

АЛГОРИТМЫ ПОСТРОЕНИЯ НЕСТРУКТУРИРОВАННЫХ СЕТОК С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ БЫСТРОГО ПОИСКА ГЕОМЕТРИЧЕСКОЙ БЛИЗОСТИ ТОЧЕК ДЛЯ МЕТОДИКИ ТИМ

А. К. Шмелева, А. А. Воронинов, И. Г. Новиков, А. В. Шурыгин

ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», г. Саров Нижегородской обл.

Алгоритм быстрого поиска геометрической близости

Рассмотрим алгоритм быстрого поиска на примере задачи поиска ближайшей точки с меньшим номером, которая используется в алгоритме диаграммы Вороного: в упорядоченном множестве $\{S_i, i = 1, \dots, n\}$ необходимо для каждой точки $(S_i), i = 2, \dots, n$ найти ближайшую точку с номером $(S_j), j = 1, \dots, i - 1$.

В двумерном случае быстрый поиск осуществляется следующим образом:

1. Область считается прямоугольником со сторонами a и b , параллельными осям координат.
2. Определяется количество разбиений.
3. Область делится на клетки исходя из количества разбиений.
4. Для каждой клетки запоминаются все точки, лежащие в ней.
5. В цикле по всем центрам:
 - По формуле (1) вычисляются расстояния между текущим центром и центрами с меньшими номерами, лежащими в той же клетке, что и текущий центр, или в соседних с этой клеткой восьми клетках. Среди этих расстояний определяется минимальное.

$$r_{kj}^2 = (x_k - x_j)^2 + (y_k - y_j)^2, \quad j < k. \quad (1)$$

– Если расстояние между текущим центром и ближайшим к нему центром, найденным быстрым алгоритмом, превосходит длину стороны клетки, то выполняется поиск с перебором всех точек в области.

– Для каждого центра запоминается номер ближайшего соседнего центра с меньшим номером. Это и является результатом работы алгоритма.

Важным этапом при реализации алгоритма быстрого поиска является определение оптимального числа разбиений – такого разбиения области на клетки, при котором время вычислений минимально. Опишем вкратце суть метода для двумерного случая.

Зная для квадратной области оптимальное количество разбиений для нескольких значений числа точек y_n , получаем некоторую дискретную функцию.

Для ее аппроксимации было рассмотрено два подхода.

1. Подход, основанный на использовании метода наименьших квадратов

$$f(n) = \begin{cases} 49,9602 + 3,43355 \cdot 10^{-4} \cdot n - 1,17449414 \cdot 10^{-10} \cdot n^2, & \text{если } n < n_{\text{кр}}, \\ 300, & \text{если } n \geq n_{\text{кр}}, \end{cases} \quad (2)$$

где $n_{\text{кр}}$ – координата вершины параболы.

2. Подход, основанный на подборе аппроксимирующей функции определенного вида

$$y(n) = 0,1775 \cdot n^{0,3} (\ln n + 9,5). \quad (3)$$

При проведении расчетов использовался второй подход, так как функция $y(n)$ точнее, чем $f(n)$, приближает y_n .

Для прямоугольной области размером $a \times b$ разбиения вычисляются по формулам (4)

$$m_a = \sqrt{\frac{a}{b}} y(n), \quad m_b = \sqrt{\frac{b}{a}} y(n); \quad (4)$$

$y(n)$ вычислено по формуле (3), m_a и m_b – числа разбиений по осям Ox и Oy соответственно.

Описанный алгоритм обобщается и на трехмерный случай: область разбивается на кубики, и ближайшая точка ищется среди точек, расположенных в ближайших к текущему центру 27 кубиках. Функции, определяющие количество разбиений для области в виде параллелепипеда со сторонами a , b и c , вычисляются по формулам

$$m_a = \sqrt[3]{\frac{a^2}{bc}} f(n), \quad m_b = \sqrt[3]{\frac{b^2}{ac}} f(n), \quad m_c = \sqrt[3]{\frac{c^2}{ab}} f(n), \quad (5)$$

где

$$f(n) = \begin{cases} 14,2935 + 6,71963 \cdot 10^{-5} \cdot n - 3,213511483 \cdot 10^{-11} \cdot n^2, & \text{если } n < n_{\text{кр}}, \\ 50, & \text{если } n \geq n_{\text{кр}}. \end{cases} \quad (6)$$

Разработанный алгоритм заменил метод прямого перебора при поиске ближайшего центра в программе построения двумерной и трехмерной сеток (диаграммы Вороного) в рамках методики ТИМ [1, 2].

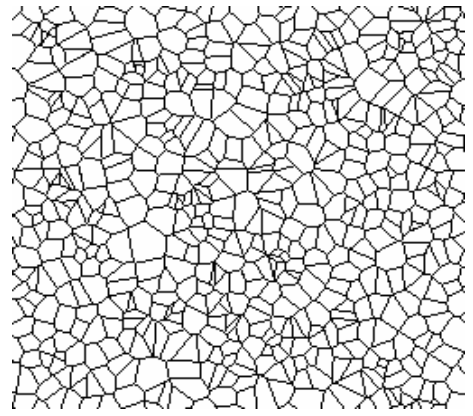
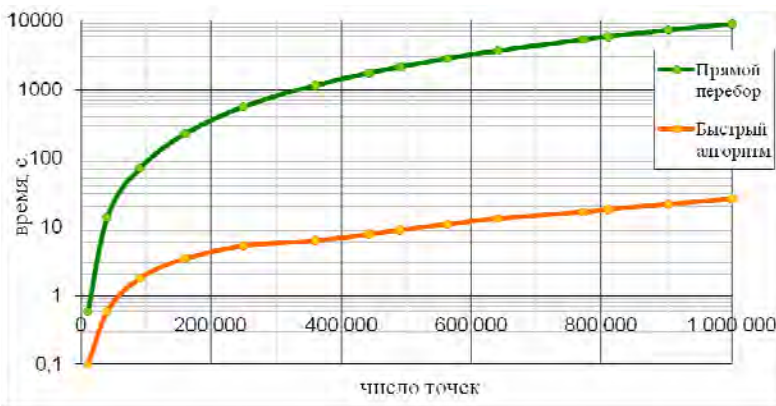


Рис. 1. Логарифмическая зависимость времени поиска ближайшего центра от числа центров для квадратной области (слева) и пример полученной сетки (справа)

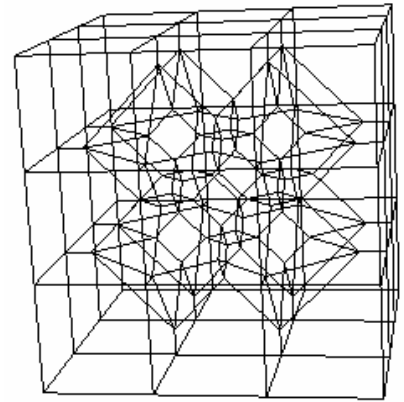
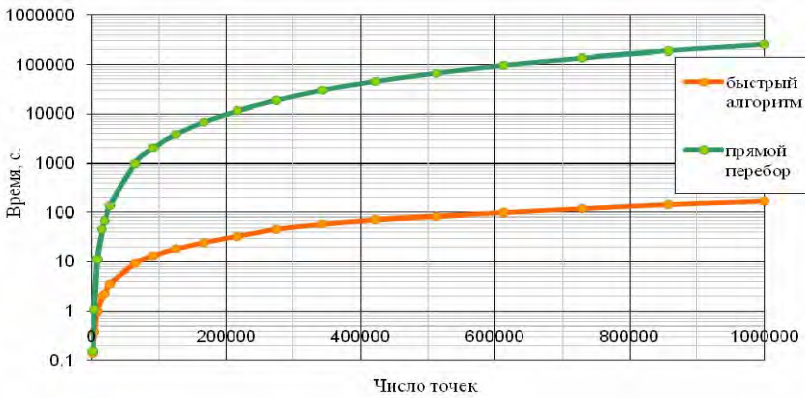


Рис. 2. Логарифмическая зависимость времени поиска ближайшего центра от числа центров для кубической области (слева) и пример полученной сетки (справа)

На рис. 1 и 2 изображены логарифмическая зависимость времени поиска ближайшего центра от числа центров для квадратной и кубической областей и примеры полученных сеток соответственно.

В двумерном случае для миллиона точек применение быстрого алгоритма ускорило поиск примерно в 350 раз по сравнению с методом прямого перебора, а в трехмерном – примерно в 800 раз. Многократно сократилось и общее время построения всей сетки.

Алгоритм быстрого поиска вершины для ребра

Самым трудоемким этапом построения триангуляции Делоне в методике ТИМ [3] являлся поиск вершины для ребра, осуществляемый прямым перебором. При выборе вершины оценивается расстояние между центром ребра и центром описанной окружности, построенной на вершинах ребра и потенци-

альной вершине [4]. Среди вершин выбирается та, для которой оно минимально.

Алгоритм быстрого поиска вершины схож с алгоритмом быстрого поиска ближайшего центра – область делится на клетки и поиск вершины осуществляется в ближайших к центру ребра клетках. Разбиения для прямоугольника $a \times b$ определяются по формулам

$$y_a(n) = \sqrt{\frac{a}{b}} y(n), \quad y_b(n) = \sqrt{\frac{b}{a}} y(n), \quad (7)$$

$$y(n) \approx 0,05875 \cdot n^{0,3} \cdot (\ln n + 19).$$

Замеры времени построения сетки производились для разных геометрий. На рис. 3 показана логарифмическая зависимость времени построения триангуляции Делоне от числа точек для области в виде круга и пример полученной сетки.

Для 10^6 точек построение сетки с использованием алгоритма быстрого поиска проводится примерно в 80–90 раз быстрее, чем с прямым перебором, независимо от способа задания точек.

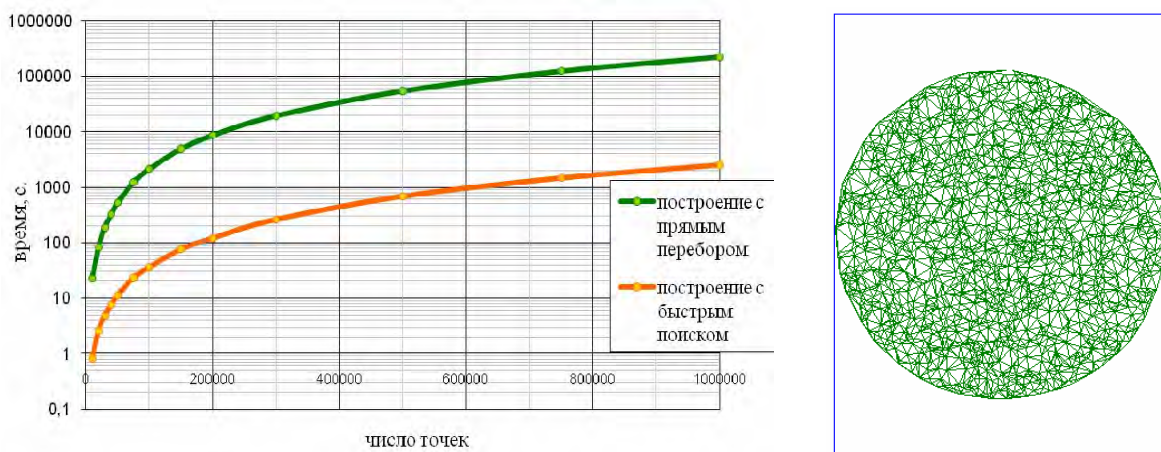


Рис. 3. Логарифмическая зависимость времени построения триангуляции Делоне от числа точек (слева) и пример сетки при задании точек внутри круга (справа)

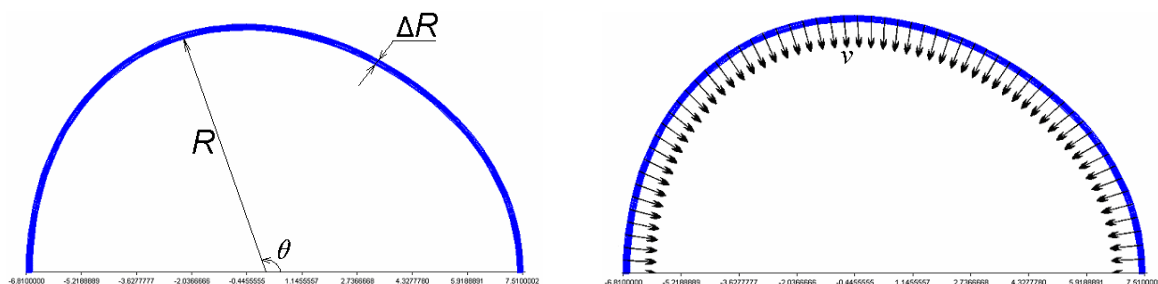


Рис. 4. Начальная геометрия (слева) и направление поля скоростей (справа)

Поиск самопересечений плоской кривой

Задача определения самопересечений ломаной встречается при решении задач контактного взаимодействия, когда математическая область может начать взаимодействовать сама с собой. Алгоритм поиска самопересечений базируется на поиске точки пересечения двух отрезков. При использовании быстрого алгоритма каждый отрезок приписывается клеткам, в которых он лежит, и для каждого отрезка поиск пересечений осуществляется среди отрезков, принадлежащих тем же клеткам, что и данный.

Рассмотрим одну из тестовых задач – задачу о полете несферической оболочки.

Начальная форма оболочки: $R(t=0, \theta) = 7 + 0,875 \cos^3 \theta - 0,525 \cos \nu$ (см), толщина $\Delta R = 0,16$ см. Материал – свинец: $\rho(0) = 11,4$ г/см³. В начальный момент оболочка имеет скорость к центру: $v = 5,70686 \cdot 10^6$ см/с. Давление внутри $P_i = 3,495 \cdot 10^6 \cdot V^{-5/3}$ (см³), давление снаружи $P_E = 0$, где V – объем полости. Начальная геометрия задачи представлена на рис. 4.

В момент времени 1,11797 мкс в расчете возникает самопересечение внутренней границы. Для ис-

правления самопересечения в методике ТИМ используется метод дифференцируемых связей [5].

Рис. 5 иллюстрирует поведение вещества без контроля самопересечений, рис. 6 – с отслеживанием самопересечений границы и использованием процедур коррекции.

Время счета задачи с начального момента $t = 0$ мкс до момента $t = 1,12$ мкс

	Время счета без отслеживания самопересечений, с	Время счета с использованием прямого перебора, с	Время счета с использованием быстрого алгоритма, с
Вся задача	332,5	338,3	333,3
Исправление самопересечений	–	5,8	0,8

В задаче граница состоит всего из 140 отрезков, поэтому вклад алгоритмов исправления самопересечений в общее время счета оказывается небольшим. Однако даже для таких маленьких границ алгоритм быстрого поиска позволил сократить время работы алгоритмов исправления самопересечений более чем в 7 раз. На задачах с большим количеством точек вдоль границ использование быстрого поиска позволяет сократить время поиска пересечений в десятки раз.

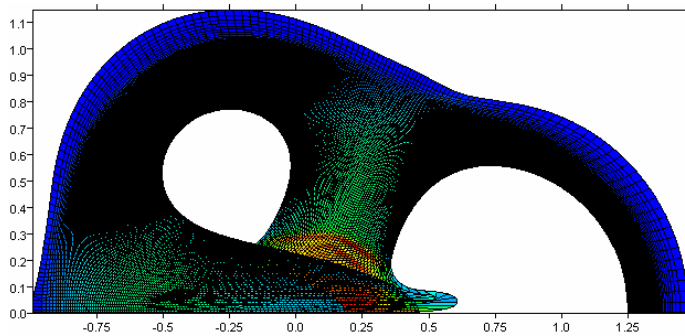


Рис. 5. Вид оболочки на момент времени $t = 1,16$ мкс без контроля самопересечений

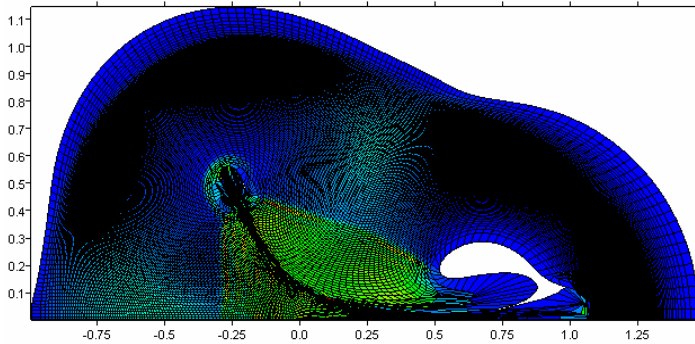


Рис. 6. Оболочка на момент времени $t = 1,16$ мкс с исправлением самопересечений

Построение двумерной диаграммы Вороного на основе реберно-ячеечного формата представления сетки

Для реализации программы построения диаграммы Вороного [6] был выбран алгоритм последовательного добавления центров в текущую сетку [7]. При этом используются следующие вспомогательные алгоритмы:

I. Определение для каждого центра ячейки, в которую он попал (для диаграммы Вороного эта задача эквивалентна задаче поиска ближайшей соседней точки с меньшим номером, алгоритм быстрого решения которой рассмотрен выше).

II. Дробление ячейки срединным перпендикуляром между двумя центрами диаграммы Вороного на две.

Эта задача, в свою очередь, состоит из двух подзадач:

1. Определение параметров срединного перпендикуляра для отрезка.

2. Дробление ячейки заданной прямой на два фрагмента.

Алгоритм деления выпуклой многоугольной ячейки прямой предусматривает несколько частных случаев:

- а) точки пересечения прямой с ребрами ячейки не совпадают с узлами ячейки;
- б) одна из точек пересечения совпадает с каким-либо узлом ячейки;
- в) обе точки пересечения совпадают с какими-то узлами ячейки;

г) тривиальные случаи (все эти случаи приравниваются к отсутствию пересечений).

III. Объединение ячеек.

При формировании ячейки Вороного нужно объединить в одну все ячейки-фрагменты, полученные дроблением срединными перпендикулярами близких ячеек. Объединение фрагментов происходит попарно последовательно.

IV. Уплотнение нумерации ребер и узлов.

Пример полученной диаграммы Вороного для прямоугольной области при случайном задании центров изображен на рис. 7.

Пример диаграммы Вороного для области в виде прямоугольника, в котором центры распределены случайным образом внутри кольца, показан на рис. 8. На рис. 9 приведены данные о времени построения диаграммы Вороного для прямоугольной области при случайном задании центров.

При построении диаграммы Вороного в узле сходится $N + 1$ ребро, где N – размерность пространства. При этом при определенном положении могут получаться близкие и даже совпадающие узлы (вырожденные ребра) – рис. 10. Такие вырожденные ребра осложняют дальнейшее построение сетки и нежелательны при проведении расчетов. Алгоритм построения диаграммы Вороного использует реберно-ячеечное представление структуры сетки [8]. Использование этого формата позволяет непосредственно на этапе построения сетки удалять короткие ребра, в результате в сетке появляются узлы с большим количеством сходящихся ребер (рис. 10,б).

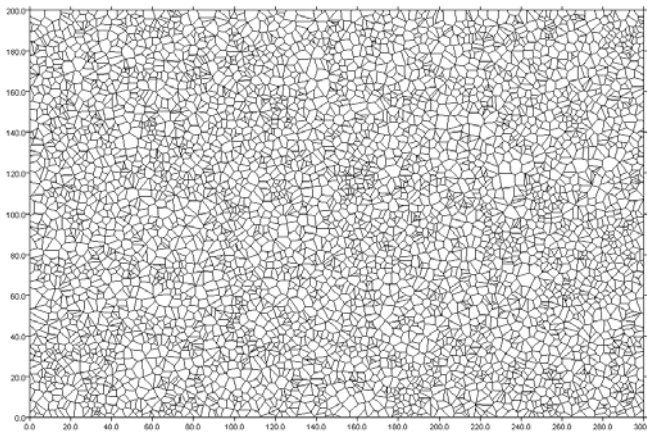


Рис. 7. Диаграмма Вороного при случайном распределении точек

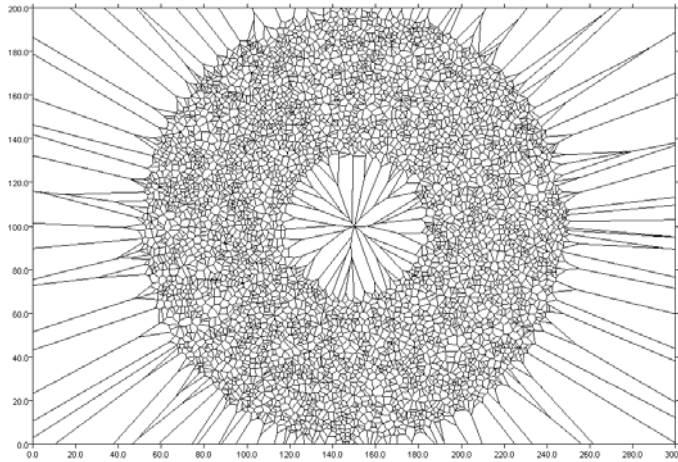


Рис. 8. Диаграмма Вороного при случайном распределении точек в кольце

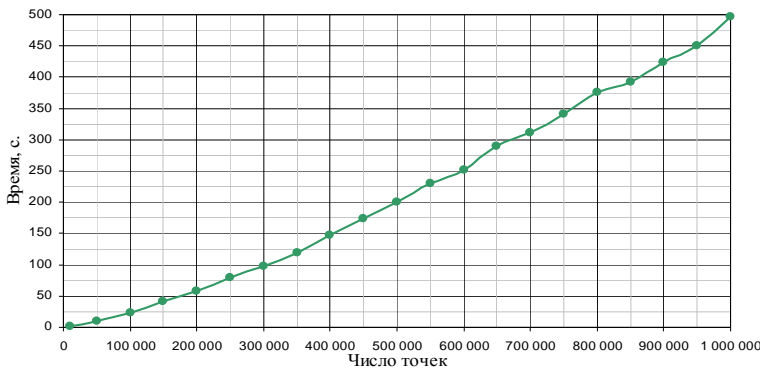


Рис. 9. График зависимости времени построения сетки от числа центров

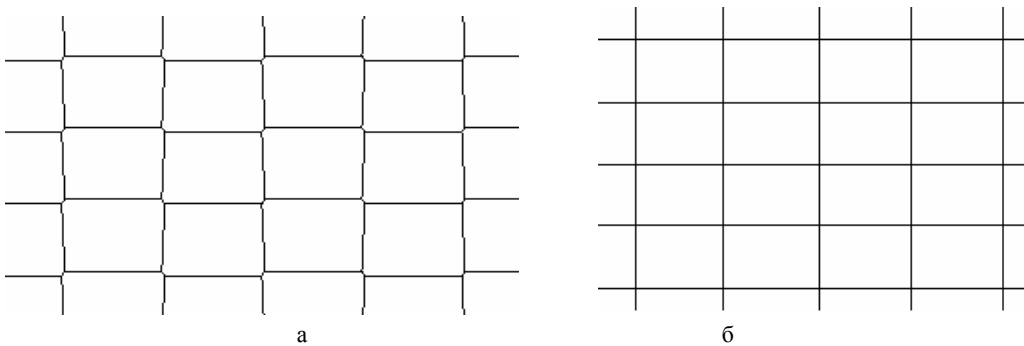


Рис. 10. Частные случаи диаграммы Вороного с близкими и совпадающими узлами

Построение трехмерной диаграммы Вороного на основе формата представления сетки «по граням»

При построении трехмерной диаграммы Вороного с помощью подхода, аналогичного двумерному случаю, были реализованы следующие вспомогательные алгоритмы:

1. Определение для каждого центра ячейки, в которую он попал, с помощью алгоритма быстрого поиска.
2. Деление выпуклой ячейки плоскостью на две ячейки.
3. Объединение нескольких произвольных ячеек в одну.
4. Объединение граней ячейки, лежащих в одной плоскости.
5. Удаление узлов, лежащих на одной прямой.
6. Уплотнение нумерации граней и узлов.
7. Удаление малых ребер и граней.

Так же как и в двумерном случае, при определенной расстановке центров в сетке могут возникать особенности. В трехмерном случае это не только близкие узлы, но и грани с малой площадью. Использование формата «по граням» [9] позволяет непосредственно на этапе построения сетки устранять эти особенности, при этом малые грани могут трансформироваться в узел или ребро.

Реализованные алгоритмы построения сетки были протестированы для ряда распределений центров. На рис. 11, 12 представлены полученные сетки при случайном и равномерном распределении точек.

На рис. 13 приведены данные о времени построения диаграммы Вороного для кубической области при случайном задании центров.

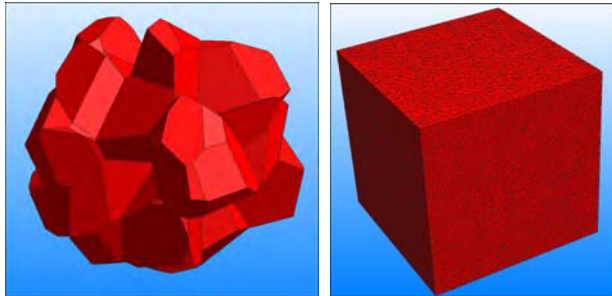


Рис. 11. Диаграмма Вороного в кубе при случайном распределении точек (слева – фрагмент, справа – вид сетки на поверхности куба)

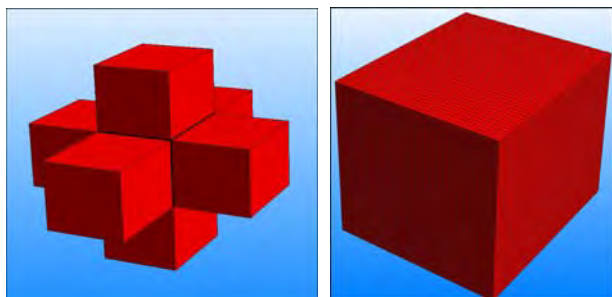


Рис. 12. Диаграмма Вороного в кубе при равномерном распределении точек в узлах кубической решетки (слева – фрагмент, справа – вид сетки на поверхности куба)

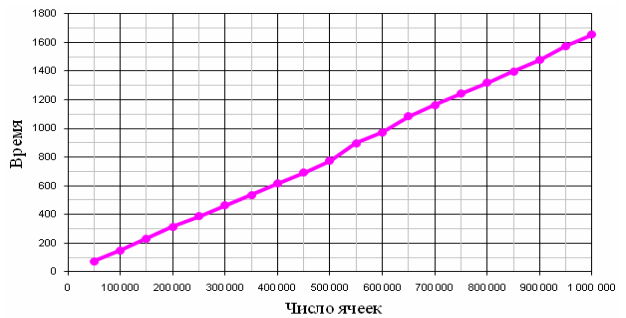


Рис. 13. График зависимости времени построения сетки от числа центров

Заключение

На основе алгоритма быстрого поиска геометрической близости точек в рамках методики ТИМ реализовано построение неструктурированных сеток методом диаграммы Вороного и триангуляции Делоне. Также алгоритм адаптирован для поиска самопересечений двумерных границ. Использование алгоритма быстрого поиска позволило уменьшить сложности вычислительных задач с $O(n^2)$ до $O(n \log(n))$ и значительно сократило время на их решение. В дальнейшем данный подход предполагается использовать и для других геометрических алгоритмов, например для поиска самопересечений поверхностей. Также на основе разработанных подходов предполагается разработка параллельных алгоритмов для построения сеток с большим количеством точек с учетом сложной внешней границы области.

Литература

1. Соколов С. С., Воропинов А. А., Новиков И. Г., и др. Методика ТИМ-2D для расчета задач механики сплошной среды на нерегулярных многоугольных сетках с произвольным количеством связей в узлах // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2006. Вып. 4. С. 29–43.
2. Воропинов А. А. Структура программы ТИМ-РНД построения нерегулярных многогранных сеток произвольной структуры // Молодежь в науке: Сборник докладов V научно-технической конференции. Саров: ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», 2007. С. 56–60.
3. Шурыгин А. В., Воропинов А. А., Шмелева А. К. Построение сетки Дирихле на основе триангуляции Делоне для методики ТИМ-2D // Молодежь в науке: Сборник аннотаций девятой научно-технической конференции (г. Саров, 26–28 ноября 2010 г.). Саров: ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», 2010. С. 24.
4. Скворцов А. В. Триангуляция Делоне и ее применение. Томск: Изд-во Томского университета, 2002.

5. Новиков И. Г., Панов А. И., Соколов С. С. Способ коррекции нерегулярной лагранжевой сетки методом наложения дифференцируемых связей // Журнал вычислительной математики и математической физики РАН. 2005. Том 45. № 8. С. 1487–1500.

6. Гордеев Э. Н. Диаграмма Вороного: Обзор // Распознавание, классификация, прогноз. Математические методы и их применение. Вып. 4. М.: Наука, 1992. С. 41–67.

7. Препарата Ф., Шеймос М. Вычислительная геометрия: введение. М.: Мир, 1989.

8. Воропинов А. А. Некоторые форматы данных для представления двумерных неструктурированных сеток произвольного вида // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2010. Вып. 4. С. 52–63.

9. Воропинов А. А., Соколов С. С., Панов А. И., Новиков И. Г. Формат для описания нерегулярной многогранной сетки произвольной структуры в методике ТИМ // Там же. 2007. Вып. 3–4. С. 55–63.