

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ 3D-МОДЕЛИРОВАНИЯ В ХИМИИ

Пардабеков А.М., Карагандинский университет им. академика Е.А. Букетова, Караганда, Казахстан
Горбунова Н.А., Карагандинский университет им. академика Е.А. Букетова, Караганда, Казахстан

Компьютерные технологии в наше время являются одной из самых развивающихся отраслей, поскольку многие сферы жизни напрямую связаны с информационными технологиями. Среди областей компьютерных технологий трёхмерная графика играет огромную роль. Актуальность 3D-моделирования в современном мире невозможно переоценить. С появлением передовых технологий и растущим спросом на реалистичный, визуально привлекательный контент 3D-моделирование стало неотъемлемой частью различных отраслей, включая архитектуру, проектирование, дизайн продуктов, кино и телевидение, видеоигры и виртуальную реальность [1].

Искусственный интеллект и компьютерные технологии всё активнее используются и в современной химии для анализа и визуализации данных. Программы трёхмерного моделирования позволяют превращать абстрактные результаты квантово-химических расчётов в наглядные трёхмерные модели молекул и материалов. В сочетании с ИИ такие инструменты помогают не только строить красивые визуализации, но и автоматически обрабатывать большие массивы данных, прогнозировать свойства веществ и создавать обучающие материалы.

Программное обеспечение Blender [2] всё чаще используется в химической науке, хотя изначально эта программа создавалась для компьютерной графики и анимации. В отличие от специализированных приложений для визуализации молекул, которые в первую очередь предназначены для точного анализа структур и расчётных данных, Blender позволяет создавать более наглядные и художественно оформленные изображения. Поэтому его применяют в тех случаях, когда необходимо не только показать результат исследования, но и сделать его понятным, привлекательным и удобным для презентации.

На практике это выглядит так: химик получает модель молекулы или материала в программах квантовой химии или молекулярной динамики, после чего экспортирует её в формат, подходящий для Blender. В самой программе можно придать молекуле видимость реального объекта — задать текстуры, цвета атомов, подсветить связи, построить поверхности электронной плотности или орбитали. В результате получается не просто схема, а полноценная 3D-сцена, которую можно вращать, анимировать или включить в научный ролик. Существует определенный алгоритм разработки модели:

- создание трехмерной сцены;
- текстурирование или же работа с материалами;
- настройка освещения, блеск;
- рендеринг или визуализация сцены.

Наиболее важным этапом является моделирование сцены и всех ее компонентов разного масштаба. Каждое моделирование какого-либо объекта начинается с его проектирования. Для моделирования не обязателен точный чертёж, смоделировать можно как и по картинке, так и «методом подбора». После того, как определились с эскизом, можно приступить и к самому процессу моделирования. Моделировать можно разными способами, но самый распространённый метод – моделирование по полигонам (рис. 1).

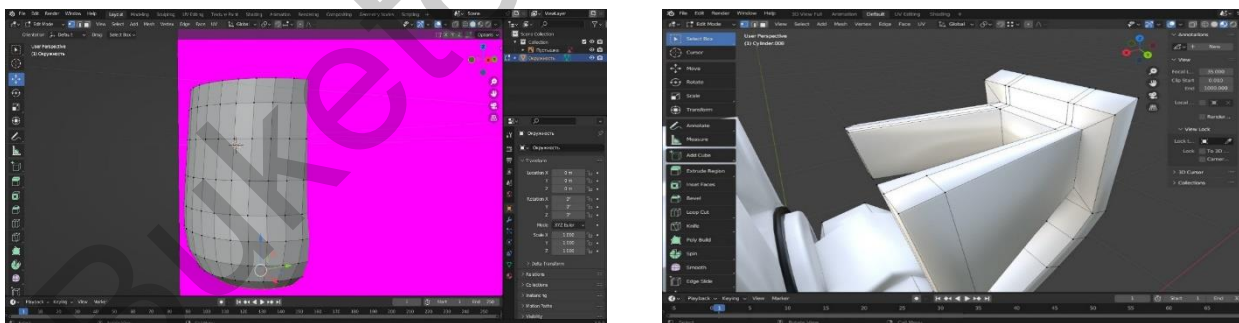
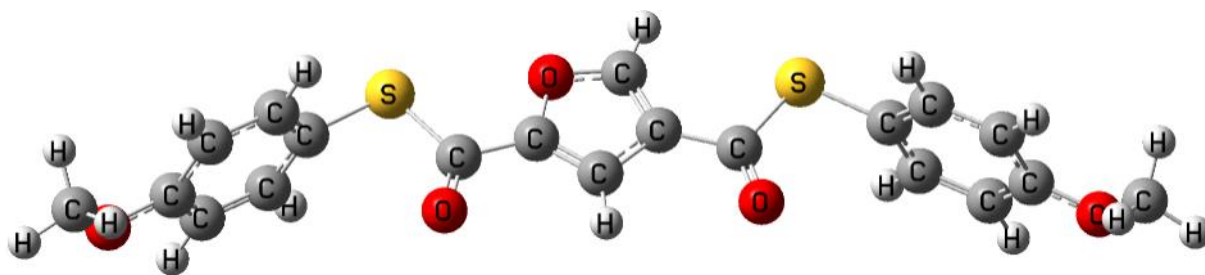


Рисунок 1. Полигональное моделирование и результат текстурирования

После того как моделирование по полигонам подходит к концу, и готова модель объекта, переходят на этап текстурирования. Результат текстурирования виден на рисунке 1.

В молекулярном моделировании используются специализированные надстройки типа BioBlender или Molecular Nodes, которые упрощают работу с данными из биохимических баз и позволяют быстро превращать числовые результаты моделирования в динамичные визуальные образы. Это особенно полезно в биохимии, молекулярной биологии и материаловедении. Аддон Molecular Nodes применяется в так называемом процедурном методе моделирования молекул. К примеру, исходная молекула подготавливается с помощью программы-визуализатора GaussView [3]:



Молекулярная модель экспортируется в программу Blender, затем создается трехмерная сцена и каркасная модель (рис. 2).

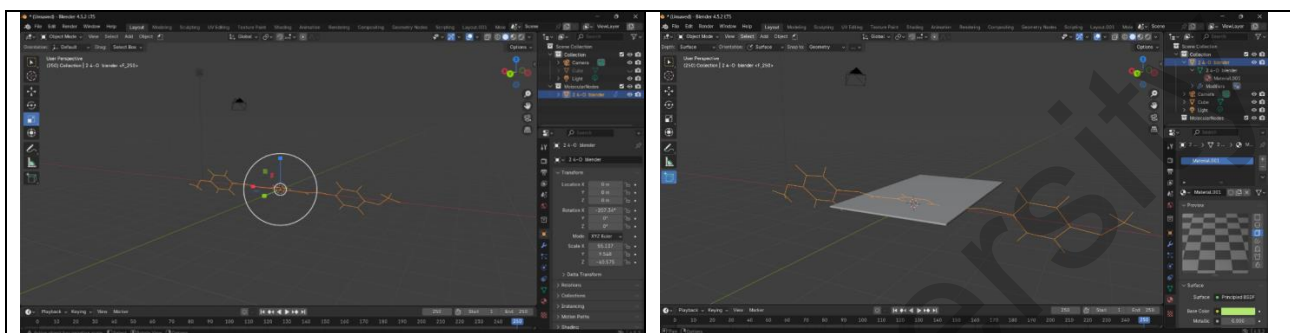


Рисунок 2. 3D-сцена и каркасная модель молекулы

Следующим этапом моделирования является задание текстуры, цвета атомов, подсвечивание связей и др., т.е. финальный рендеринг модели молекулы (рис. 3).

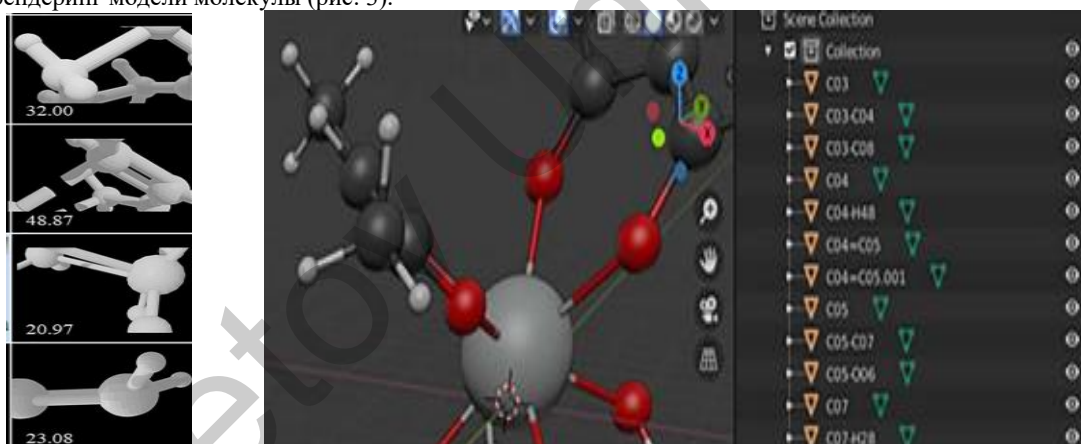


Рисунок 3. Рендеринг молекулы

Особое значение Blender имеет также для создания анимаций. Он позволяет показать процессы, которые невозможно передать статическим изображением: движение молекул, реакционные механизмы, изменение структуры белков.

Таким образом, синтез компьютерной графики, Blender и методов искусственного интеллекта открывает новые возможности для науки и образования в области химии. В целом актуальность 3D-моделирования заключается в его способности создавать реалистичные и подробные модели, которые можно использовать для самых разных целей. Поскольку технологии продолжают развиваться и открываются новые приложения для 3D-моделирования, их актуальность в ближайшие годы будет только возрастать.

Список использованных источников

1. Сафронов И. А. Обзор подходов к созданию концепт-изображений средствами IT-технологий // BCNW [Электронный ресурс]. — URL: <https://network-journal.mpei.ac.ru/cgi-bin/main.pl?l=ru&n=32&pa=10&ar=1>
2. Kuhn C. Blender 3D Incredible Machines. — Birmingham: Packt Publishing, 2016. — 49 p.
3. Dennington II R.D., Keith T.A., and Millam J.M., GaussView, Version 6.0. Gaussian Inc, Wallingford, CT, 2016.