

Физическое моделирование решёток Браве в веб-среде

А.Н. Хлыстов^{1a}, В.Ю. Попов^{1b}, А.С. Янышкин^{2c}, Д.А. Рычков^{1d}, П.В. Архипов^{1e}

¹ Братский государственный университет, Макаренко, 40, Братск, Россия

² Чувашский государственный университет, Московский 15, Чебоксары, Россия

^a alexey.khlystov@gmail.com, ^b slapopov@gmail.com, ^c yanyushkinas@mail.ru, ^d dielektrik84@mail.ru,

^e pavded@yandex.ru

^a <https://orcid.org/0000-0003-3017-9788>, ^b <https://orcid.org/0000-0001-6299-9161>,

^c <https://orcid.org/0000-0003-1969-7840>, ^d <https://orcid.org/0000-0002-9323-7693>,

^e <https://orcid.org/0000-0003-0390-8367>

Статья поступила 15.04.2021, принята 15.05.2021

Основным параметром, определяющим количественные, качественные и стоимостные характеристики современных технических проектов, является возможность проведения виртуального эксперимента. Это значительно дешевле, безопаснее и эффективнее физического эксперимента. И если в стремительно развивающейся индустрии быстрого прототипирования одним из ключевых критериев является возможность визуализации модели в материале, то в моделировании методами молекулярной динамики критерием становится возможность визуализации атомного строения материала в модели. Если модели быстрого прототипирования предоставляют возможность проведения особых экспериментов, которые в реальном мире провести затруднительно, то молекулярно-динамические модели дают возможность проведения экспериментов над атомной структурой создаваемого материала. Данная статья посвящена одному из наиболее мощных методов анализа физических процессов на молекулярном уровне – компьютерному молекулярно-динамическому моделированию контактирующих поверхностей при комбинированной электроалмазной обработке. В целом работа по моделированию состоит из двух этапов. На первом этапе создаётся статическая атомная модель двух поверхностей, которые контактируют при обработке – это само алмазное зерно в составе шлифовального круга и обрабатываемый этим зерном материал – быстрорежущая сталь Р6М5. На втором этапе моделируется их контактное взаимодействие в динамике. Поскольку обычное математическое описание не обладает достаточной наглядностью для визуализации сложных аспектов атомистической трибологии резания металлов и не может показать исследователю визуализацию одновременно протекающих при этом разных процессов, то такой подход к их моделированию остаётся единственным способом восполнить этот пробел. В центре статьи стоят вопросы первого этапа – начало молекулярно-динамического моделирования кристаллической решётки двух поверхностей в веб-среде. Разработано специальное приложение WebBLC, позволяющее создавать модели кристаллических решёток в веб-среде. Предложены некоторые рекомендации для физического моделирования решёток Браве в веб-среде. При создании молекулярно-динамических моделей выявлено, что каждая программная среда имеет свою систему измерений, которая, как правило, не рассчитана для создания наноразмерных моделей. Для получения достоверных результатов, перед созданием модели необходимо убедиться, что программная среда учитывает масштаб виртуального эксперимента.

Ключевые слова: атомистическое моделирование, веб-среда, WebBLC, частицы, атомы, кристаллическая решётка, решётка Браве, Р6М5.

Physical modeling of Bravais lattices in a web environment

A.N. Khlystov^a, V.Yu. Popov^b, A.S. Yanyushkin^{1c}, D.A. Rychkov^d, P.V. Arkhipov^e

Bratsk State University; 40, Makarenko St., Bratsk, Russia

¹Chuvash State University; 15, Moskovsky Prospect, Cheboksary, Russia

^a alexey.khlystov@gmail.com, ^b slapopov@gmail.com, ^c yanyushkinas@mail.ru, ^d dielektrik84@mail.ru,

^e pavded@yandex.ru

^a <https://orcid.org/0000-0003-3017-9788>, ^b <https://orcid.org/0000-0001-6299-9161>,

^c <https://orcid.org/0000-0003-1969-7840>, ^d <https://orcid.org/0000-0002-9323-7693>,

^e <https://orcid.org/0000-0003-0390-8367>

Received 15.04.2021, accepted 15.05.2021

The main parameter that determines the quantitative, qualitative and cost characteristics of modern technical projects is the possibility of conducting a virtual experiment. It is much cheaper, safer, and more efficient than a physical experiment. And, if in the rapidly developing industry of rapid prototyping, one of the key criteria is the ability to visualize a model in a material, then in molecular dynamics modeling, the criterion is the ability to visualize the atomic structure of a material in a model. While rapid prototyping models provide an opportunity to conduct special experiments that are difficult to carry out in the real world, molecular dynamics models make it possible to conduct experiments on the atomic structure of the material being created. This article is devoted to one of the most powerful methods for analyzing physical processes at the molecular level - computer molecular dynamics modeling of contacting surfaces during combined electro-diamond processing. In general, the modeling work consists of two stages: at the first stage, a static atomic

model of two surfaces is created, which are in contact during processing - this is the diamond grain itself in the composition of the grinding wheel and the material processed by this grain - high-speed steel R6M5. At the second stage, their contact interaction in dynamics is modeled. Since the usual mathematical description does not have sufficient clarity to visualize the complex aspects of the atomistic tribology of metal cutting and cannot show the researcher the visualization of different processes simultaneously occurring at the same time, this approach to their modeling remains the only way to fill this gap. The article highlights the problems of the first stage - the beginning of molecular dynamics modeling with the creation of a crystal lattice of two surfaces in a web environment. A special WebBLC application has been developed to create models of crystal lattices in the web environment. Some recommendations are proposed for physical modeling of Bravais lattices in a web environment. When creating molecular dynamics models, it was revealed that each software environment has its own measurement system, which, as a rule, is not designed for creating nanoscale models. To get reliable results, before creating a model, it is necessary to make sure that the software environment takes into account the scale of the virtual experiment.

Keywords: atomistic modeling, web environment, WebBLC, particles, atoms, crystal lattice, Bravais lattice, high-speed steel R6M5.

Введение. В рамках цикла предыдущих статей [1–5] об исследовании возможностей молекулярно-динамического (МД) моделирования применительно к области процессов как обычного шлифования, так и комбинированной электроалмазной обработки быстрорежущей стали Р6М5 нами было рассмотрено статическое и динамическое моделирование в среде трехмерного моделирования Blender. По-атомно создавались поверхности алмазного зерна (элемента шлифовального круга) с учётом его дефектов [2] и обрабатываемой им поверхности стали Р6М5 [3]. Первые виртуальные эксперименты были предприняты в Autodesk 3ds Max с одновременным изучением других доступных на то время компьютерных систем, например, платного SolidWorks. При этом было замечено [4] ключевое отличие этих систем, состоящее в том, что SolidWorks мог работать с частицами как с системами (т.е. как единой сущностью). В то же время Blender мог работать и с каждой частицей индивидуально, однако не мог показывать результат в реальном времени. Только благодаря этому появилась возможность создания разнообразных кристаллических решеток с целью их последующего анализа для машиностроительных целей, например, в области резания и обработки материалов. Другим минусом SolidWorks стал тот факт, что его система создания частиц была предназначена по большей части для моделирования жидкостей и газов.

Стремительное развитие IT-технологий, их повсеместное проникновение во все инструменты инженерного анализа [5] стало диктовать свои условия по совершенствованию процесса моделирования так, чтобы сделать его максимально доступным для любого пользователя. Хотя ещё несколько лет назад от такого пользователя требовались бы базовые понимания принципов компьютерного моделирования в какой-либо трехмерной среде и доступ к мощным аппаратным средствам, таким, например, как суперкомпьютер.

Целью данной работы является моделирование методами молекулярной динамики атомного строения материала в модели с возможностью его визуализации в реальном времени, а именно: статическое моделирование любых современных материалов в наиболее доступной пользователю среде, например, в веб-среде.

Методология. В большинстве случаев основным этапом задания начальной конфигурации при МД-моделировании металлических систем является выбор положения частиц, выбор среды окружения, иных термодинамических параметров и т.п. [6]. Исследования при помощи, например, сканирующей туннельной спектроскопии [7], атомно-зондовой масс-спектрометрии [8] и методами электронного и ионного проекторов [9–12] также позволяют судить о начальной конфигурации моделируемой металлической системы. К тому же современные компьютерные системы дают возможность изучать топографическое изображение поверхности с разрешением вплоть до атомного. Эти исследования также необходимы для дальнейшего критического рассмотрения полученных результатов.

Вопросам моделирования процессов резания на основе квантово-механических расчётов, моделирования и визуализации наноструктур посвящены работы учёных: Кабалдина Ю.Г. [13–15], Заводинского В.Г. [16, 17], Матюшкина И.В. [18], а также ряда зарубежных ученых: Abel G.C., Stillinger F.H., Weber T.A., Foulkes W.M.C., Mitas L., Needs R.J., Rajagopal G. и др.

Под веб-средой понимаются компьютерные технологии взаимодействия с электронными данными через сеть Интернет при помощи интернет-браузера. Вычислительные методы молекулярного моделирования для исследования структуры и свойств молекул развиваются вместе с развитием IT-технологий. К современным компьютерам уже можно отнести не только стационарные компьютеры, но и смартфоны, количество пользователей которых достигло 90% в мире (согласно исследованию 2019 года¹). Такая популярность портативных компьютеров делает веб-среду самой универсальной в отличие от программных средств, специализированных для стационарных или суперкомпьютеров. Другими словами, работа в браузере стала не только привычнее работы в незнакомых программных средствах, но ещё и доступнее, в силу понижающихся требований к аппаратной составляющей. Работа в браузере обладает преимуществами распределённости и переносимости, т.е. пользователь может работать с программой, находясь в любой точке мира, используя при этом любую платформу (компьютер или гаджет).

Bravais Lattices Creator (BLC) в веб-среде. BLC – это средство для моделирования кристаллических решёток и решёток Браве, изначально разработанное нами [1] как

¹ <https://www.pewresearch.org/global/2019/02/05/smartphone-ownership-is-growing-rapidly-around-the-world-but-not-always-equally/>

дополнение для Blender, с помощью встроенного скриптового языка Python. BLC в Blender позволяет создавать модели решёток Браве металлов или кристаллов. Например, изображённая на рис. 1 модель алмазного зерна шлифовального круга (рис. 1, а) и обрабатываемая поверхность стали Р6М5 (рис. 1, б) созданы буквально по атомам именно BLC в Blender. В свою очередь, разрабатываемое приложение для веб-среды должно обладать функционалом, позволяющим задать все параметры, необходимые для построения модели решётки. Также приложение должно обеспечивать обратную совместимость с BLC в Blender.

Трёхмерную графику в браузере позволяет реали-

зовать прикладная программа WebGL, исполняемая как элемент языка разметки HTML пятой версии. Взаимодействие с WebGL осуществляется при помощи скриптового языка программирования JavaScript. Для разработки трёхмерной графики WebBLC использовалась библиотека WebGL – Three.js, а для разработки интерфейса использовалась библиотека Bootstrap. Применение свободных кроссбраузерных библиотек позволяет создавать веб-приложения по общепринятым стандартам, а также гарантирует этим приложениям работу как на стационарном компьютере, так и на многих мобильных устройствах. Используемые методики позволили провести моделирование в полном объёме в соответствии с поставленной целью.

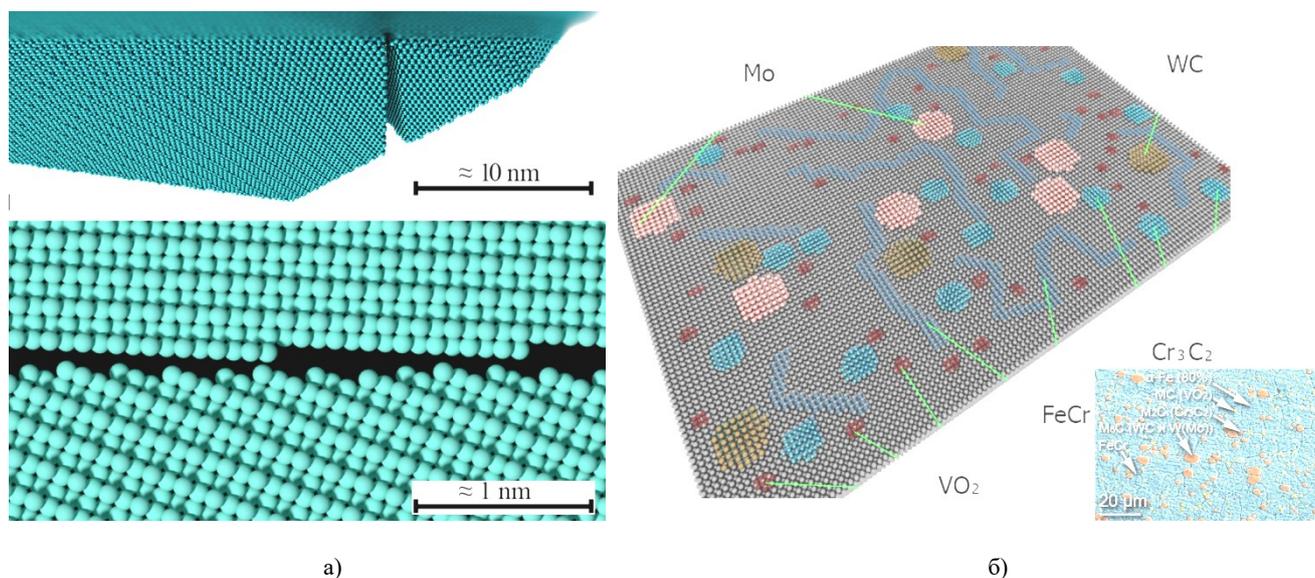


Рис. 1. Физические модели, разрабатываемые BLC в Blender для исследования контактного взаимодействия при комбинированной электроалмазной обработке: а) результаты моделирования в морфологии кристаллической структуры алмазного зерна объёмных дефектов (макродфектов) в виде трещин между блоками; б) результат атомистического моделирования структуры порошковой БРС в сравнении с SEM-фотографией состояния микроструктуры её поверхности

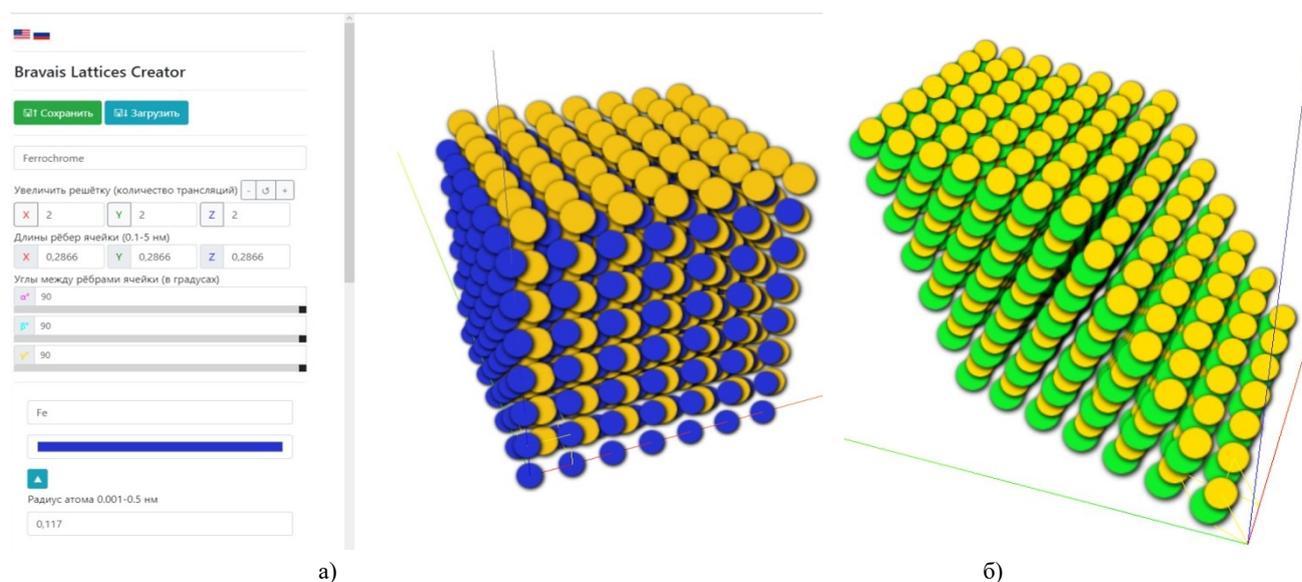


Рис. 2. Внешний вид разработанного приложения WebBLC: а) интерфейс WebBLC; б) созданная модель решётки Браве триклинной кристаллической решетки низшей сингонии

Результаты и обсуждение. WebBLC опубликовано в глобальной сети по доменному имени <https://alexiy.nl/blc-web>. При первом включении программа автоматически создаёт модель элементарной ячейки феррохрома (см. рис. 2, а). Сделано это для того, чтобы на её примере продемонстрировать пользователю функциональные возможности WebBLC. Чтобы скрыть или отобразить главное меню, нужно использовать переключатель в правом верхнем углу приложения. В правом нижнем углу расположена кнопка с вопросительным знаком для вызова справки и кнопка вызова панели комментариев. В интерфейсе приложения на кнопках вместо текстового обозначения визуализированы интуитивно понятные пиктограммы, чтобы пользователь сразу мог понимать функциональное назначение кнопки. Интерфейс WebBLC доступен на двух языках: русском и английском.

В главном меню пользователь может задать минимально необходимые параметры элементарной ячейки для построения её модели и решётки Браве. К таким параметрам относятся:

- длины рёбер ячейки по трём векторам (ширина, глубина, высота) в нанометрах;
- углы между тремя векторами в градусах;
- положения атомов в элементарной ячейке;
- радиусы атомов каждого из элементов кристаллической решётки.

Помимо этого, пользователь может указать название моделируемой им кристаллической решетки,

дать название любому из её элементов, а также назначить каждому из её элементов уникальный цвет модели атома.

Пример работы в WebBLC. Если установить параметры, при которых длины всех рёбер равны, а углы равны 90° , то решётка классифицируется как кубическая, высшей сингонии. В WebBLC угол между рёбрами ячейки может быть от 0 до 90° , чтобы пользователь смог получить, например, модель низшей сингонии (см. рис. 2, б). При этом стоит учитывать, что наука представляет гексагональную сингонию как призму из трёх элементарных ячеек [19], где углы между векторами равны 120° , как, например, решётка графита (см. рис. 3, а). Тем не менее такую элементарную ячейку всё ещё можно вписать в прямоугольник (см. рис. 3, б) с углами 90° в WebBLC. Это обусловлено особенностями алгоритма приложения, работающего только с параллелепипедами. В момент работы с WebBLC в поле его визуализации (справа) пользователю сразу виден результат его моделирования.

Затем полученный результат можно сохранить на любое своё устройство в виде изображения. При нажатии на кнопку «Сохранить» браузер скачает сформированный программой файл с параметрами кристаллической решётки в XML разметке. Сохранённый файл можно повторно загрузить в WebBLC для последующей правки при помощи кнопки «Загрузить». Также файл можно импортировать в BLC для Blender и продолжить работу с кристаллической решёткой уже в нём, создавая модели более сложных кристаллитов с применением принципов молекулярно-динамического моделирования.

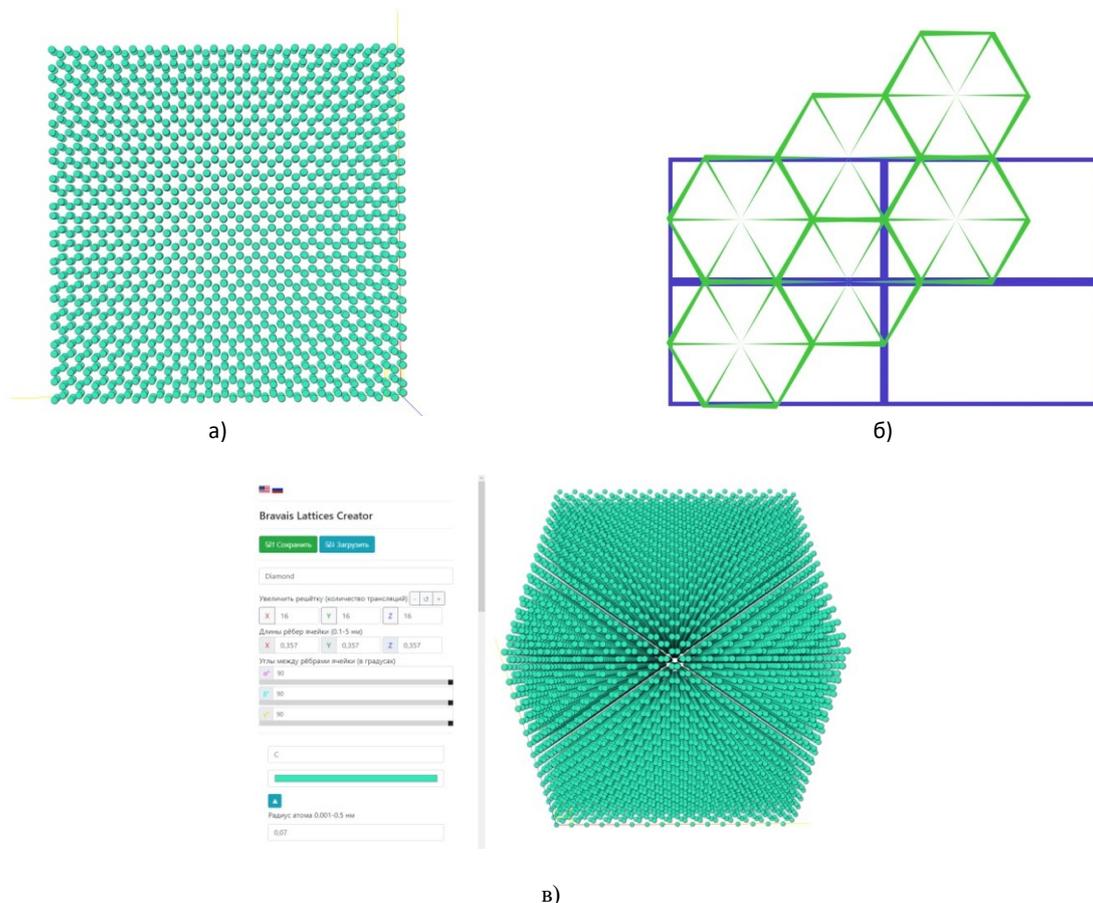


Рис. 3. Создание модели в WebBLC: а) модель решётки Браве гексагональной кристаллической решётки низшей сингонии графита; б) вписывание гексагона в прямоугольник; в) модель решётки Браве кубической кристаллической решётки высшей сингонии алмаза

Выводы и заключение. Нами предложены некоторые рекомендации для физического моделирования решёток Браве в веб-среде.

1. Разработано приложение WebBLC, позволяющее создавать модели кристаллических решёток в веб-среде.

2. WebBLC доступен в глобальной сети Интернет и работает на любых компьютерах, поддерживающих технологии HTML5 и WebGL (это компьютеры и смартфоны). WebBLC имеет русский и английский интерфейс, построенный на шаблонах Bootstrap.

3. WebBLC позволяет сохранять и загружать параметры модели, что обеспечивает обратную совместимость с BLC для Blender. WebBLC не может в полной мере заменить дополнение для Blender, в связи с низкой производительностью самой веб-среды по сравнению со специализированными программами для трёхмерного моделирования, при помощи которых были созданы модели [3], насчитывающие более 500000 атомов. При помощи WebBLC, без значительных нагрузок на компьютер с четырёхъядерным процессором, можно получить модели только с 30000 атомов (см. рис. 3, в). Однако теперь, благодаря веб-среде, можно быстро и удобно строить модели кристаллических решёток пря-

мо на смартфоне, по которым затем будут создаваться МД-модели в Blender.

4. При создании МД-моделей было выявлено [20], что каждая программная среда имеет свою систему измерений, которая, как правило, не рассчитана для создания наноразмерных моделей. Так, в Blender одна единица длины интерпретируется как одна единица метрической системы. Поэтому для получения достоверных результатов перед созданием модели необходимо убедиться, что программная среда учитывает масштаб виртуального эксперимента. И если это не так – выполнить масштабирование модели в соответствии с требованиями.

5. Разработку приложения для моделирования можно ускорить, используя встроенные в виртуальную среду примитивные объекты, такие как отрезки или плоскости. Например, нет необходимости рассчитывать координаты верхней грани элементарной ячейки триклинной сингонии при помощи матрицы поворота, так как достаточно получить координаты второй точки уже имеющегося в трёхмерной среде отрезка, характеризующего вектор высоты элементарной ячейки.

Литература

1. Попов В.Ю., Хлыстов А.Н., Бондин А.В. Атомная визуализация алмазного резания // Компьютерные исследования и моделирование. 2016. Т. 8. № 1. С. 161-172.
2. Попов В.Ю., Янюшкин А.С., Хлыстов А.Н. Дефекты в алмазах - основа адгезии при шлифовании // Обработка металлов (технология, оборудование, инструменты). 2017. № 5 (74). С. 16-23.
3. Попов В.Ю., Янюшкин А.С., Архипов П.В., Рычков Д.А., Говорин Д.В. Физические модели формирования основных видов контактного взаимодействия при комбинированной электроалмазной обработке // Системы Методы Технологии. 2018. № 4 (40). С. 32-39.
4. Попов В.Ю. Выбор программы для эмуляции физики резания // Механика XXI века. 2017. № 1. С. 21-26.
5. Попов В.Ю., Янюшкин А.С., Звягинцева С.Ю., Александрова А.В. Новые возможности в совершенствовании инструментов инженерного анализа // Роль и значение науки и техники для развития современного общества: сб. ст. Междунар. науч.-практической конф. (26 нояб. 2018 г.). Волгоград, 2018. С. 160-163.
6. Hossam Halfa. Thermodynamic Calculation for Silicon Modified AISI M2 High Speed Tool Steel // Journal of Minerals and Materials Characterization and Engineering. 2013. 1. P. 257-270.
7. Ельцов К.Н., Климов А.Н., Косяков А.Н., Обьедков О.В., Юров В.Ю., Шевлюга В.М. Сверхвысоковакуумный сканирующий туннельный микроскоп GPI-300 // Труды ИО-ФАН. 2003. Т. 59. С. 45-63.
8. Толстогузов А.Б. Атомно-зондовая масс-спектрометрия // Масс-спектрометрия. 2009. Т. 6. № 4. С. 280-288.
9. Баландин А.А., Рубинштейн А.М. Катализ: физико-химия гетерогенного катализа / пер. с англ. М.: Мир, 1967. 480 с.
10. Андерсон Р. Экспериментальные методы исследования катализа / пер. с англ. М.: Мир, 1972. 480 с.
11. Лодиз Р., Паркер Р. Рост монокристаллов / пер. с англ. М.: Мир, 1974. 540 с.
12. Томас Дж., Томас У. Гетерогенный катализ / пер. с англ. М.: Мир, 1969. 452 с.
13. Кабалдин Ю.Г., Кузьмишина А.М. Квантово-механическое моделирование деформации и разрушения срезаемого слоя при резании // Вестн. машиностроения. 2016. № 4. С. 65-71.
14. Kabaldin Y.G. Quantum model of nanostructure assembly // Russian Engineering Research. 2014. Т. 34. № 12. P. 751-755.
15. Кабалдин Ю.Г., Серый С.В., Уткин А.А. Моделирование процессов трения и смазывания при резании на основе квантово-механических расчетов // Вестн. машиностроения. 2012. № 2. С. 46-52.
16. Заводинский В.Г., Каминский О.И. Квантово-механическое исследование трения в наноконтактах // Механика композиционных материалов и конструкций. 2017. Т. 23. № 3. С. 310-321.
17. Zavodinsky V.G., Gorkusha O.A. Development of an orbital-free approach for simulation of multi-atomic nanosystems with covalent bonds // Наносистемы: физика, химия, математика. 2016. Т. 7. № 3. С. 427-432.
18. Матюшкин И.В. Моделирование и визуализация средствами MATLAB физики наноструктур. М.: Техносфера, 2011. 168 с.
19. Сиротин Ю.И., Шаскольская М.П. Основы кристаллофизики. М.: Наука, 1979. 640 с.
20. Хлыстов А.Н. Автоматизация молекулярно-динамического моделирования // Механика XXI века. 2016. № 15. С. 255-259.

References

1. Popov V.YU., Hlystov A.N., Bondin A.V. Atomic visualization of diamond cutting // Computer Research and Modeling. 2016. V. 8. № 1. P. 161-172.
2. Popov V.YU., YAnyushkin A.S., Hlystov A.N. On the destruction of diamond grains during grinding // Obrabotka Metallov (Metal Working and Material Science). 2017. № 5 (74). P. 16-23.
3. Popov V.YU., YAnyushkin A.S., Arhipov P.V., Rychkov D.A., Govorin D.V. Physical models of the formation of the main types of contact interaction in combined electric-

- diamond machining // *Systems Methods Technologies*. 2018. № 4 (40). P. 32-39.
4. Popov V.YU. Choosing a program for emulating the physics of cutting // *Mekhaniki XXI veku*. 2017. № 1. P. 21-26.
 5. Popov V.YU., YAnyushkin A.S., Zvyaginceva S.YU., Aleksandrova A.V. New opportunities in improving the tools of engineering analysis // *Rol' i znachenie nauki i tekhniki dlya razvitiya sovremennogo obshchestva: sb. st. Mezhdunar. nauch.-prakticheskoy konf. (26 noyab. 2018 g.)*. Volgograd, 2018. P. 160-163.
 6. Hossam Halfa. Thermodynamic Calculation for Silicon Modified AISI M2 High Speed Tool Steel // *Journal of Minerals and Materials Characterization and Engineering*. 2013. 1. P. 257-270.
 7. El'cov K.N., Klimov A.N., Kosyakov A.N., Ob'edkov O.V., YUrov V.YU., SHevlyuga V.M. Ultrahigh-vacuum scanning tunneling microscope GPI-300 // *Trudy IOFAN*. 2003. V. 59. P. 45-63.
 8. Tolstoguzov A.B. Atomic-probe mass-spectrometry // *Mass Spectrometry*. 2009. V. 6. № 4. P. 280-288.
 9. Balandin A.A., Rubinshtejn A.M. *Catalysis: physicochemistry of heterogeneous catalysis* / per. s angl. M.: Mir, 1967. 480 p.
 10. Anderson R. *Experimental methods for the study of catalysis* / per. s angl. M.: Mir, 1972. 480 p.
 11. Lodiz R., Parker R. *Growth of single crystals* / per. s angl. M.: Mir, 1974. 540 p.
 12. Tomas Dzh., Tomas U. *Heterogeneous catalysis* / per. s angl. M.: Mir, 1969. 452 p.
 13. Kabaldin YU.G., Kuz'mishina A.M. Quantum-mechanical modeling of the deformation and fracture of the shear layer during cutting // *Russian Engineering Research*. 2016. № 4. P. 65-71.
 14. Kabaldin Y.G. Quantum model of nanostructure assembly // *Russian Engineering Research*. 2014. V. 34. № 12. P. 751-755.
 15. Kabaldin YU.G., Seryj S.V., Utkin A.A. Modeling the processes of friction and lubrication during cutting based on quantum-mechanical calculations // *Russian Engineering Research*. 2012. № 2. P. 46-52.
 16. Zavodinskij V.G., Kaminskij O.I. Quantum-mechanical study of friction in nanocontacts // *Mekhanika kompozitsionnykh materialov i konstruksii (Mechanics of composite materials and structures)*. 2017. V. 23. № 3. P. 310-321.
 17. Zavodinsky V.G., Gorkusha O.A. Development of an orbital-free approach for simulation of multi-atomic nanosystems with covalent bonds // *Nanosystems: Physics, Chemistry, Mathematics*. 2016. V. 7. № 3. P. 427-432.
 18. Matyushkin I.V. *Modeling and visualization by means of MATLAB physics of nanostructures*. M.: Tekhnosfera, 2011. 168 p.
 19. Sirotin YU.I., SHaskol'skaya M.P. *Fundamentals of crystal physics*. M.: Nauka, 1979. 640 p.
 20. Hlystov A.N. Automation of molecular dynamics modeling // *Mekhaniki XXI veku*. 2016. № 15. P. 255-259.