

Hacimsel Moleküler Modellemede Kütle-Yay Sisteminin Kullanımı

Alpaslan Duysak¹, Rıdvan Yayla²

¹ Dumlupınar Üniversitesi, Bilgisayar Mühendisliği Bölümü, Kütahya
² Bilecik Şeyh Edebali Üniversitesi, Bilgisayar Mühendisliği Bölümü, Bilecik
aduysak@dpu.edu.tr, ridvan.yayla@bilecik.edu.tr

Özet: Sanal gerçeklik uygulamalarının yaygınlaştığı günümüz dünyasında nesnelerin sanal ortamlarda gerçeğe en yakın görüntüsünün elde edilmesi ile birçok teknik geliştirilmiştir. Fiziksel şartlar düşünülerek ve nesnelerin kimyasal yapılarından yola çıkılarak elde edilen modeller, sanal gerçeklik uygulamalarının yaygınlaşmasında önemli rol oynamaktadır. Sanal ortamlarda nesnelerin modellenmesi aşamasında nesnelerin hacim ve kütleleri ele alınarak oluşturulan modellerde, nesneye etki eden her türlü fiziksel kuvvet ve buna bağlı olarak oluşan hacimsel değişiklikler gözlemlenmekte ve hacim modellenmesinde oluşacak olan değişimler simüle edilebilmektedir. Hacimsel Moleküler Modelleme nesnelerin sanal ortamda 3 boyutlu görüntülerinin elde edilmesi için oluşturulan bir tekniktir. Nesnelerin 3 boyutlu görüntüleri oluşturulurken sanal ortamda dışarıdan etki eden kuvvetlere karşı nesnenin şeklinde oluşacak olan deformasyonun gözlemlenmesi için kütle-yay sisteminden yararlanılır. Bu çalışmada tetrahedral geometrik şekil temelinde hacimsel moleküler modelleme ile kütle-yay sistemi ilişkisi ele alınarak yeni bir yaklaşım geliştirilmiştir.

Anahtar Sözcükler: Hacimsel Moleküler Modelleme, Kütle-Yay Sistemi, Deformasyon

Abstract: Today's world of growing up virtual reality applications, A lot of technics are developed within virtual environments most realistic image is obtained. The models that is obtained to consider physical conditions and set off with the objects of the chemical structures, play an important role for growing up the virtual reality applications. When the objects is modeling at virtual environments, it can observed that affected to any physical force of the object in virtual environments of according to handle of the objects of volume and masses and it is simulated that changing of the volume modeling. Volumetric molecular modeling is a technic because of being obtained to three dimensional images of objects in virtual environment. While three dimensional images of objects are created, it is made use of mass-spring system because of being observed deformation that is in shape of object against forces that are affect from abroad in virtual environment. In this study, A new approach has been developed that is handled relationship between the volumetric molecular modeling with mass-spring system based on tetrahedral geometric shape.

Keywords: Volumetric Molecular Modeling, Mass-Spring System, Deformation

1. Giriş

Günümüzde sanal gerçeklik, bilgisayar grafik teknolojilerinin yaygınlaşması ile yaşamın her noktasında işe koşulmakta ve özellikle iş yaşamında kullanıcılara bir çok kolaylık sağlamaktadır. Sanal ortam, nesnelerin gerçek zamanda, bilgisayar grafik teknolojileri ve programlama dilleri ile üç boyutlu olarak ifade edilmesidir. Sanal ortamlarda nesnelerin hacimsel olarak ifade edilmesi, gerçeğe yakın olan üç boyutlu görüntüsünün elde edilmesinde, avantaj sağlayan bir modelleme yöntemidir. İnsana derinlik hissi veren ve gerçeğe yakın bir görüntünün elde edilmesinde önemli bir faktör olan hacimsel boyut, nesnelerin daha gerçekçi olarak ifade edilmesinde önemli rol oynamaktadır. Hacimsel modelleme ile yapılan uygulamalar, sanal gerçeklik ile yapılan çalışmalarda özellikle simülatör araçlarının oluşturulmasında etkin rol oynamaktadır. Tıp alanında yapılan yeniliklerle, doğru ve gerçekçi bir operasyonun yapılmasında simülasyon araçları etkili bir biçimde kullanılmaktadır. Aynı şekilde savunma sanayisinde askeri eğitimler için oluşturulan simülasyon ortamları, gerçek bir ortamda karşılaşılabilecek olası durumlar için eğitim alan

kişilere gerçek ortamda aldıkları eğitime yardımcı olan eğitim ortamlarıdır. Oyun programlamadan eğitime kadar birçok alanda simülasyon yazılımları geliştirilmiştir. [1] Tetrahedral modelleme, üçgen modelleme yöntemlerinin uygulanabildiği bir modelleme yöntemi olarak nesnelerin hacimsel modellenmesinde kullanılan bir modelleme yöntemidir.

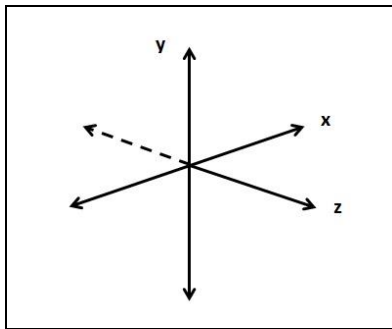
6. Sanal Gerçeklik

Sanal gerçeklik, insanlara yakınlık hissini uyandıran gerçek bir ortamın, bilgisayar grafik teknolojileri vasıtasıyla ele alınarak bilgisayar ortamına aktarılmasıdır. Bir başka ifade ile katılımcılarına gerçekmiş hissi veren, bilgisayarlar tarafından yaratılan dinamik bir ortamla karşılıklı iletişim olanağı tanıyan, bir benzetim modelidir [2]. Sanal gerçeklik uygulamaları, sanal ortamın etkili bir şekilde kullanılması ile gerçekçi bir simülasyonun uygulanması fikrini ön görmektedir. Bu kapsamda elde edilen teknikler, hacimsel modelleme ile yapılan uygulamaların önemini ortaya koymaktadır. Ayrıca, nesnelerin sanal ortamda hacimsel olarak modellenmesi ileri düzeyde bir simülasyonun ortaya konulmasında ve gerçekçi bir simülasyonun

oluşturulmasında önemli bir unsur olarak karşımıza çıkmaktadır. Sanal ortam, genel anlamda bir nesneye bağlı olarak gerçekleştirilen üç boyutlu bir nesne modelinin bilgisayar grafikleri yardımıyla, bilgisayar ortamına aktarıldığı platformu ifade etmektedir.

2.1. Sanal Ortamın Altyapısı

Sanal ortam, farklı programlama dilleri, program derleyicileri ve program kütüphaneleri ile oluşturulabilir. Sanal gerçeklik uygulamalarında 3max, maya vb. paket programların kullanılmasının yanısıra, C++ programlama dili ile entegre edilebilen OpenGL kütüphanesi ile etkili bir biçimde kullanılabilir. Bu kapsamda ortaya konulan modeller, kullanıcılarına derinlik hissi vererek, hacimsel modellemenin gerçekleştirilmesinde katkıda bulunmaktadır. Çeşitli modellerin hacimsel modelleme yoluyla elde edilmesi, farklı uygulamaların oluşturulmasında ve şekil değişikliklerinin görüntülenmesinde ortaya konulan bir tekniktir. Bu bağlamda kullanıcının elde edeceği modellerin deformasyonu sağlanmaktadır. Ayrıca kullanıcı ile etkileşimin daha gerçekçi bir hissi uyandırması için çevresel birimlerden de yararlanılabilir. Sanal ortama derinlik hissini uyandıran gözlük, haptic kol, eldivenler bu kapsamda değerlendirebilecek olan çevresel birimlerdir. Sanal ortamda modellenen bu nesne modelleri ile çevresel birimlerden yararlanılarak nesnelerin deformasyonu gözlemlenebilmekte, nesneye ait dışarıdan etki eden bir kuvvetin sanal ortamın altyapısına bağlı olarak kuvveti hesaplanabilmektedir. Hacimsel modellemede 3 boyutlu olarak düşünülen koordinat ekseninde, z eksenini derinlik hissini ifade etmekte, -z eksenini ise kullanıcının ekrana baktığı yönü yani model ile kullanıcıya arasındaki uzaklığı ifade etmektedir. Bu durumu ifade eden temel gösterim Şekil-1'de gösterilmiştir.

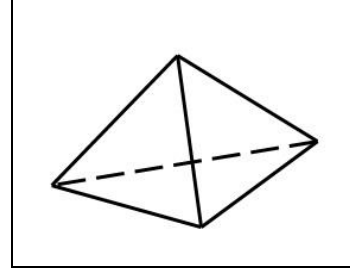


Şekil 1. Koordinat düzleminde derinliği ifade eden z eksenini

Bu çalışmada, oluşturulacak olan modelin hazırlanmasında sanal ortamın altyapısı için C++ Programlama dili ve OpenGL kütüphanesi kullanılmış ve simülasyon sağlanmıştır.

2.2 Geometrik Şekil

OpenGL ortamında gerçek zamanda bir nesnenin modeli oluşturulurken, modele ait ağ oluşumunda kullanılan geometrik şekil tetrahedral geometrik şeklidir. Tetrahedral geometrik model bir tür üçgen piramittir ve üçgen yüzeyleri sayesinde üçgensel modelleme tekniklerinin tetrahedral modelin üçgen yüzeylerinde oluşacak herhangi bir deformasyonda kullanılmaktadır. Tetrahedral model ile oluşturulan ağ örüntüsü, hacimsel boyutta incelenen nesnenin daha gerçekçi bir görüntüsünün elde edilmesini sağlar.

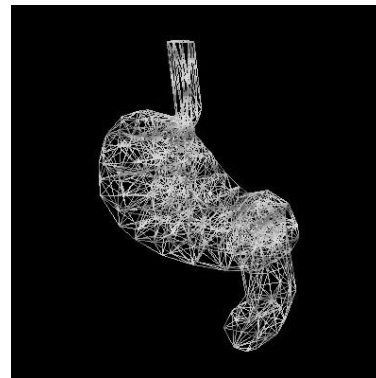


Şekil 2. Hacimsel modellemede kullanılan tetrahedral geometrik şekil

3. Modelin Oluşturulması

Üçgensel moleküler modelleme yöntemi nesnenin sanal ortamda oluşturulmasında kullanılan yaygın bir tekniktir. Üçgensel modellemede nesnelerin 2 boyutlu ve 3 boyutlu olarak simülasyonları gerçekleştirilebilir. Tetrahedral geometrik model ise, nesnelerin hacimsel boyutta simülasyonun sağlanabildiği etkin bir yöntemdir. Bu çalışmada nesne modelinin oluşturulması için tetrahedral geometrik model kullanılmış ve modelin yüzeyinde bulunan üçgen geometrik şekiller ile modelin görüntüsü elde edilmiştir.

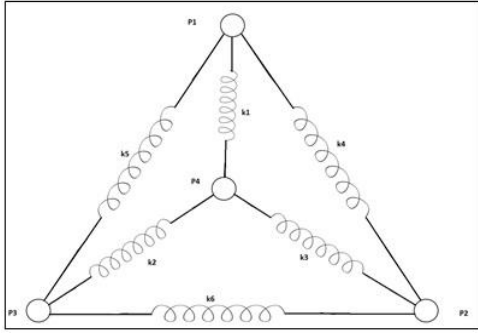
Bu kapsamda tetrahedral modele ait olan üçgen yüzey bilgileri bir text dosyasından okutulmaktadır ve modelin tetrahedral ağ örüntüsü bu teknik ile elde edilmiştir.[3] Bu çalışmada tetrahedral geometrik şekil ile oluşturulan bir mide modelinin ağ örüntüsü Şekil 3'de verilmiştir.



Şekil 3. Tetrahedral model ile oluşturulmuş bir mide modelinin ağ örüntüsü

4. Tetrahedral Modellemede Kütle-Yay Sisteminin Kullanımı

Kütle-Yay Sistemi üçgen modelleme ile nesnelerin deformasyonunda kullanılan yaygın bir yöntemdir. Bu kapsamda tetrahedral modellemede, her bir üçgen yüzeyinin bağlı olduğu köşe noktalarında bir kütlelerin olduğu düşünülür. Bu kütleler arasında tetrahedral şeklin kenarları vasıtasıyla yayların bağlı olduğu kabul edilir. Nesneye bir kuvvet etki ettiğinde, yayları sıkıştırır ya da sönümleme hareketi yaptırarak nesneye potansiyel enerji kazandırır. Bu enerjiden yola çıkılarak nesnenin iç kuvvetleri hesaplanır. Bir tetrahedral geometrik modele ait kütle-yay sistemi Şekil 4’te gösterilmiştir.



Şekil 4. Tetrahedral modele ait kütle-yay sistemi

4.1. Kütle-Yay Sisteminde Potansiyel Enerji

Tetrahedral model ile modellenmiş bir nesneye bir kuvvet etki ettiğinde, modelde kütle-yay sistemi ile yaylarda bir potansiyel enerji depolanır. Bu potansiyel enerji üçgen köşe noktalarında bulunan kütleler ile kütleler arasındaki yayların gerilme ve sönüm hareketleri ile oluşur. Şekil 4’de belirtilen kütle-yay modelindeki tetrahedral geometrik şeklin bir üçgen yüzeyi ele alındığında, bir yüzeyde toplanan potansiyel enerjisi ile elde edilen kuvvetler hesaplanır. Bu kapsamda elde edilen kuvvetler ile dışarıdan etki eden kuvvetin toplanması ile nesne modeline etki eden toplam kuvvet bulunur ve Eşitlik 1’teki gibi hesaplanır.[4]

$$f_{top} = f_k + f_d(k) + f_{dış} \quad (1)$$

Eşitlik 1’de belirtilen f_k ve $f_d(k)$ değerleri kütle-yay sisteminde, kütleler arasındaki yayların gerilme ve sönümleme hareketlerinden elde edilen kuvvetleri, $f_{dış}$ ise dışarıdan nesneye etki eden dış kuvveti belirtmektedir.

Kütle-yay sisteminde elde edilen kuvvetler ile kütlelerin hız ve yer değiştirme ilişkisi Eşitlik 2’deki gibi belirtilmektedir. [4]

$$F_{top} = \sum [k(r - r_0) - d(\|v_2 - v_1\|) \frac{x_2 - x_1}{|x_2 - x_1|}] \quad (2)$$

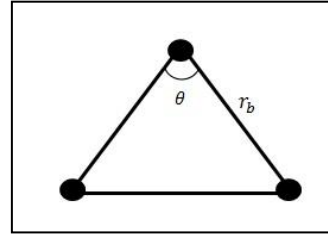
Eşitlikte belirtilen x_1 ve x_2 iki kütle arasındaki durum vektörünü, v_1 ve v_2 kütlelerin hız vektörlerini, r_0 ise

kütleler arasındaki yay uzunluğunu, k ve d ise yayların sertlik ve sönüm sabitlerini ifade etmektedir.

4.2 Hacimsel Moleküler Modelleme Kütle-Yay Sistemi İlişkisi

Kütle-yay sistemi, üçgensel modelleme ile yapılmış bir ağ modelinin deformasyonunda kullanılan bir yöntemdir. Bu kapsamda Tetrahedral modellemede kütle-yay sistemi ile bağlantılı olarak moleküler modelleme metodları uygulandığında verimli sonuçların alındığı görülmüştür. Hacimsel moleküler modellemede, kütle-yay sisteminde olduğu gibi tetrahedral modelin her bir uç noktasında bir atomun olduğu varsayılır. Köşe noktalarında bulunan bu atomlar yaylara benzer şekilde atomlar arası bağlar ile birbirine bağlıdır.

Tetrahedral modelleme ile modellenmiş olan bir nesneye dışarıdan bir kuvvet etki ettiğinde tetrahedral modelin uç noktalarındaki bağlar arasında gerilme ya da sıkışma hareketi olur. Şekil 5’te, başlangıçta deformasyona uğramamış bir tetrahedral geometrik şeklin bir yüzeyi ele alınmış ve köşe noktalarında bulunan atomlar ile atomlar arası bağlar gösterilmiştir.



Şekil 5. Tetrahedral modele ait bir üçgen yüzeyi

Tetrahedral modelleme ile yapılmış bir modele dışarıdan bir kuvvet etki ettiğinde, atomlar arasındaki θ açısı değişir. Bu açının değeri gerilme ya da sönümlemeye göre değişiklik gösterir.

Hacimsel moleküler modellemede, atomlar ve bağlar arası etkileşimler ile bağ-açı potansiyel enerjisi ve yüzey açısı potansiyel enerjisi elde edilir.

Bağ açısı potansiyel enerjisi, üçgen yüzeylerin tepe açılarının deformasyon öncesi ve deformasyon sonrası etkileşimi ile oluşan açılar ile elde edilen potansiyel enerjidir. Bu bağlamda bağ-açı etkileşimi ile elde edilen potansiyel enerji Eşitlik 3’deki gibi hesaplanmaktadır.[4]

$$\phi_\theta = \sum_{i,j=1,2}^3 \frac{1}{2} k_\theta (\cos\theta - \cos\theta_0)^2 \quad (3)$$

Yüzey açısı enerjisi, kütlelere bağlı yayların gerilme ve sönümleme hareketinden elde edilen bükülme ya da sıkışmadan dolayı elde edilen potansiyel enerjidir. Bu enerji Eşitlik 4’deki gibi hesaplanmaktadır.[4]

$$\phi_r = \sum_{i,j=1,2}^3 \frac{1}{2} k_r (r_b - r_0)^2 \quad (4)$$

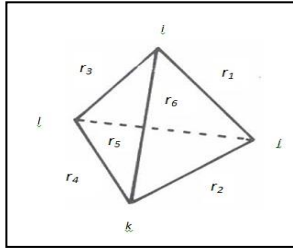
Bir tetrahedral modelde oluşacak olan toplam potansiyel enerji ise tetrahedral modelin 4 üçgen yüzeyinin dışarıdan etki eden bir kuvvete karşı modelde oluşturacağı potansiyel enerjiler toplamıdır.

Enerjinin türevi kuvveti verir. Bir nesneye bir kuvvet etki ettiğinde oluşan toplam potansiyel enerjinin türevi o nesneye ait olan toplam iç kuvveti verir. Hacimsel moleküler modellemede nesneye dışarıdan bir kuvvet etki ettiğinde, elde edilen toplam kuvvetin hesaplanması eşitlik 5'te verilmiştir.

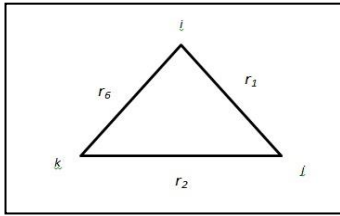
$$F_{top} = F_{bağ} + F_{yüzey-açı} \quad (5)$$

4.3. Hacimsel Moleküler Modellemede Yüzey-Açı kuvvetleri

Tetrahedral moleküler modellemede, tetrahedral geometrik şeklin her bir yüzeyine etki eden toplam yüzey açı kuvvetleri hesaplanır ve toplam tetrahedral geometrik şekil sayısı ile çarpılarak, nesneye etki eden toplam yüzey açı-kuvveti bulunur. Bu kapsamda bir tetrahedral geometrik şekle etki eden yüzey-açı kuvvetlerinin aşamalı olarak gösterimi şu şekildedir:



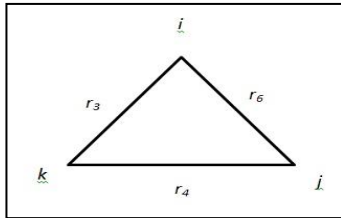
Şekil 6. Tetrahedral geometrik şekil



Şekil 7. Tetrahedral şeklin 1. yüzeyi

$$f_{yüzey1} = -k_b (r_1 - r_1^0) \times \vec{r}_1 - k_b (r_2 - r_2^0) \times \vec{r}_2 - k_b (r_6 - r_6^0) \times \vec{r}_6$$

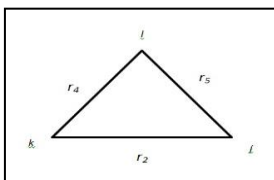
(5)



Şekil 8. Tetrahedral şeklin 2. yüzeyi

$$f_{yüzey2} = -k_b (r_3 - r_3^0) \times \vec{r}_3 - k_b (r_4 - r_4^0) \times \vec{r}_4 - k_b (r_6 - r_6^0) \times \vec{r}_6$$

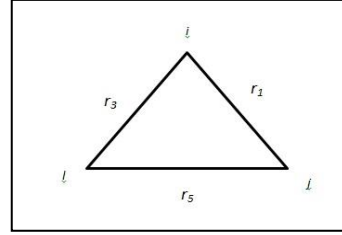
(6)



Şekil 9. Tetrahedral şeklin 3. yüzeyi

$$f_{yüzey3} = -k_b (r_1 - r_1^0) \times \vec{r}_1 - k_b (r_2 - r_2^0) \times \vec{r}_2 - k_b (r_5 - r_5^0) \times \vec{r}_5$$

(7)



Şekil 10. Tetrahedral şeklin 4. yüzeyi

$$f_{yüzey4} = -k_b (r_1 - r_1^0) \times \vec{r}_1 - k_b (r_2 - r_2^0) \times \vec{r}_2 - k_b (r_3 - r_3^0) \times \vec{r}_3 - k_b (r_4 - r_4^0) \times \vec{r}_4 - k_b (r_5 - r_5^0) \times \vec{r}_5$$

(8)

$$F_{yüzeyToplamı} = -k_b (r_1 - r_1^0) \times \vec{r}_1 - k_b (r_2 - r_2^0) \times \vec{r}_2 - k_b (r_3 - r_3^0) \times \vec{r}_3 - k_b (r_4 - r_4^0) \times \vec{r}_4 - k_b (r_5 - r_5^0) \times \vec{r}_5 - k_b (r_6 - r_6^0) \times \vec{r}_6$$

(9)

Eşitlik 9'da verilen k_b değerleri modellenen nesneye ait esneklik sabitini, $r_1^0, r_2^0, r_3^0, r_4^0, r_5^0, r_6^0$ değerleri deformasyon öncesi atomlar arası bağ uzunluklarını, $r_1, r_2, r_3, r_4, r_5, r_6$ değerleri deformasyon sonrası atomlar arası oluşan yeni bağ uzunluklarını, $\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \vec{r}_4, \vec{r}_5, \vec{r}_6$ vektörel değerleri ise üç boyutlu ortamda deformasyonun oluşturduğu vektörel yönü belirtmektedir. Eşitlikte belirtilen ve tekrar eden kuvvetler, toplam yüzey kuvvetine dâhil edilmez. Bu şekilde daha gerçekçi bir deformasyonun yapılması sağlanır.

4.4. Hacimsel Moleküler Modellemede Bağ-Açı kuvvetleri

Hacimsel moleküler modellemede, bir tetrahedral geometrik modelde, atomlar ile bağlar arasındaki açıdan oluşan potansiyel enerjinin türevi, bağ-açı kuvvetlerini verir ve Eşitlik 10'daki gibi hesaplanır.

$F_{bağaçıtoplama} =$

$$k \times (\cos \alpha - \cos \alpha_0) \times \frac{-r_3}{r_2 \times r_4} \times \vec{r}_3 + k \times (\cos \beta - \cos \beta_0) \times \frac{-r_4}{r_2 \times r_6} \times \vec{r}_4 + k \times (\cos \theta - \cos \theta_0) \times \frac{-r_5}{r_1 \times r_2} \times \vec{r}_5 + k \times (\cos \alpha - \cos \alpha_0) \times \frac{-r_3}{r_2 \times r_4} \times \vec{r}_3$$

(10)

