

УДК 514.87

А.В. Паши́нская

Донецкий национальный технический университет
anna.pashinskaya@mail.ru

Использование ячеечного подхода при разработке геометрической модели генерации и роста многогранников в пространстве

В статье рассмотрен способ генерации кристаллов в виде призм с использованием ячеечного метода описания пространства, приведены алгоритмы построения ребра многогранника, грани многогранника, проведено сравнение достоинств и недостатков изложенных алгоритмов. Приведены примеры визуализации объема моделирования и его сечения, полученные с применением пакетов Mathcad и 3ds Max.

Ячеечный метод, кристаллизация, геометрическое моделирование

Введение

Когда в современном мире заходит речь о компьютерном моделировании и графическом отображении некоторой информации, то, как правило, имеются в виду наиболее часто используемые приемы, такие как создание поверхностей с помощью некоторого количества полигонов и поиск отображения трехмерного объекта на двумерную поверхность (экран монитора). Однако существует ряд задач, в которых такой подход неприменим, так как пользователя интересуют пространственные характеристики объектов или же описание объекта требует слишком большого количества полигонов. Множество исследований посвящено разработке эффективных методов отображения элементов пространства, однако работ, в которых исследуется процесс построения объектов в трехмерном пространстве на данный момент мало. Наиболее перспективным направлением исследований является исследование методов построения объектов в пространстве, описанном 3D сеткой или ячеечной сеткой (cell-based methods) [1], поскольку такой подход позволяет обойтись без перерасчета поверхности объекта.

Практическим применением такого подхода является разработка способа моделирования роста кристаллов в расплаве [2]. Сейчас на рынке программного обеспечения представлено несколько пакетов, позволяющих моделировать процессы затвердевания слитков [3-5]. Разработке способов решения данной задачи в настоящее время уделяется немало внимания: комбинированный подход геометрического анализа и численных методов [6] позволил получить двухмерные изображения кристаллов, трехмерное изображение кристаллов может быть получено по методам, изложенных в [7-8]. Система построений в трехмерном ячеечном пространстве подробно рассмотрена в [9]. Ранее

автором были опубликованы статьи ([10-12]), в которых предлагались способы построения простейших геометрических объектов на основе ячеечной сетки.

На данном этапе необходимо разработать методы построения в трехмерном пространстве кристаллов, заданных набором ребер (отрезки прямых) и граней (треугольные и четырехугольные отсеки плоскостей), рассмотреть возможные способы визуализации результата моделирования – трехмерной схемы распределения кристаллов в пространстве и двухмерного изображения, являющегося плоским сечением пространства моделирования.

Принципы геометрической модели

Условия для разработки модели можно описать следующим образом: рассматриваем только самопроизвольное зарождение кристаллов, форма зародышей ограничена прямоугольными и треугольными призмами, в расплаве нет примесей, пространство моделирования является трехмерным, разбитым на отдельные ячейки – области кубической формы с длиной стороны, равной единице. Каждый зародыш кристалла задается набором ячеек. Ячейкой-источником назовем ячейку пространства, из которой возможно предпринять шаг единичной длины, ячейкой-претендентом – ячейку пространства, находящуюся в шаге единичной длины от ячейки-источника. В процессе роста зародыш сохраняет форму до тех пор, пока не сталкивается с другими зародышами. Иначе рост на месте столкновения граней прекращается. Рост граней происходит вдоль нормалей к их поверхностям.

Построение зародыша разбито на несколько этапов, рассмотрим самые важные из них – построение ребра (отрезок прямой) и построение грани (отсек плоскости).

Пусть отрезок задан точками (x_1, y_1, z_1) , (x_2, y_2, z_2) . При построении отрезка возможно два варианта: отрезок параллелен одной из осей координат, отрезок занимает общее положение. В первом варианте рассчитываем приращения $dx=x_1-x_2$, $dy=y_1-y_2$, $dz=z_1-z_2$, выбираем ось, для которой данная разность не равна нулю. Допустим, что $dx \neq 0$, $dy=0$, $dz=0$. Тогда поиск координат (x, y, z) следующих точек реализуется следующим образом:

$x=x_1$; $y=y_1$; $z=z_1$

Пока $(x < x_2)$

{ $x=x+1$; ставим точку (x, y, z) }

Во втором случае воспользуемся модифицированным алгоритмом Брезенхема. Суть модификации состоит в двух последовательных использований данного алгоритма для двухмерного случая. Для корректной работы алгоритма Брезенхема проводится предварительная сортировка осей координат по уменьшению длины шага вдоль оси: пусть существует три оси X , Y , Z и вектор приращений (dx, dy, dz) , тогда отсортированными назовем оси, для которых верно утверждение $dx \geq dy \geq dz$. Для первого прохода по алгоритму Брезенхема делаем развёртку счётным циклом по самой длинной стороне вектора, т.е. по оси X , вычисляя приращения dy . Затем, при втором проходе по алгоритму Брезенхема, вычисляется приращение dz по уже известному приращению координат dy . Схема вычислений для отрезка, заданного точками (x_1, y_1, z_1) , (x_2, y_2, z_2) , приведена ниже:

// длины путей по координатным осям

$dx = \text{abs}(x_2 - x_1)$; $dy = \text{abs}(y_2 - y_1)$;

$dz = \text{abs}(z_2 - z_1)$;

сортировка осей (X, Y, Z) ;

// $dx \geq dy \geq dz$.

рассчитываем единичные направления движения
 sx, sy, sz ;

ставим точку (x_1, y_1, z_1) ;

$d = 2 * dy - dx$; // задаем пару «x»-«y»

$d_1 = 2 * dy$;

$d_2 = 2 * (dy - dx)$;

$dd = 2 * dz - dy$; // задаем пару «y»-«z»

$dd_1 = 2 * dz$;

$dd_2 = 2 * (dz - dy)$;

$x = x_1 + sx$;

$y = y_1$;

$z = z_1$;

для $i=1$; $i \leq dx$; $i++$, $x+=sx$

{ // первый проход

если $d > 0$

{

$d+=d_2$;

$y+=sy$;

// был выполнен шаг по средней оси -Y

// второй проход

если $dd > 0$

{
 $dd+=dd_2$;

$z+=sz$;

}

иначе $dd+=dd_1$;

// конец второго прохода

}

иначе $d+=d_1$;

// конец первого прохода

ставим точку (x, y, z)

};

Заполнение ячеек, принадлежащих грани, происходит по методу штриховки. Т.к. нам известны координаты точек, лежащих на ребрах кристалла, то, используя любой известный алгоритм построения отрезка прямой в пространстве, можно соединить эти точки отрезками. В этом случае грань постепенно «заштриховывается».

Гранями кристалла являются трех- или четырехугольные отсеки плоскости, задающиеся соответственно отрезком и точкой или двумя отрезками. Рассмотрим случай построения треугольной грани. Пусть точки ребра \in множеству $edge = \{e_1, e_2, \dots, e_n\}$ размерностью n , причем $ei = \{x_i, y_i, z_i\}$, где (x_i, y_i, z_i) – координаты i -й точки ребра, и точка $A(x, y, z) \notin edge$. Схема вычислений выглядит следующим образом:

для $i=0$; $i < n$; $i++$

{ построение прямой по алгоритму Брезенхема для точек с координатами (x, y, z) и $(e_i[x], e_i[y], e_i[z])$;

}

При построении грани, являющейся четырехугольными отсеком плоскости, и заданной множествами $edge1 = \{e1_1, e1_2, \dots, e1_n\}$ и $edge2 = \{e2_1, e2_2, \dots, e2_n\}$, имеющих одинаковую размерность n , схема вычислений выглядит так:

для $i=0$; $i < n$; $i++$

{ построение прямой по алгоритму Брезенхема для точек с координатами $(e1_i[x], e1_i[y], e1_i[z])$ и $(e2_i[x], e2_i[z], e2_i[z])$;

}

Вторым вариантом заполнения грани является использование алгоритма заливки. В этом случае в качестве начальной точки выбирается точка, принадлежащая грани (к примеру вершина грани). Далее анализируются ячейки-соседи для данной точки. К грани относят те ячейки, координаты которых удовлетворяют неравенству:

$$d(P, \Pi) = \frac{|A \cdot x + B \cdot y + C \cdot z + D|}{\sqrt{A^2 + B^2 + C^2}} < \frac{\sqrt{3}}{2}, \text{ где}$$

$P(x, y, z)$ – точка, соответствующая рассматриваемой ячейке, Π – плоскость, содержащая грань и заданная уравнением $A \cdot x + B \cdot y + C \cdot z + D = 0$

Однако оба способа заполнения грани имеют свои недостатки. Первый не гарантирует того, что между ячейками не будет разрывов, т.е. грань может не быть целой, что вызовет проблемы при заполнении внутреннего пространства кристалла. Второй способ не имеет такого недостатка, но за счет захватывания лишней ячейки, т.к. толщина грани может превышать 1 ячейку. Эта особенность приводит к образованию «артефактов» при росте кристаллов (формально все ячейки поверхности имеют способность к росту, однако ячейки-источники, лежащие ближе к центру кристалла, не имеют свободных ячеек-претендентов). Такие «артефакты» будут отображаться как единичные ячейки грани, лежащие внутри кристалла.

При заполнении внутреннего пространства кристалла используется стандартный алгоритм заливки. Рост кристалла реализован как движение вдоль нормалей ячеек кристалла. Рост грани происходит вдоль нормали к ее поверхности, росту ребра – вдоль обеих нормалей смежных граней и вдоль их суммарной нормали, роста вершины – вдоль всех возможных попарных сумм нормалей и вдоль суммы трех нормалей.

Для ячейки с координатами (x, y, z) и нормальями $n1=\{a_1, b_1, c_1\}$, $n2=\{a_2, b_2, c_2\}$, $n3=\{a_3, b_3, c_3\}$ координатами ячеек-претендентов будут такие координаты: $(x+a_1, y+b_1, z+c_1)$, $(x+a_2, y+b_2, z+c_2)$, $(x+a_3, y+b_3, z+c_3)$, $(x+a_1+a_2, y+b_1+b_2, z+c_1+c_2)$, $(x+a_1+a_3, y+b_1+b_3, z+c_1+c_3)$, $(x+a_3+a_2, y+b_3+b_2, z+c_3+c_2)$, $(x+a_1+a_2+a_3, y+b_1+b_2+b_3, z+c_1+c_2+c_3)$. Если ячейка-претендент свободна, то помечаем ее, как занятую. При этом она будет наследовать нормали ячейки-источника. Ячейка-источник помечается как внутренняя, дальнейшее перемещение из нее становится невозможным.

Результатом описания вычислений является множество значений $Point=\{p_1, p_2, \dots, p_v\}$, где $v=N \cdot M \cdot K$, N , M , K – целочисленные размерности пространства по осям X , Y , Z ; $pi=\{x_i, y_i, z_i, normal_i\}$ – множество точек, в котором x_i, y_i, z_i – координаты точки, $normal_i$ – множество соответствующих ей нормалей; $normal_i=\{nor_1, nor_2, nor_3\}$ – множество с максимальной размерностью 3, в котором каждый элемент nor_i описывает нормаль с параметрами $\{a_i, b_i, c_i\}$, причем $normal_i$ может быть пустым или неполным (в случае если соответствующая ячейка внутренняя или принадлежит грани).

Расчет и визуализация

Результат расчета сильно зависит от точности вычислений при округлении величин.

В частности, если в течение одного шага вычислений значение переменной меняется только в дробной части, то номер соответствующего индекса в совокупности ячеек остается неизменным. Это приводит к тому, что

визуально перемещение этой точки не отображается. Однако, для корректной работы алгоритма необходимо сохранение дробных значений, поэтому переменные координат хранят точное положение точки в пространстве, а округление используется только на стадии отображения результатов.

Согласно изложенным принципам, было проведено моделирование в системе Mathcad. Визуализацию результата можно проводить любыми удобными средствами, поддерживающими функции считывания из файла и функции работы с графикой, т.к. результирующие множества записывались в файл с расширением txt.

Фрагмент данного файла приведен на рисунке 1. Каждая строка описывает три координаты ячейки (с округлением до целой части) и номер в таблице, описывающей нормали.

В данной работе результаты вычислений используются для построения изображения в среде 3ds MAX с использованием MaxScript.

Все приведенные изображения показывают результат генерации и роста кристаллов, грани которых расположены параллельно плоскостям координат или с некоторым углом α относительно оси OZ , а так же их сечения плоскостью, параллельной плоскости OX .

v	v	v	v
0	0	0	0
0	0	0	0
0	0	0	0
0	16	18	7
0	16	19	2
0	16	20	2
0	16	21	2
0	16	22	9
0	0	0	0
0	0	0	0
0	0	0	0

Рисунок 1 – Содержание файла результата

На рисунке 2 показано сечение группы кристаллов в форме призм с прямоугольным основанием. Локальная система координат кристалла совпадает с мировой системой координат. Ячейка отображается как куб, с длиной стороны равной единице. Внутреннее пространство разделяется границей, имеющей такой же цвет, что и грани, продолжающие рост.

На рисунке 3 показана визуализация призм с прямоугольным основанием с помощью сфер и точек.

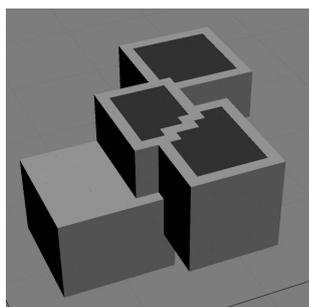
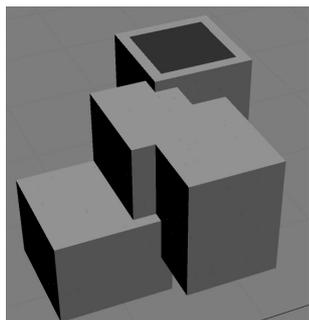


Рисунок 2 – Сечения кристаллов

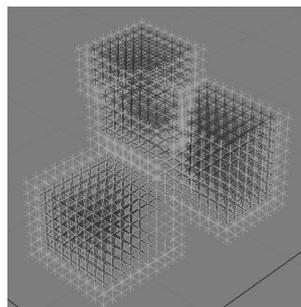
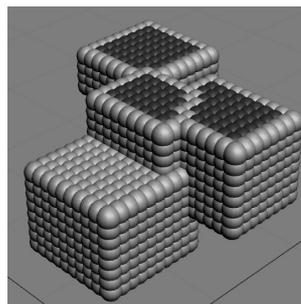


Рисунок 3 – Визуалізація з допомогою сфер і точок

Выводы и перспективы

Существующая программная реализация геометрической модели зарождения и роста кристаллов обладает рядом ограничений (по форме кристаллов и их положению в пространстве), для повышения точности результата желательно использование специализированных математических пакетов. Задачу визуализации результата целесообразно отделить от задачи моделирования роста кристаллов, т.к. допускается использование

различных методов отображения множества точек. В частности, для построения конечного трехмерного изображения (т.е. когда процесс моделирования остановлен), возможно использование полигонов.

Дальнейшее развитие модели должно проходить в двух направлениях: повышение скорости вычислений и расширение списка допустимых параметров, влияющих на процесс зарождения и роста кристаллов.

Список литературы

- 1.G.M. Nielson : Volume Modelling, Volume Graphics, Springer, 2000
2. Crystal Growth and Solidification / H. Muller-Krumbhaar, Yu. Saito. – CRC Press: Surfactant Science Series. – 2000. – Vol. 89. – P. 853-854.
3. LVMFlow [Электронный ресурс] – Режим доступа: http://enlvm.mkmssoft.ru/?page_id=2 -MKM Ltd. LVMFlowCV
4. ProCAST [Электронный ресурс] – Режим доступа: <http://www.esi-group.com/products/casting/procast> - Casting Simulation: ProCAST Benefits
5. WinCAST [электронный ресурс] – Режим доступа: <http://www.simtec-inc.com> – Simtec Inc.
6. Grujicic M. Computer simulations of the evolution of solidification microstructure in the LENS™ rapid fabrication process / M. Grujicic, G. Cao, R.S. Figliola // Applied Surface Science 183. – 2001. – P. 43-57
7. С.Е. Krill III, L.-Q. Chen. Computer simulation of 3-D grain growth using a phase field Model – Acta Materialia 50. – 2002. – P. 3057-3073
8. 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.
9. Volume Modelling And Rendering Based On 3D Voxel Grids, 2005, [Электронный ресурс] / Jan Müller // Режим доступа: <http://fullebooks.net/volume-modelling-and-rendering-based-on-3d-voxel-grids-pdf-106807.htm> - Volume Modelling And Rendering Based On 3D Voxel Grids | Free PDF Ebooks
10. Karabchevskiy V.V. Process of crystal growth in liquid melt: modeling and rendering (16th

International Students' Day of Metallurgy) / Karabchevskiy V.V., Pashinskaya A.V. – 2009. - P.69.

11. 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 – Вип. 85. – С. 19-24.

12. Карабчевский В.В., Пашинская А.В. Особенности воксельной модели процесса роста многогранников / В.В. Карабчевский, А.В. Пашинская // Міжвідомчий науково-технічний збірник «Прикладна геометрія та інженерна графіка». – 2011. – Вип. 87. – С. 149-153.

Надійшла до редколегії 11.10.2011

А.В. ПАШИНСЬКА

Донецький національний технічний університет

Використання коміркового підходу при розробці моделі генерації та росту многогранників у просторі

В статті розглянуто спосіб генерації кристалів у вигляді призм з використанням коміркового методу, наведені алгоритми побудови ребра та грані многогранника, проведено порівняльний аналіз переваг та недоліків наведених алгоритмів. Наведено приклади візуалізації об'єму моделювання, що були отримані із використанням пакетів Mathcad та 3ds Max.

Комірковий метод, кристалізація, геометричне моделювання

A.V. PASHINSKAYA

Donetsk national technique university

Using cell-based method for polyhedron nucleation and growth in space development

In the article cell-based method for polyhedron nucleation was examined. Edge and facet building algorithms were produced. Advantages and disadvantages of these algorithms were researched. The results of modeling using Mathcad and 3ds Max were released.

Cell-based method, crystallization, geometric simulation