

На правах рукописи



Сергеев Валерий Викторович

**АЛГОРИТМИЧЕСКИЕ И ПРОГРАММНЫЕ СРЕДСТВА ДЛЯ
ПОДГОТОВКИ ДАННЫХ И ОБРАБОТКИ РЕЗУЛЬТАТОВ
МОДЕЛИРОВАНИЯ ФИЗИКО-МЕХАНИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ
МЕТОДАМИ ЧАСТИЦ**

Специальность 05.13.11 – математическое и программное обеспечение
вычислительных машин, комплексов и компьютерных сетей

АВТОРЕФЕРАТ
диссертации на соискание ученой степени
кандидата технических наук

Томск – 2012

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Институте физики прочности и материаловедения Сибирского отделения Российской академии наук и в Федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего профессионального образования «Национальный исследовательский Томский политехнический университет»

Научный руководитель: доктор физико-математических наук, доцент
Смолин Алексей Юрьевич

Официальные оппоненты: доктор технических наук, профессор
Спицын Владимир Григорьевич

кандидат технических наук, доцент
Седов Юрий Владимирович

Ведущая организация: Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт вычислительных технологий Сибирского отделения Российской академии наук

Защита состоится «21» мая 2012 г. в 16 часов на заседании диссертационного совета Д 212.269.06 при ФГБОУ ВПО «Национальный исследовательский Томский политехнический университет» по адресу: 634034, г. Томск, ул. Советская, 84/3.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ФГБОУ ВПО «Национальный исследовательский Томский политехнический университет» по адресу: 634034, г. Томск, ул. Белинского, 55.

Автореферат разослан «19» апреля 2012 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета
к.т.н., доцент



М.А. Сонькин

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность работы

Компьютерное моделирование физико-механических процессов, основанное на дискретном подходе, интенсивно используется как в научных целях, так и в интересах промышленности. Результаты такого моделирования востребованы, например, при разработке новых конструкционных и функциональных материалов, проектировании различных узлов, деталей и конструкций в строительстве, машиностроении, транспорте, медицинской технике и т.д. Кроме того, подобного класса задачи, однако на существенно больших масштабах, встречаются в горнодобывающей промышленности, геомеханике, тектонофизике.

Важными этапами процесса компьютерного исследования являются подготовка исходных данных и обработка полученных результатов численных расчётов. Очевидно, что большое влияние на эффективность получаемых результатов оказывает возможность автоматизации процесса подготовки исходных данных и создания самой расчётной модели. Не менее важную ценность представляет последующая обработка и анализ полученных данных, так как от этого напрямую зависит достоверность выводов и адекватность принятия решений по дальнейшему ходу численного эксперимента. В данной области накоплен существенный опыт, который изложен в работах следующих авторов: Р. Cundall, J. Favier, V. Popov, А.М. Кривцов, С.Г. Псахье.

Используемые в настоящее время программные продукты, реализующие дискретный подход моделирования, обладают рядом существенных недостатков, в частности таких, как их узкая направленность, жёсткая привязка к конкретному методу моделирования, использование неэффективного подхода к построению геометрической модели, которые ограничивают возможности исследователя. Также в связи с возрастающими потребностями современной науки и техники, в частности, развитием нанотехнологий, осуществляется модернизация существующих методов, и разрабатываются новые методы моделирования. В связи с этим, актуальной задачей является создание новых алгоритмов и программных средств для реализации этапов подготовки исходных данных и обработки результатов компьютерного моделирования. При этом разработанное программное обеспечение должно обладать определённой степенью универсальности (в смысле применения к различным методам) и предоставлять современные средства визуализации расчётных данных с целью повышения эффективности восприятия их пользователем.

Целью диссертационной работы является исследование, разработка и внедрение алгоритмического и программного обеспечения для подготовки исходных данных и обработки результатов численного моделирования физических процессов в твёрдых телах на основе методов частиц.

Для достижения указанной цели в диссертационной работе поставлены следующие **задачи**:

1. Анализ существующих средств подготовки исходных данных и обработки полученных результатов для систем моделирования.
2. Разработка нового способа формирования структуры исходных данных, обеспечивающего возможность хранения и учёта параметров взаимодействия расчётных элементов, и его программная реализация.
3. Разработка и программная реализация алгоритма преобразования описания геометрического объекта, заданного полигональной сеткой, в совокупность локальных описаний, характеризующих частицы с заданными размерами и типом упаковки.
4. Адаптация существующих алгоритмов определения принадлежности точки внутреннему объёму трёхмерного объекта, описанного полигональной сеткой.
5. Разработка и реализация программного обеспечения для подготовки исходных данных и обработки полученных результатов.

Получены следующие результаты, обладающие научной новизной:

1. Разработан новый способ формирования структуры исходных данных, отличающийся от существующих возможностью хранения и учёта параметров взаимодействия расчётных элементов.
2. Модифицирован алгоритм Кируса-Бека для определения положения точки в трёхмерном пространстве относительно полигональной сетки для объекта произвольной формы, отличающийся от известного введением блока отбора ближайших к проверяемой точке граней.
3. Модифицирован алгоритм трассировки луча для решения задачи локализации точки в трёхмерном пространстве относительно полигональной сетки, отличающийся от известного учётом различных вариантов пересечения луча с гранями сетки.
4. Разработан новый алгоритм преобразования описания геометрического объекта, позволяющий получить из полигональной сетки совокупность локальных описаний, характеризующих частицы с заданными размерами, типом упаковки и параметрами межэлементных связей.
5. Разработан новый способ визуализации совокупности локальных описаний, характеризующих частицы, позволяющий повысить скорость отображения большого объёма данных за счёт дополнительной буферизации.

Практическая ценность и реализация результатов работы

Использование созданных алгоритмических и программных средств позволяет значительно повысить эффективность трёхмерного моделирования методами частиц, сократить сроки и стоимость научно-исследовательских и опытно-конструкторских работ. В качестве достоинств разработанного способа визуализации результатов следует отметить, что он значительно сокращает время отображения данных, повышает уровень восприятия пользователем численной информации и позволяет исключить большинство ошибок,

вызванных человеческим фактором при анализе результатов моделирования. Кроме того, разработанный алгоритм преобразования описания геометрических объектов является практически ценным для решения различных задач вычислительной геометрии.

Разработанное на основе предложенных способов и алгоритмов программное обеспечение «PM_Prepare», используемое для подготовки исходных данных для моделирования методами частиц, и «PM_Results», используемое для обработки и анализа результатов численных расчётов, функционирует на компьютерах типа IBM PC под управлением операционных систем Windows и Linux. Объём исходного кода составляет более 27000 строк на языке C++.

Разработанные алгоритмы, подходы и программное обеспечение использовано для решения следующих практически важных задач.

1. В компании ООО «Предприятие «Сенсор» с помощью приложения «PM_Prepare» осуществлялась подготовка исходных данных для моделирования методом молекулярной динамики процессов нановыглаживания поверхности металлов, обработка результатов моделирования проводилась с использованием приложения «PM_Result».
2. В компании ООО «ПИТ-Инжиниринг» внедрены в промышленную эксплуатацию приложения «PM_Prepare» и «PM_Result». Указанное программное обеспечение используется для изучения прочностных свойств светодиодных экранов при внешнем механическом воздействии с целью совершенствования их конструкции и оптимизации производства.
3. Разработанные в диссертации алгоритмы, методы и программное обеспечение внедрены в практику использования в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Институте физики прочности и материаловедения Сибирского отделения Российской академии наук.

Личный вклад автора

1. Постановка задач создания алгоритмов и подходов для реализации этапов подготовки исходных данных и обработки результатов моделирования методами частиц выполнены автором совместно с д.ф.-м.н. Смолиным А.Ю.
2. Разработка и программная реализация алгоритма преобразования описания геометрических объектов, заданного полигональной сеткой, в совокупность локальных описаний, характеризующих частицы с заданными размерами и типом упаковки выполнена лично автором.
3. Модификация и программная реализация алгоритма Кируса-Бека выполнена лично автором.
4. Модификация и программная реализация алгоритма трассировки луча для решения задачи локализации точки в трёхмерном пространстве относительно полигональной сетки выполнена лично автором.
5. Разработка структуры программного обеспечения для подготовки исходных данных и обработки результатов моделирования выполнена лично автором.

6. Разработка приложения «PM_Prepare» для реализации этапа подготовки исходных данных выполнена лично автором.
7. Разработка приложения «PM_Results» для обработки и анализа результатов численного моделирования методами частиц выполнена лично автором.

Положения, выносимые на защиту:

1. Предложенный и реализованный в программном обеспечении способ формирования структуры исходных данных позволяет хранить параметры взаимосвязей элементов данных и учитывать изменение параметров во времени.
2. Разработанный алгоритм преобразования описания геометрического объекта позволяет получить из полигональной сетки совокупность локальных описаний, характеризующих частицы с заданными размерами и типом геометрической упаковки.
3. Новый способ визуализации совокупности локальных описаний, характеризующих частицы, позволяет повысить скорость их отображения за счёт дополнительной буферизации данных.
4. Реализация разработанных в диссертации подходов к построению алгоритмов и программных средств позволяет автоматизировать работу пользователя при подготовке исходных данных и обработке расчётных данных, повысить оперативность и достоверность получения результатов моделирования.

Апробация работы

Результаты работы докладывались и обсуждались на следующих конференциях: международной конференции по компьютерной графике, машинному зрению, обработке изображений и видео «GraphiCon» (г. Москва, 2008); всероссийской научно-практической конференции по свободному программному обеспечению (г. Томск, 2008); международной конференции по физической мезомеханике, компьютерному конструированию и разработке новых материалов (г. Томск, 2009); международной конференции по вычислительной механике и современным прикладным программным системам «ВМСППС» (г. Алушта, Украина, 2009); международной конференции «Вычислительная математика, дифференциальные уравнения, информационные технологии» (г. Улан-Удэ, 2009); международной научно-практической конференции «Современные информационные и электронные технологии» (г. Одесса, 2010); международной летней школе «Advanced Problems in Mechanics» (г. Санкт-Петербург, 2010); международной конференции по вычислительной механике и современным прикладным программным системам «ВМСППС» (г. Алушта, Украина, 2011).

Структура и объём работы

Диссертация состоит из введения, четырёх разделов, заключения и списка использованных источников из 101 наименований. Объём диссертации составляет 147 страниц, в том числе 72 рисунка и 1 таблица.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обоснована актуальность исследуемой в диссертации проблемы, сформулированы цель и задачи работы, перечислены полученные новые результаты, их научно-практическая ценность, приведены положения, выносимые на защиту, дана краткая характеристика разделов диссертации.

В первом разделе диссертационной работы дано описание двух основных подходов моделирования физических процессов, протекающих в материалах и средах:

– континуального, в рамках которого моделируемый материал рассматривается как сплошная среда, непрерывно заполненная материей, а процессы, протекающие в ней, описываются дифференциальными уравнениями в частных производных (для численного решения этих уравнений используются сеточные методы);

– дискретного, когда моделируемый материал представляется в виде ансамбля взаимодействующих между собой элементов в общем случае конечного размера и определённой формы (методы частиц).

Одним из этапов компьютерного исследования является подготовка исходных данных. Особо стоит выделить процесс создания геометрической модели испытуемого образца. Для этого в случае трёхмерного моделирования физических процессов необходимо построить некоторый виртуальный прототип реального образца, который должен состоять из одного или нескольких трёхмерных объектов. Известно, что самым распространённым способом представления трёхмерных объектов в компьютерной графике и объёмном моделировании является полигональная сетка – совокупность вершин, рёбер и граней, которые определяют форму многогранного объекта. Такое представление геометрической модели в чистом виде используется в программном обеспечении, реализующем методы континуального подхода. Однако при использовании методов частиц моделируемая среда изначально должна быть представлена в виде ансамбля взаимодействующих элементов конечного размера. Это делает невозможным использование напрямую полигональных сетей для представления геометрической модели. Одним из подходов, решающих данную проблему, реализован в программном обеспечении «EDEM», где набор дискретных элементов задается параметрически, а полигональные сетки используются как граничные условия, с которыми взаимодействуют частицы. Недостатком такого подхода является возможность использования только гранулированных (сыпучих) материалов для моделирования. В программном обеспечении «LAMMPS», основанном на методе молекулярной динамики, для создания геометрической модели

используется генерация координат частиц, при которой задается форма трёхмерного моделируемого объекта в виде ограниченного набора графических примитивов: параллелепипед, сфера, цилиндр и т. д. Следовательно построить с помощью программных средств «LAMMPS» геометрическую модель образца с более сложной формой невозможно, что является значимым недостатком данной системы.

Еще одной особенностью построения геометрической модели для решения класса задач методами частиц является требование к определённому расположению частиц относительно друг друга. Принцип, по которому задается, каким образом частицы будут расположены в пространстве, носит название упаковки. Различают разные виды объёмных упаковок, среди них можно отметить наиболее распространённые: кубическая упаковка, гранецентрированная кубическая упаковка, гексагональная плотная упаковка.

Во втором разделе предлагается новая структура исходных данных для описания состояния дискретных элементов. Её главной отличительной особенностью от существующих является хранение параметров взаимосвязей элементов данных и учёт изменения параметров во времени. В частности, в случае её применения к описанию состояния частиц согласно дискретному подходу для моделирования материалов, осуществляется хранение параметров напряжения при последнем необратимом состоянии, а также учитывается направление процесса деформирования: активное нагружение или разгрузка. Другими словами предложенная структура позволяет хранить историю деформирования для упруго-вязкопластических материалов.

Так как в методах частиц деформация описывается взаимодействием частиц с соседними частицами, предложенная новая структура условно названа «Частица – Сосед», а её обобщённая схема представлена на рис. 1. Количество соседей может быть различным и зависит от заданного типа упаковки.

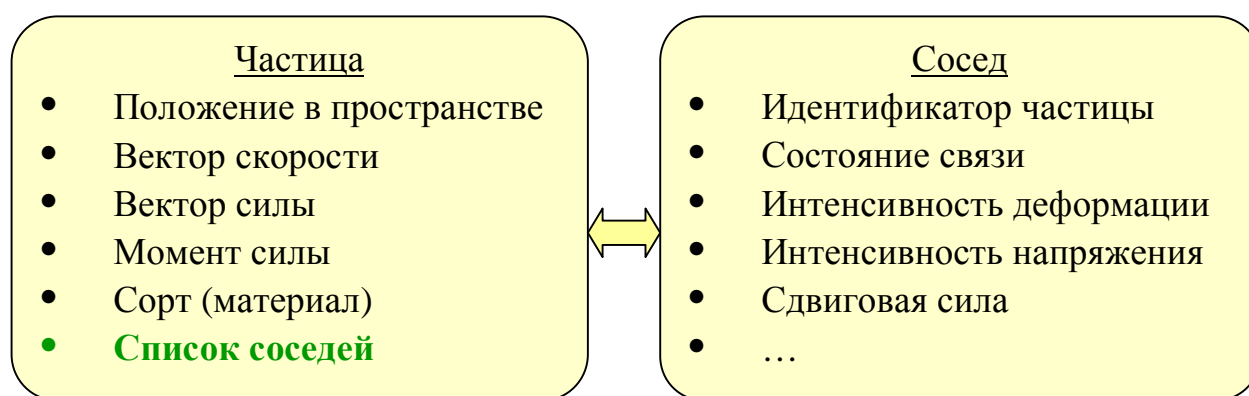


Рис. 1 Обобщённая схема структуры исходных данных «Частица–Сосед»

Предложенная структура исходных данных была реализована в виде иерархии классов на языке C++. Диаграмма этих классов показана на рис. 2.

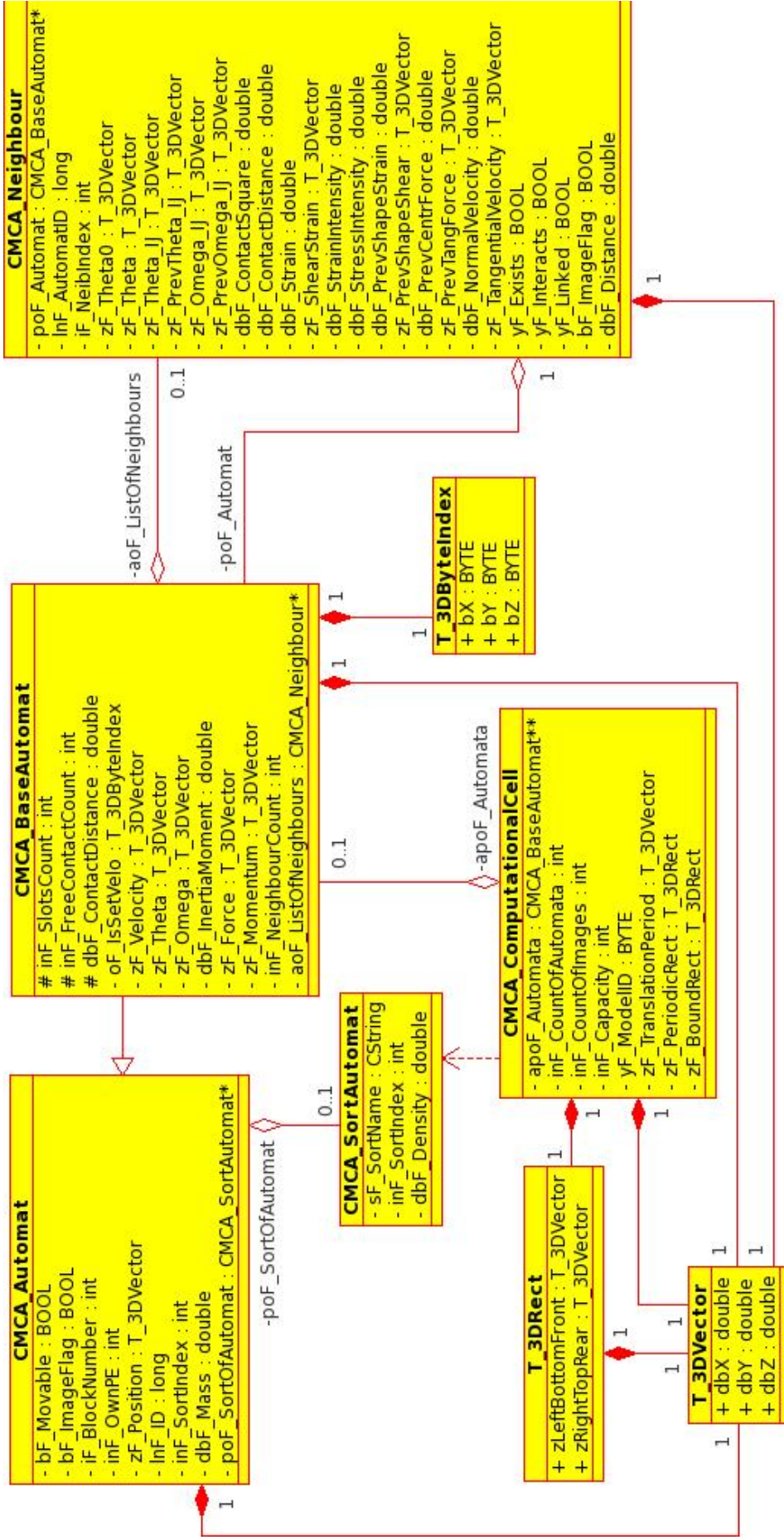


Рис. 2 Диаграмма классов структуры исходных данных «Частица–Сосед»

Очевидно, что недостатком данной структуры, по сравнению с имеющейся, является требование больших вычислительных ресурсов (память и время). Однако очень важным её достоинством является то, что использование такой структуры значительно расширяет круг задач, решаемых методами частиц. В частности, при моделировании материалов появились следующие новые возможности:

1. впервые в рамках дискретного подхода удалось описать пластическую деформацию материала, которая не зависит от типа упаковки частиц;
2. стало возможным описывать процесс деформации консолидированного (не сыпучего) материала с явным учётом возникновения и развития в нём повреждений (трещин) вплоть до разрушения его на фрагменты и взаимодействия фрагментов как сыпучей среды.

Далее формулируются основные требования, выдвигаемые для описания геометрической модели испытуемого образца. На их основе, учитывая специфику методов частиц, предлагается использовать описание трёхмерных объектов, заданного полигональными сетками, с последующим преобразованием в совокупность локальных описаний, характеризующих частицы с заданными размерами и типом упаковки. Разработанный в данной работе алгоритм такого преобразования состоит из двух основных этапов (рис. 3).

Первым этапом является создание минимальной области заполнения (расчётной ячейки) на основе исходных данных, а именно координат вершин полигональных сеток всех объектов геометрической модели. Затем генерируются координаты пробной точки из области заполнения, представляющей положение частицы в трёхмерном пространстве. При этом основная цель состоит в том, чтобы расположить частицы заданного размера (представленные сферами) строго согласно требуемому типу упаковки.

На втором этапе имеющаяся пробная точка, координаты которой задают положение частицы в пространстве, проверяется на принадлежность геометрическому объекту (представленному полигональной сеткой). Главной особенностью предложенного алгоритма на этом этапе является возможность использования любого доступного на сегодняшний день метода определения принадлежности точки некоторому объёму в трёхмерном пространстве. В работе для реализации этого этапа были разработаны:

1. модифицированный алгоритм Кируса-Бека;
2. модифицированный алгоритм трассировки луча.

Ограничением оригинального алгоритма Кируса-Бека при его использовании для определения положения точки в трёхмерном пространстве относительно всех граней полигональной сетки является возможность его использования только для объектов выпуклой формы. В работе предложен модифицированный алгоритм, на который данное ограничение не распространяется, то есть его можно применять для определения положения точки относительно полигональной сетки объекта произвольной формы. Его ключевым отличием является этап отбора ближайших к проверяемой точке граней сетки (грань полигональной сетки является ближайшей к проверяемой

точке, если каждый из отрезков, соединяющий проверяемую точку с вершиной грани, не пересекает других граней полигональной сетки). Далее проверка положения точки осуществляется только относительно полученного набора ближайших граней.

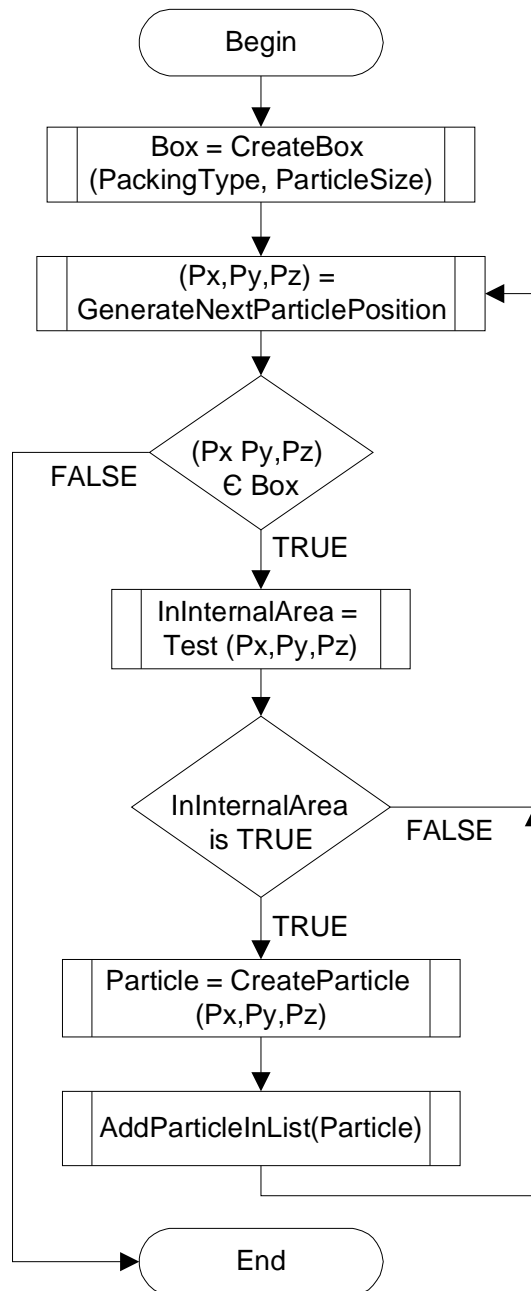


Рис. 3 Обобщённая схема алгоритма преобразования описания геометрического объекта

Основным применением алгоритма трассировки луча является построение изображения трёхмерных моделей в компьютерных программах. При этом отслеживается обратная траектория распространения луча (от экрана к источнику света). Для использования данного алгоритма в решении задачи локализации точки относительно полигональной сетки, разработана модификация, учитывающую специфику области применения. Её суть – в учёте

вариантов пересечения луча с гранью сетки и корректировке общей суммы пересечений луча с полигональной сеткой:

Случай 1: если точка пересечения является вершиной грани, то накапливаемая сумма увеличивается на $1/n$, где n – количество всех граней сетки, содержащих данную вершину;

Случай 2: если точка пересечения лежит на ребре грани, то накапливаемая сумма увеличивается на $1/2$;

Случай 3: если точка пересечения принадлежит внутренней области грани, то накапливаемая сумма пересечений увеличивается на 1.

Далее приводится структура программного обеспечения подготовки исходных данных для моделирования «PM_Prepare» (рис. 4), отражающая распределение функций системы между программными модулями, а также их взаимосвязи. Общий объём исходного кода, созданного автором, составляет более 16000 строк на языке C++.

Рассмотрим компоненты данного программного обеспечения.

Расчётное ядро системы моделирования («MCA3D», «LAMMPS» или другие системы, основанные на методах частиц) представляет собой программный модуль, в котором, заложены все основы метода моделирования, его физические принципы и законы. В качестве дополнительно подключаемых к ядру модулей, либо в его составе, существуют конкретные реализации некоторых основных типов моделей механического поведения материалов и сред: набора упругих сфер, упругого твердого тела, упругопластического тела. Под контролем ядра происходит весь процесс моделирования, который на входе имеет структурированное описание модели. На выходе расчётного ядра пользователь получает набор бинарных файлов с результатами моделирования, которые представляют собой сериализованные данные всех объектов модели в определённые моменты времени.

Остальные компоненты удобно разбить на три уровня. Несмотря на то, что такое представление является чисто условным, его использование позволяет увидеть функциональные связи между компонентами.

Верхний уровень программного обеспечения состоит из главного окна системы подготовки модели «PM_Prepare» (рис. 5), предлагающего пользователю инструменты и средства для подготовки модели. Запуск конкретного модуля для решения определённой задачи из среднего уровня осуществляется в отдельном потоке. Такая реализация обладает тем достоинством, что при возникновении системного сбоя в модуле среднего уровня нет необходимости перегружать всю систему. Модуль с ошибкой будет выгружен из памяти ПК автоматически, а главное окно системы позволит продолжить работу дальше.

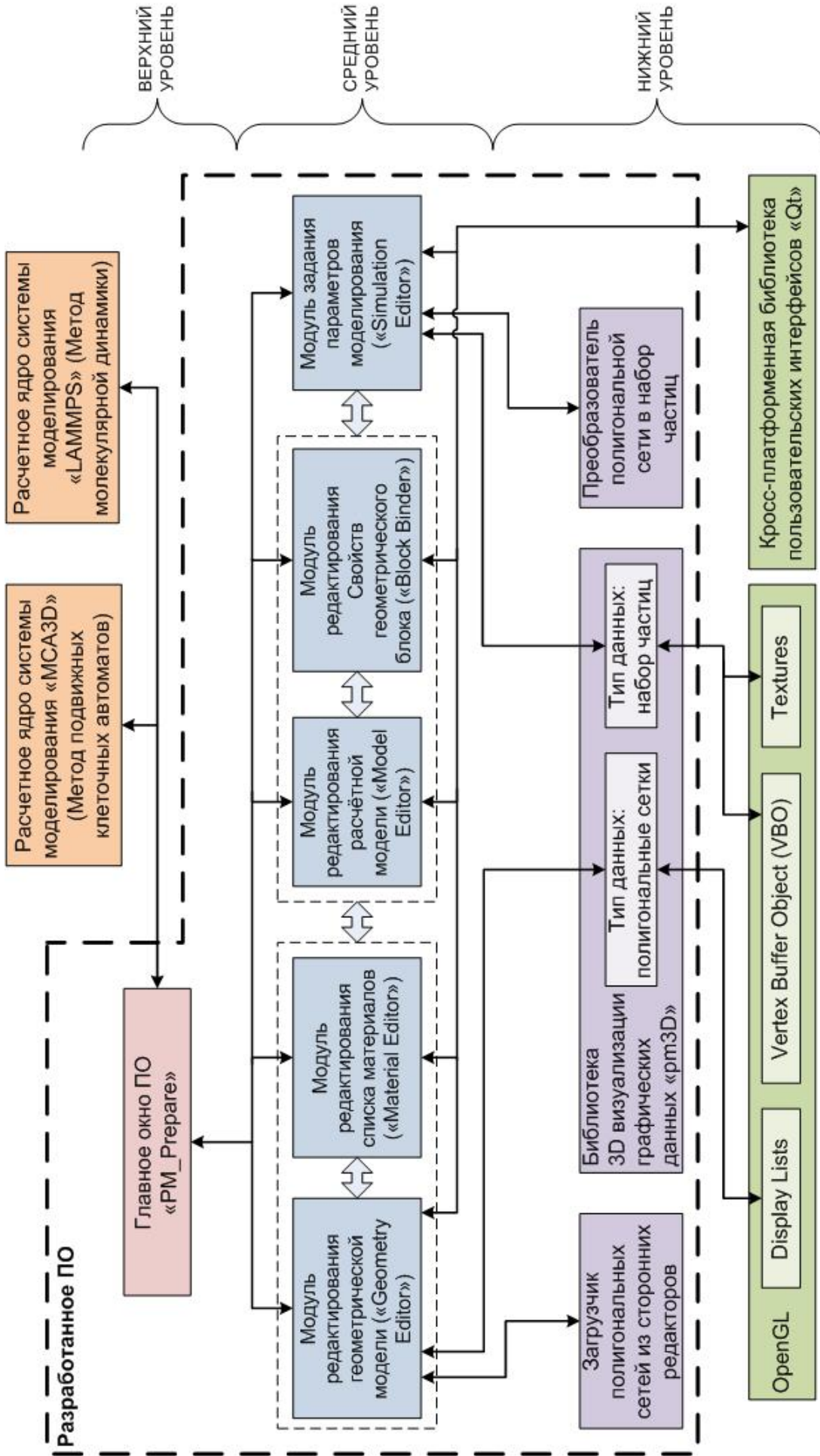


Рис. 4 Обобщенная структура ПО «PM_Prepare»

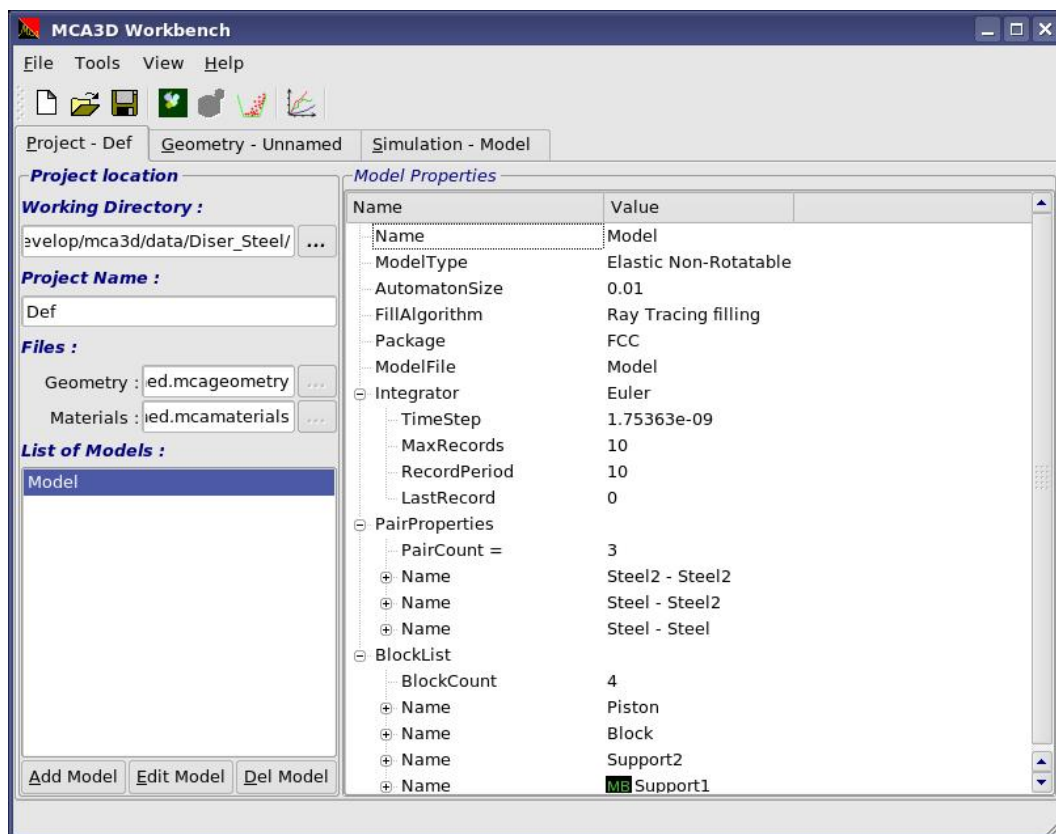


Рис. 5 Интерфейс разработанного программного обеспечения для подготовки исходных данных

Средний уровень состоит из программных модулей, реализующих конкретные стадии подготовки расчётной модели:

- модуль редактирования геометрической модели («Geometry Editor»);
- модуль редактирования списка материалов («Material Editor»);
- модуль редактирования списка расчётных моделей («Model Editor»);
- модуль редактирования свойств геометрического блока («Block Binder»);
- модуль редактирования параметров моделирования («Simulation Editor»).

Нижний уровень образуют функциональные модули, реализующие операции загрузки полигональных сеток, вывода трёхмерной графической информации и преобразования графических объектов, описанных полигональными сетками в набор частиц.

В третьем разделе приводится структура программного обеспечения «PM_Results» (рис. 6) просмотра, обработки и анализа результатов моделирования. Общий объем исходного кода, созданного автором, составляет более 11000 строк на языке C++.

Верхний уровень программного обеспечения состоит из главного окна системы «PM_Results» (рис. 7), предлагающего пользователю инструменты и средства для обработки и анализа результатов моделирования. Запуск конкретного модуля для решения определённой задачи из среднего уровня осуществляется в отдельном потоке.

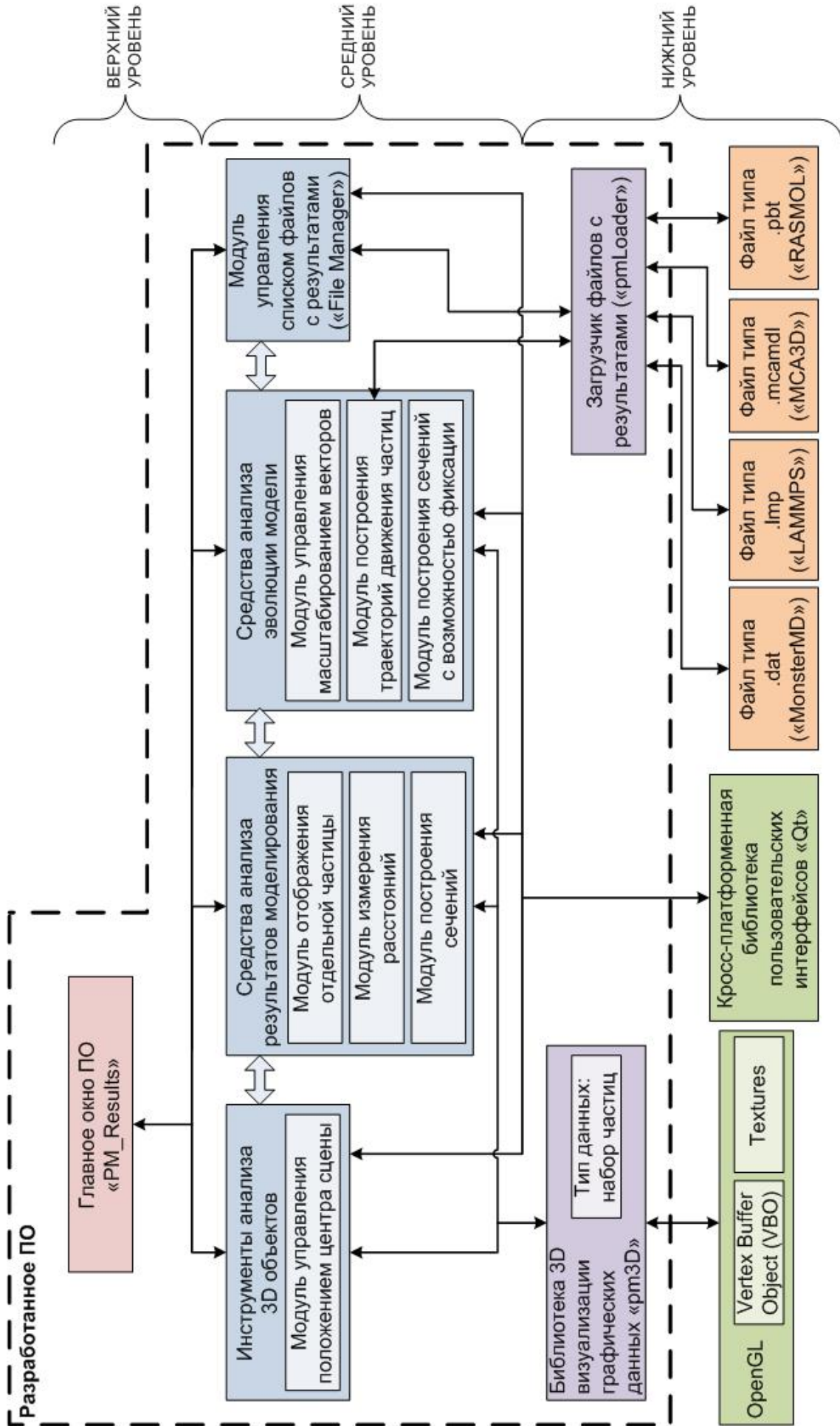


Рис. 6 Обобщенная структура ПО «PM_Results»

Средний уровень включает в себя инструменты и средства для анализа результатов моделирования, в том числе программные модули, реализующие конкретные задачи анализа:

- модуль управления положением центра сцены;
- модуль отображения отдельной частицы;
- модуль измерения расстояний;
- модуль построения сечений с возможностью фиксации частиц;
- модуль управления масштабированием векторов;
- модуль построения траекторий движения частиц;
- модуль управления списком файлов с результатами.

Нижний уровень образуют функциональные модули, реализующие операции загрузки файлов с результатами и вывода трёхмерной графической информации.

Предлагается новый способ визуализации совокупности локальных описаний, характеризующих частицы, с дополнительной буферизацией данных. Это позволяет достичь значительного ускорения отрисовки на экране большого количества данных (более миллиона частиц) за счёт сокращения количества обменов данными между оперативной памятью компьютера и памятью видеокарты. При этом, так как все частицы имеют одинаковое визуальное представление (в виде сферы), то для их отображения используется наложения текстуры.

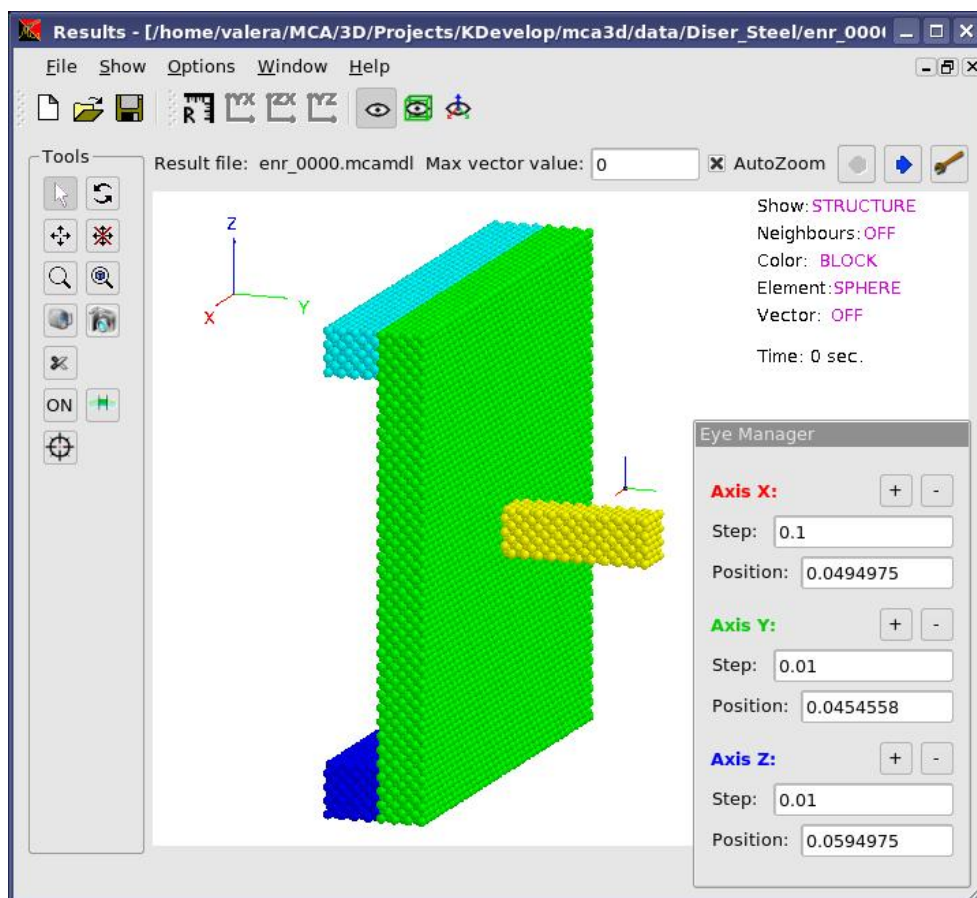


Рис. 7 Интерфейс разработанного программного обеспечения для обработки и анализа результатов численных расчётов

В четвёртом разделе описывается процесс верификации реализованных алгоритмов и разработанного программного обеспечения, приведены результаты исследования эффективности подготовки исходных данных и обработки полученных результатов численных расчётов.

Таблица 1 Результаты сравнения алгоритма преобразования описания геометрических объектов с применением модифицированного алгоритма Кируса-Бека (МАКВ) и с применением модифицированного алгоритма трассировки луча (MART)

Название образца	Количество граней	Количество проверяемых точек	Количество частиц	Время работы с использованием МАКВ, с	Время работы с использованием MART, с
Torus	2880	81774	4024	28	6
Bird	12320	5516205	116321	316	35
Herz	50640	2984520	23311	662	41

Из таблицы 1 видно, что время работы алгоритма с использованием MART меньше, чем с МАКВ. Однако в промышленности для построения геометрической модели образца используется трёхмерный сканер и в результате его работы иногда получаются полигональные сетки с артефактами. Если инженером по невнимательности данный артефакт будет пропущен, то последующее применение MART может дать ошибочный результат, а алгоритм МАКВ является устойчивым к подобному роду ошибок и способен решить задачу корректно.

С целью оценки эффективности разработанного программного обеспечения для подготовки исходных данных проведено изучение скорости создания различных расчётных моделей, основанных на тестовом геометрическом объекте (рис. 8).

Из рисунка 8 видно, что скорость создания расчётной модели в форме графического примитива (цилиндра) с использованием разработанного программного обеспечения немного меньше по сравнению с использованием аналогичного программного обеспечения «LAMMPS». Однако «LAMMPS» может работать только с ограниченным набором графических примитивов (параллелепипед, сфера, цилиндр и т.д.), тогда как «PM_Prepare» позволяет использовать для создания расчётной модели объекты произвольной формы.

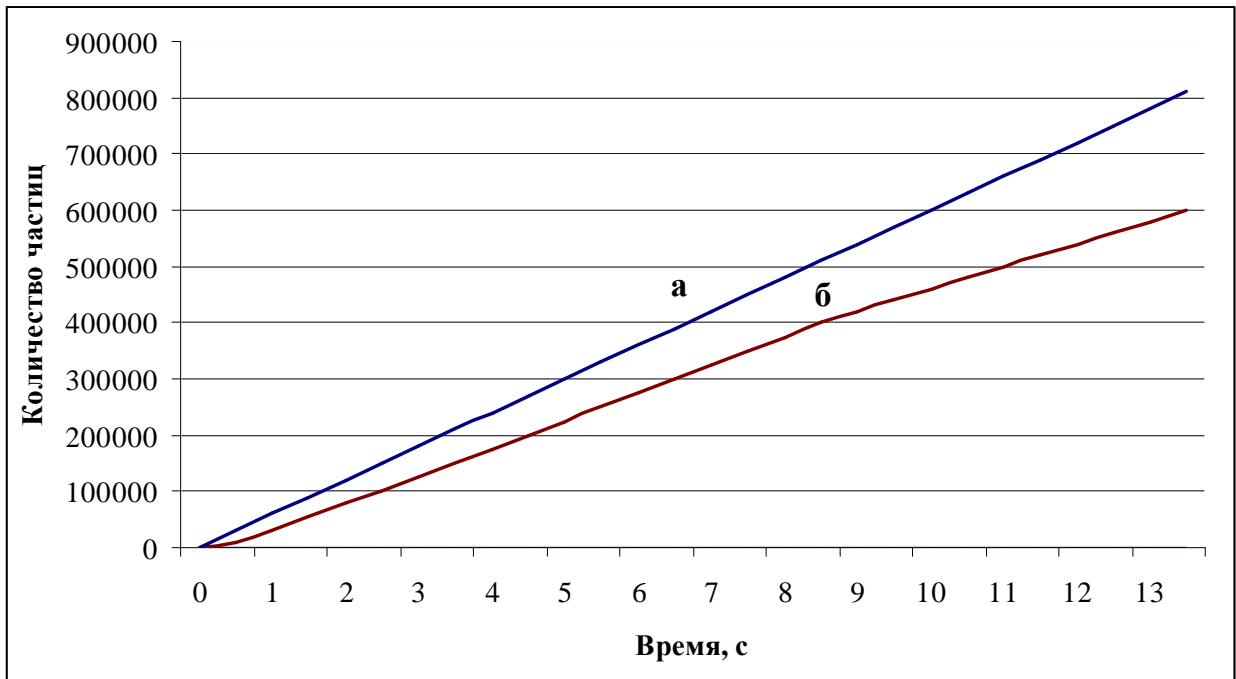


Рис. 8 Сравнение скорости создания расчётной модели цилиндрической формы с использованием программного обеспечения «LAMMPS» (а) и разработанного программного обеспечения «PM_Prepere» (б)

Для оценки эффективности разработанного программного обеспечения обработки результатов численных расчётов был проведен эксперимент по измерению скорости визуализации совокупности локальных описаний, характеризующих частицы. Как видно из рис. 9 новый способ визуализации совокупности локальных описаний является более эффективным при отображении большого количества частиц.



Рис. 9 Сравнение скорости визуализации совокупности локальных описаний с использованием буферизации данных (а) и без неё (б)

В заключении приведены выводы по полученным результатам.

В приложениях приведены акты внедрения результатов диссертационной работы, свидетельства о регистрации электронного ресурса и функциональные элементы, используемые в разработанном программном обеспечении.

Основные результаты работы:

1. Предложен новый способ формирования структуры исходных данных для хранения параметров взаимосвязей элементов данных и учёта изменения параметров во времени.
2. Модифицирован алгоритм Кируса-Бека для определения положение точки в трёхмерном пространстве относительно полигональной сетки для объекта произвольной формы.
3. Модифицирован алгоритм трассировки луча для решения задачи локализации точки в трёхмерном пространстве относительно полигональной сетки.
4. Разработан новый алгоритм преобразования описания геометрического объекта в совокупность локальных описаний, характеризующих частицы с заданными размерами, типом упаковки и межэлементными связями.
5. Предложен новый способ визуализации совокупности локальных описаний, характеризующих частицы, с дополнительной буферизацией данных.
6. Реализовано на языке C++ и внедрено программное обеспечение «PM_Prepare» для подготовки исходных данных и «PM_Results» для обработки результатов численных расчётов. В составе программного обеспечения «PM_Prepare» и «PM_Results», защищённого свидетельствами о регистрации электронного ресурса, реализованы предложенные в диссертации алгоритмы и подходы.

Таким образом, решена актуальная задача, имеющая существенное значение для повышения эффективности подготовки исходных данных и обработки результатов численных расчётов.

Публикации по теме диссертации:

В изданиях, рекомендованных ВАК:

1. Сергеев, В.В. Алгоритмы локализации точки в трехмерном пространстве для генерации объекта при моделировании методом частиц [Текст] / В.В. Сергеев, С.Ю. Коростелев, С.Г. Псахье. // Известия Томского политехнического университета. – 2008. – Т. 312. – № 5. – С. 44–47.
2. Сергеев, В.В. Изучение возможности идентификации наноскопических пор на основе анализа силы трения [Текст] / В.В. Сергеев, А.Ю. Смолин, С.А. Добрынин, С.Ю. Коростелев, С.Г. Псахье. // Вестник Томского государственного университета. Математика и механика. – 2010. – № 4. – С. 116–122

Свидетельства об официальной регистрации программ для ЭВМ:

3. Сергеев В.В., Смолин А.Ю. Коростелев С.Ю., Псахье С.Г. Программа подготовки данных для трёхмерного моделирования материалов методом частиц «PM_Prepare» // Свидетельство о регистрации электронного ресурса №17416. Зарегистрировано в объединённом фонде электронных ресурсов «Наука и образование» 19.09.2011.
4. Сергеев В.В., Смолин А.Ю. Коростелев С.Ю., Псахье С.Г. Программа обработки и анализа результатов трёхмерного моделирования материалов методом частиц «PM_Results» // Свидетельство о регистрации электронного ресурса №17415. Зарегистрировано в объединённом фонде электронных ресурсов «Наука и образование» 19.09.2011.

Публикации в других изданиях:

5. Сергеев, В.В. Алгоритмы локализации точки в 3D пространстве для генерации объекта при моделировании методом частиц [Текст] / В.В. Сергеев, С.Ю. Коростелев, С.Г. Псахье. // Труды 18-й международной конференции по компьютерной графике, машинному зрению, обработке изображений и видео (GraphiCon'2008). – 2008. – с. 309.
6. Сергеев, В.В. Приложение “Analyzer3D” для просмотра и анализа результатов моделирования методом частиц [Текст] / В.В. Сергеев, С.Ю. Коростелев, С.Г. Псахье. // Труды 1-ой всероссийской научно-практической конференции по свободному программному обеспечению. – 2008. – с. 76.
7. Сергеев, В.В. Метод заполнения при создании сложных трехмерных объектов для моделирования методом частиц [Текст] / В.В. Сергеев, С.Ю. Коростелев, С.Г. Псахье. // Материалы XVI международной конференции по вычислительной механике и современным прикладным программным системам (ВМСППС'2009). – 2009. – с. 642.
8. Коростелев, С.Ю. Приложение “Analyzer3D” для обработки и анализа результатов моделирования методом частиц [Текст] / С.Ю. Коростелев, В.В. Сергеев, С.Г. Псахье. // Материалы XVI международной конференции по вычислительной механике и современным прикладным программным системам (ВМСППС'2009). – 2009. – с. 425.
9. Сергеев, В.В. Заполнение сложных трехмерных объектов для моделирования методом частиц [Текст] / С.Ю. Коростелев, В.В. Сергеев, С.Г. Псахье. // Сборник материалов молодых ученых: Труды молодых ученых – участников международной конференции «Вычислительная математика, дифференциальные уравнения, информационные технологии». – 2009. – с. 221.
10. Сергеев, В.В. Создание сложных трехмерных объектов для моделирования методом частиц [Текст] / С.Ю. Коростелев, В.В. Сергеев, С.Г. Псахье. // Тезисы докладов международной конференции по физической мезомеханике, компьютерному конструированию и разработке новых материалов. – 2009. – с. 151.

11. Смолин, А.Ю. Трибоспектроскопия – инструмент для анализа качества покрытий. Компьютерное моделирование [Текст] / А.Ю. Смолин, Е.В. Шилько, В.В. Сергеев, А.И. Дмитриев, С.А. Добрынин, С.Г. Псахье. // Материалы VI Российской научно-технической конференции «Механика микронеоднородных материалов и разрушение» (Электронный ресурс). Екатеринбург: ИМАШ УрО РАН. – 2010. – Электронный оптический диск, вкладка «Публикации».
12. Сергеев, В.В. Программный интерфейс для создания систем моделирования, основанных на дискретных методах [Текст] / С.Ю. Коростелев, А.Ю. Смолин, В.В. Сергеев, С.Г. Псахье. // Труды XI международной научно-практической конференции «Современные информационные и электронные технологии». – 2010. – с.181.
13. Astafurov, S.V. Investigation of influence of nonequiaxial compression on general features of mechanical response of shearing fault zones [Текст] / S.V. Astafurov, E.V. Shilko, V.V. Sergeev, S.G. Psakhie. // Proceedings of the XXXVII Summer School “Advanced problems in mechanics (APM’ 2010)”, St. Petersburg (Repino) 01–05 July, 2010; Editors: D.A. Indeitsev, A.M. Krivtsov – St. Petersburg: Institute for problems in mechanical engineering. – 2010. – P. 504–507.
14. Sergeev, V.V. Modeling tribospectroscopy using movable cellular automata [Текст] / V.V. Sergeev, A.Yu. Smolin, S.Yu. Korostelev, S.A. Dobrinin. // Proceedings of the XXXVII Summer School // Proceedings of the XXXVII Summer School “Advanced problems in mechanics (APM’ 2010)”, St. Petersburg (Repino) 01–05 July, 2010; Editors: D.A. Indeitsev, A.M. Krivtsov – St. Petersburg: Institute for problems in mechanical engineering. – 2010. – P. 603–606.
15. Сергеев, В.В. Модуль «MCA_Results» для просмотра и анализа результатов моделирования методом подвижных клеточных автоматов [Текст] / В.В. Сергеев, А.Ю. Смолин, С.Ю. Коростелев, С.Г. Псахье. // Материалы XVII международной конференции по вычислительной механике и современным прикладным программным системам (ВМСППС’2011). – 2011. – с. 832.