6) Порівнюємо кути $\theta$ і виявляємо менший (для вибору схеми згущення) і повертаємося до пункту 2) .

Однак у проведених дослідженнях не була вирішена задача вибору необхідного коефіцієнта $p$. Вирішенню даного питання і будуть присвячені подальші дослідження.

**Висновки.** Згідно з проведеними дослідженнями було розв'язано задачу дискретного інтерполяції ДПК довільної конфігурації з заданими у вузлах дотичними при умові відсутності осциляції на основі розробленої адаптивної схеми локального згущення точкового ряду.

### ЛІТЕРАТУРА

1. Верещага В.М. Дискретно-параметрический метод геометрического моделирования кривых линий и поверхностей: Дисс. ... д-ра техн. наук: 05.01.01. – Мелитополь, 1996. – 320 с.
2. Верещага В.М. Формирование производных в узлах плоской дискретно представленной кривой // Мелитоп. ин-т механиз. с. хоз-ва. – Мелитополь, 1994. Деп. в ГНТБ Украины 22.02.1994, №337 – Ук 94.

Получено 13.03.2006 г.

УДК 681. 327.1

М.П. Осипов, С.И. Ротков

# ОПТИМИЗАЦИЯ РАБОТЫ АЛГОРИТМА ПРЯМОГО ПОСТРОЕНИЯ ТРИАНГУЛЯЦИИ ДЕЛОНЕ

**Постановка проблемы.** Триангуляцией называется планарный граф, все внутренние области которого являются треугольниками [2]. Построение триангуляции широко применяется в машиностроении, медицине, археологии, в области мультимедиа, в геоинформационных системах и т.д.

Поскольку задача построения триангуляции по набору точек является неоднозначной, необходимо выбрать из набора различных триангуляционных разбиений лучшее разбиение. В качестве оптимальной на практике обычно используют триангуляцию, удовлетворяющую теореме Делоне о пустом шаре [1]:



 ISSN 1562-9945

Система взаимосвязанных не перекрывающихся треугольников имеет наименьший периметр, если ни одна из вершин не попадает внутрь ни одной из окружностей, описанных вокруг образованных треугольников.

Треугольники, образовавшиеся при такой триангуляции, максимально приближаются к равносторонним. Оптимальность представленной триангуляции заключается в том, что метод предполагает формирование локально наиболее правильных треугольников.

На сегодняшний день, существует большое количество алгоритмов генерации триангуляционного разбиения, но стандартных процедур триангуляции не существует. Это обусловлено неустойчивостью этих алгоритмов и неудовлетворительным временем их работы на реальных наборах данных. Поэтому алгоритмы триангуляции интенсивно совершенствуются, и критериями их эффективности являются достоверность и быстродействие.

**Анализ последних исследований и публикаций.** В зависимости от используемого подхода алгоритмы построения триангуляции Делоне разделяются на четыре типа [2]:

1) алгоритмы слияния
2) итеративные алгоритмы
3) двухпроходные алгоритмы
4) алгоритм прямого построения

Из всех типов построения триангуляции Делоне лишь алгоритм прямого построения строит такие треугольники, которые удовлетворяют условию Делоне в конечной триангуляции и поэтому не должны перестраиваться. На практике, проверка на условие Делоне и последующее перестроение занимают довольно большую часть времени. Поэтому разработку алгоритма решено было делать на основе идеи прямого построения, не требующей перестройку триангуляции.

Алгоритм прямого построения работает путем постоянного наращивания к текущей триангуляции по одному треугольнику за шаг [3]. Вначале триангуляция состоит из одного ребра. На каждой итерации алгоритм ищет новый треугольник, удовлетворяющий условию Делоне, который подключается к границе текущей триангуляции. Иными словами, на каждой итерации происходит поиск очередной точки для текущего ребра, принадлежащего границе триангуляции, с целью образования нового треугольника. Поскольку для поиска следующей точки, необходимо производить перебор всех точек разбиения, общая трудоемкость алгоритма составляет $O(N^2)$ арифметических операций для $N$ точек. Использование клеточного пошагового алгоритма прямого построения, описанного в работе [2], позволяет сократить среднюю трудоёмкость алгоритма до $O(N)$ на ряде распространённых распределений. Для этого вся область разбивается на клетки и точки сортируются по клеткам. Общее количество клеток должно быть порядка $O(N)$. Использование данного подхода позволяет эффективно применять этот алгоритм на практике наравне с другими алгоритмами триангуляции, обладающими подобной трудоёмкостью (алгоритм динамического кэширования, алгоритм послойного сгущения, двухпроходный алгоритм невыпуклого полосового слияния, ленточный алгоритм) [4].

Дальнейшая оптимизация работы алгоритма состоит в сведении к минимуму времени работы и вычислительной сложности процедуры выбора следующей точки, формирующей новый треугольник. Выбор точки будет осуществляться из текущего набора точек. Текущий набор точек – это множество точек попавших в окрестность текущего ребра (“пузырь”). “Пузырь” это окружность, проходящая через концы текущего ребра, центр которой находится на серединном перпендикуляре к текущему ребру [3].

В традиционном алгоритме прямого построения поиск точки для текущего ребра осуществляется по следующему принципу:

Выбирается точка из текущего набора точек образующая с концами текущего ребра максимальный угол.

Количество основных операций, выполняемых методом для n точек текущего набора:

1. n * операция вычисления угла по трем точкам.
2. n * операция сравнения (выбор максимума).

Основные недостатки такого подхода:

1. Использование при определении угла тригонометрических функций, которые резко замедляют процесс
2. Последовательная обработка всех точек текущего набора.

В работе [5] был предложен другой метод выбора следующей точки. Работа метода основана на теореме Делоне о пустом шаре. Определяется точка из текущего набора образующая с текущим ребром треугольник, описанная окружность которого не содержит внутри се-

 ISSN 1562-9945

бя точек. Центры описанных окружностей для всех точек из текущего набора лежат на серединном перпендикуляре к текущему ребру. Пусть $C_5$ окружность, включающая в себя концы текущего ребра и не содержащая внутри себя точек. В ходе работы алгоритма в качестве $C_5$ удобнее всего взять окружность, описанную вокруг треугольника, включающего в себя текущее ребро (ABC на рис. 1). Тогда искомой будет являться точка, формирующая описанную окружность, центр которой имеет минимальное расстояние до центра окружности $C_5$ (точка $O_5$ на рис. 1).

Количество основных операций, выполняемых методом для n точек текущего набора:

1. n * операция вычисления центра описанной окружности;
2. n * операция вычисления расстояния;
3. n * операция сравнения (выбор минимума).

Работа данного метода имеет выигрыш в скорости по сравнению с классическим подходом, поскольку трудоемкая операция вычисления тригонометрических функций заменяется операцией определения центра описанной окружности. Основной недостаток данного подхода состоит в том, что для определения искомой точки необходимо обработать все точки текущего набора. То есть операцию вычисления центра описанной окружности необходимо применить ко всем точкам текущего набора.

**Формулировка целей статьи.** Целью работы является модификация классического алгоритма прямого построения для оптимизации его вычислительной сложности.

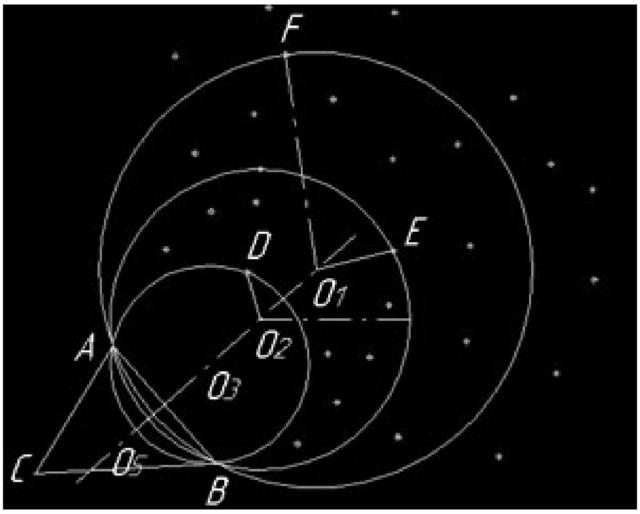


Рисунок 1 - Поиск следующей точки для текущего ребра

**Описание нового метода.** Для минимизации недостатков традиционных методов выбора следующей точки предлагается модифицированный подход, идея которого основана на пошаговом сужении набора текущих точек.

Пошаговый алгоритм поиска точки для текущего ребра с целью формирования нового треугольника:

1. Выбор очередной “точки-кандидата” из текущего набора точек (точки F, E, D на рис. 1).
2. Формирование окружности, проходящей через “точку-кандидат” и концы текущего ребра.
3. Проверка на попадание точек из текущего набора во внутрь данной окружности.
4. Если внутри этой окружности лежит хотя бы одна точка из текущего набора точек, то переход на шаг 5. Иначе переход на шаг 6.
5. Текущим набором точек являются точки, попавшие внутрь сформированной на шаге 2 окружности. Переход на шаг 1.
6. Текущая точка кандидат является искомой точкой.

Таким образом, искомой является точка из текущего набора, образующая с данным ребром треугольник, описанная окружность которого не имеет внутри себя точек. Построенный треугольник соответствует теореме Делоне о пустом шаре.

Критерием выбора очередной “точки-кандидата” на шаге 1 является минимальное расстояние до центра текущей окружности (отрезки $DO_1$ и $FO_2$ на рис. 1). Выбор такого критерия позволяет существенно сократить текущий набор точек без затрат на дополнительные вычисления, так как требуемое расстояние было найдено на шаге 3 при определении набора точек попавших в текущую окружность. В качестве другого критерия выбора “точки-кандидата” может быть использовано минимальное расстояние до центра текущего ребра. Исследования, проведённые на различных распределениях точек, показали, что в большинстве случаев трудоёмкость алгоритмов использующих данные критерии одинакова.

По ходу работы алгоритма с каждым очередным циклом происходит существенное уменьшение рассматриваемого набора точек. Это сделано, потому что любая точка, попавшая внутрь окружности, образует с текущим ребром треугольник, описанная окружность кото-

 ISSN 1562-9945

рого будет всегда лежать внутри текущей окружности (рис. 1). Следовательно, внутрь этой новой окружности не могут попасть точки не лежащие в текущей окружности. Поэтому рассматриваемый набор точек на попадание во внутрь новой окружности ограничивается набором точек попавших в окружность на предыдущем шаге. То есть, в случае попадания определённого количества точек внутрь описанной окружности, только эти точки становятся новым текущим набором. Тем самым с каждым шагом существенно сокращается область поиска. Общее количество основных операций, выполняемых модифицированным методом для n точек текущего набора $(n + m_1 + m_2 + ... + m_k) \cdot$[вычисление расстояния до центра описанной окружности + 2*операция сравнения] + k * [вычисление центра описанной окружности], де k – количество осуществляемых циклов выбора "точки-кандидата", $m_i$ – количество точек из текущего набора в i –ом цикле ($1<m_i<=n$, $i=1...k$; $m_1>m_2>m_3>...>m_k$).

Общее количество операций, выполняемых методом, описанным в работе [5] для n точек текущего набора:

n * *операция вычисления центра описанной окружности* + n * *операция вычисления расстояния* + n * *операция сравнения*

Исследования, проведенные на различных распределениях точек, показали, что в среднем количество циклов выбора "точки-кандидата" равняется трём (k=3). В тоже время, при больших наборах данных количество циклов резко снижается. Так, например, при количестве точек из текущего набора n = 7850 алгоритм работал всего семь циклов (k=7). Таким образом, при больших наборах данных, резко сокращается количество вычислений трудоёмкой операции, осуществляющей определение центра описанной окружности. Экспериментально установлено в среднем двукратное увеличение скорости работы представленного алгоритма по сравнению с традиционным, описанным в работе [5].

Преимущества модифицированного подхода:

- возможность определения искомой точки за один проход;
- постепенное сужение набора "точек-кандидатов".

**Выводы.** Приведенные модификации классического алгоритма прямого построения привели к резкому снижению вычислительных затрат, необходимых для его работы. Дальнейшая оптимизация алгоритма состоит в определении оптимального критерия выбора “точки-кандидата” из текущего набора точек.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Делоне Б. Н. О пустоте сферы / Б. Н. Делоне. – М.: ОМЕН, 1934. – С. 793-800.
2. Скворцов А. В. Триангуляция Делоне и ее применение / А. В. Скворцов. – Томск: Томский ун-т, 2002. – 128 с.
3. Романюк А. Алгоритмы триангуляции / А. Романюк, А. Сторчак// Компьютеры + Программы. – М.: Комиздат. – 2001. – № 1.
4. Скворцов А. В. Эффективные алгоритмы построения триангуляции Делоне / А. В. Скворцов, Ю. Л. Костюк // Геоинформатика. Теория и практика / Томский ун-т. – 1998. – № 1. – С. 22–47.
5. Ласло М. Вычислительная геометрия и компьютерная графика на С++ : Пер. с англ. — М. : БИНОМ, 1997. – 304 с.

Получено 15.03.2006 г.

УДК 515.2

M. Petryk, D. Mykhalyk

# MATHEMATICAL MODELING OF CONCENTRATION PROFILES IN HETEROGENEUS AND NANOPORES MEDIA

**Introduction.** The transport of molecules in the pore system of zeolites and other solids has been extensively studied by several authors (Barrer 1979, Kдrger and Ruthven 1992, Chen *et al*. 1994). When a bed of zeolite crystallites is considered, it can be assumed that molecular transport involves two important processes: diffusion in the macropores formed by the space between the crystallites (intercrystallite diffusion) and diffusion in the nanopores within the crystallites (intracrystallite diffusion). To determine the contribution of each of these processes to the overall diffusion process, one has to know the values of certain parameters, such as diffusion coefficients, the pressure in the gas phase, the dimensions of the crystallite bed, the adsorption isotherm, etc.