непрерывного копирования данных по PCI-E шине.

2. ДОСТИЖЕНИЯ В ПРЕДМЕТНОЙ ОБЛАСТИ

На данный момент, существуют следующие аналоги для визуализации моделей атомных структур аморфных сплавов. Программный пакет JEMS [1], который предназначен для представления электронно-микроскопических изображений, но в силу своей реализации не позволяет воспроизводить электронно-микроскопическое изображение с высокой скоростью. Программный пакет, CaRIne Crystallography [2], предназначенный для визуализации трехмерных моделей

атомных структур, не рассчитан на отображение моделей файлов более 5 Мбайт, содержащих около 150000 атомов.

3. ВЫБОР ТЕХНОЛОГИИ

Для реализации изменения и обработки моделей атомов был создан редактор реализованный средствами языка программирования C++, который обеспечивает относительно высокую скорость считывания и обработки данных.

Так как необходимо визуализировать статичные данные: координаты, цвета и индексы, которые в процессе отображения не будут изменяться, то наиболее оптимальное решение, использование расширения OpenGL, ARB_vertex_buffer_object (VBO).

```
glEnableClientState( GL_VERTEX_ARRAY );
glEnableClientState( GL_COLOR_ARRAY );
glBindBuffer( GL_ARRAY_BUFFER, cId );
glColorPointer( 3, GL_UNSIGNED_BYTE, 0, 0 );
glBindBuffer( GL_ARRAY_BUFFER, vId );
glVertexPointer( 3, GL_FLOAT, 0, 0 );
glBindBuffer( GL_ELEMENT_ARRAY_BUFFER, iId );
glDrawElements( GL_TRIANGLES, Count,
GL_UNSIGNED_INT, 0 );
glBindBuffer( GL_ELEMENT_ARRAY_BUFFER, 0 );
glBindBuffer( GL_ARRAY_BUFFER, 0 );
glDisableClientState( GL_VERTEX_ARRAY );
glDisableClientState( GL_COLOR_ARRAY );
```

Листинг 1: Пример активации буферов без использования VAO

Для упрощения процесса кодирования целесообразно использовать следующее расширение OpenGL, ARB_vertex_array_object (VAO) [3], которое позволяет упростить процедуры активации буферов до одной команды.

```
glBindVertexArray( vao );
glDrawElements( GL_TRIANGLES, n, GL_UNSIGNED_INT, 0 );
glBindVertexArray( 0 );
```

Листинг 2: Пример активации буферов с использованием VAO

В качестве альтернативной технологии визуализации, можно рассмотреть дисплейные списки, которые выдают большую производительность на статичных данных, однако основной недостаток которых – длительное время на построение списка, и его полное перестроение при любой модификации данных.

4. АМОΡФНЫЕ СТРУКТУРЫ

4.1 Моделирование

При моделировании атомной структуры аморфного сплава, производится работа с файлом модели [4], в котором каждый атом представляется набором параметров: название элемента,

степень окисления, три координаты, радиус и коэффициент заполнения. Основная идея заключается в изменении параметров элементов с помощью, элементарных стереометрических объектов: сфера, плоскость, sin-плоскость, тетраэдр и цилиндр. Все это позволяет: создавать флуктуации плотности в заданных областях, внедрять кристаллические структуры в аморфные, изменять морфологию поверхности модели.

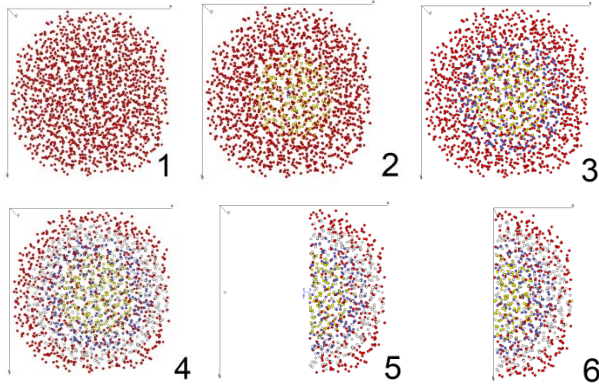


Рисунок 1: 1 вырезана сфера железа; 2 включение фосфора; 3 добавлен слой никеля; 4 добавлен слой кислорода; 5 срез половины сферы; 6 нормировка ячеек

4.2 2D визуализация

Визуализация моделей средствами GPGPU [5], производится в несколько этапов [6]. Производится вычисление проекций потенциалов отдельных атомов (1) и последующее формирование потенциала образца путем линейной суперпозиции потенциалов каждого атома в образце (2):

$$v_z(X) = \int_{-\infty}^{+\infty} V_a(x, y, z) dz = 4\pi^2 a_0 e \sum_{i=0}^3 a_i K_0(2\pi r \sqrt{b_i}) + 2\pi^2 a_0 e \sum_{i=0}^3 \frac{c_i}{d_i} \exp(-\pi^2 r^2 / d_i) \quad (1)$$

где $X = (x, y)$ - положение атома в плоскости, перпендикулярной к оптической оси микроскопа;

$K_0(x)$ - модифицированная функция Бесселя нулевого порядка; a_0 - радиус орбиты Бора для электрона; a_i, b_i, c_i, d_i - коэффициенты, значения которых зависят от атомного номера и приводятся в соответствующих таблицах [7].

$$v_z(X) = \sum_{j=1}^N v_{z_j}(X - X_j) \quad (2)$$

Вычислить функцию прохождения электронов через исследуемый объект (3):

$$t(X) = \exp[i\sigma v_z(X)] \quad (3)$$

где σ - постоянная взаимодействия электронного пучка с образцом.

Взять преобразование Фурье от функции прохождения (4).

$$T(k) = FT[t(X)] \quad (4)$$

Умножить функцию (4) на передаточную функцию объектива (5), чтобы получить волновую функцию в обратной фокальной плоскости (6).

$$H_0(k) = \exp[-i\chi(k)]A(k) \quad (5)$$

$$\chi(k) = \pi\lambda k^2 (0.5C_s \lambda^2 k^2 - \Delta f)$$

где Δf - дефокусировка; C_s - коэффициент сферической аберрации; $A(k)$ - функция апертуры.

$$\psi_i(k) = FT^{-1}[H_0(k)T(k)] \quad (6)$$

Подсчет квадрата модуля волновой функции изображения (в реальном пространстве), чтобы получить конечную интенсивность (7).

$$g(x) = |\psi_i(X)|^2 \quad (7)$$

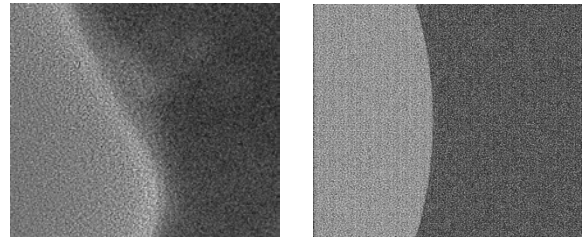


Рисунок 2: Электронно-микроскопические изображения: слева реальное, справа смоделированное

Производя визуальное сравнение между реальным и смоделированным изображением, показанных на рисунке 2 мы можем сделать заключения о типе дефекта структуры в реальном объекте.

4.3 3D визуализация

Перед вычислением проекции потенциалов модели, необходимо убедиться в корректности дефектов внесенных в модель, так как процесс создания проекций очень затратный по времени и ресурсам. Визуализация реализуется средствами OpenGL 2.1 с помощью расширения ARB_vertex_array_object (VAO). Данные вершин, цветов и индексов, считываются, полностью загружаются в память видеоустройства, и удаляются из системной памяти.

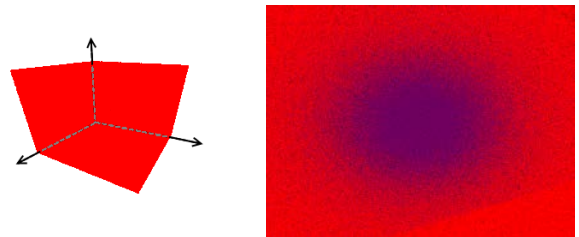


Рисунок 3: Визуализация модели с избытком фосфора в центре, физический размер модели 51*51*51 нм, количество атомов 23000000, fps 40.

5. РЕЗУЛЬТАТЫ

Все расчеты производились на станции NVIDIA GTX 690. Примерное время обработки модели 51*51*51 нм составляет 2-3 минуты. Расчет проекций потенциалов для этой же модели составляет около 5-6 минут. Замеры производительности программ при визуализации приведены в таблицах 1 и 2.

Размеры выводимой области, пх.	Частота кадров, кадр/с	Время кадра, мс
128*128	900	0,11
256*256	300	0,33
1024*1024	60	1,3

Таблица 1: Результаты измерений для двумерной визуализации

Количество атомов, атомов.	Частота кадров, кадр/с	Время кадра, мс
125	3500	0,32
650000	3000	0,33
2300000	40	2,5

Таблица 2: Результаты измерений для трехмерной визуализации

Возможность средствами операционной системы запускать одновременно нескольких вычислительных потоков на CPU позволяет ускорить в несколько раз процесс создания множества модифицированных моделей.

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В статье был представлен метод визуализации моделей атомных структур аморфных сплавов средствами GPU. В результате исследования был реализован программный комплекс, который позволяет модифицировать и визуализировать модели в двумерном виде как электронно-микроскопическое изображение и трехмерное, как модель атомов сплава. Процесс моделирование-визуализация происходит практически в реальном времени, что позволяет быстро изменять модели для достижения наибольшего сходства между реальным образцом и смоделированным. Все это позволяет более эффективно интерпретировать результаты экспериментов, позволяя получать материалы с заданными техническими характеристиками.

7. БЛАГОДАРНОСТИ

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства образования и науки, госконтракты № 16.552.11.7059 и 14.740.11.1015.

8. ССЫЛКИ

[1] *Simulation of diffraction patterns and high resolution images:*

<http://cimewww.epfl.ch/people/stadelmann/jemsWebSite/jems.html>

[2] *The crystallographic software for research and teaching:*
<http://carine.crystallography.pagespro-orange.fr/>

[3] *OpenGL VAO programming Guide:*
<http://www.opengl.org/documentation/books/>

[4] Кристаллография: Лабораторный практикум / Под ред. Проф. Е.В. Чупрунова: Учеб. Пособие для вузов. – М.: Издательство физико-математической литературы, 2005. – 412 с. – ISBN 5-94052-103-7

[5] David B. Kirk, Wen-mei W. Hwu. *Programming Massively Parallel Processors*. 2012. p. 514.

[6] Earl J. Kirkland. *Advanced Computing in Electron Microscopy*. 2010. p. 289.

[7] P.A. Doyle and P.S. Turner. *Relativistic Hartree-Fock x-ray and electron scattering factors*. *Acta Cryst.*, A24:390-397, 1968.

Об авторах

Александр Дубинец – студент магистратуры ДВФУ. Его адрес: dubinetc.an@dvfu.ru.

Евгений Пустовалов – доцент кафедры компьютерных систем ШЕН ДВФУ, к.ф.-м.н. Его адрес: pustovalov.ev@dvfu.ru.

Александр Федоренко – студент магистратуры ДВФУ. Его адрес: fedorec.an@dvfu.ru.

Станислав Полищук – аспирант ДВФУ. Его адрес: polischuk.sv@dvfu.ru.

Владимир Ткачëв – студент ШЕН ДВФУ. Его адрес: vova292@gmail.com.