

УДК 514.87

А.В. Пашинская, аспирант
Донецкий национальный технический университет, г. Донецк, Украина
anna.pashinskaya@mail.ru

Критерий выбора метода моделирования процесса кристаллизации

В данной работе проводится сравнительный анализ эффективности работы воксельного и векторно-воксельного методов визуализации с точки зрения скорости получения результатов. Автором сформулированы условия оптимального использования обоих вариантов методов, проведено исследование влияния параметров векторно-воксельного метода на скорость получения результатов на примере моделирования кристаллизации расплава, кристаллы которого имеют кубическую кристаллическую решетку.

Ключевые слова: анализ эффективности, воксельная модель, векторная модель

Введение

В компьютерной графике существует два основных подхода к представлению изображений: в растровой и векторной формах. В применении к трехмерному моделированию используется аналогичный подход, позволяющий создать объект, используя полигональные, каркасные, проволочные модели, или путем разбиения объекта на множество элементарных трехмерных 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 воксельного и комбинированного векторно-воксельного методов при визуализации моделирования процесса кристаллизации и формулирование критерия выбора оптимального для заданных условий метода. Эффективность методов можно анализировать с точки зрения трех факторов – качество полученного изображения, скорости работы при моделировании процесса полной кристаллизации, скорость работы при моделировании частичной кристаллизации. В данной статье проведена оценка эффективности методов с точки зрения временных затрат для полной и частичной кристаллизации.

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

Для получения трехмерных моделей используются различные подходы.

Геометрическим аспектам решения таких задач посвящена работа [1], совместное использование численных и геометрических методов показано в работе [2], получение трехмерной модели кристаллов возможно с использованием методов, описаниях 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 модель модифицирована таким образом, чтобы на некотором этапе можно было пользоваться векторным описанием объекта (кристалла или зародыша кристалла).

Постановка задачи

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

Общие схемы алгоритмов, реализующих методы, представлены на рис 1а и 1б. Основное отличие для векторно-воксельного метода заключается в том, что вокселизация объектов производится не сразу, а по мере пересечения оболочек, описанных вокруг объектов.

Под вокселизацией будем понимать процесс поиска вокселей, задающих положение объектов в воксельном пространстве моделирования. Для примера используем в качестве кристаллов объекты кубической формы. Рассмотрим пространство моделирования, в котором:

m – количество кристаллов,
 n – длина стороны кристалла,
 $k = const$ – количество кристаллов в векторном описании,
 $l = const$ – количество кристаллов в воксельном описании,
 $r = const$ – количество кристаллов, которые будут переведены в воксельную форму на данном шаге.

При этом $k + l = m$, $0 \leq r \leq m - l$, $r \neq 1$.

На каждом этапе моделирования производится вызов соответствующих функций, скорость выполнения которых неодинакова для разных этапов. Для построения зависимости, описывающей временную сложность алгоритмов, сведем каждую функцию к набору элементарных блоков. Каждый блок содержит от одной до трех операций (арифметических или логических), точное количество операций в каждом блоке – случайная величина, принимающая конкретное значение в зависимости от входных данных, в свою очередь являющихся случайными величинами.

Рассмотрим построение функций, описывающих временные затраты на получение результата, для обеих модификаций метода.

Воксельный метод

Шаг 1. Генерация объектов - 8 генераций вершин для каждого объекта * m

Этот этап можно не принимать в расчет, т.к. он присутствует во всех модификациях метода, время его работы можно задавать некоторой константой, принимающей одинаковое значение для всех методов.

Шаг 2. Вокселизация

Для вершин - $f1(m) = 8 * m$
Для ребер - $f2(n, m) = 12 * n * m$
Для граней - $f3(n, m) = 6 * 2 * n^2 * m$
Для внутренней части кристалла
 $f(n, m) = n^3 * m$

При суммировании этапов, получим общую функцию вокселизации:

$$f_{voxelize}(n, m) = f1(m) + f2(n, m) + f3(n, m) + f4(n, m) = 8 * m + 12 * n * m + 6 * 2 * n^2 * m + n^3 * m$$

$$f_{voxelize}(n, m) = m * (8 + 12 * n + 12 * n^2 + n^3)$$

Шаг 3. Рост объекта

Для вершин - $v1(m) = 8 * 7 * m$
Для ребер - $v2(n, m) = 12 * 3 * n * m$
Для граней - $v3(n, m) = 6 * n^2 * m$
Для внутренней части кристалла
 $v4(n, m) = const = 0$

При суммировании этапов, получим общую функцию роста:

$$v_{growth}(n, m) = v1(m) + v2(n, m) + v3(n, m) + v4(n, m) = 56 * m + 36 * n * m + 6 * n^2 * m + 0$$

$$v_{growth}(n, m) = m * (56 + 36 * n + 6 * n^2)$$

Итоговая функция, описывающая временную сложность алгоритма:

$$F_{v.a}(n, m) = f_{voxelize}(n, m) + steps * v_{growth}(n, m) = m * (8 + 12 * n + 12 * n^2 + n^3) + steps * m * (56 + 36 * n + 6 * n^2) \tag{1}$$

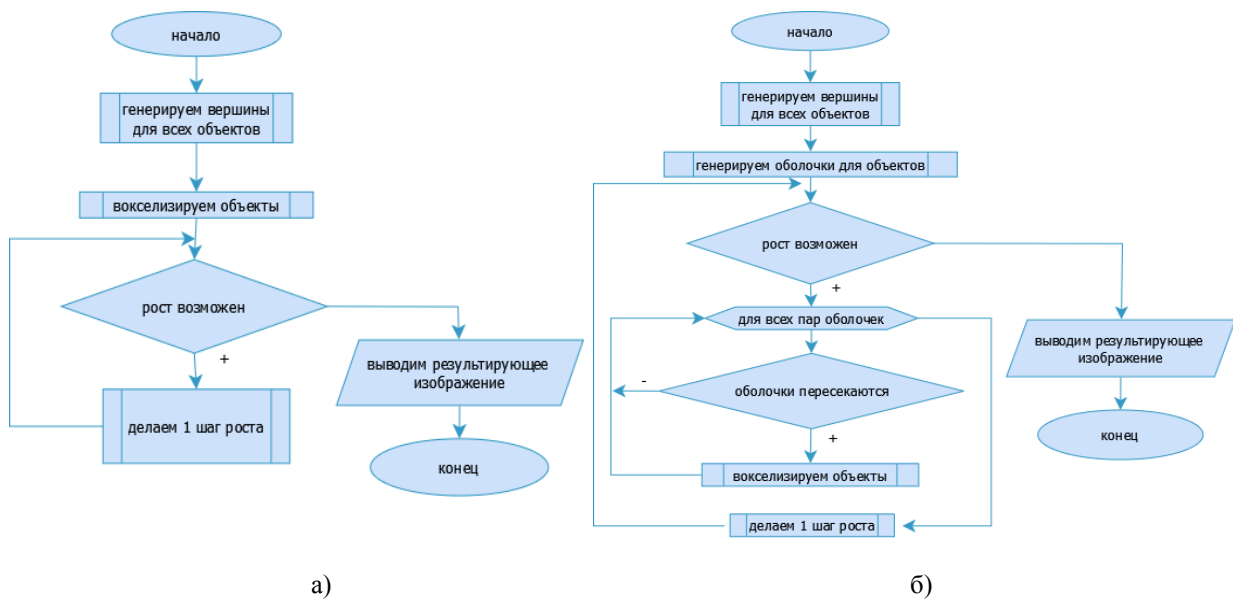


Рисунок 1 – Алгоритмы для реализации воксельного (а) и векторно-воксельного (б) методов

При этом, $steps = const$ - количество шагов роста.

Векторно-воксельный метод

Шаг 1. Генерация объектов – 8 генераций для каждого объекта * m . Этап пропускаем, т.к. он присутствует во всех модификациях метода.

Шаг 2. Генерация оболочек

Для 8 точек-вершин объекта необходимо найти \max и \min значение по трем координатам

$$s(m) = 8 * 3 * 2 * m$$

Шаг 3. Проверка пересечения – сравнения координат с \min и \max значениями

$$u(m) = \frac{m^2 - m}{2}$$

Шаг 4. Вокселизация

$$\text{Для вершин} - w1(r) = 8 * r$$

$$\text{Для ребер} - w2(n, r) = 12 * n * r$$

$$\text{Для граней} - w3(n, r) = 6 * 2 * n^2 * r$$

$$\text{Для внутренней части кристалла} \\ w4(n, r) = n^3 * r$$

Общая функция вокселизации

$$w_{\text{voxelize}}(n, r) = \\ = f1(r) + f2(n, r) + f3(n, r) + f4(n, r) = \\ = 8 * r + 12 * n * r + 6 * 2 * n^2 * r + n^3 * r \\ w_{\text{voxelize}}(n, r) = r * (8 + 12 * n + 12 * n^2 + n^3)$$

Шаг 5. Рост объекта

Для объектов в векторном описании:

$$\text{Для вершин} - \varphi1(k) = 8 * k$$

Для объектов в воксельном описании:

$$\text{Для вершин} - \varphi2(l) = 8 * 7 * l$$

$$\text{Для ребер} - \varphi3(n, l) = 12 * 3 * n * l$$

$$\text{Для граней} - \varphi4(n, l) = 6 * n^2 * l$$

Для внутренней части кристалла

$$\varphi5(n, l) = const = 0$$

Общая функция роста

$$\varphi_{\text{growth}}(n, l, k) = \\ = \varphi1(k) + \varphi2(n, l) + \varphi3(n, l) + \varphi4(n, l) = \\ = 8 * k + 56 * l + 36 * n * l + 6 * n^2 * l \\ \varphi_{\text{growth}}(n, l, k) = 8 * k + l * (56 + 36 * n + 6 * n^2)$$

Далее возможно два варианта замены

Если $k = m - l$, получаем:

$$\varphi_{\text{growth}}(m, n, l) = \\ = 8 * m - 8 * l + l * (56 + 36 * n + 6 * n^2) = \\ = 8 * m + l * (48 + 36 * n + 6 * n^2)$$

Если $l = m - k$, получаем:

$$\varphi_{\text{growth}}(m, n, k) = \\ = 8 * k + (m - k) * (56 + 36 * n + 6 * n^2)$$

$$\varphi_{\text{growth}}(m, n, k) = \\ = m * (56 + 36 * n + 6 * n^2) - k * (48 + 36 * n + 6 * n^2)$$

Очевидно, что вычислительная сложность при первой замене ниже, т.к. количество умножений во втором случае в два раза больше.

Получаем итоговую функцию (2), описывающую временную сложность алгоритма

$$F_{v-v.a}(n, m, l, r) = s(m) + \\ + steps * (u(m) + w_{\text{voxelize}}(n, r) + \varphi_{\text{growth}}(m, n, l)) = \\ = 48 * m +$$

$$+ steps * \left(\frac{m^2 - m}{2} + r * (8 + 12 * n + 12 * n^2 + n^3) + \right. \\ \left. + 8 * m + l * (48 + 36 * n + 6 * n^2) \right)$$

При этом, $steps = const$ - количество шагов роста, $k + l = m$, $0 \leq r \leq m - l$, $r \neq 1$.

Оценка временных затрат

В соответствии с формулами (1) и (2) было проведено моделирование для разных комбинаций m и n при фиксированном $step$. Для векторно-воксельного метода параметры l и r задавались константами. На рис. 2 и рис. 3 представлена графически зависимость времени работы методов от размерности и количества моделируемых объектов. Время работы отложено по вертикальной оси.

Согласно полученным данным, в случае фиксации параметров l и r время работы методов отличается более чем на два порядка.

Однако, l и r могут принимать фиксированные значения только в частных случаях, что не соответствует общим физическим принципам модели. Для проведения более точного анализа скорости работы векторно-воксельного метода необходимо выявить влияние параметров на значение $F_{v-v.a}(n, m, l, r)$. Очевидно, что влияние параметра r будет сильнее, т.к. r - коэффициент перед многочленом третьей степени, тогда как l - перед многочленом второй степени. При уменьшении интервала значений r в пять раз ($0 \leq r \leq \frac{m-l}{5}$), менее 19% всех опытов требует

выполнить более $2 \cdot 10^{10}$ элементарных блоков операций, 4% - более $8 \cdot 10^{10}$ (рис. 4). При уменьшении этого интервала в 20 раз ($0 \leq r \leq \frac{m-l}{20}$), менее 10% всех опытов требует

выполнить более $9 \cdot 10^9$ элементарных блоков операций, 3% - более $2 \cdot 10^{10}$ (рис. 5). Аналогичные исследования, проведенные для выявления влияния параметра l на общую производительность метода, дали следующие результаты: уменьшение интервала значений l в пределах $0 \leq l \leq \frac{m}{4}$ (интервал значений r остается

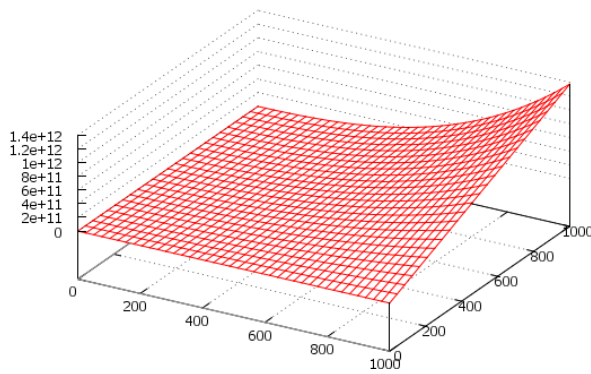


Рисунок 2 – График зависимости временных затрат на работу воксельного метода от значений m и n

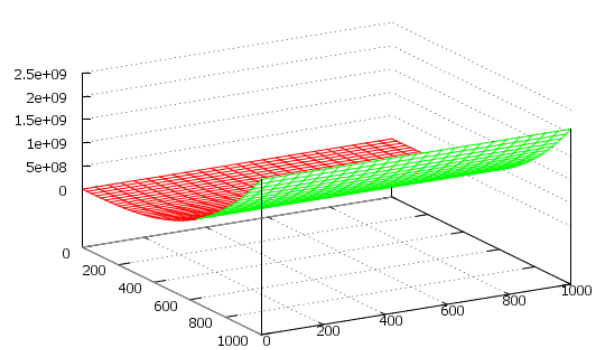


Рисунок 3 – График зависимости временных затрат на работу векторно-воксельного метода от значений m и n при фиксированных l и r

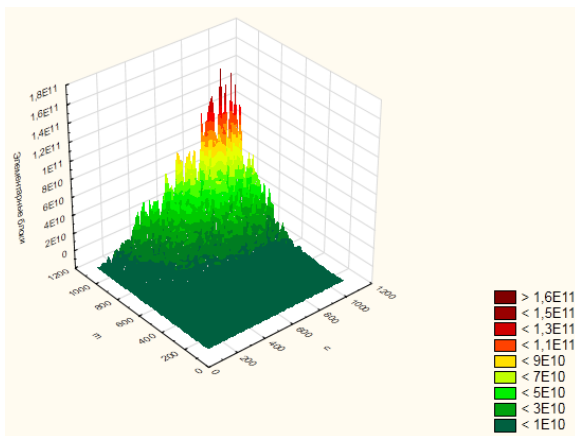


Рисунок 4 – График зависимости временных затрат на работу векторно-воксельного метода,

$$0 \leq r \leq \frac{m-l}{5}$$

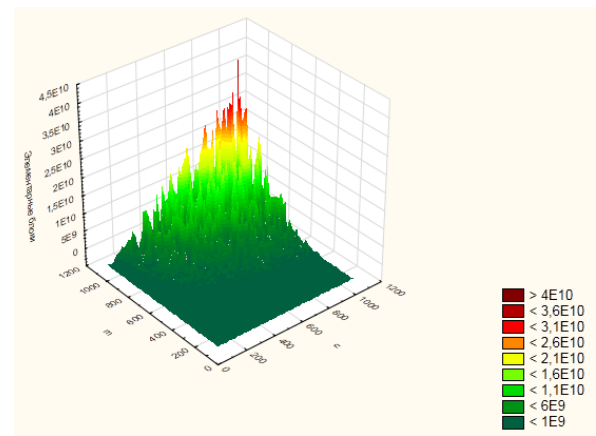


Рисунок 5 – График зависимости временных затрат на работу векторно-воксельного метода,

$$0 \leq r \leq \frac{m-l}{20}$$

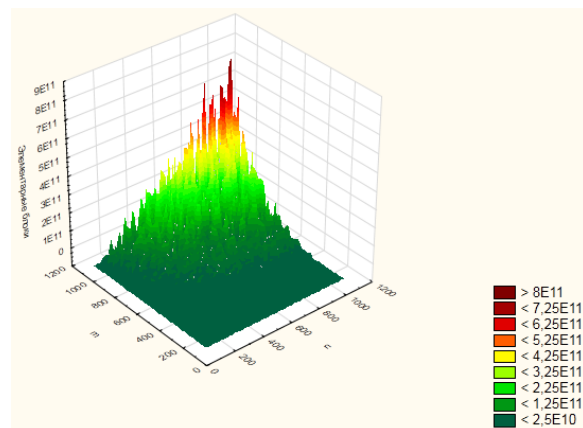


Рисунок 6 – График зависимости временных затрат на работу векторно-воксельного метода, $0 \leq l \leq \frac{m}{4}$

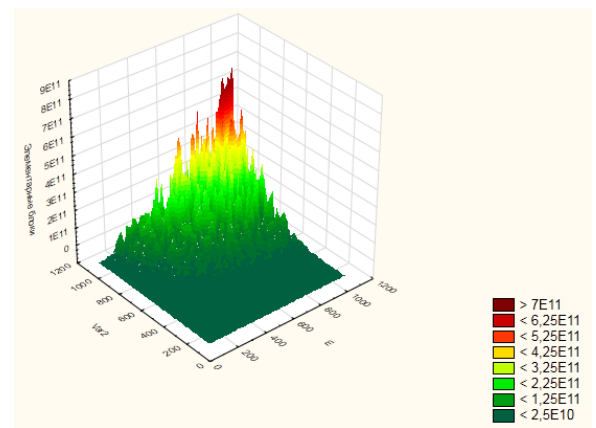


Рисунок 7 – График зависимости временных затрат на работу векторно-воксельного метода, $\frac{m}{2} \leq l \leq m$

полным, т.е. $0 \leq r \leq m-l$) - менее 19% всех опытов требует выполнить более $1 \cdot 10^{11}$ элементарных блоков операций, менее 3% - более $4 \cdot 10^{11}$ элементарных блоков операций (рис. 6), при уменьшении интервала в пределах $\frac{m}{2} \leq l \leq m$ - менее 20% опытов требует выполнить более $1 \cdot 10^{11}$, менее 2% - более $4 \cdot 10^{11}$ элементарных блоков операций.

Полученные результаты подтверждают, что влияние параметра r более существенно для суммарного времени работы метода, т.е. векторно-воксельный метод будет тем эффективнее с точки зрения временных затрат на получение результата, чем меньше кристаллов будет переводиться на каждом шаге из векторной формы в воксельную. Кроме того, векторно-воксельный метод более эффективен, чем воксельный, во всех случаях, кроме случая, когда происходит вокселизация объектов на первой итерации цикла роста - т.е. оболочки всех объектов пересекаются. Тогда векторно-воксельный алгоритм будет выполняться на $s(m) + u(m)$ блоков операций больше:

$$s(m) + u(m) = 48 * m + \frac{m^2 - m}{2}$$

Выводы

В работе проведен анализ эффективности воксельного и векторно-воксельного методов получения трехмерной модели кристаллизации расплава в замкнутом объеме с точки зрения скорости получения результата при частичной и полной кристаллизации. На основании полученных данных можно сделать следующие

выводы: воксельный метод моделирования более эффективен в случае, когда кристаллы расположены очень близко друг к другу, т.е. оболочки, описанные вокруг них, пересекаются. В этом случае, векторно-воксельный метод выполняет на $48 * m + \frac{m^2 - m}{2}$ блоков операций

больше, чем воксельный. В случае, если оболочки объектов не пересекаются на первом шаге, время получения результата в векторно-воксельном методе меньше на несколько порядков. Таким образом, основной критерий выбора метода моделирования - количество кристаллов и их расположение в пространстве моделирования. Основным параметром, влияющим на снижение скорости работы векторно-воксельного метода - r , количество объектов, которые будут вокселированы на некотором этапе. При $0 \leq r \leq \frac{m-l}{5}$, время уменьшается на 2 порядка в

96% случаях, при $0 \leq r \leq \frac{m-l}{20}$ - на 3 порядка в

90% случаев. Влияние параметра l (количество объектов, уже находящихся в воксельной форме), существенно ниже - при $0 \leq l \leq \frac{m}{4}$ время

уменьшается на 1 порядок для 81% опытов.

Направлением дальнейших исследований является проведение аналогичного анализа для объектов, имеющих формы, отличные от кубической, а так же проведение анализа эффективности методов с точки зрения качества полученных трехмерных изображений.

Список литературы

1. M. Grujicic. Computer simulations of the evolution of solidification microstructure in the LENS™ rapid fabrication process / M. Grujicic, G. Cao, R.S. Figliola // Applied Surface Science. - 2001. - 183. - P. 43-57.
2. C.E. Krill III. Computer simulation of 3-D grain growth using a phase field Model / C.E. Krill III, L.-Q. Chen // Acta Materialia. - 2002. - 50. - P. 3057-3073.
3. Бреднихина А.Ю. Разработка средств геометрического моделирования и научной визуализации для поддержки обучения и исследований в области кристаллографии: автореферат дис. кандидата технических наук: спец. 05.13.18 / Бреднихина Анна Юрьевна; Ин-т вычисл. математики и мат. геофизики. - Новосибирск, 2009. - 16 с.
4. Карабчевский В.В. Моделирование и визуализация процесса кристаллообразования в расплавах / В.В. Карабчевский, А.В. Пашинская // Збірник наукових праць конференції «Геометричне та комп'ютерне моделювання». - Харків: ХДУХТ, 2009 - С. 51-56.
5. Карабчевский В.В. Геометрическое моделирование роста кристаллов в расплавах / В.В. Карабчевский, А.В. Пашинская // Міжвідомчий науково-технічний збірник «Прикладна геометрія та інженерна графіка». - 2010. - Випуск 85. - С. 19-24.
6. Карабчевский В.В. Особенности воксельной модели процесса роста многогранников / В.В. Карабчевский, А.В. Пашинская // Міжвідомчий науково-технічний збірник «Прикладна геометрія та інженерна графіка». - 2011. - Випуск 87. - С. 149-153.

7. Карабчевский В.В. Методы моделирования роста кристаллов в расплавах / В.В. Карабчевский, А.В. Пашинская // Наукові праці Донецького національного технічного університету. Серія «Інформатика, кібернетика та обчислювальна техніка» (ІКОТ-2010). – 2010. – Випуск 11(164). – С. 165-171.

Надійшла до редакції 30.10.2012

А.В. ПАШИНСЬКА

Донецький національний технічний університет

A. V. PASHINSKAYA

Donetsk National Technical University

Критерій вибору методу моделювання процесу кристалізації

В даній роботі проведено порівняльний аналіз ефективності роботи воксельного та векторно-воксельного методів моделювання кристалізації з точки зору швидкості отримання результатів. Автором сформульовані умови оптимального використання обох методів, проведено дослідження впливу параметрів векторно-воксельного методу на швидкість отримання результатів на прикладі моделювання кристалізації розплаву, кристали якого мають кубічну форму.

The Criterion of Crystallization Process Method Selection

The paper provides a comparative analysis of voxel and vector-voxel methods efficiency in terms of the velocity of obtaining results. We discussed optimal application of both methods and studied the influence of vector-voxel methods parameters on the velocity of obtaining results with the example of melt crystallization modeling.

Ключові слова: *аналіз ефективності, воксельна модель, векторна модель*

Keywords: *performance analysis, voxel model, vector model*