

УДК 681.3.06

*О. В. Литовченко**Українська академія друкарства***ПРОЕКТУВАННЯ ПРОСТОРОВОЇ МОДЕЛІ МОЛЕКУЛИ**

Розроблено метод проектування просторової моделі молекули для візуалізації її структури при проектуванні системи автоматизованої підготовки зображень просторових моделей молекул.

Модель, молекула, проектування, вершина, сцена, клас, мова, атрибут

Останнім часом все актуальнішими для компаній медичного, біотехнологічного, фармацевтичного та нанотехнологічного профілю, видавництва наукової й науково-популярної літератури, журналів, кіностудій, наукових і освітніх установ стають задачі підготовки зображень 3D-моделей, які містять специфічну наукомістку інформацію. До таких зображень належать і просторові моделі молекули.

Розв'язати подібні задачі можна, скориставшись спеціалізованими програмними комплексами для візуалізації молекул. Однак підготовлені ними зображення не відповідають поліграфічним нормам [1], оскільки проектувалися для візуалізації на екрані комп'ютера, а не для застосування в комп'ютерних видавничих системах. Якщо ж зображення отримано за допомогою вказаних комплексів і відповідає поліграфічним нормам, це не гарантує відповідності видання даним нормам. Такий стан речей можна пояснити тим, що якісну верстку з ілюстраціями, зокрема технічного спрямування, повинні виконувати лише спеціалісти достатньо високої кваліфікації. В іншому випадку можна звернутися до неспеціалізованих дизайн-агентств, але при цьому існує велика ймовірність фактичних помилок і неточностей щодо відображення структури молекули.

Для розв'язання поставленої задачі розроблено систему автоматизованої підготовки зображень просторових моделей молекул (САПЗМ). Її використання дозволить, з одного боку, отримати якісне зображення просторової молекули, яке відповідатиме поліграфічним нормам, а з другого — забезпечить автоматизоване завершування ілюстрації в публікацію відповідно до прийнятих норм підготовки видання.

Процес одержання тривимірного зображення поділяється на два етапи [8]:

моделювання — створення математичної моделі сцени й об'єктів у ній;

візуалізація (рендеринг) — побудова проекції моделі на екрані комп'ютера відповідно до обраної фізичної моделі.

При проектуванні інформаційних систем з використанням моделей максимальна гнучкість досягається тоді, коли робота системи будується на моделях, які можуть змінюватися в процесі її функціонування. Такий процес

називається адаптацією інформаційних систем і забезпечує налаштування на мінливі умови експлуатації й потреби користувачів як при створенні нових систем, так і при супроводі наявних [2].

Існують загальні підходи до процесу створення адаптивних інформаційних систем. Одним з таких підходів є предметно-орієнтоване моделювання (domain specific modeling, DSM) [3, 5]. Це метод вирішення проблем, які часто трапляються в межах предметної області. Найчастіше застосовується для опису певних частин області за допомогою предметно-орієнтованих мов моделювання (domain-specific modeling language, DSML) [6]. Перевага предметно-орієнтованих мов моделювання полягає в тому, що завдання, для яких вони виділені, редагуються більш ефективно, ніж при використанні мов моделювання загального призначення (general-purpose modeling language, GPML). DSML надають фахівцям з проблемної області готові абстракції такого ж рівня, як їхня проблемна область. Отже, фахівці з проблемної області можуть швидко освоїти, застосувати й розширити DSMLs без їх вивчення.

Беручи до уваги сказане, для ефективного розв'язання задачі проектування просторової моделі молекули 3D-засобами на основі методу створення DSML [4] розроблено мову просторового моделювання молекули (МПММ). Вона являє собою предметно-орієнтовану мову моделювання, абстрактний синтаксис якої визначено відповідно до метамоделі MOF[4]. Написані на ній моделі можуть зберігатися в поданні XML. Крім того, ця мова володіє виконавчою семантикою, що визначена в XSLT-шаблонах. За допомогою шаблонів можна генерувати програмний код 3D-сцен з моделей, поданих у вигляді XML [7].

Для моделювання 3D-сцен у МПММ використовується модель сцени. Вона не описує конкретної сцени, а лише клас сцен одного типу, тобто являє собою структуру даних, що лежить в основі конкретної 3D-сцени. Протягом часу сцена може мати різні стани, наприклад при зміні розташування 3D-об'єктів.

Для опису конкретної сцени використовується її специфікація. Конкретним синтаксисом у цьому випадку може бути OpenGL. Ця бібліотека містить усі необхідні дані для визначення зовнішнього вигляду відповідної сцени. Специфікація сцени, як і модель сцен МПММ, знаходяться на рівні M1 метамоделі MOF. Це пояснюється тим, що, описуючи конкретну сцену, вона визначає її початковий стан (рис. 1), тобто специфікація сцени може завантажуватися пакетом 3D і трансформуватись у конкретну сцену.

Слід зауважити, що кожен 3D-API (OpenGL, Direct3D) володіє форматом графічних даних і є шаблоном для однієї або декількох специфікацій сцен. На противагу цьому, модель сцени може використовуватися для побудови просторового зображення відразу кількома 3D-API, оскільки вона не прив'язана до жодного з них, тобто атрибути елементів моделі сцени формуються залежно від 3D-платформи. Графічно модель сцени зображається орієнтованим графом (рис. 2). Такий запис одночасно з ієрархічним розбором комплексних структур сцен забезпечує інкапсуляцію й утилізацію окремих складових

частин і простий механізм подання аналогічних 3D-об'єктів. Модель володіє кореневою вершиною «Сцена», де описуються початкові параметри сцени. Від неї досягаються всі інші вершини орієнтованого графа, які також можуть володіти атрибутами. Не всі графи мають бути підпорядковані головному, деякі з них можуть бути занесені в підграфи моделі сцени.

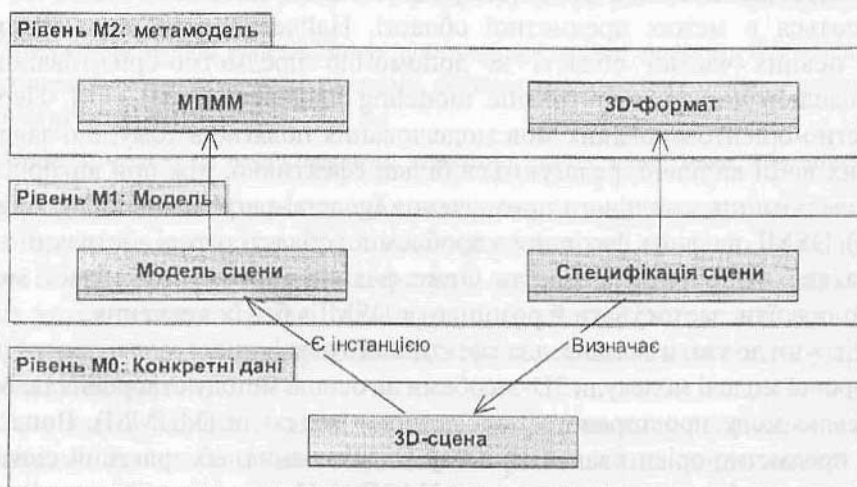


Рис. 1. Взаємозв'язок моделі сцени МПММ і специфікації сцени з 3D-сценою

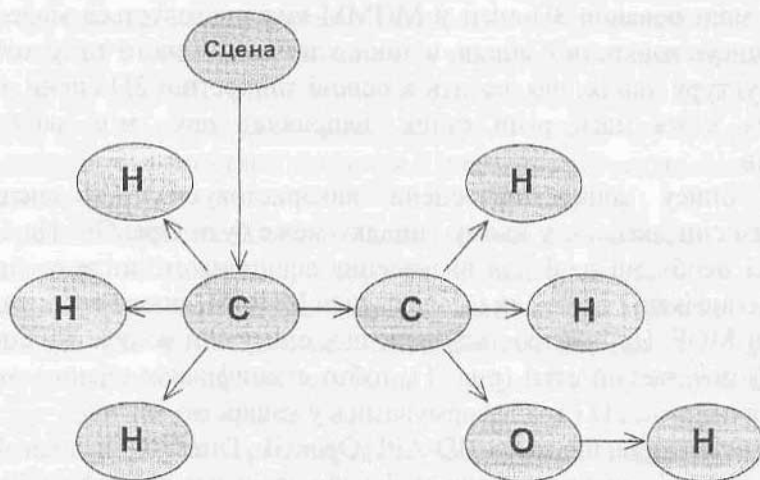


Рис. 2. Модель сцени молекули етанолу

Модель сцени МПММ складають елементи різних типів (рис. 3), з яких батьківським для всіх є клас «Базовий елемент». У свою чергу, він містить класи «Елемент сцени», який служить для опису вершини, та «Відношення», що свідчить про відношення між батьківською і дочірньою вершинами.



Рис. 3. Елементи моделі сцени

Зв'язок між батьківською і дочірньою вершинами вказує на те, що представлений вершиною 3D-об'єкт належить до батьківського або до його частини. Це забезпечує визначення його розміщення в просторі, тобто позиція й орієнтація об'єкта визначаються відносно позиції та орієнтації батьківського об'єкта.

На рис. 4 зображено ієрархію наслідування класів, екземпляри яких — це вершини в моделі сцен МПММ. Базовим класом, який використовується для опису вершин орієнтованого графа в межах моделі сцен МПММ, вважається клас «Вершина». Крім вершин класу «Сцена» — кореневих вершин моделі сцени, а отже, винятково батьківських, усі інші можуть бути як батьківськими, так і дочірніми. Поряд з атрибутами вершина може володіти контентом. Дочірні вершини належать до контенту батьківської вершини.

Модель сцени повинна обов'язково мати кореневу вершину. Як уже зазначалося, у моделі сцени такою вершиною є «Сцена». Вона містить загальну специфікацію сцени (камера, освітлення) та при необхідності володіє властивостями 3D-платформи.

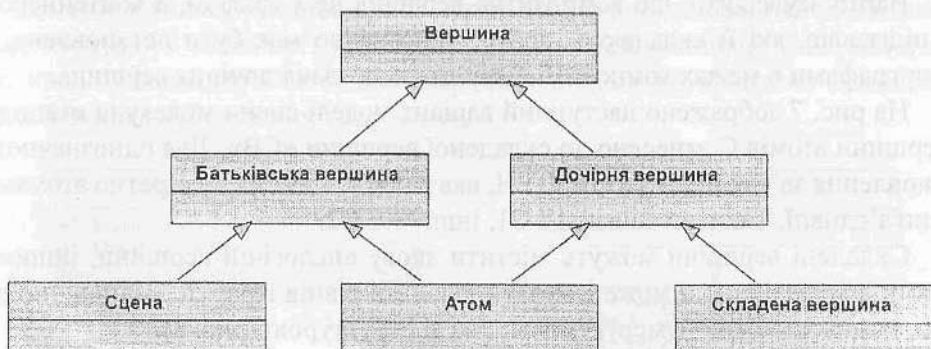


Рис. 4. Ієрархія наслідування класів вершини в моделі сцен МПММ

Вершина класу «Атом» одна з найважливіших у моделі, описує атом молекули як геометричний об'єкт, тобто його зовнішній вигляд (матеріал, текстура, розмір). Вміст вершини типу «Атом» у моделі МПММ описується класом «Контент» (рис. 5).

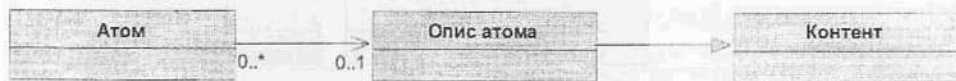


Рис. 5. Зв'язок між класами «Атом» і «Контент»

«Складена вершина» — це тип вершини, що складається з підграфів моделі сцени. Для однозначної ідентифікації відповідного підграфа використовують клас «Опис підграфа» (рис. 6), який містить його специфікацію. Вершина цього класу сама може містити складену вершину. Крім того, клас «Опис підграфа» містить усі атрибути елементів вершин, асоційованих з цим підграфом.



Рис. 6. Зв'язок між класами Com_node і Def_subgraf

Варто зауважити, що композитна вершина не є графом, а контейнером для підграфів, які її складають, тобто, однозначно має бути встановлено, з якими графами в межах композитної вершини зв'язана дочірня вершина.

На рис. 7 зображено наступний варіант моделі сцени молекули етанолу, де вершини атомів С занесено до складеної вершини «СВ». Для однозначного встановлення зв'язків для атомів О і Н, вказується, з якими конкретно атомами С вони з'єднані. Так одні зв'язані з С1, інші — з С2.

Складені вершини можуть містити знову аналогічні вершини, іншими словами в моделі сцени може існувати декілька рівнів ієрархії. Відповідно до цього, кожна вершина нумерується згідно зі структурою (рис. 8).

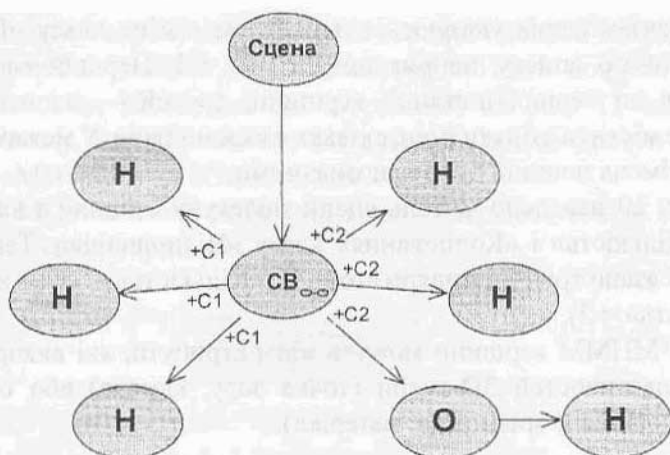


Рис. 7. Варіант моделі сцени молекули етанолу з композитною вершиною

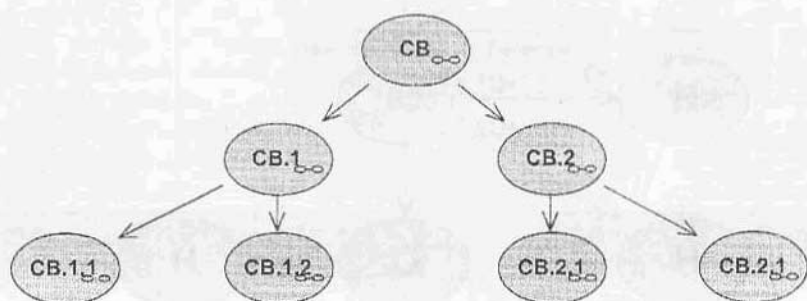


Рис. 8. Ієрархія композитних вершин

У мові МПММ вершина, а також підграф можуть володіти кількома екземплярами. Для визначення їх використовуються атрибути класів, зображені на рис. 9. Число екземплярів встановлюється атрибутами «Кількість» і «Копіювання» класу «Відношення». Якщо атрибут «Копіювання» має значення true, то атрибут «Кількість» вказує на кількість екземплярів. Слід зазначити, що число екземплярів складеної вершини відповідає кількості екземплярів його батьківської вершини типу «Атом».

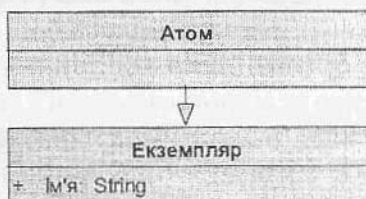
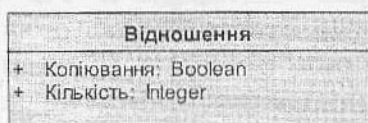


Рис. 9. Атрибути класів для створення екземплярів елемента моделі сцени

Імена екземплярів указуються атрибутом «Ім'я» класу «Екземпляр» у формі поіменного списку, наприклад: С1, С2, С3. Перший елемент списку приєднується до першої інстанції вершини, другий — до наступної і т.д. Список може містити стільки імен, скільки є екземплярів. У межах композитної вершини всі імена повинні бути однозначними.

На рис. 10 наведено модель сцени молекули етанолу з використанням атрибутів «Кількість» і «Копіювання» класу «Відношення». Таким чином, з атомом С1 зв'язано три екземпляри атома Н («Кількість» = 3), а з атомом С2 — два («Кількість» = 2).

У мові МПММ вершини можуть мати атрибути, які використовуються для опису властивостей 3D-сцени (точка зору, камера) або об'єкта сцени (наприклад, позиція й орієнтація, матеріал).

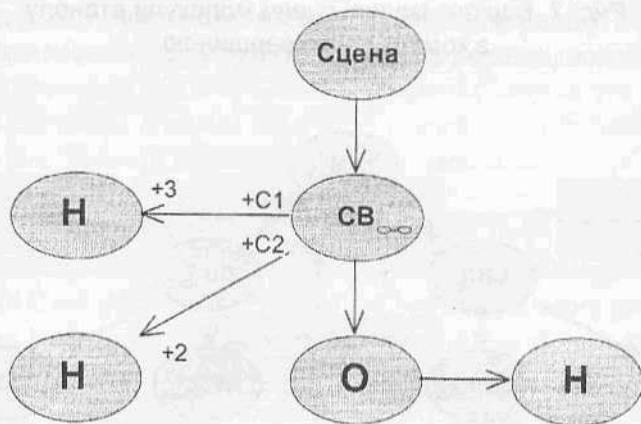


Рис. 10. Варіант моделі сцени молекули етанолу з використанням кількох копій екземпляра

Атрибут приєднується до вершини графа (рис. 11) і має в контексті вершини одне унікальне ім'я. Деякі типи вершини дозволяють підключення декількох атрибутів того самого типу. Наприклад, об'єкт може володіти декількома матеріалами.



Рис. 11. Частина моделі сцени молекули етанолу

Моделювання атрибутів для кожної вершини необов'язкове. Це має сенс тоді, коли потрібно вказати, які властивості об'єкта повинні змінюватися динамічно. А саме, відповідно до зображеної на рис. 11 частини моделі молекули станолу, атом Н під час візуалізації матиме доступ до атрибутів «Текстура», «Матеріал» та «Освітлення».

У мові МПММ класи атрибутів вершин являють собою структуровану ієрархію наслідування (рис. 12).

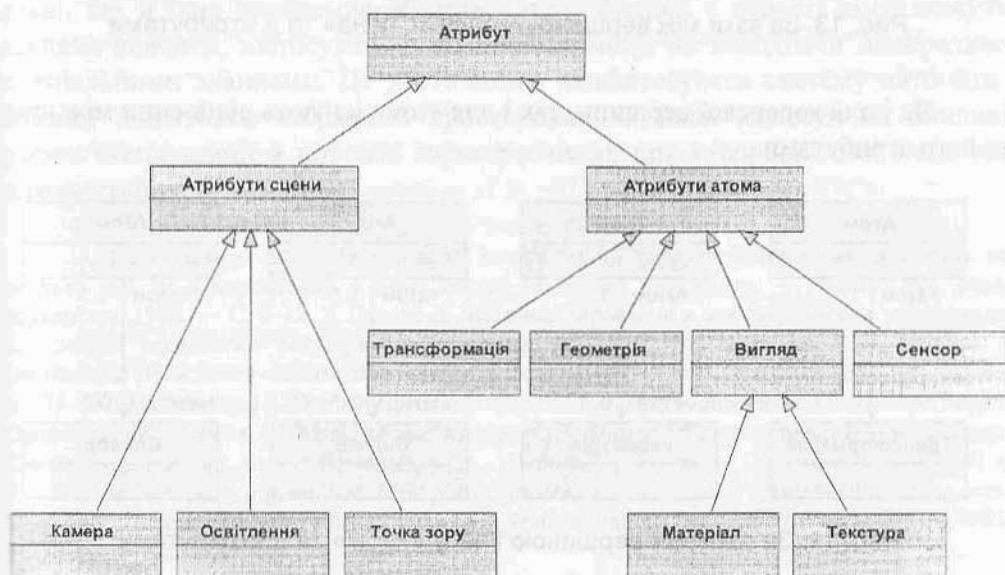


Рис. 12. Ієрархія наслідування класів атрибутів вершин

Розрізняють атрибути сцени та атрибути атома. До атрибутів сцени належать: «Камера», «Точка зору», «Освітлення». Можливі зв'язки між вершиною класу «Сцена» та її атрибутами (рис. 13). Атрибут «Камера» — це віртуальна камера, завдяки якій користувач переглядає 3D-сцену. Інстанція віртуальної камери може містити відомості про її позицію та орієнтацію, вертикальний і горизонтальний кути повороту, відстані до передньої та задньої площин відсікання. За допомогою атрибуту «Точка зору» задається центр координат в 3D-сцені, який інкапсулює в собі установлену позицію й орієнтацію, тобто позиція центра визначається зміщенням системи координат. Враховуючи це, у 3D-сцені може бути створено кілька точок зору, до яких у подальшому переміщуватиметься користувач. При цьому позиція та орієнтація віртуальної камери встановлюються на позицію й орієнтацію точки зору. Наступний атрибут «Освітлення» визначає властивості освітлення в 3D-сцені. Коренева вершина сцени може володіти декількома атрибутами джерел світла.

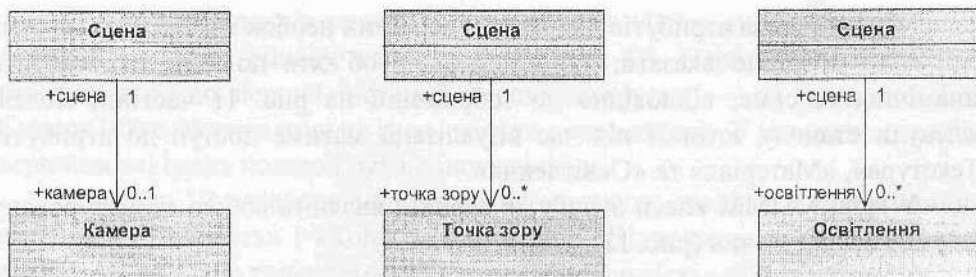


Рис. 13. Зв'язки між вершиною класу «Сцена» та її атрибутами

Як і для кореневої вершини, так і для атома існують відносини між ним та його атрибутами.



Рис. 14. Зв'язки між вершиною класу «Атом» та її атрибутами

Кожна вершина «Атом» володіє мінімум однією просторовою трансформацією відносно її батьківської вершини. Якщо ця трансформація повинна надалі динамічно змінюватися поза межами 3D-сцени, то вона повинна приєднуватися до вершини як атрибут класу «Трансформація». Тоді цей атрибут характеризуватиме позицію та орієнтацію об'єкта, що відповідає цій вершині в 3D-сцені.

Атрибут «Геометрія» може асоціюватися з одними або декількома вершинами типу «Атом». Він дає можливість маніпулювати геометричними характеристиками відповідних 3D-об'єктів для їх деформації (перспектива, зсув і ін.). Оскільки досліджувані 3D-об'єкти складаються з графічних примітивів (куля, циліндр), то вершина об'єкта може володіти декількома атрибутами «Геометрія».

Наступним атрибутом є «Вигляд», який є батьківським для атрибутів класу «Матеріал» і «Текстура». Атрибут «Матеріал» описує такі властивості об'єкта, як колір і прозорість, «Текстура» визначає текстуру об'єкта. Вони можуть бути спільними для декількох об'єктів.

До вершин типу «Атом» може приєднуватися й атрибут «Сенсор», що відповідає в 3D-сцені за інтерактивність, реагує на вибір користувачем одного

з 3D-об'єктів, з якими зв'язаний сенсорний елемент, наприклад, клацанням кнопкою миші. Сенсор може одночасно використовуватися декількома об'єктами. Це можливо, коли його властивість «Копіювання» має значення «true».

Таким чином, розроблена мова моделювання 3D-сцени молекули забезпечує адаптивність системи автоматизованої підготовки зображень просторових моделей молекул. Перевага цієї мови полягає в тому, що МПММ надає фахівцям з проблемної області готові абстракції, визначені на тому ж рівні, що й їхня проблемна область. Отже, фахівці з області хімії можуть швидко вивчити, застосувати й розширити мову, не володіючи попередньо спеціальними знаннями. Це дасть змогу налаштувати систему автоматизованої підготовки зображень просторових моделей молекул на мінливі умови експлуатації й потреби користувачів як при створенні, так і під час використання.

1. Сеньківський В. М. Особливості комп'ютерної технології підготування видань до випуску / В. М. Сеньківський // Комп'ютерні технології друкарства. — Львів : Укр. акад. друкарства, 1998. — С. 9–12. 2. Лядова Л. Метамоделирование и многоуровневые метаданные как основа технологии создания адаптируемых информационных систем / Л. Лядова. // International Book Series «Information Science & Computing». — Sofia, Bulgaria, 2008. — № 4. — S. 125–132. 3. Hessellund A. Domain-Specific Multimodeling: Thesis / A. Hessellund. — Copenhagen, Denmark, 2009. — 190 s. 4. Vitzthum A. Entwicklungsunterstützung für interaktive 3D-Anwendungen. Ein modellgetriebener Ansatz: Dissertation / A. Vitzthum. — München, Germany, 2008. — 234 s. 5. http://en.wikipedia.org/wiki/Domain-specific_modeling. 6. <http://www.visualmodeling.com/DSM.htm>. 7. http://uk.wikipedia.org/wiki/XSL_Transformations. 8. http://ru.wikipedia.org/wiki/Трёхмерная_графика.

ПРОЕКТИРОВАНИЕ ПРОСТРАНСТВЕННОЙ МОДЕЛИ МОЛЕКУЛЫ

Разработан метод проектирования пространственной модели молекулы для визуализации ее структуры при проектировании системы автоматизированной подготовки изображений пространственных моделей молекул.

PLANNING OF SPATIAL MODEL OF MOLECULE

The method of designing of spatial model of a molecule is developed for visualisation of its structure at designing of system of the automated preparation of images of spatial models of molecules.