

基于边追踪算法的 3D 球的欧式 Voronoi 图生成和显示

朱勇 张砚 陈韬

摘要

本次计算几何实验实现了三维空间中不同大小的球之间的欧几里得距离 Voronoi 图的计算和显示, 通过实现文献[1]中追踪 Voronoi 边的算法, 能够在最坏情况下 $O(mn)$ 的时间复杂度下完成对 Voronoi 图的构建, 其中 m 为 Voronoi 边的数量, n 为三维空间中球的个数。另外, 由于三维空间中不同大小的球之间的欧几里得距离 Voronoi 图的边为曲线, Voronoi 面为曲面, 本实验将 Voronoi 图的边表示成有理二次 Bezier 曲线, 并且用 OpenGL 实现了二次曲面的显示。

一、 介绍

自从俄国数学家 G. Voronoi 定义 Voronoi 图之后, Voronoi 图就成为了包括计算几何学在内的多门自然科学、工程学的重要课题。对通常的二维点集的 Voronoi 图算法的研究已经非常成熟, 但是对于二维圆的 Voronoi 图和三维球的 Voronoi 图的研究还非常少, 尽管他们在自然科学和工程学中有许多很有意义的应用。对于二维圆的 Voronoi 图和三维球的 Voronoi 图的研究通常集中在对加权 Voronoi 图如 Power Diagram 上[2], 这种 Voronoi 图的是由直线和平面构成的, 所以它的构成和可视化比本实验中的欧氏 Voronoi 图要简单。

Voronoi 图在各门科学中有极大的应用空间。在生物信息学中, 可以用来计算分子的表面积, 参考分子表面积的定义, 考虑一个探测球在分子表面的原子间运动, 因为 Voronoi 图上的点与距离最近的原子表面距离相等, 所以对于给定探测球半径 R , 其同时和两个以上原子相切时的轨迹必然在 Voronoi 图上, 所以我们可以的到探测球运动的轨迹, 从而进一步计算分子的表面积。[3][4]

与其他类型的 Voronoi 图或 Power Diagram 不同, 三维球的欧氏 Voronoi 图只有少量前人的工作 Deok-Soo Kim 等在文献[1]中提出了一种计算三维球的欧氏 Voronoi 图的算法。该文献讨论了三维球的欧氏 Voronoi 图的一些属性, 并且提出了一种基于边追踪的 Voronoi 图构建算法, 描述了如何能正确而有效的追踪 Voronoi 图的边并且讨论了如何解析的表示 Voronoi 图的边和面, 并提出了一些实验结果。

图 1 和图 2 分别表示了二维圆的 Voronoi 图和三维球的 Voronoi 图。

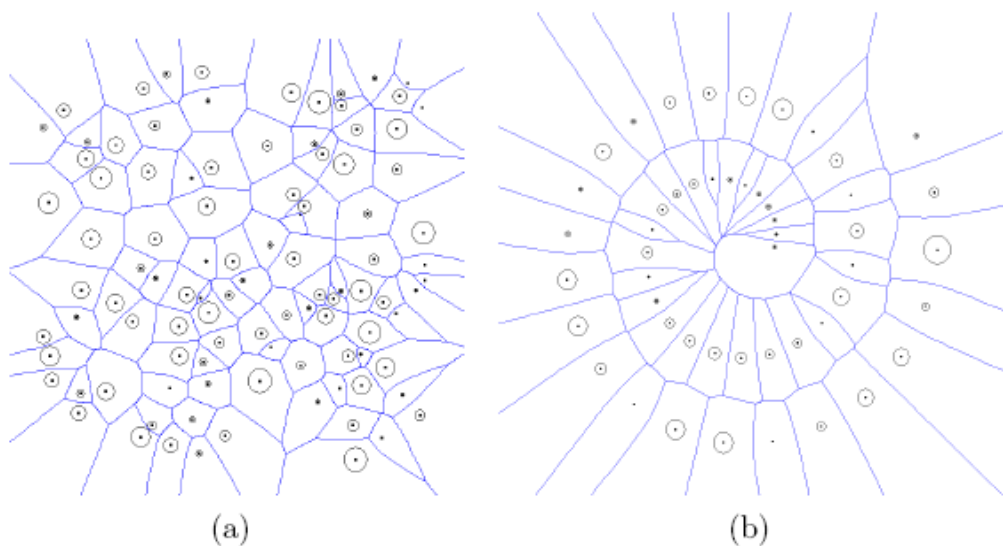


图 1 二维圆的欧式 Voronoi 图 (a) random circles, and (b) circles on a spiral

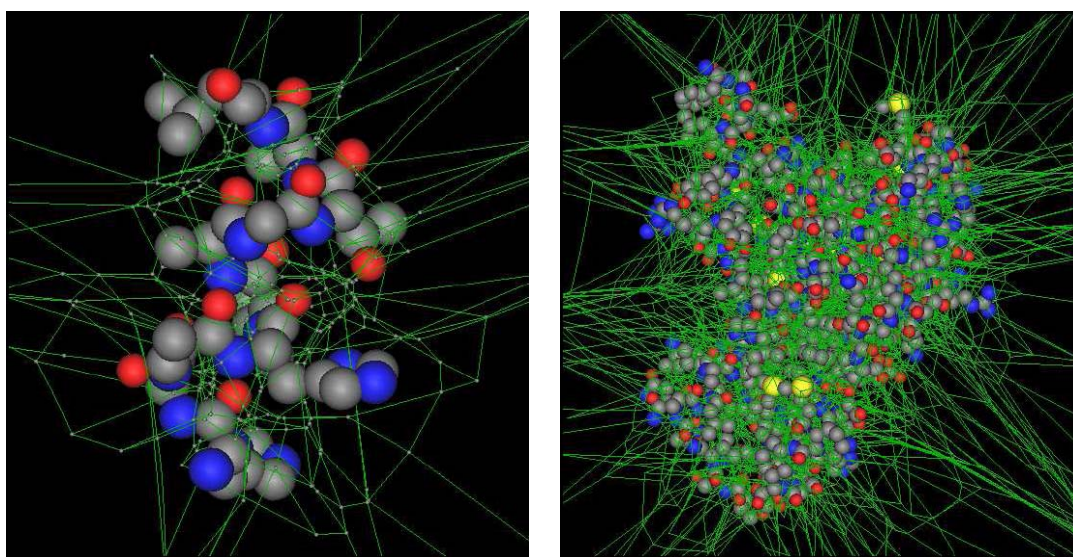


图2 三维球的欧式Voronoi图(S): (a) an α -helix consisting of 67 atoms, and (b) PDB ID 1BH8 consisting of 1,074 atoms (680 C's, 181 N's, 203 O's, and 10 S's).

其中，图 2 表示了 Voronoi 图在原子结构中的应用。

文实验报告由如下几个部分组成：第二节介绍本实验报告中用到的一些术语和符号，第三节分析 Voronoi 图结构的基本单元如点、线、面以及他们的计算公式，第四节在第三节的基础上描述了本实验报告中实现 Voronoi 图的算法，最后介绍了一些今后的工作，如何将 voronoi 图应用到分子表面积计算。

二、 文中一些术语和符号

在本实验报告中，将用 $B = \{b_1, b_2, \dots, b_n\}$ 来表示空间中三维球的集合， $b_i = (c_i, r_i)$ ，其中 $c_i = (x_i, y_i, z_i)$ 为第 i 个球的球心， r_i 为第 i 个球的半径。我们认为没有一个球完全包含在另一个球中，但是可以允许两个球相交。也就是说，我们将不会计算球之内的 Voronoi 图。对于任何一个球 b_i ，它都有一个 Voronoi 区域 VR_i ，满足

$$VR_i = \{p \mid \text{dist}(p, c_i) - r_i \leq \text{dist}(p, c_j) - r_j, i \neq j\}$$

这样， $EVD(B) = \{VR_1, VR_2, \dots, VR_n\}$ 就叫做 B 的欧式 Voronoi 图。在本实验中，Voronoi 图的拓扑结构表示成 $G = (V; E)$ ，其中 $V = \{v_1; v_2; \dots\}$, $E = \{e_1; e_2; \dots\}$ 分别为 Voronoi 顶点和边的集合。得到 G 后，我们就可以计算 Voronoi 面的集合 $F = \{f_1; f_2; \dots\}$ 。在本实验中，我们用通常的 L2 测度来代表欧式距离，即

$$\text{dist}(c_i, c_j) = \sqrt{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 + (z_i - z_j)^2}.$$

通常情况下，Voronoi 图的顶点为集合 B 中的几（通常为 4）个球的内切球的球心。而 Voronoi 图的边也是由集合 B 中的几（通常为 3）个球共同决定的。假设有一条边 e ，那么如果它不延伸到无穷远，它将由两个 Voronoi 顶点构成起点和终点，设他们分别是 v_s 和 v_e 。通常情况下，夹成 e 的三个球叫做 e 的 gate balls，而 v_s 是 gate balls 和另一个球 b_s 的内切球的球心，同样 v_e 是 gate balls 和另一个球 b_e 的内切球的球心。注意这里的 b_s 和 b_e 在某种特殊情况下可能是同一个球，这种情况会在后面讨论。图 3 三维欧式 Voronoi 图在二维上的一个示意图。

本实验中另一个很重要的定义是角距离 θ 。它是如下定义的：给定三个 gate balls，不妨设最小的球为 b_{g1} ，那么起点 v_s 到点 p 的角距离就定义为 $\angle v_s c_{g1} p$ ，其中 c_{g1} 为 b_{g1} 的圆心。注意角距离的是有方向的，它的正方向由边 e 的方向确定，所以 $0 < \theta < 2\pi$ 。在图 3 中，有很多球可以与起点 v_s 定义角距离，我们称形成的角距离最小的那个球是离起点 v_s 最近的。

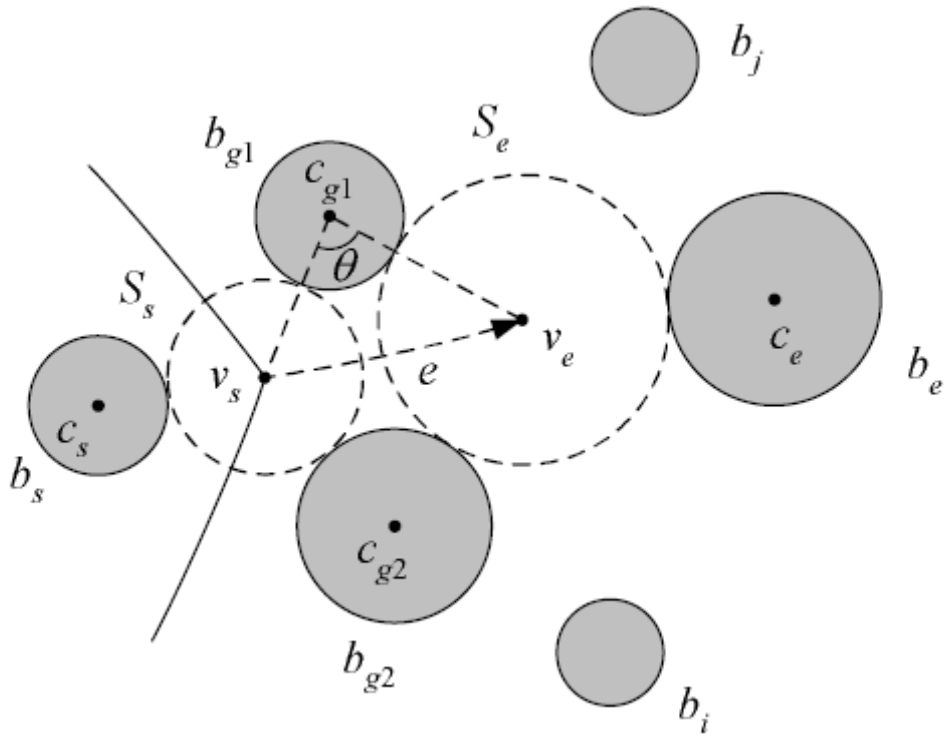


图3 欧式 Voronoi 图及一些符号表示

三、基本几何结构

在平面 Voronoi 图的计算中，通常将计算 Voronoi 顶点坐标和 Voronoi 边的公式分开进行，我们将这一方法拓展到三维。在三维中，Voronoi 图不但有顶点和边，还有面这一几何结构。在构造 Voronoi 图的拓扑结构时，计算顶点是不可避免的，但是当有了顶点以及他们之间的连接信息后，Voronoi 图的拓扑结构已经生成，所以边和面的具体计算表达式不是必需的，只需要在显示 Voronoi 图的时候得到即可。这使得分别计算它们成为可能。

3.1. 顶点的计算

由 Voronoi 图的定义，在非退化情况下，Voronoi 顶点是由它周围的 4 个球夹成的内切球的球心，且这个内切球不与集合 B 中的其余的球相交。这样一个内切球的计算在文献[]中有很好的算法如下。

假设 b_1, \dots, b_4 为组成一个 Voronoi 顶点 v 的四个球，不妨设 b_4 为最小的球，那么我们可以将四个球的半径都减小 r_4 ，这样， b_4 就缩小成一个点。我们以该点为坐标原点，设内切球的球心位置为 (x, y, z) ，半径为 r ，其余三个缩小后的球相对原点圆心坐标为 (x_i, y_i, z_i) ，半径为 r_i ，那么 x, y, z, r 满足以下公式：

$$(x - x_1)^2 + (y - y_1)^2 + (z - z_1)^2 = (r + r_1)^2 \quad (1)$$

$$(x - x_2)^2 + (y - y_2)^2 + (z - z_2)^2 = (r + r_2)^2 \quad (2)$$

$$(x - x_3)^2 + (y - y_3)^2 + (z - z_3)^2 = (r + r_3)^2 \quad (3)$$

$$x^2 + y^2 + z^2 = r^2. \quad (4)$$

简化后，前三个方程可以表示成关于 r 的线性方程，那么可以用待定系数法将 x, y, z 表示成 r 的一次函数，再将它们带入第四个等式，可解出 r ，从而得到 x, y, z 的值。再通过最小球的球心坐标和半径，可以得到内切球在原坐标系下的球心和半径。

通过分析以上四个方程可知，最终的解有四种情况：

- (1) 无解。这说明四个球没有内切球，比如说四个球在一条直线上且半径相等，这是一种退化情况，本实验暂时不考虑这一情况。
- (2) 一个解。这是一个最通常的情况。四个球形成一个内切球。
- (3) 两个解。这说明四个球形成两个顶点，这是三维球的 Voronoi 图与三维点的 Voronoi 图的一大区别。这也是第二节中提到的一种情况——一个边的起点和终点都是由相同的四个球决定的——生成的原因，在后面算法部分我们会进一步分析。
- (4) 无穷多解。这也是一个退化情况，这样就是 5 个或 5 个以上球决定一个顶点，本实验也不考虑这一情况。

本实验通过实现以上算法方法求解了 Voronoi 顶点的坐标。

3.2. 边的计算

当拓扑结构 $G = (V, E)$ 构建好后，为了显示 Voronoi 图，我们需要把边的参数表达式求出来。一般情况下边是由三个球决定的，我们采用和计算顶点相同的方法计算边，将最小的球缩成一个点，便能得到下面的方程：

$$(x - x_1)^2 + (y - y_1)^2 + (z - z_1)^2 = (r + r_1)^2 \quad (5)$$

$$(x - x_2)^2 + (y - y_2)^2 + (z - z_2)^2 = (r + r_2)^2 \quad (6)$$

$$x^2 + y^2 + z^2 = r^2, \quad (7)$$

通过对这三个方程分析可以得知，这条边是一个平面与一个二次曲面的交，那么这条边就在一个平面上，而且是一段二次曲线，一段二次曲线可以由一条有理二次 Bezier 曲线来参数化：

$$\beta(t) = \frac{w_0(1-t)^2 p_0 + 2w_1(1-t)t p_1 + w_2 t^2 p_2}{w_0(1-t)^2 + 2w_1(1-t)t + w_2 t^2}, \quad t \in [0, 1],$$

其中, $w_0=w_2=1$, p_0 和 p_2 是边的起点和终点, 这个信息是在拓扑结构 $G=(V, E)$ 中的。 p_1 是从 p_0 和 p_2 点出发, 分别沿这两点上曲线的切线方向的延长线的交点。 w_1 可以由曲线上任意一个另外的点计算出来。也就是说, 我们只要知道曲线段上起点和终点处的切矢, 再加上曲线上任意一点的坐标就可以参数化这条曲线段, 从而将它离散化, 显示到屏幕上。

由于Voronoi边的性质, 它上面任意点的切向, 与这一点连到三个gate balls的向量所成角度必两两相等, 这样就能求出起点和终点处的切矢; 而曲线上任意一点, 可以通过计算三个gate balls所在的平面上, 曲线经过的点来获得, 计算时相当于将求Voronoi顶点的算法降到二维上, 求三个圆的内切圆, 注意也会出现两个解的情况, 处理时要格外注意, 如图4所示。

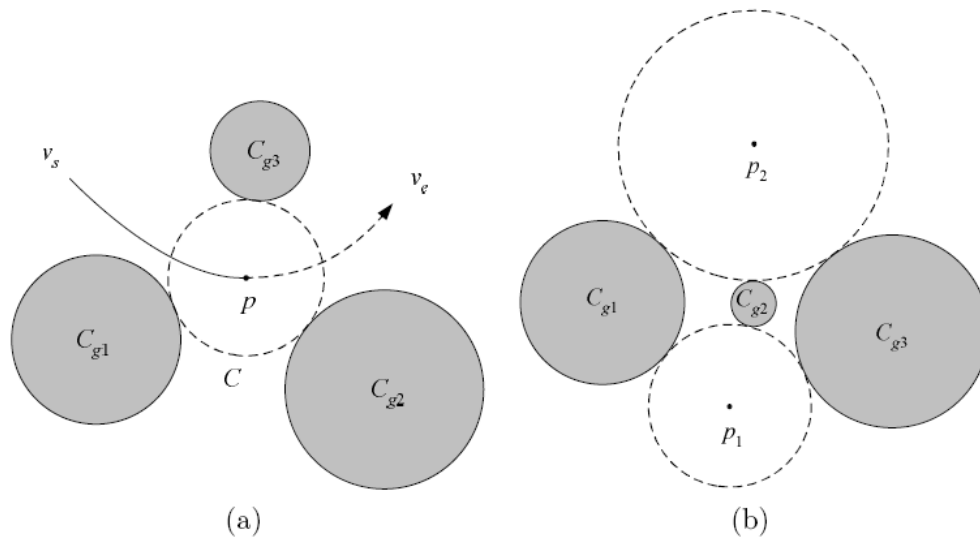


图4 求解Voronoi边上一点 (a)一个内切圆 (b)两个内切圆

求得过曲线上的点后, w_1 由如下公式获得:

$$w_1 = \frac{\tau_1}{2\sqrt{\tau_0\tau_2}},$$

其中 τ_0, τ_1 , and τ_2 为该点在三角形(p_0, p_1, p_2)内的重心坐标。可以通过判断这一坐标来确定该点是否在曲线段内, 如果不在, 上面求得的 w_1 还需要反号。这样, 我们得到了边的绘制方法。如果一条边发射到无穷远, 我们在该方向上加入一个虚拟的终点, 这样不但能绘制发射到无穷远的边, 还方便了后面绘制发射到无穷远的面。

3.3. 面的计算

每个面是由构成边的任意两个球决定的, 所以遍历一下得到的边就可以生成所有的面。由于不同大小的球之间是曲面, 所以要显示面必须将它均匀三角剖分。直接进行剖分是很难的, 好在我们可以利用Voronoi面的一些性质。

决定Voronoi面的两个球已知, 我们可以将坐标变换成图5的位置, 以两个球

心的中点为原点，原点到较小球球心的方向为z方向。

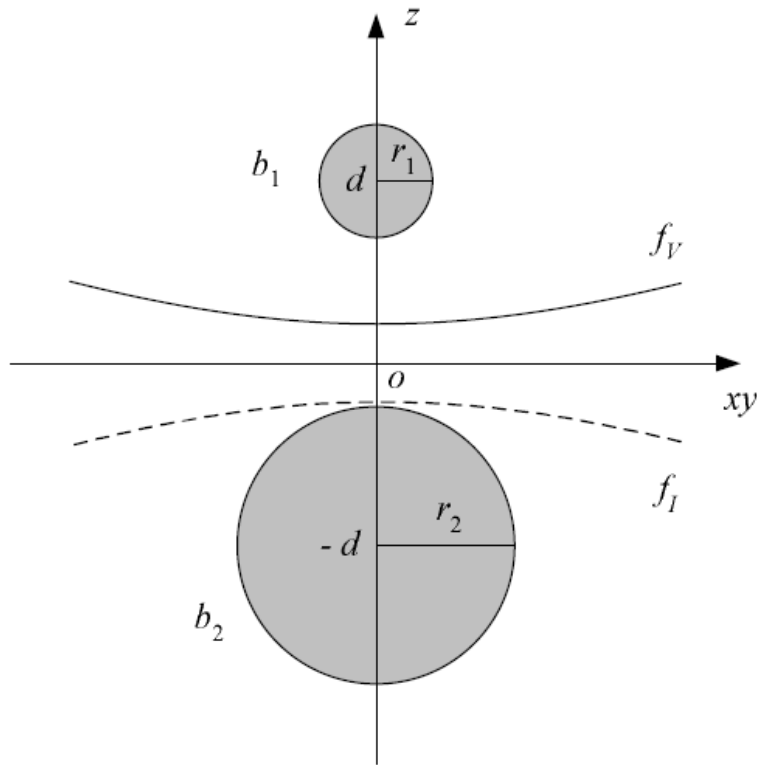


图5 才的Voronoi面

我们称这一坐标系为两个球的标准位置。这样，给定xy平面上任意一点，我们就可以求得它的高度：

$$z = \pm \frac{2r \sqrt{(-r^2 + 4d^2)(4x^2 + 4y^2 + 4d^2 - r^2)}}{-4r^2 + 16d^2},$$

当z取非负值时，为我们所要的点。Voronoi面是由Voronoi边围成的，所以要绘制这个面必须知道它是由那些边围成。本实验用了以下方法。首先，在生成面时有一条边，以它为起始边，向终点方向找下一条边。在我们的数据结构中，边纪录了起点和终点，以及决定它的三个球。顶点纪录了发出去的4条边，以及决定它的四个球。所以很容易得到终点发出去的边中，哪条边和起始边在同一个面上，只要探测决定它的三个球即可。这样一条条边找下去，如果没有延伸到无穷远的情况，必然会回到起始边。如果有无穷远边，即射线边，那么我们再从起始边的起点出发，相反方向找下一条边，这样也必然能找到一个射线边，我们只要将两个射线边的虚拟终点用直线连起来就可以了。这样我们就找到了所有围成面的边。

找到边之后，由于我们用有理Bezier曲线表示每条边，跟据Bezier曲线的仿射变换性质，我们只需要将其控制顶点变换到面的标准位置的坐标系下，整条曲线

就变换过去了，这也是我们采取Bezier曲线的另一个好处。为了做三角剖分，我们可以将围成面的曲线的控制顶点都投射到标准位置下的xy平面，这样曲线也就都投射到该平面了，然后将曲线离散化，得到一个非凸的多边形，应用均匀采样现在多边形内部加入采样点，然后应用CGAL中的二维受限区域三角剖分算法，将xy平面上的非凸的多边形三角剖分，再根据以上求高度的公式，将xy平面上的每个点拔高，就得到了曲面的三角网格，最后就可以用OpenGL等工具绘制了。

四、用边追踪的算法构建Voronoi图

要获得Voronoi图的表示，必须设计一种算法先得到它的拓扑结构，本实验采用边追踪的算法，先找到第一个Voronoi顶点，然后计算它发出去的四条边的终点，每个终点又发射出新的三条边，直到最后形成整个Voronoi图。

4.1. 初始化

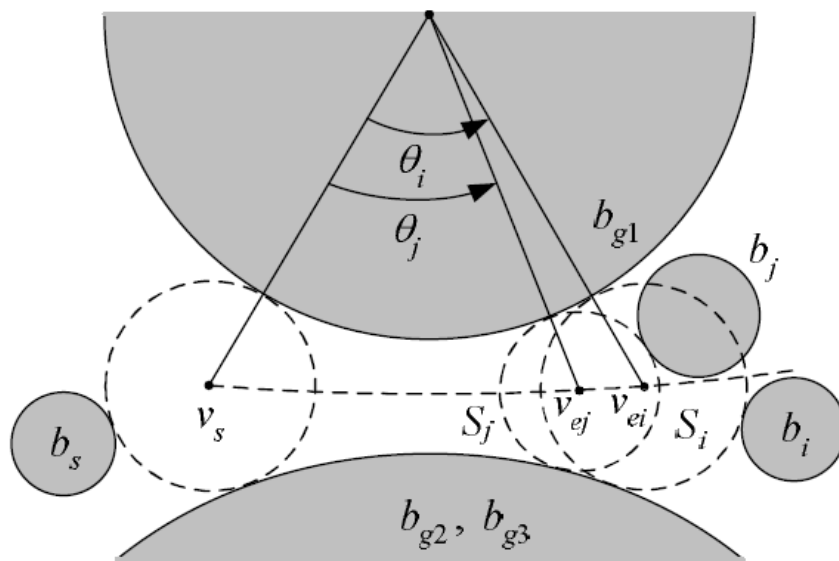
要运用边追踪算法，我们必须先知道第一个Voronoi顶点，显然，并不是所有的四个球都能形成一个Voronoi顶点，如果遍历的去找这四个点，最坏可能达到 $O(n^5)$ 的复杂度。对此，本实验采用了一个技巧，先在远离集合B处建立四个虚拟的球，让他们必然能形成一个Voronoi顶点，从这一点出发，应用边追踪算法找Voronoi顶点，当找到一个顶点，决定它的四个球都不是虚拟点时，它就是我们要的始发点，这个初始化的过程复杂度是 $O(1)$ 的。

4.2. 用边队列实现边追踪算法及计算边的终点

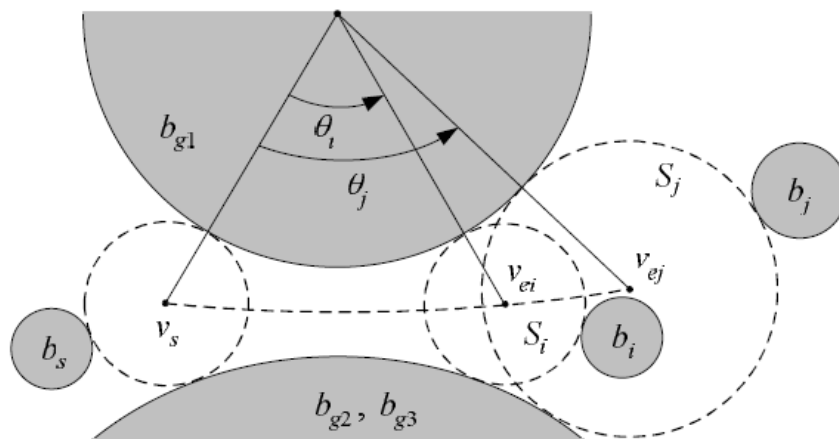
将新生成的边送入边队列，不停的取出最先放入的边来计算它的终点，这就是这个算法的主要思想。那么这一算法中最核心的部分就是计算边的终点了。如果找到一个球，它与决定边的三个球组成的内切球不与其余球相交，那么它就是Voronoi边的终点，但是如果逐一探测球是否相交，生成每一个终点需要 $O(n^2)$ 的时间复杂度。为此，文献[1]设计了一种算法能在 $O(n)$ 的时间复杂度内完成终点的寻找。该文献提出，如果一个内切球的球心是Voronoi终点，那么它在角距离的度量下是离起点最近的，如图6所示。但是本实验在实现过程中发现，由于最小球 b_{g1} 的球心与Voronoi边不在同一平面内，所以这个角度会随着边的曲线轨迹先变大，然后在不到180度的时候开始变小，这样无法直接度量角的大小。如果将球心投射到Voronoi边所在的平面，那么可以通过边的方向把角定义到 0 和 2π 之间，但是又不能保证该点肯定投射到曲线的内侧（虽然文献[1]中取最小球就是为了保证这一点，但实际情况并不鲁棒）。为此，本实验设计了一个更为鲁棒的算法来求得终点。

首先，我们需要在没有终点的情况下知道边的正方向，本实验可以证明以下结论：

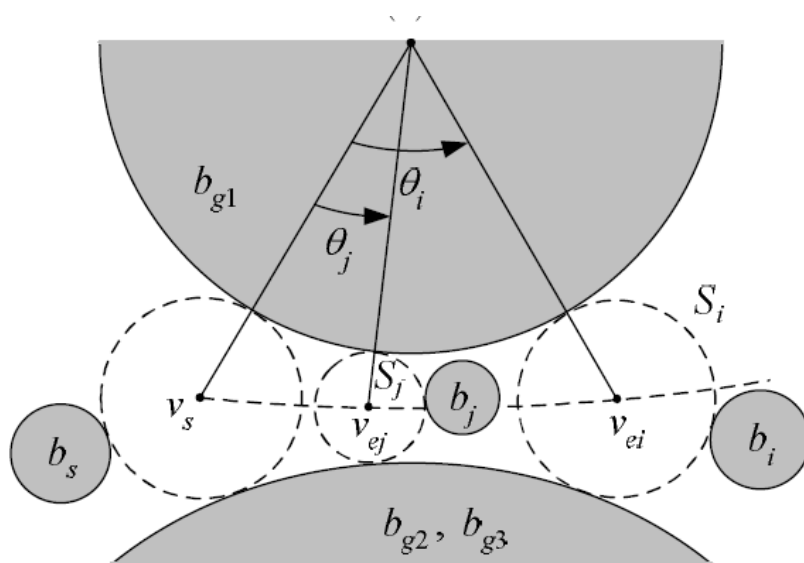
设一条边的gate balls与起点所在内切球的三个切点所在的平面为 n ，组成起点的另一个球 b_s 与内切球的切点为点 T_s ，那么 n 的正法向定义为指向与 T_s 相反方向



(a)



(b)



(c)

图6 终点与起点的角距离

的法向, gate balls的球心所在平面m的正法向定义为与n的正法向夹角小于90度的方向, 那么若边曲线上起点到边曲线上一个任意点Va的向量与m的正法向夹角小于90度, Va则是处于正方向上的点, 否则不是。

有了这一结论, 我们首先可以直接去除所有生成内切球球心在相反方向的球, 这大约是n/2个球, 剩下的球需要作比较, 也不用比较相对难算的角度, 可以直接比较生成的内切球球心在曲线上的位置。

再寻找到终点后, 必须判断这个终点是否已经是计算过的顶点, 如果是, 就没有必要再发出三条边, 为了不增加复杂度, 我们设计了一个哈希表储存已经计算的顶点, 用决定顶点的四个球作为他们的字典序序码。

注意寻找终点的备选集合为B去除三个gate balls, 也就是说包括生成顶点的第四球。这是由于四个球可能生成两个Voronoi顶点, 他们可能是一条边的起点和终点。在演示文件1.sph中可以看到这种情况。

用以上的算法, 最终可以求得Voronoi图的拓扑结构, 能够在最坏情况下 $O(mn)$ 的时间复杂度下完成对Voronoi图的构建, 其中m为Voronoi边的数量, n为三维空间中球的个数。然后通过第三节中的边和面的算法可以将Voronoi图显示出来, 而获取边和面的复杂度都是 $O(1)$ 的

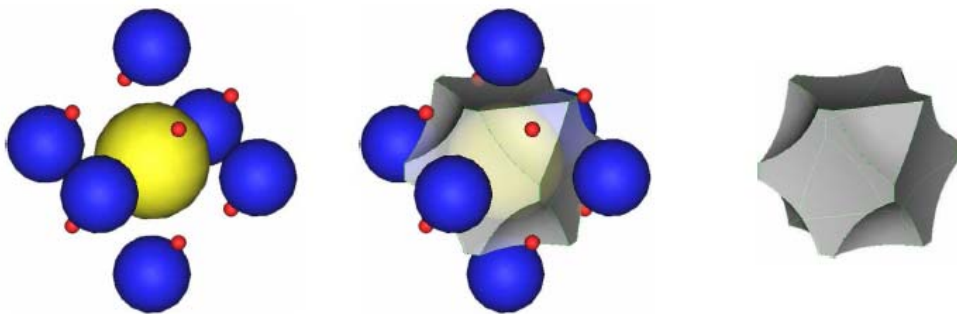


图7 Voronoi图的显示

五、总结以及今后的工作

本实验实现了文献[1]中计算三维球的Voronoi图算法, 并且对它的算法进行了改进, 挺高了速度和鲁棒性。但是并没有改善算法的复杂度, 在最坏情况下, 算法的复杂度是 $O(n^3)$, 相当于BruteForce算法, 由于本实验的目的着重在于演示, 所以没有考虑一种好的改进算法, 如扫描线算法等。另外, 本程序实验没有实现演示整个Voronoi图的生成过程也是一个遗憾。程序使用了OpenCV库函数, 所以要编译需要安装OpenCV 1.0。

在今后, 我们可以用三维球的Voronoi图实现一些应用。在获取空间球体的

voronoi图后，我们可以利用voronoi图计算分子的表面积，分子的表面积分为三种结构，如图：

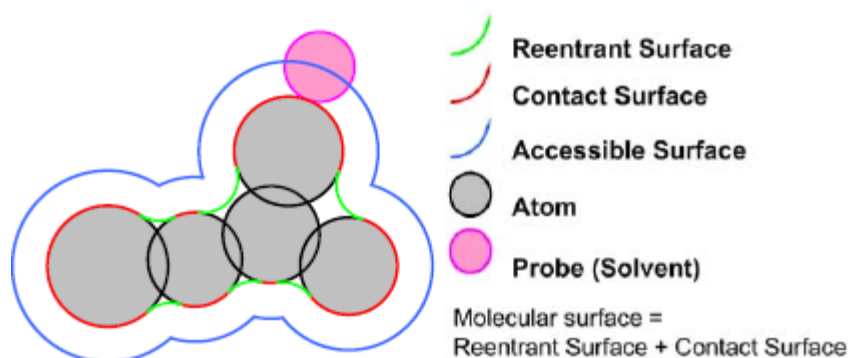


Fig. 2 Solvent accessible vs. Molecular surface

分子的表面积的定义：设置一个半径为 R 的探测球（Probe），使探测球在分子的表面自由的滚动，探测球和分子的接触面即为分子的表面，所有接触面的面积即为分子的表面积。

分子的表面积有三类：1,凸面（convex），2，凹面（concave），3，圆环内面（torus）。凸面为分子表面原子与探测球的接触面，为球面或球面的一部分。凹面为探测球与多个表面原子相切时探测球的内表面。圆环内面为探测球与两个表面原子相切时探测球的内表面。其具体表现为探测球运动的自由度：

Table 1. Three shapes of surface pieces

Atoms touching probe	Degrees of freedom	Surface	Shape	Boundary
1	2	Sphere	Convex	Cycles of convex arcs
2	1	Torus	Saddle	Convex and concave arcs
3	0	Sphere	Concave	Three concave arcs

由 voronoi 图的几何意义易见，探测球的运动轨迹是 voronoi 图的子集，即探测球的运动轨迹被 voronoi 图约束，要获取特定半径探测球的运动轨迹，即可由一个特定点（通常可以由 X_{min} 处获得第一个轨迹点），逐步遍历整个探测球的轨迹，通过探测球轨迹上与表面原子的相切情况我们可以得到当前探测点构成的面，若和一个球相切则为凸面，两个球相切则为圆环内面，三个球以上相切则为凹面。如此扩展，我们可以得到所有的三类表面，进而计算分子的表面积。

遍历所有的 edge，判断 edge 到构成 edge 的原子的表面的距离 L ，如果 $L < R$ ，则可以判断探测原子无法穿过，否则标记可以穿过，同时标记原子可接触，edge 的标记是区间的标记，即 edge 的一部分可接触，则标记其可接触的部分。同样对于所有的 vertex 做同样的操作，这样我们可以得到一个 voronoi 的标记子集。这个子集的性质是，对于每个 edge 周围的原子，其相邻之间可能有圆环内面或凹面（3），对于每个 vertex 周围的原子，其相邻之间可能有凹面，所有不可接触

的原子则必然不可能在分子的表面。

有了上述的信息，我们可以利用已有算法（见参考文献）构造分子表面原子的面积结构。

计算面积结构的顺序为：1，计算凹面结构，根据 vertex 和 edge 的位置，可以得出相邻原子的凹面组成原子即其构成凹面的位置，及构成凹面的边界。2，凹面的边界是构成圆环内面（torus）的基本元素，通过对凹面边界的处理，我们可以得到圆环内面（torus）结构。其结构除了凹面边界外，还有和凹面边界对应的原子上的切点构成的圆弧。3，计算凸面结构，利用每个原子上所有的构成圆环内面（torus）的切点圆弧，形成一个或多个有向环，有向环构成一个或多个凸面区域，形成凸面结构。

下面是三类面积的计算公式。

Face	Area
Convex	$A_c = r_i^2 \left[2\pi\chi - \sum_s \varphi_s \sin \theta_{si} - \sum_r (\pi - \alpha_r) \right]$
Saddle	$A_s = \varphi_s [r_{ij} r_p (\theta_{si} + \theta_{sj}) - r_p^2 (\sin \theta_{si} + \sin \theta_{sj})]$
Concave	$A_c = r_p^2 \left(\sum_r \beta_r - \pi \right)$

有了 voronoi 图后，可以用来计算分子的表面积，参考分子表面积的定义，考虑一个探测球在分子表面的原子间运动，因为 voronoi 图上的点与距离最近的原子表面距离相等，所以对于给定探测球半径 R，其同时和两个以上原子相切时的轨迹必然在 voronoi 图上，所以我们可以得到探测球运动的轨迹，从而进一步计算分子的表面积。

参考文献

- [1] Joonghyun Ryu, Donguk Kim, Youngsong Cho, Rhohun Park and Deok-Soo Kim : COMPUTATION OF MOLECULAR SURFACE USING EUCLIDEAN VORONOI DIAGRAM , Computer-Aided Design & Applications, Vol. 2, Nos. 1-4, 2005
- [2] Okabe A, Boots B, Sugihara K, Chiu SN. Spatial Tessellations: Concepts and Applications of Voronoi Diagrams. 2nd ed. Chichester: John Wiley & Sons; 1999.
- [3] MICHAEL.CONNOLLY: Analytical Molecular Surface Calculation, International Union of Crystallography,1983
- [4] Michel F. Sanner, Arthur J. Olson, Jean-Claude Spohner: Fast and Robust Computation of Molecular Surfaces