

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского

Н.В. СоМОВ

PseudoSymmetry software package

Symmetry3D

(Руководство пользователя)

г. Нижний Новгород 2016 г.

Содержание

О программе Symmetry3D.....	3
Системные требования	4
Рабочее окно программы.....	5
Параметры расчета.....	7
Исследование симметрии трехмерного объекта.....	11
Построение симметриграмм	14
Файл отчета.....	16

О программе Symmetry3D

Программа **Symmetry3D** является частью пакета программ **PseudoSymmetry** и позволяет проводить исследования симметрии трехмерных объектов, заданных в формате **STL**. Расчеты производятся по воксельной модели объекта с применением **OpenMP** и **CUDA** технологий.

В программе **Symmetry3D** реализованы следующие алгоритмы:

- оценка степени инвариантности трехмерного объекта относительно заданного оператора преобразования (DoI);
- вокселизация трехмерного объекта;
- поиск элементов симметрии;
- приведение элементов симметрии к каноническому виду;
- определение точечной кристаллографической группы симметрии;
- расчет симметриграм и кореллограм для заданной оси вращения.

Численная оценка степени инвариантности трехмерного объекта (DoI) осуществляется на основе формулы

$$\eta_{\hat{q}}[\rho(\mathbf{r})] = \left[\frac{\int \rho(\mathbf{r})\rho(\hat{q}\mathbf{r})dV}{\int_{\rho} \rho(\mathbf{r})^2 dV} \right]^2, \quad (1)$$

где \hat{q} – оператор преобразования объекта, $\rho(\mathbf{r})$ – функция плотности объекта, равная единице для точек пространства принадлежит объекту, и $\rho(\mathbf{r})=0$ во всех остальных точках пространства.

Системные требования

Для использования пакета программ **PseudoSymmetry** необходим персональный компьютер под управление операционной системой Windows XP/Vista/7/8/8.1/10 (64-bit).

Рекомендуемые параметры рабочей станции:

Процессор: 4 ядра или более, частота 3.0 ГГц или выше.

Оперативная память: 8 ГБ или более.

CUDA-устройство: Видеокарта с поддержкой CUDA или специализированное устройство, спецификация 2.0 или выше. Частота ядра от 800 МГц, число потоков от 1000, ОЗУ 1 Гб или выше.

Рабочее окно программы

Рабочее окно программы изображено на рис. 1. Оно состоит из главного меню программы, панели инструментов, области вкладок и области вывода.

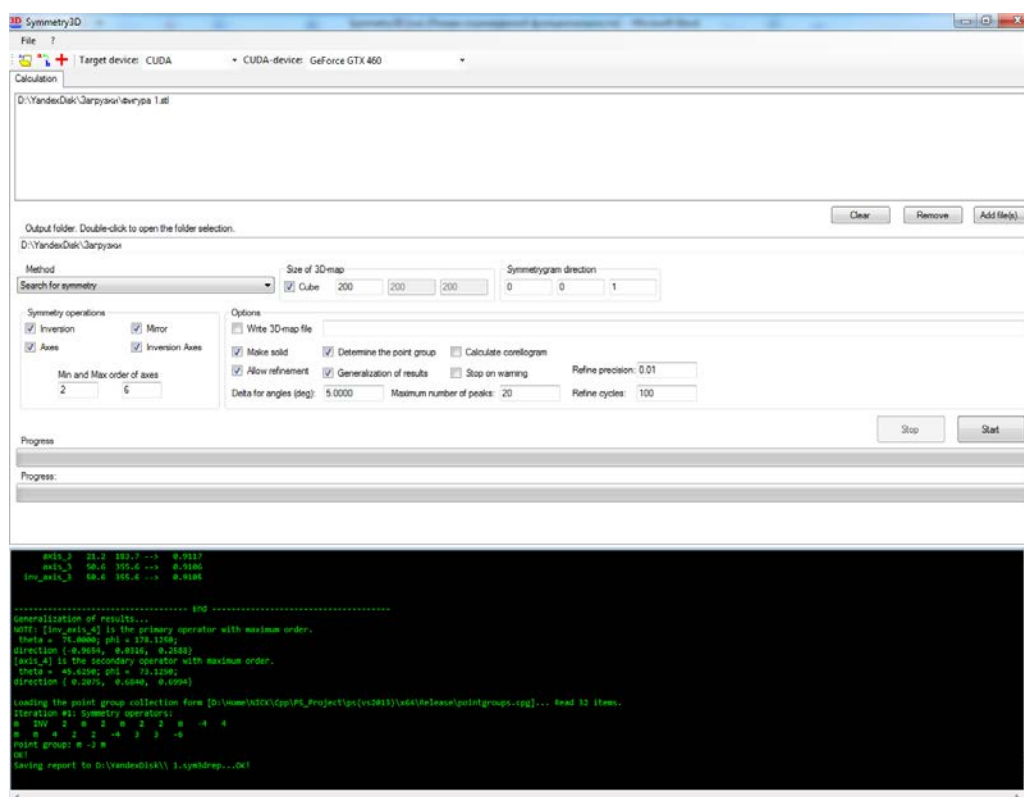


Рис. 1. Рабочее окно программы Symmetry3D

Используя главное меню программы можно выполнить следующие действия:

- импортировать файл отчета для последующего просмотра;
- запустить конвертор файлов отчета;
- посмотреть версию программы;

Панель инструментов позволяет быстро выполнить некоторые действия:

- импортировать файл отчета для последующего просмотра;
- запустить конвертор файлов отчета;

- добавить файл модели объекта для последующего обьсчета;
- выбрать устройство расчета (CPU – центральный процессор, CUDA – устройство содержащее графические процессоры GPU).

В области вкладок по умолчанию находится одна вкладка *Calculation*, которая содержит инструментарий для запуска расчетов. После импорта файла отчета появляются новые вкладки, соответствующие разделам отчета.

Область вывода служит для вывода промежуточной отчетной информации. В процессе расчета в эту область выводятся промежуточные результаты, сообщения о предупреждениях и ошибках.

Параметры расчета

В верхней части вкладки *Calculation* находится список файлов трехмерных объектов, которые необходимо исследовать. Для управления данным списком предусмотрены три кнопки:

Clear – очистить список;

Remove – удалить выделенные элементы;

Add file(s) – добавить файлы объектов в список.

Ниже следует поле выбора пути вывода результатов расчетов (рис. 2).

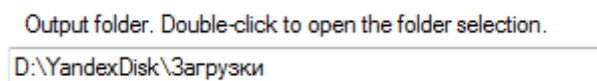


Рис. 2. Путь вывода результатов

Данное поле заполняется автоматически, путем к последнему выбранному файлу объекта. Если требуется, данный путь можно заменить. Для этого необходимо отредактировать поле вручную, либо щелкнуть по нему два раза и выбрать нужный каталог в стандартном окне выбора директорий.

Поле *Method* позволяет выбрать метод расчета (рис. 3). Возможны три варианта

Search for symmetry – метод поиска симметрии трехмерного объекта;

Symmetrygram – расчет симметриграммы трехмерного объекта;

Create 3D-map file – создание файла трехмерной карты вокселей;

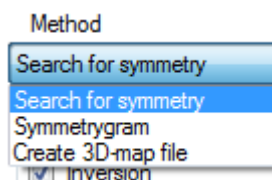


Рис. 3. Выбор метода расчета

Размер карты вокселей задается в поле *Size of 3D-map* (рис. 4). Переключатель *Cube* сигнализирует об эквивалентности всех трех измерений карты вокселей.




Рис. 4. Размер карты вокселей

При расчетах симметриграмм направление оси вращения задается в поле *Symmetrygram direction* (рис. 5). Данное поле должно содержать компоненты единичного вектора направления оси симметриграммы (x , y и z соответственно).

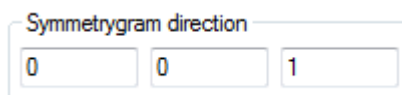


Рис. 5. Направление оси симметриграммы

При поиске симметрии трехмерного объекта набор тестовых элементов симметрии задается в поле

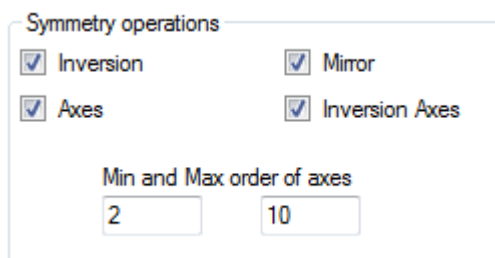


Рис. 6. Тестовые элементы симметрии

В поле на рис. 6 следует отметить те элементы симметрии, относительно которых может быть инвариантен исследуемый объект. Минимальный и максимальный порядок инверсионных и поворотных осей задается в числовой форме.

На рис. 7 показаны опции расчетов.

Options

Write 3D-map file

Make solid Determine the point group Calculate corellogram

Allow refinement Generalization of results Stop on warning Refine precision:

Delta for angles (deg): Maximum number of peaks: Refine cycles:

Рис. 7. Опции расчетов

Write 3D-map file – записать файл с трехмерной картой вокселей. Если имя файла не указано, то запись будет выполнена в тот же каталог, в котором располагается файл модели. Карта будет сохранена в файл с тем же именем, но новым расширением *bfr*.

Make solid – предписывает выполнить алгоритм заполнения пустот трехмерного объекта. Данный алгоритм превращает полый объект, заданный поверхностью, в объемный заполненный объект.

Allow refinement – предписывает выполнить уточнения направлений элементов симметрии после процедуры поиска.

Delta for angles – некоторый малый угол. Данный параметр задает угол сканирования при поиске направлений элементов симметрии или шаг симметриграммы.

Determine the point group – предписывает производить поиск точечной группы симметрии трехмерного объекта.

Generalization of results – приведение результатов к каноническому виду. Для этого вбирается два элемента симметрии по следующим правилам:

Первый элемент симметрии не является центром инверсии и характеризуется максимальной степенью инвариантности (DoI).

Второй элемент симметрии не является центром инверсии, направление перпендикулярно направлению первого элемента симметрии и также характеризуется максимальной степенью инвариантности (DoI).

Направление первого оператора симметрии принимается Z, второго за X. Направления остальных оператор переводятся в новый базис.

Calculate corrallogram – предписывает рассчитывать коррелограмму для полученной симметриграммы.


Stop on warning – остановка расчетов в случае если модель трехмерного объекта не отвечает нужному качеству. Например, объект получен путем 3D-сканирования, в результате ошибок которого поверхность объекта имеет разрывы. При высокой детализации (больших размерах карты вокселей) невозможно отличить внутренние воксели объекта от внешних, поэтому процедура заполнения объема объекта дает предупреждение. Если опция *Stop on warning* установлена, то расчет прекращается.

Maximum number of peaks – максимальное число анализируемых элементов симметрии с пиковыми значениями DoI.

Refine precision – точность уточнения.

Refine cycles – максимальное число циклов уточнения.

Исследование симметрии трехмерного объекта

Перед началом расчетов необходимо добавить файлы объектов в список расчетов. Для этого можно воспользоваться кнопкой панели инструментов , либо использовать кнопку *Add file(s)*. В качестве файлов, содержащих модели трехмерных объектов можно использовать файлы формата STL (бинарные, текстовые). Также поддерживаются файлы воксельных карт, имеющие расширение bfr. Один файл должен содержать один трехмерный объект.

Если требуется изменить каталог вывода результатов расчета, то необходимо щелкнуть два раза по полю *Output folder* после чего выбрать нужную папку в открывшемся окне.

В табл. 1 приведены рекомендуемые параметры для исследования симметрии трехмерных объектов.

Запуск расчетов осуществляется кнопкой *Start*. Результат работы программы выводится в файлы имена, которых соответствуют именам файлов, содержащих трехмерные объекты. Ниже приведена маска имени файла отчета

<имя файла объекта>-report.sym3drep

Рекомендуемые параметры для исследования симметрии трехмерных объектов

Название параметра	Рекомендуемое значение
Method	Search for symmetry
Size of 3D-map	100 ⁽¹⁾
Inversion	Да
Axes	Да
Mirror	Да
Inversion Axes	Да
Min and Max order of axes	2–6 (для анализа кристаллографической симметрии)
Write 3D-map file	Нет
Make solid	Да ⁽²⁾
Allow refinement	Да ⁽³⁾
Determine the point group	Да
Generalization of results	Да
Calculate corellogram	Нет
Stop on warning	Нет ⁽⁴⁾
Delta for angles	5.0 ⁽⁵⁾
Maximum numbers of peaks	30 ⁽⁶⁾
Refine precision	0.01 ⁽⁷⁾
Refine cycles	50 ⁽⁸⁾

⁽¹⁾ Данное значение определяет степень детализации объекта при представлении его в виде трехмерной карты вокселей. Рекомендуется использовать симметричный диапазон: 50–1000, например, 100×100×100. Верхнее значение определяется параметрами рабочей станции. При расчетах с использованием CUDA трехмерная карта вокселей должна полностью помещаться в памяти CUDA-устройства. Необходимо учитывать, что один воксель занимает 1 байт.

⁽²⁾ Данную опцию следует отключать при использовании специально подготовленных BFR файлов.

⁽³⁾ Включает или отключает уточнение направления элемента симметрии. При грубой оценке симметрии данную опцию можно отключить.

⁽⁴⁾ Если данная опция установлена как **Да**, то программа будет останавливать расчет, если в параметрах расчета и параметрах расчета наблюдается конфликт. Наиболее часто возникает проблема, при которой алгоритм заполнения объема трехмерного объекта не может отличить внутренние воксели объекта от внешних. При возникновении такой

проблемы необходимо уменьшить размеры карты вокселей или отредактировать поверхность трехмерного объекта таким образом, что бы размеры разрывов были много меньше линейных размеров вокселя.

⁽⁵⁾ Данный параметр задает шаг сканирования по углу. Оптимальное значение данного параметра, при использовании уточнения, равно 5.0 градусов.


⁽⁶⁾ Данный параметр задает максимальное число элементов симметрии, для которых были найдены пиковые значения степени инвариантности.

⁽⁷⁾ Точность уточнения. Данный параметр имеет размерность градусов, оптимальное значение 0.01.

⁽⁸⁾ Число циклов уточнения, оптимальное значение от 30 до 100.

Построение симметриграмм

Симметриграмма трехмерного объекта представляет собой функцию угла поворота DoI, которая рассчитывается для заданной оси вращения объекта.

Перед началом расчетов необходимо добавить файлы объектов в список расчетов. Для этого можно воспользоваться кнопкой панели инструментов , либо использовать кнопку *Add file(s)*. В качестве файлов, содержащих модели трехмерных объектов можно использовать файлы формата STL (бинарные, текстовые). Также поддерживаются файлы воксельных карт, имеющие расширение bfr. Описание формата BFR файлов приведено ниже. Один файл должен содержать один трехмерный объект.

Если требуется изменить каталог вывода результатов расчета, то необходимо щелкнуть два раза по полю *Output folder* после чего выбрать нужную папку в открывшемся окне. Далее в поле *Symmetrygram direction* необходимо задать направление оси вращения симметриграммы. Направление оси вращения симметриграммы задается в виде трех компонент единичного вектора. Данные об особых направлениях исследуемого объекта можно получить из отчета *Search for Symmetry* из таблицы **%tab_max_val**. В данной таблице приведена информация о элементах симметрии и их особых направлениях для которых наблюдаются максимумы степени инвариантности (DoI).

В табл. 2 приведены рекомендуемые параметры для расчета симметриграммы.

Запуск расчетов осуществляется кнопкой *Start*. Результат работы программы выводится в файлы имена, которых соответствуют именам файлов, содержащих трехмерные объекты. Ниже приведена маска имени файла отчета

<имя файла объекта>-symgrm.sym3drep

Рекомендуемые параметры для исследования симметрии трехмерных объектов

Название параметра	Рекомендуемое значение
Method	Symmetrygram
Size of 3D-map	100 ⁽¹⁾
Write 3D-map file	Нет
Make solid	Да ⁽²⁾
Allow refinement	Нет
Determine the point group	Нет
Generalization of results	Нет
Calculate corellogram	Да ⁽³⁾
Stop on warning	Нет ⁽⁴⁾
Delta for angles	2.0 ⁽⁵⁾
Maximum numbers of peaks	Не используется
Refine precision	Не используется
Refine cycles	Не используется

⁽¹⁾ Данное значение определяет степень детализации объекта при представлении его в виде трехмерной карты вокселей. Рекомендуется использовать симметричный диапазон: 50–1000, например, 100×100×100. Верхнее значение определяется параметрами рабочей станции. При расчетах с использованием CUDA трехмерная карта вокселей должна полностью помещаться в памяти CUDA-устройства.

⁽²⁾ Данную опцию следует отключать при использовании специально подготовленных BFR файлов.

⁽³⁾ Включает или отключает расчет кореллограммы.

⁽⁴⁾ Если данная опция установлена как **Да**, то программа будет останавливать расчет, если в параметрах расчета и исходных данных наблюдается конфликт. Наиболее часто возникает проблема, при которой алгоритм заполнения объема трехмерного объекта не может отличить внутренние воксели объекта от внешних. При возникновении такой проблемы необходимо уменьшить размеры карты вокселей или отредактировать поверхность трехмерного объекта таким образом, что бы размеры разрывов были много меньше линейных размеров вокселя.

⁽⁵⁾ Данный параметр задает шаг симметриграммы по углу. Оптимальное значение данного параметра равно 2.0 градуса.

Файл отчета

Файлы отчета являются простыми текстовыми файлами, имеющими линейную структуру. Открыть данный файл можно в любом текстовом редакторе: NotePad, WordPad и т.д. Первая строка файла является стандартной. Она содержит идентификационную информацию о формате файла и время его создания.

Далее следуют параметры и таблицы. Параметры файла отчета имеют следующий формат

```
# <комментарий к параметру>  
${имя параметра} = <значение параметра>
```

Если значение параметра является строкой, содержащей пробелы, то значение выводится в апострофах.

Таблицы имеют более сложный формат

```
# <Название таблицы>  
%<имя таблицы>  
# <заголовок колонки №1>  
# <заголовок колонки №2>  
# ...  
# <заголовок колонки №N>
```

Значение-1-1	Значение-1-2	Значение-...	Значение-1-N
Значение-2-1	Значение-2-2	Значение-...	Значение-2-N
...			
Значение-P-1	Значение-P-2	Значение-...	Значение-P-N

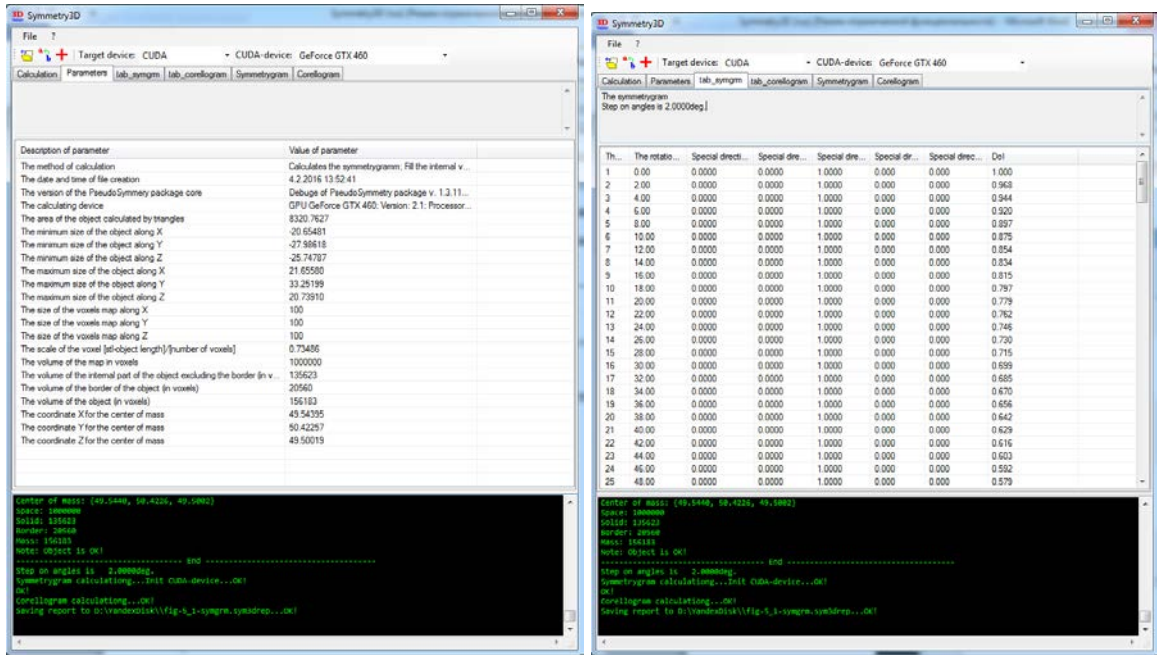
В табл. 3 приведены описания параметров файла отчета.

Описание параметров файла отчетов

Название параметра	Описание
\$method	Перечисление используемых методов расчета
\$date	Дата проведения расчетов
\$version	Версия математического ядра
\$machine	Параметры вычислительной станции
\$area_tgs	Площадь поверхности объекта, рассчитанная по треугольникам в STL-файле
\$size_min_x, \$size_min_y, \$size_min_z, \$size_max_x, \$size_max_y, \$size_max_z	Минимальные и максимальные размеры объекта в единицах измерения длины STL-файла
\$map_x, \$map_y, \$map_z	Размер трехмерной карты вокселей
\$scale	Масштаб [единица измерения длины в STL-файле / воксель]
\$space	Число вокселей в карте
\$solid	Число вокселей принадлежащих объекту, но не принадлежащих его поверхности
\$border	Число вокселей принадлежащих поверхности объекта
\$volume	Число вокселей принадлежащих объекту
\$cm_x, \$cm_y, \$cm_z	Координаты центра масс на трехмерной карте вокселей

Просмотр содержимого файла отчета можно производить непосредственно в программе **Symmetry3D**. Для этого нужно импортировать файл отчета при помощи главного меню или панели инструментов.

В области вкладок появятся новые вкладки, соответствующие разделам файла отчета. Каждая таблица файла отчета выводится в виде отдельной вкладки, параметры файла выводятся на отдельной вкладке *Parameters* (рис. 8). По данным таблиц симметрограмм и кореллограм строятся графики (рис. 9).



(a)

(б)

Рис. 8. Вкладки параметров (а) и таблица данных симметриграммы (б)

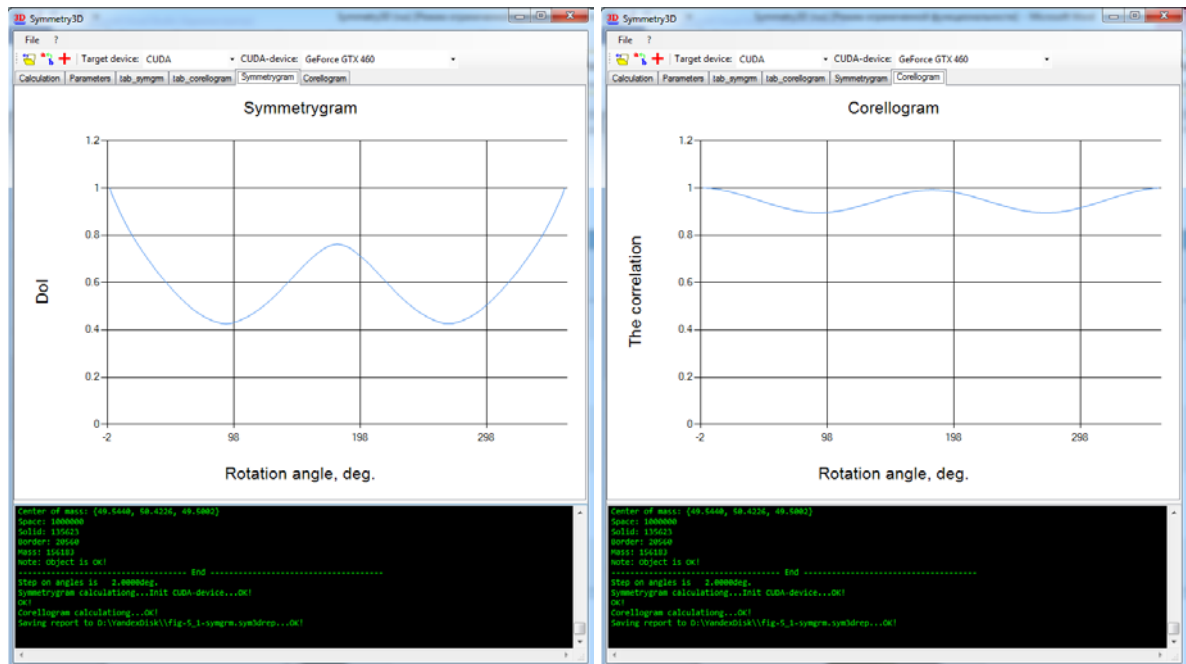


Рис. 9. Вкладки Symmetrygrm и Corellogrm

Для удобства обработки файлов отчета в других программах предусмотрена возможность их конвертации в другие форматы. Для этого необходимо запустить конвертер файлов отчета из главного меню, либо панели инструментов.

В открывшемся окне нужно задать список файлов для конвертации, формат выходных файлов, указать путь сохранения конвертированных файлов и нажать на кнопку *Run* (рис. 10). Если путь сохранения конвертированных файлов не указан, то файлы будут сохраняться в тот же каталог, где расположен конвертируемый файл.

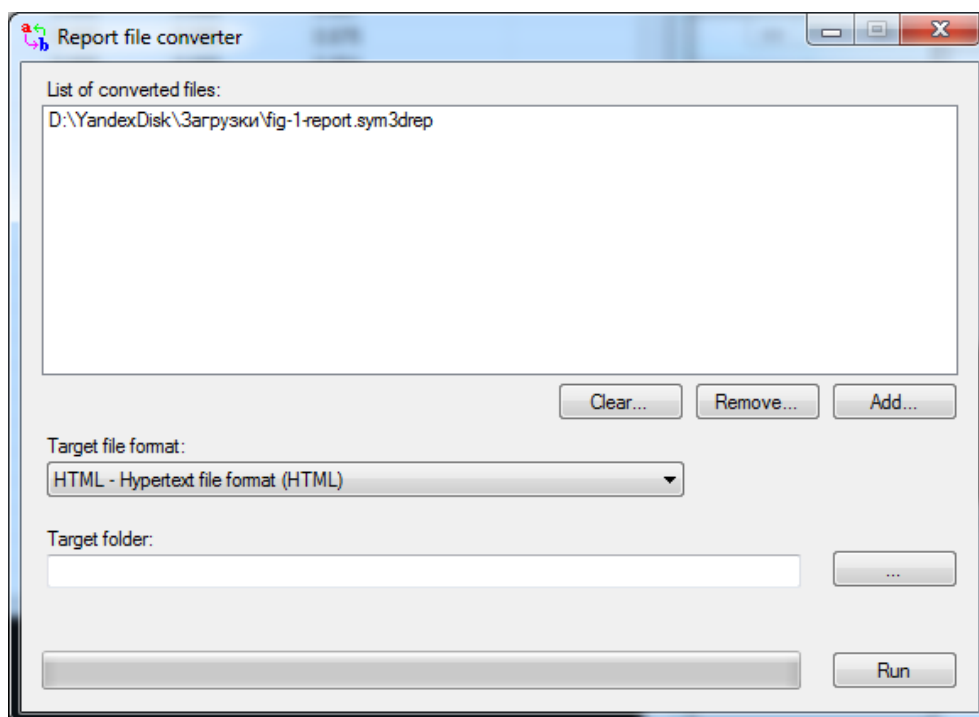


Рис. 10. Конвертер файлов отчетов