

УДК 514.87

ОЦЕНКА ЭФФЕКТИВНОСТИ МЕТОДОВ МОДЕЛИРОВАНИЯ ПРОЦЕССА КРИСТАЛЛИЗАЦИИ

Пашинская А.В.

Донецкий национальный технический университет

В статье проведена сравнительная оценка эффективности использования воксельного и векторно-воксельного методов моделирования процесса кристаллизации, сформулированы условия для оптимального использования данных методов.

Введение

В сфере компьютерной графики есть два основных подхода к описанию моделей: в растровой и векторной формах. В применении к трехмерному моделированию используется аналогичный подход, позволяющий создать объект используя для его описания список вершин, ребер или узловых точек (полигональные каркасные, проволочные модели) или путем разбиения объекта на множество элементарных фрагментов (воксельные модели). Воксельные модели часто используются для визуализации и анализа медицинской, технической и научной информации, однако они имеют существенный недостаток – воксельные модели (по сравнению с векторными) потребляют гораздо больше места в памяти для обработки.

Целью написания данной статьи является проведение сравнительной оценки эффективности двух методов моделирования процесса кристаллизации, а так же определение оптимальных условий их использования.

Актуальность данного исследования подтверждается практической возможностью использования быстрого компьютерного моделирования процесса кристаллизации при подготовке к промышленному производству твердосплавных изделий, что сокращает время на проведение опытных экспериментов.

Воксельный и комбинированный методы моделирования кристаллизации

Под моделированием процесса кристаллизации понимается процесс создания трехмерной модели зародышей кристаллов, имеющих формы призм с треугольным или прямоугольным основанием, в некотором замкнутом объеме с последующей возможностью расчета форм кристаллов в процессе их роста, т.е. в процессе затвердевания вещества.

Для получения трехмерных моделей используются различные подходы: геометрические аспекты решения таких задач посвящена работа [1], совместное использование численных и геометрических методов показано в работе [2], получение трехмерной модели кристаллов возможно с использованием методов, описанных в [3-4].

Как было показано ранее ([5-7]), при моделировании процесса кристаллизации предпочтительно использование воксельной модели. Тем не менее, при разработке метода следует учитывать не только точность результата [8], но и скорость его получения.

Так же, при генерации воксельной модели, влияние погрешностей создания объекта уменьшается при увеличении размеров объекта. Подробно, построение воксельной модели описано в [6]. Векторно-воксельная модифицирована таким образом, чтобы на некотором этапе можно было пользоваться векторным описанием объекта (кристалла или зародыша кристалла).

Рассмотрим суть модификации подробнее. В начале моделирования все объекты заданы списком вершин и ребер. Основная идея заключается в том, чтобы не создавать воксельную модель кристалла до тех пор, пока не происходит взаимодействие с другим кристаллом. Поскольку для произвольно ориентированных кристаллов возможны разнообразные типы взаимодействий (грань-грань, грань-ребро, грань-вершина, ребро-ребро, ребро-вершина), поиск которых требует больших вычислительных затрат ([1]), предлагается свести типы взаимодействий к минимуму, путем использования оболочек, описанных вокруг объектов. Если оболочки (рис. 1) взаимодействуют, то производим вокселизацию объектов, лежащих внутри оболочек. Иначе, все операции с объектами проводятся в векторной форме.

Рассмотрим пространство моделирования, в котором M – количество кристаллов (кубической формы), N – длина стороны кристалла, K – количество кристаллов в векторном описании, L – количество кристаллов в воксельном описании, R – количество кристаллов, которые будут переведены в воксельную форму на данном шаге. При этом $K + L = M$, $R \leq M$. На каждом этапе моделирования производится вызов соответствующих функций, скорость выполнения которых неодинакова для разных этапов.

Построение воксельной модели разбито на следующие этапы:

1. Генерация исходных точек – функция генерации вызывается $M * 8$ раз.
2. Вокселизация всех объектов – функция вокселизации вызывается для $M * N * N * N$ точек.
3. Рост – функция вычисления нового положения точек вызывается $M * N * N * 6$ раз на каждом шаге роста. Количество шагов роста задается пользовательскими настройками.

Построение векторно-воксельной модели:

1. Генерация исходных точек – функция генерации вызывается $M * 8$ раз.
2. Генерация оболочек – функция вызывается M раз.

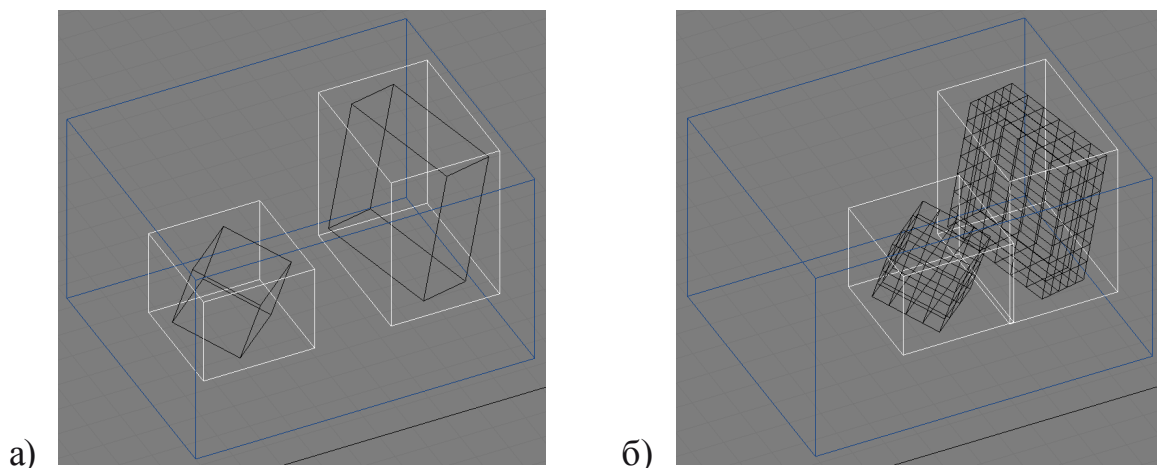


Рисунок 1. Векторное и воксельное описание объектов: а) при отсутствии пересечений оболочек объекта; б) при наличии пересечений оболочек объекта.

3. Проверка пересеканности оболочек – функция проверки вызывается для каждой пары оболочек, т.е. $M * (M - 1) / 2$ раз.
4. Вокселизация объектов, оболочки которых соприкасаются – функция вокселизации вызывается для $R * N * N * N$ точек.
5. Рост – функция роста вызывается $L * N * N * 6 + K * 8$ раз на каждом шаге роста.

Векторно-воксельный метод будет более эффективен по скорости выполнения только на определенном временном промежутке – до вокселизации большинства объектов, т.е. при следующих условиях:

1. Кристаллы распределены равномерно во всей области кристаллизации.
2. Размеры кристаллов на начальных этапах существенно меньше размеров области, т.е. возможен длительный рост без взаимодействий.

Назовем их условиями (1).

В то же время, есть существенный фактор, снижающий эффективность данного алгоритма – вокселизация объектов с соприкасающимися оболочками. Данная операция требует заполнения $R * N * N * N$ ячеек пространства, т.е. выполнения $R * N * N * N$ вызовов функций. В то же время, при генерации воксельной модели погрешности вычислений, связанные с выбором ячеек пространства, существенно меньше, чем погрешности, связанные с множественными округлениями значений при многошаговом росте объекта. Таким образом, качество полученного изображения существенно выше, чем при использовании воксельного алгоритма. Так же, при выполнении вышеперечисленных условий для некоторого отрезка времени, для воксельного метода на каждом шаге роста используется $M * N * N * 6$ операций для вычисления нового положения ячеек, тогда как для векторно-воксельного метода $M * 8$ (т.к. в этом случае $K = M$).

В целом эффективность методов можно анализировать с точки зрения трех факторов – качество полученного изображения, скорость работы при моделировании процесса полной кристаллизации, скорость работы при моделировании частичной кристаллизации.

В первом случае эффективность векторно-воксельного алгоритма выше, т.к. минимизируются ошибки округления на этапах роста. Во втором случае – эффективность векторно-воксельного алгоритма выше при соблюдении условий (1). В последнем случае эффективность методов будет зависеть от параметров R , K и L .

Целью ближайших исследований является выявление соотношений между параметрами R , K и L , с целью определения наиболее точных условий для эффективного (по временным затратам) применения описанных методов.

Выводы

В статье рассмотрено два подхода к моделированию процесса кристаллизации в расплавах – воксельный и векторно-воксельный метод. Использование каждого имеет достоинства и недостатки. Воксельный метод эффективен по времени и качеству результирующего изображения при моделировании кристаллизации, при большом количестве кристаллов, если размеры кристаллов сопоставимы с размерами области моделирования, кристаллы распределены неравномерно по объему.

Векторно-воксельный метод эффективен по времени получения результата и качеству полученного изображения при соблюдении условий (1), а так же в случае моделирования частичной кристаллизации объема. В случае моделирования полной кристаллизации эффективность по скорости получения результата зависит от параметров R , K и L . Определение данной зависимости является целью дальнейших исследований.

Перечень источников

- [1] Jan Müller. Volume Modelling And Rendering Based On 3D Voxel Grids, 2005, Электронный ресурс. Режим доступа: <http://fullebooks.net>
- [2] M. Gruzicic, G. Cao, R.S. Figliola. Computer simulations of the evolution of solidification microstructure in the LENSTM rapid fabrication process. – Applied Surface Science 183, 2001, pp. 43-57
- [3] C.E. Krill III, L.-Q. Chen. Computer simulation of 3-D grain growth using a phase field Model – Acta Materialia 50, 2002, pp. 3057-3073
- [4] Бреднихина А.Ю. Разработка средств геометрического моделирования и научной визуализации для поддержки обучения и исследований в области кристаллографии: автореферат дис. кандидата технических наук : 05.13.18 / Бреднихина Анна Юрьевна; [Место защиты: Ин-т вычисл. математики и мат. геофизики]. – Новосибирск, 2009, 16 с.
- [5] Карабчевский В.В., Пашинская А.В. Моделирование и визуализация процесса кристаллообразования в расплавах. Збірник наукових праць конференції «Геометричне та комп'ютерне моделювання». – Харків: ХДУХТ, 2009 – С. 51-56.
- [6] Карабчевский В.В., Пашинская А.В. Геометрическое моделирование роста кристаллов в расплавах. – Міжвідомчий науково-технічний збірник «Прикладна геометрія та інженерна графіка». Випуск 85. – К:КНУБА, 2010 р. – С. 19-24
- [7] Карабчевский В.В., Пашинская А.В. Особенности воксельной модели процесса роста многогранников. – Міжвідомчий науково-технічний збірник «Прикладна геометрія та інженерна графіка». Випуск 87. – К:КНУБА, 2011 р. – С. 149-153.
- [8] Карабчевский В.В., Пашинская А.В. Методы моделирования роста кристаллов в расплавах. – Наукові праці Донецького національного технічного університету. Серія «Інформатика, кібернетика та обчислювальна техніка» (ІКОТ-2010). Випуск 11(164). – Донецьк: ДВНЗ «ДонНТУ». – 2010. – С. 165-171.