

自然邻点插值方法在材料状态方程数据库开发中的应用

曹渊^{1,2}, 郭永辉², 王铁良², 田宙²

1. 长安大学环境科学与工程学院, 西安 710054
2. 西北核技术研究所, 西安 710024

摘要 针对材料状态方程数据库数据量大、高度离散、分布极不规则的特点及其对插值方法的特殊要求,提出了基于自然邻点插值方法的开发方案。首先论述了基于 Delaunay 三角网和 Voronoi 图的自然邻点插值方法的基本原理,其次引入线性插值、Sibson 插值和 non-Sibsonian 插值 3 种插值函数并详细介绍了各自的函数形式和插值格式,然后采用该方法对材料状态方程数据库进行插值程序开发与数据库本身对比了插值效果,最后分析了 3 种插值函数的不同特性并实测了计算效率与耗时。大量分析对比显示,插值结果合理、计算效率较高,表明该方法能够很好地应用于材料状态方程数据库开发中。

关键词 自然邻点;插值;状态方程;数据库

中图分类号 O241.3

文献标识码 A

文章编号 1000-7857(2010)23-0072-05

Application of Natural Neighbor Interpolation Method to Development of Materials State Equation Database

CAO Yuan^{1,2}, GUO Yonghui², WANG Tieliang², TIAN Zhou²

1. College of Environmental Science and Engineering, Chang'an University, Xi'an 710054, China
2. Northwest Institute of Nuclear Technology, Xi'an 710024, China

Abstract In view of the great amount of data, and the highly dispersed and irregular distribution characteristics of the materials state equation database and the special requirements for an interpolation method, a development scheme based on the natural neighbor interpolation method is proposed. Firstly, the basic principles of the natural neighbor interpolation method based on Delaunay triangular mesh and Voronoi diagram are discussed. Secondly, three interpolation functions, the linear interpolation, the Sibson interpolation and the non-Sibsonian interpolation are analyzed together with their function forms and interpolation formats in detail. Thirdly, the materials state equation database is developed through interpolation programs by this method and the interpolation results are compared with the database itself. Lastly, various characteristics of three interpolation functions, the computational efficiency and the time cost are discussed. Analysis and comparison show that the interpolation results are reasonable and the interpolation computation is very efficient. So this method can well be applied to the development of the materials state equation database.

Keywords natural neighbor; interpolation; state equation; database

0 引言

强爆炸近区参数计算、辐射流体力学以及两相流数值模拟中,需要用到物质在高温、高压,超高温、超高压下的状态方程。材料状态方程数据库是一个存有多种类型数十种材料状态方程性质的数据库,其数据量巨大且在三维空间上高度

离散,分布极不规则(密度和温度等数据范围十分宽广,跨越数个量级),对插值算法的可靠性提出了很高的要求。

目前常用的插值方法大致分为有限元法和无单元法两类。有限元法包括 Lagrange 插值、Newton 插值、Hermite 插值、双三次插值、分段多项式插值等。有限元插值理论严密、原理

收稿日期:2010-10-25;修回日期:2010-11-14

作者简介:曹渊,助理研究员,研究方向为计算力学,电子信箱:guoyuan2003@163.com

明确,易于实现,但内在的网格限制了其在一些特殊问题上的应用。无单元法如滑动最小二乘法 (Moving Least Square, MLS)拟合概念明确、实现简便,总体拟合精度高,拟合结果也具有高次连续性,但其不具有严格的插值特性,同时其计算参数的确定受人为因素干扰较多,不利于推广应用^[1]。传统插值方法在处理数据点比较均匀或规则的数据场时能够取得良好的效果,但在处理数据复杂、分布极不规则、疏密程度差别很大的数据场时效果很不理想^[2]。自然邻点插值方法作为一种更先进的插值方法,能较好地解决节点分布不均的问题,并具有严格的插值特性,缺点在于对任意区域特别是任意三维区域,其拓扑结构的生成是比较复杂的,且计算量较大,但此问题随着计算机性能的不断得到相应解决^[3-5]。自然邻点插值法现在已广泛应用于科学计算可视化和计算流体力学等领域,在处理高度离散化分布的不规则点以及描述空间尺度上的剧烈变化方面效果较好。本文采用该方法进行状态方程数据库的插值程序开发。

1 方法原理

1.1 Delaunay 三角网和 Voronoi 图

自然邻点插值方法是一种基于 Voronoi 图的插值方法。Voronoi 图是一种非结构化网格,它所剖分的网格单元称为 Voronoi 单元。Voronoi 单元在任意 n 维空间的一般描述为:设 Ω 是任意维度空间 R^n 上的凸空间,令 Ω 内任意分布有限节点集 $\{x_i | x_i \in \Omega, i=1, \dots, M, \text{且 } i \neq j, \text{有 } x_i \neq x_j\}$,则对每个节点 x_i 均可定义一个子空间 T_i ,满足^[1]

$$T_i = \{x | d(x, x_i) < d(x, x_j), x \in \Omega, \forall j \neq i\} \quad (1)$$

其中, d 为两点间的距离, T_i 为节点 x_i 的 Voronoi 单元,表示距离 x_i 最近的离散点的空间点位置集合。在二维空间中, T_i 的形状为开放的多边形或闭合的凸多边形。所有 T_i 的边界线构成的几何拓扑结构称为 Voronoi 图,由相关的 2 个离散点的中垂线构成。给定节点集 $\{x_i\}$,便唯一确定了 Voronoi 图。在 Voronoi 图里,每一个原始节点的自然邻点即为与之具有共同边界的节点。

与 Voronoi 图等价的描述是 Delaunay 三角网,如图 1 所示,虚线所示为 Voronoi 图,实线所示为 Delaunay 三角网。

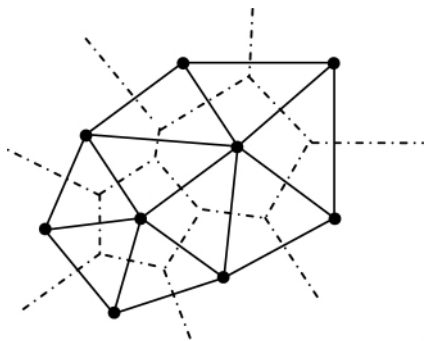


图 1 Voronoi 图和 Delaunay 三角网

Fig. 1 Voronoi diagram and Delaunay triangular mesh

Delaunay 三角网将有公共 Voronoi 结构边界的节点连接起来,从而将整体区域划分为三角形区域,这种三角划分最大程度地保持了均衡性,避免狭长三角形的出现,是最接近于规则化的三角划分。Voronoi 图与 Delaunay 三角网互为对偶关系,根据 Delaunay 三角网也可得其对应的 Voronoi 图。

1.2 插值基函数与插值格式

所谓自然邻点插值,就是根据每个节点的自然邻点对该节点的贡献率计算该节点的插值结果。本文引入线性插值、Sibson 插值、non-Sibsonian 插值 3 个插值基函数,其中后两者为非线性插值。

1.2.1 线性插值

设待插点坐标为 (a, b, c) ,其中 a, b 已知, c 待求。假定待插点所属 Delaunay 三角形的 3 个顶点坐标 (按顺时针方向) 分别为 $(a_0, b_0, c_0), (a_1, b_1, c_1), (a_2, b_2, c_2)$,令 $a_{02}=a_0-a_2, b_{02}=b_0-b_2, c_{02}=c_0-c_2, a_{12}=a_1-a_2, b_{12}=b_1-b_2, c_{12}=c_1-c_2$,则线性插值的插值基函数为

当 $b_{12} \neq 0$,有

$$w_0 = \frac{c_{02}b_{12} - c_{12}b_{02}}{a_{02}b_{12} - a_{12}b_{02}}, w_1 = \frac{c_{12} - w_0a_{12}}{b_{12}}, w_2 = c_2 - w_0a_2 - w_1b_2 \quad (2)$$

当 $b_{12} = 0$,有

$$w_1 = \frac{c_{02}a_{12} - c_{12}a_{02}}{b_{02}a_{12} - b_{12}a_{02}}, w_0 = \frac{c_{12} - w_1b_{12}}{a_{12}}, w_2 = c_2 - w_0a_2 - w_1b_2 \quad (3)$$

待插点的线性插值格式为

$$c = aw_0 + bw_1 + w_2 \quad (4)$$

1.2.2 非线性插值

Sibson 插值需要用到 2 阶 Voronoi 单元的概念。二维情况下,在给定数据点集及其 1 阶 Voronoi 图的基础上,新插入点 x ,可以得到与 x 对应的 1 阶 Voronoi 单元 T_x 。 T_x 与插入 x 之前的原 Voronoi 图各单元的重叠部分即为 2 阶 Voronoi 单元,定义如下^[1]:

$$T_{ij} = \{x | d(x, x_i) < d(x, x_j) < d(x, x_k), x \in \Omega, \forall k \neq i, j\} \quad (5)$$

几何上, T_{ij} 是那些以 x_i 为最近点、以 x_j 为第二近点的空间点位置的集合。图 2 中 x 点的自然邻点为 x_1, x_2, x_3, x_4 ,多边形 $ABCD$ 即为 1 阶 Voronoi 单元 T_x ,显然 T_x 由 2 阶 Voronoi 单元 $T_{x1}, T_{x2}, T_{x3}, T_{x4}$ 组成。此定义可推广到任意维度的空间。

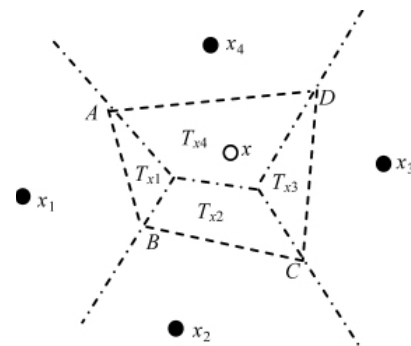


图 2 2 阶 Voronoi 图示意图

Fig. 2 Illustration for the 2nd order Voronoi diagram

Sibson 插值利用 2 阶 Voronoi 单元的面积定量衡量点 x 与自然邻点的相互关系,并形成数值关系^[1]:

$$\phi_i(x) = \frac{A_i(x)}{A(x)} \quad (6)$$

其中, $A_i(x)$ 为 2 阶 Voronoi 单元 T_{x_i} 的面积, $A(x)$ 为 1 阶 Voronoi 单元 T_x 的面积,即 T_{x_i} 的总和。式(6)给出了利用自然邻点表示空间点的局部坐标系,称为 Sibson 坐标,同时给出了以自然邻点为插值基点对点 x 进行插值运算时插值基函数的取值方法。

non-Sibsonian 插值,又称 Laplace 插值,该方法无需显式地建立 2 阶 Voronoi 图,直接利用点 x 的 1 阶 Voronoi 单元进行计算,其插值基函数为^[6-7]

$$\phi_i(x) = \frac{\alpha_i(x)}{\sum_j \alpha_j(x)} \quad \alpha_j(x) = \frac{s_j(x)}{h_j(x)} \quad (7)$$

其中, $s_j(x)$ 为点 x 的 Voronoi 单元中对应于自然邻点 j 的边长, $h_j(x)$ 为点 x 到自然邻点 j 距离的 1/2,见图 3。

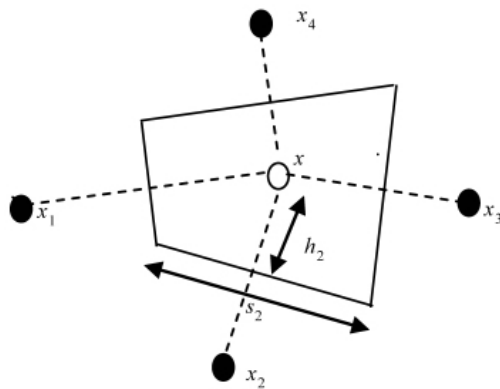


图 3 Non-Sibsonian 计算示意图

Fig. 3 Illustration for non-Sibsonian calculation

Sibson 插值和 non-Sibsonian 插值的格式如下^[8]:

$$f(x) = \sum_{i=1}^p \phi_i(x) f_i \quad (x \in \Omega) \quad (8)$$

其中, p 为 x 的自然邻点总数, i 是点 x 的自然邻点序号, $f(x)$ 是新插入点 x 的待求物理量值, f_i 是 x 的第 i 个自然邻点的对应物理量值, $\phi_i(x)$ 是 x 的第 i 个自然邻点的插值基函数。

自然邻点插值主要取决于待插点附近区域的自然邻点,为一种局部插值方法,其插值基函数在除已知离散点外的区域处处连续且无穷次可微,因此对于分布高度不规则的样本数据,该方法插值效果良好^[9]。

2 实现过程

程序设计:在 Develop Studio 环境中进行混合编程,插值子程序由 C 语言编制,然后利用 Compaq Visual Fortran 平台开发相应的控制程序和输入输出接口,以便与流体力学程序连用。

线性插值计算步骤:构建样本点 Delaunay 三角网格,寻找待插点所属的 Delaunay 三角形,记录该三角形的 3 个顶点坐标;根据式(2)或式(3)计算 3 个线性权重(权重即插值基函数的函数值);根据式(4)计算插值结果。

Sibson 插值计算步骤:构建样本点 Delaunay 三角网格,构建 1 阶、2 阶 Voronoi 图并记录其拓扑关系,寻找待插点的所有自然邻点;根据式(6)计算 Sibson 插值权重,比较每个自然邻点的权重与最小允许权重的关系,最小允许权重一般设为 0,也可以设为负值或负无穷小,最小允许权重设为 0 表示禁止外推,设为负值表示可以适当外推,设为负无穷小表示可以无限外推,如果小于最小允许权重,则舍去该邻点的贡献;根据式(8)计算插值结果。

non-Sibsonian 插值计算步骤:构建样本点 Delaunay 三角网,构建 1 阶 Voronoi 图并记录其拓扑关系,寻找待插点的所有自然邻点;根据式(7)计算 non-Sibsonian 插值权重,比较每个自然邻点的权重与最小允许权重的关系,如果小于最小允许权重,则舍去该邻点的贡献;根据式(8)计算插值结果。

插值子程序计算流程如图 4 所示。

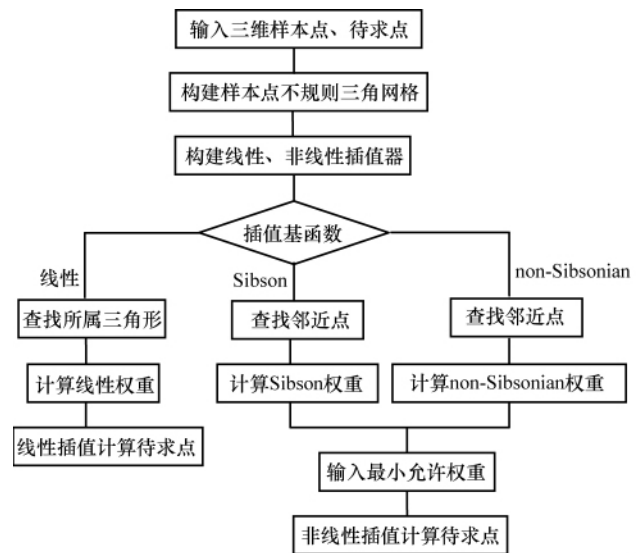


图 4 自然邻点插值子程序计算流程

Fig. 4 Calculation flow chart of natural neighbor interpolation subroutine

3 实际应用与讨论

将程序模拟结果与材料状态方程数据库本身以及其他方法^[10]进行比对,确保插值效果的可靠性。以空气材料和铀材料为例,随机抽取流体力学计算中间过程的一些数据,比较数据插值效果如图 5~图 8 所示。其中图 5、图 6 分别为密度一定、压强及温度插值效果对比;图 7、图 8 分别为温度一定、压强及能量插值效果对比。自变量和因变量范围在几个量级,插值结果仍与样本数据吻合很好。

若样本点数据采用的单位制不同,对插值结果造成的误

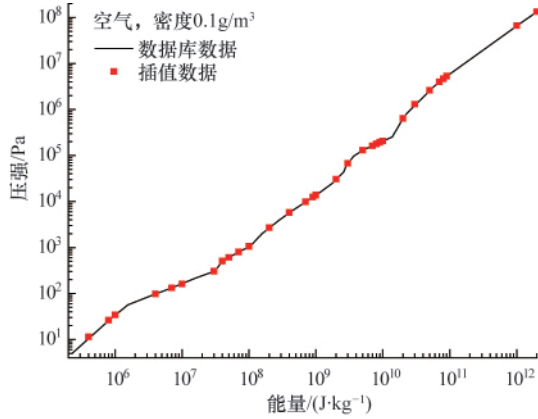


图 5 压强插值效果与数据库本身的比较

Fig. 5 A comparison of the pressure interpolation effect with database itself at fixed density

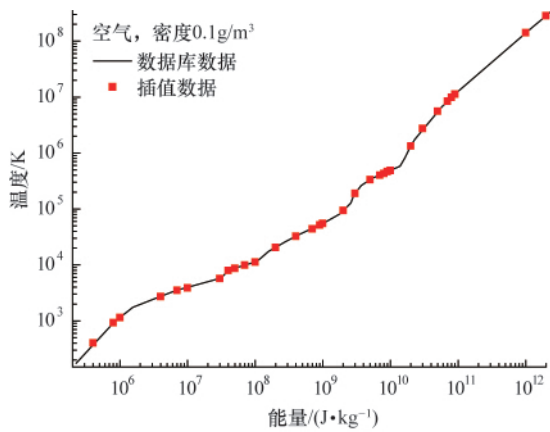


图 6 温度插值效果与数据库本身的比较

Fig. 6 A comparison of the temperature interpolation effect with database itself at fixed density

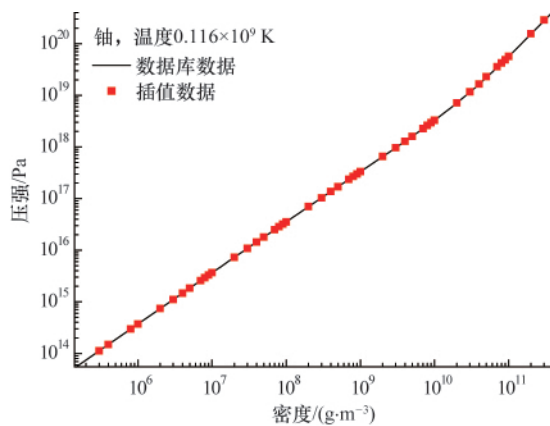


图 7 压强插值效果与数据库本身的比较

Fig. 7 A comparison of the pressure interpolation effect with database itself at fixed temperature

差不同。大量的数据比较证明,采用单位制 B 可以保证大部分样本数据在量级上比较接近,从而控制网格的畸形程度,

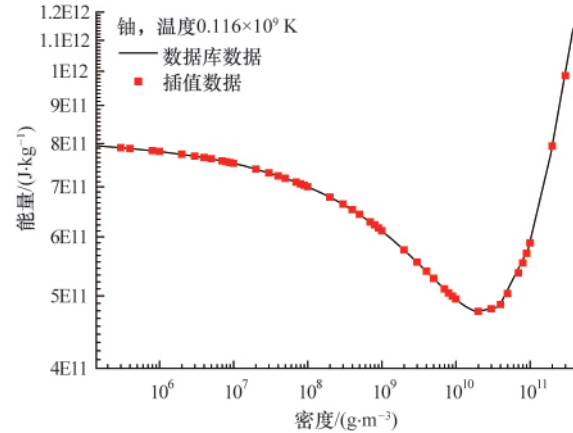


图 8 能量插值效果与数据库本身的比较

Fig. 8 A comparison of the energy interpolation effect with database itself at fixed temperature

提高插值精度,减小插值误差。3套单位制如表 1 所示。

表 1 3套单位制

Table 1 Three systems of units

	密度	能量	压强	温度
国际单位制	$1 \times 10^3 \text{g/m}^3$	J/kg	Pa	K
单位制 A	$1 \times 10^6 \text{g/m}^3$	$1 \times 10^6 \text{J/kg}$	$1 \times 10^9 \text{Pa}$	K
单位制 B	$1 \times 10^6 \text{g/m}^3$	$1 \times 10^8 \text{J/kg}$	$1 \times 10^{11} \text{Pa}$	$1 \times 10^6 \text{K}$

对当前材料状态方程数据库,采用自然邻点方法的 3 种不同插值基函数的插值效果比较:线性插值内插最准确,但不适合过度外推。Sibson 插值和 non-Sibsonian 插值,当其最小允许权重为 0,即禁止外推时,效果仅次于线性插值;在最小允许权重为负值或无穷小时,某些点可能会插出不合理值。最小允许权重的大小决定了插值的可靠程度,设置的最小允许权重越小,外推得到结果的可能性越大,但可信度越低。Sibson 插值和 non-Sibsonian 插值都是非线性插值,其区别在于计算权重的方法不同,在最小允许权重相同的情况下,插值结果相近。线性插值基函数对材料状态方程数据库插值最准确,说明该库中的样本数据本身比较符合线性规律。

插值效率与耗时:经过实际验证,采用自然邻点插值方法的线性插值函数对同一种材料插值 1×10^6 个点,耗时约 3s (测试用计算机: Intel (R) Core (TM), 2 CPU 1.86GHz, 内存 1.00GB),效率非常高。

4 结论

通过引入自然邻点插值方法,解决了材料状态方程数据库的插值问题。大量实例证明,新开发系统插值效果较好,并且效率很高,进而验证了自然邻点插值方法在处理大样本量、高度离散、不规则以及空间尺度上剧烈变化的数据时具

有良好效果。本系统的开发有利于充分发挥材料状态方程数据库在流体力学计算中的作用。

参考文献 (References)

- [1] 周小平, 周瑞忠. 用 Voronoi 图进行新型自然邻居插值的几何学方法与特性[J]. 计算力学学报, 2005, 22(3): 355-359.
Zhou Xiaoping, Zhou Ruizhong. *Chinese Journal of Computational Mechanics*, 2005, 22(3): 355-359.
- [2] 朱怀球, 吴江航. 基于 $C-\infty$ 基函数的自然邻点插值方法 (NNI) 在科学计算可视化上的应用[J]. 计算机工程与应用, 2001, 37(1): 1-3.
Zhu Huaiqiu, Wu Jianghang. *Compute Engineering and Applications*, 2001, 37(1): 1-3.
- [3] Sukumar N, Moran B, Semenov A Yu, et al. Natural Neighbour Galerkin Methods [J]. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 2001, 50(1): 1-27.
- [4] Cueto E, Sukumar N, Calvo B, et al. Overview and recent advances in natural neighbor Galerkin methods [J]. *Archives of Computational Methods in Engineering*, 2003, 10(4): 307-384.
- [5] Sibson R. A brief description of natural neighbor interpolation[M]//Barnet V. *Interpreting Multivariate Data*. Chichester, New York: Wiley, 1981: 21-36.
- [6] 蔡永昌, 朱合华. 基于局部搜索算法的自然邻接点方法 [J]. 力学学报, 2004, 36(5): 623-628.
Cai Yongchang, Zhu Hehua. *Acta Mechanica Sinica*, 2004, 36 (5): 623-628.
- [7] Belikov V V, Ivanov V D, Kontorovich V K, et al. The non-Sibsonian interpolation: A new method of interpolation of the values of a function on an arbitrary set of points [J]. *Computational Mathematics and Mathematical Physics*, 1997, 37(1): 9-15.
- [8] 谢经平, 朱怀球, 吴泰然. 基于 Voronoi Cells 的自然邻点插值法在地形可视化中的应用[J]. 遥感信息, 2002(1): 15-18.
Xie Jingping, Zhu Huaiqiu, Wu Tairan. *Remote Information*, 2002 (1): 15-18.
- [9] 高洋, 张健. 基于自然邻点插值的数据处理方法 [J]. 中国科学院研究生学报, 2005, 22(3): 346-347.
Gao Yang, Zhang Jian. *Journal of the Graduate School of the Chinese Academy of Sciences*, 2005, 22(3): 346-347.
- [10] 唐鸽, 江少恩, 巫顺超, 等. 用 Hugoniot 数据计算高压状态方程[J]. 强激光与粒子束, 2009, 21(11): 1737-1740.
Tang Ge, Jiang Shaoen, Wu Shunchao, et al. *High Power Laser and Particles Beams*, 2009, 21(11): 1737-1740.

(责任编辑 刘志远)

·学术动态·



“2011 年国际电气电子工程师学会服务、运筹、物流与信息化国际会议(SOLI'2011)”征文

由国际电气电子工程师学会智能交通系统委员会(IEEE ITSS)主办,中国科学院自动化研究所承办的“2011 年国际电气电子工程师学会服务、运筹、物流与信息化国际会议(SOLI'2011)”将于 2011 年 7 月 10—12 日在北京召开。

会议旨在为服务科学、服务运筹、物流和信息化领域的研究者提供交流机会,探讨该领域的研究问题、挑战和未来的发展方向,分享他们的研发成果和经验。

征文范围:1)服务设计、工程、运营和创新(服务规划和设计,服务过程工程,快件服务和快速物流,医疗保健系统,金融服务,零售及服务管理,质量和客户满意度,指标和基准,安全及与安全有关的服务和管理,应急规划,运筹学,生产工程,智能交通,工程咨询,交通规划,综合运输,服务业务);2)物流及供应链管理(按需投递,物流规划,货运代理和报关,会场物流管理,仓储和配送,交通管理系统,逆向物流,物流可视性和控制,采购,供应链协作,供应链过程,物流网络);3)物质流科学和技术(物质流基本科学,综合物质流理论,自然世界的物质流,社会世界的物质流,经济世界的物质流,物质流元理论,物质流性质,物质流工程,物质流产业,物质流技术经济,循环物质流系统,X 方物质流,物质流的复杂性和涌现,物质流信息与仿真技术,物质流系统和网络,物质流的财政措施);4)服务/事件管理与制造(需求预测,客户关系管理,事件通信和报警,服务培训,服务维持,服务质量,服务捆绑,电子商务服务市场,事件管理系统,活动赞助,基于事件的生产 and 供应链,基于事件的产品和制造业,智能制造,个性化);5)信息通信技术和系统(ICTS 服务设计和管理,ICTS 服务标准、定位、组成和捆绑,过程建模,扩大和自动化,实时识别与跟踪,物流的普适计算,决策支持系统,基于代理的软件系统,RFID,数据仓库和数据/网页挖掘,商业智能,系统互操作性和集成性,信息安全,IT 项目管理,建设项目的信息管理);6)电子商务与知识管理(无线通信和移动商务,移动服务,电子政府,信息资源管理,IT 和企业创新管理,IT 和可持续发展企业战略,符号学,企业绩效管理,客户关系管理,信息经济学,网络文化与和谐社会,分布式计算,传感网络)。

征文截止时间:2011 年 3 月 13 日。

会议网站:<http://www.ieeeves.org>。