

Построение треугольных сеток с использованием метода минимизации потенциальной энергии

К.А. Новиков,^{1,*} Д.А. Коняев,^{1,†} Т.А. Новикова^{2,‡}

¹Московский государственный университет имени
М.В. Ломоносова, физический факультет, кафедра математики
Россия, 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 2
²Удмуртский государственный университет
Россия, 426034, Ижевск, ул. Университетская, д. 1

(Поступила в редакцию 08.11.2024; после доработки 22.11.2024; подписана в печать 29.11.2024)

Представлен анализ молекулярно-динамического метода расстановки узлов при построении неструктурированных сеток. Рассмотрен способ его усовершенствования. Предложен энергетический подход к задаче размещения узлов треугольной сетки на поверхности, в основе которого лежит идея нахождения минимума потенциальной энергии системы зарядов методом градиентного спуска.

PACS: 02.70.-с. УДК: 519.6

Ключевые слова: неструктурированные сетки, энергетический метод.

DOI: 10.55959/MSU0579-9392.80.2520102

ВВЕДЕНИЕ

Применение систем компьютерного моделирования для выработки технических решений в проектной, конструкторской деятельности становится не переменным атрибутом инженерного анализа [1]. Сочетание натурального эксперимента с вычислительным позволяет сопоставить ряд различных альтернативных технологических решений и сократить время и средства на создание нового работоспособного изделия.

В большинстве программ численное решение прикладных задач начинается с создания расчетной сетки на поверхности или в объеме объекта исследования. На данном этапе происходит преобразование геометрической модели в расчетную. Надежность полученных результатов моделирования напрямую зависит от качества дискретизации сложной поверхности.

В данной работе предлагается модификация молекулярно-динамического метода [2, 3] и представлен энергетический подход для нахождения местоположения узлов при построении неструктурированных сеток.

В качестве исходных данных используются NURBS-поверхности и ограничивающие кривые, которые позволяют обеспечить высокую точность задания поверхности модели.

1. МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКИЙ МЕТОД ГЕНЕРАЦИИ УЗЛОВ НЕСТРУКТУРИРОВАННЫХ РАСЧЕТНЫХ СЕТОК

Для точного описания поверхностей и границ расчетной области используется кусочно-полиномиальный метод представления — так называемый Non-Uniform Rational B-Splines (NURBS) [4]. В работах [1–3] для расстановки узлов неструктурированной сетки по произвольным NURBS поверхностям был предложен молекулярно-динамический метод. Главная идея метода состоит в том, что узлы будущей сетки — это подвижные одноименно заряженные частицы с зарядами q_i , массами m_i и скоростями \mathbf{v}_i [2]. Величина силы отталкивания действующей на i -ю частицу со стороны j -й частицы определяется выражением:

$$\mathbf{F}_{ij} = -C \frac{q_i q_j}{|\mathbf{r}_{ij}|^3} \cdot \mathbf{r}_{ij}, \quad i = 1, \dots, N, \quad (1)$$

где $|\mathbf{r}_{ij}|$ — расстояние между зарядами в пространстве, N — число частиц. Коэффициент C определяется кривизной NURBS-кривой в точке нахождения i -й частицы в данный момент времени.

Кроме того, частица испытывает воздействие силы сопротивления \mathbf{F}_i^{fr} , которая определяется скоростью частицы и имеет направление, противоположное вектору скорости:

$$\mathbf{F}_i^{fr} = -K \frac{|\mathbf{v}_i|^S}{|\mathbf{v}_i|} \mathbf{v}_i, \quad S \geq 2, \quad (2)$$

где K — коэффициент трения [2].

Для моделирования процесса взаимодействия внутренних частиц с границей расчетной области применяется подход, разработанный для описания

* E-mail: novikov.ka23@physics.msu.ru

† E-mail: konyaev@physics.msu.ru

‡ E-mail: novikovata72@mail.ru

взаимодействия частиц между собой. По границе расчетной области также распределяются M заряженных частиц q_j^{wall} , однако их перемещение в расчетной области и вдоль границы не допускается [3]. Взаимодействие подвижных частиц расчетной области с неподвижными частицами на ее границах описывается законом кулоновского отталкивания того же вида, что и при взаимодействии между подвижными частицами:

$$\mathbf{F}_{ij}^{wall} = -C^{wall} \frac{q_i q_j^{wall}}{|\mathbf{r}_{ij}^{wall}|^a} \cdot \frac{\mathbf{r}_{ij}^{wall}}{|\mathbf{r}_{ij}^{wall}|}, \quad 0 \geq 1, \quad j = 1, \dots \quad (3)$$

Максимальное допустимое расстояние между частицами на границе области $|\mathbf{r}_{ij}^{wall}|$ определяется общим количеством подвижных частиц. Если требуемое распределение узлов на границе не обеспечивает достаточной плотности расположения неподвижных частиц, то между узлами на границе области необходимо расположить дополнительные частицы, а заряд q_j^{wall} равномерно распределить между ними.

Эволюция данной модели описывается системой дифференциальных уравнений движения Ньютона для каждой i -й частицы:

$$\begin{cases} m_i \frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = \sum_{j=1}^N \mathbf{F}_{ij} + \mathbf{F}_i^{fr} + \sum_{j=1}^M \mathbf{F}_{ij}^{wall}, \\ \mathbf{v}_i = \frac{d\mathbf{r}_i}{dt}, \end{cases} \quad (4)$$

$i = 1, \dots, N; \quad i \neq j.$

Введя коэффициент $k_i = \frac{K}{m_i}$ и ускорение, приобретаемое i -й частицей $\mathbf{a}_i(t)$ под действием сил отталкивания

$$\mathbf{a}_i(t) = \frac{\mathbf{F}_i}{m_i} = \frac{1}{m_i} \left(\sum_{j=1}^N \mathbf{F}_{ij} + \sum_{j=1}^M \mathbf{F}_{ij}^{wall} \right), \quad (5)$$

получим систему:

$$\begin{cases} \frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = -k_i \mathbf{v}_i + \mathbf{a}_i(t), \\ \mathbf{v}_i = \frac{d\mathbf{r}_i}{dt}, \end{cases} \quad i = 1, \dots, N; \quad i \neq j. \quad (6)$$

Численное интегрирование уравнений движения можно провести как по алгоритму Верле [5], который основан на разложении уравнений движения в ряд Тейлора, так и методом Рунге–Кутты 4-го порядка. Получаемые результаты аналогичны, поэтому в работе представлены только результаты с применением алгоритма Верле.

Частицы перестают беспорядочно перемещаться по расчетной области и через некоторый промежуток времени приходят к состоянию квазиравновесия. На основе полученного распределения может быть построена поверхностная сетка. В идеале вершины треугольной сетки должны располагаться так, чтобы фактические расстояния между узлами совпадали с предписанными расстояниями и чтобы треугольники имели возможно более правильную форму.

При исследовании возможностей данного подхода для генерации сеток был реализован молекулярно-динамический метод и проведен численный эксперимент. Главная сложность данного способа расстановки узлов будущей сетки заключается в том, что он имеет множество коэффициентов, подбор которых, во-первых, требует значительных затрат времени, а во-вторых, для каждой поверхности набор коэффициентов индивидуален. Основным способом подбора коэффициентов K, S, a является наглядное восприятие численного решения задачи. Меняя коэффициенты, можно получить многомерное пространство локальных решений. Глобальное и наилучшее положение узлов может быть получено при визуальном анализе отдельных решений.

Для предотвращения размывания границы сетки разработчики молекулярно-динамического метода предлагают увеличить плотность неподвижных узлов на границе поверхности с сохранением суммарного заряда [3]. Однако отсутствует фиксированный закон, по которому необходимо производить сгущение узлов.

Сеточный генератор, основанный на численном решении уравнений движения частиц, требует затратить немало времени для того, чтобы расчетная сетка отличалась высокой однородностью. Чтобы частично снять перечисленные проблемы, а также ускорить время счета, в данной работе предлагается:

- рассмотреть полуаналитический явный метод решения системы (6);
- определять положение частиц, минимизируя энергию взаимодействия всего ансамбля.

2. МОДИФИКАЦИЯ МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОГО МЕТОДА: ПОЛУАНАЛИТИЧЕСКАЯ СХЕМА

В рассматриваемом динамическом методе для определения положения вершин будущих треугольников внутри расчетной области применяется явная численная схема решения уравнений движения (6). Заметим, что в системе уравнений суммирование берется по всем частицам. Для уменьшения расчетного времени ограничим число частиц, взаимодействующих с рассматриваемой частицей. Для этого выберем область поверхности радиусом R_{MAX} (зона максимального радиуса взаимодействия), которая содержит m частиц-соседей [3]. Будем считать, что i -я частица вступает во взаимодействие только с этими частицами. Взаимодействие между частицами, находящимися друг от друга на расстоянии большем, чем радиус обрезания R_{MAX} , не учитываем.

Далее рассмотрим только одну частицу на NURBS поверхности, заданной в параметрическом пространстве (U, V) , поэтому опустим индекс i .

Перемещение и скорость узла вдоль оси U параметрического пространства определяем из дифференциальных уравнений:

$$\begin{cases} \frac{dv_u}{dt} = -kv_u + a_u(t), \\ \frac{dl_u}{dt} = v_u, \end{cases} \quad (7)$$

где l_u и v_u — проекции перемещения и скорости узла соответственно на направление U . Вдоль оси V уравнения аналогичны.

Равнодействующая всех сил постоянно меняется во времени, что затрудняет вычисление проекции скорости частицы. Обозначим величину шага интегрирования τ , для которой изменения правой части динамического уравнения будут невелики, т.е. $a_u(t) = a_u = \text{const}$. Постоянные интегрирования определяются значениями переменных в начальный момент времени t_0 . Применение полуаналитического метода решения к уравнениям (6) позволяет переписать их как [5]:

$$\begin{cases} v_u(t_0 + \tau) = v_u(t_0)e^{-k\tau} + \frac{a_u}{k}(1 - e^{-k\tau}), \\ l_u(t_0 + \tau) = l_u(t_0) + \frac{v_u(t_0)}{k}(1 - e^{-k\tau}) - \frac{a_u}{k}\left(\frac{1 - e^{-k\tau}}{k} - \tau\right). \end{cases} \quad (8)$$

При определении положения частиц полуаналитический метод имеет преимущество перед явной численной схемой, так как он позволяет увеличить шаг интегрирования и, следовательно, сократить машинное время расчета. Для подтверждения теоретической оценки скорости сходимости решения к стационарному режиму в качестве критерия сравнения был выбран потенциал системы, вычисленный по формуле:

$$\phi = \sum_i \sum_j C \frac{q_j}{|\mathbf{r}_{ij}|}, \quad (9)$$

где $|\mathbf{r}_{ij}|$ — расстояние между i -й и j -й частицами в параметрическом пространстве. Точка глобального минимума потенциала соответствует глобальному равновесному состоянию системы и является оптимальным решением задачи равномерного распределения узлов по поверхности [6]. На рис. 1 представлена графическая зависимость потенциала системы ϕ в условных единицах от числа итераций KI при различных значениях шага τ интегрирования. Одна итерация соответствует одному временному шагу интегрирования τ . Результаты получены в процессе применения явной и полуаналитической схем решения.

В начальный момент частицы распределены по расчетной области случайным образом, начальное распределение для всех экспериментов является одинаковым. Исходный потенциал равен $\phi = 560$. В рассматриваемой системе глобальный минимум соответствует значению потенциала $\phi = 405$. Для сравнения эффективности явной и полуаналитической схем решения уравнений (6) выберем $KI = 200$

итераций с большим шагом численного интегрирования (при малом шаге оба алгоритма дают тождественный результат).

При шаге интегрирования $\tau = 2 \times 10^{-5}$ явная схема еще позволяет решить поставленную задачу (рис. 1, а). Потенциал системы монотонно убывает. Однако при шаге $\tau = 5 \times 10^{-5}$ явная схема становится неустойчивой. На рис. 1, б отображено осциллирующее поведение потенциала. Применение полуаналитического метода обеспечивает монотонное убывание потенциала и достижение глобального минимума при шаге интегрирования $\tau = 1 \times 10^{-4}$ за $KI = 130$ итерации (рис. 1, в).

На наш взгляд, полуаналитический метод является более предпочтительным для решения системы уравнений (6).

3. ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ МЕТОД ДИСКРЕТИЗАЦИИ NURBS-ПОВЕРХНОСТЕЙ

Процедура распределения узлов сетки состоит из двух этапов. На первом этапе осуществляется грубая расстановка узлов на границе расчетной области, на втором происходит поиск оптимального расположения узлов на поверхности внутри расчетной области.

3.1. Определение границ сетки

Процесс построения неструктурированной треугольной сетки начинается с расстановки узлов на границе сетки. Из соображений универсальности при выборе параметрического описания геометрических элементов объекта используется NURBS-модель. Так как границей поверхности являются кривые, то будем рассматривать одномерное пространство U параметров [4].

Зафиксируем начальную P_0 и конечную P_1 точки на кривой физического пространства, которые соответствуют минимальному $U_{MIN} = 0$ и максимальному значению $U_{MAX} = 1$ параметрического пространства. Для удобства на NURBS-кривой по параметру U равномерно распределим N узлов. Число N определяется характерным размером ячеек сетки. Полученное распределение перестает быть однородным при переходе из параметрического пространства в физическое (рис. 2, а).

В узлы будущей сетки поместим одноименно заряженные частицы с зарядом $q_1 = q_2 = \dots = q_N = q$. Для описания перестройки расположения частиц на границе расчетной области предлагается минимизировать потенциальную энергию системы [6].

Рассмотрим три близлежащие частицы (рис. 2, б). Заряд q_i находится в электрическом поле зарядов q_{i-1} , q_{i+1} и стремится занять такое положение, в котором его потенциальная энергия $W = q_i\phi$ наименьшая. Потенциал поля

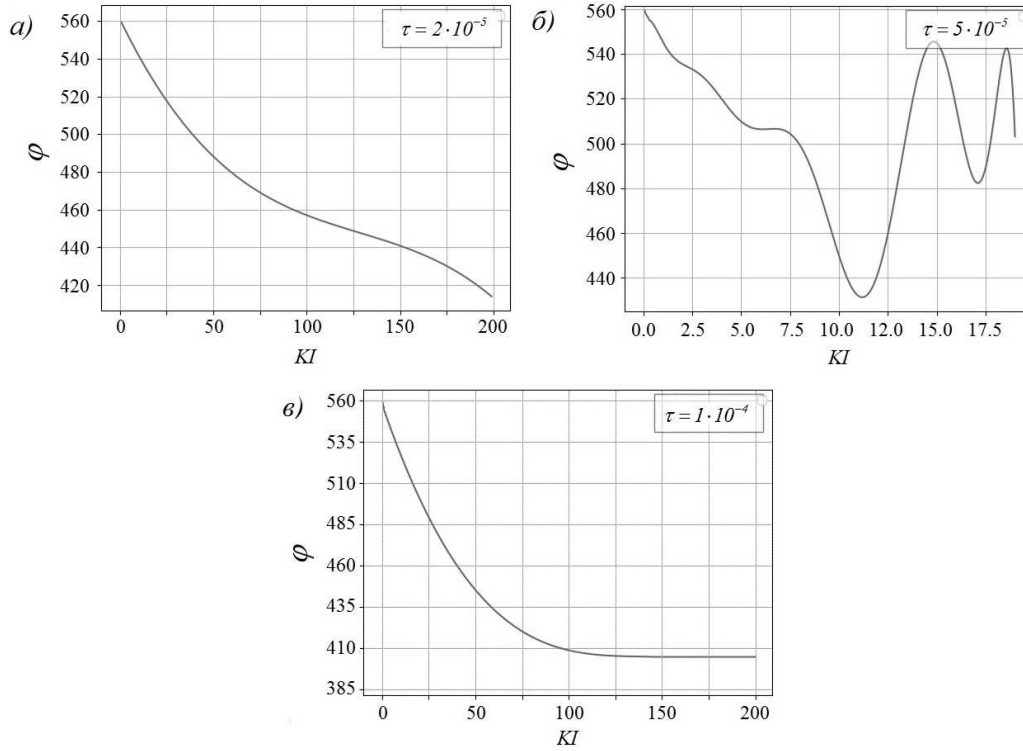


Рис. 1. Работа молекулярно-динамического метода на криволинейной поверхности: зависимость потенциала системы от количества итераций KI при различных схемах решения и значениях шага интегрирования τ : a — динамический метод (явная схема), $\tau = 2 \times 10^{-5}$; b — динамический метод (явная схема), $\tau = 5 \times 10^{-5}$; c — динамический метод (полуаналитическая схема) $\tau = 1 \times 10^{-4}$

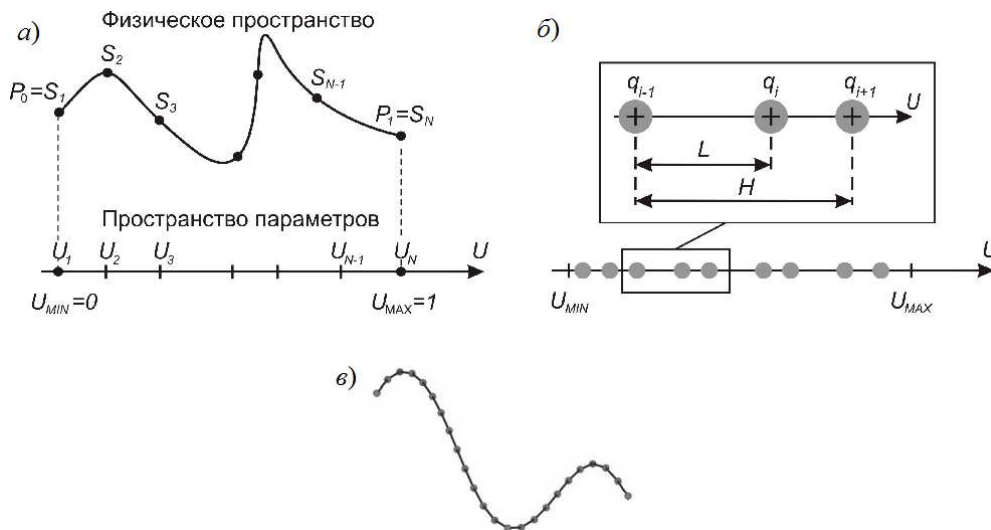


Рис. 2. a — пример NURBS-кривой, b — схема взаимодействия частиц на границе сетки в области параметра U , c — размещение узлов вдоль на кривой, полученное энергетическим методом

зарядов q_{i-1} и q_{i+1} , определяется выражением:

$$\phi = C_{i-1} \frac{q_{i-1}}{L} + C_{i+1} \frac{q_{i+1}}{H-L}. \quad (10)$$

Здесь L — расстояние между q_{i-1} и q_i зарядами, а H — между q_{i-1} и q_{i+1} .

Для того чтобы найти значение координаты L_{MIN} , которому соответствует минимум потенци-

ала поля двух зарядов, продифференцируем выражение (10):

$$\frac{d\phi}{dL} = 0 \quad (11)$$

и определим положение заряда q_i на оси U параметрического пространства, которому соответствует минимальное значение потенциала ϕ :

$$L_{MIN} = \frac{\sqrt{C_{i-1} \cdot q_{i-1}}}{\sqrt{C_{i-1} \cdot q_{i-1}} + \sqrt{C_{i+1} \cdot q_{i+1}}} H, \quad (12)$$

куда помещаем заряд q_i . Коэффициенты C_{i-1}, C_{i+1} , как и в изучаемом молекулярно-динамическом методе, определяются кривизной NURBS – кривой в точке нахождения i -й частицы [1]. Пример построенного подобным образом распределения узлов вдоль кривой приведен на рис. 2, в.

В предложенном энергетическом способе дискретизации NURBS-кривых, в отличие от сравниваемого динамического, отсутствует сила трения, а значит, нет необходимости на данном этапе тратить время и подбирать коэффициент трения K . Кроме того, мы не решаем систему уравнений движения (6), а находим координату минимума потенциальной ямы и помещаем туда узел. Это, во-первых, избавляет от необходимости подбирать временной шаг расчета. Во-вторых, для достижения одинаковой точности расчетов требуется затратить существенно меньше машинного времени.

Эти выводы подтверждаются графиками, приведенными на рис. 3. Первые два графика (рис. 3, а, б) являются результатом исследования применения явной схемы в молекулярно-динамическом подходе к решению задачи. Результат использования энергетического метода отражен на рис. 3, в. В начальный момент времени произвольно распределены частицы по кривой. Исходный потенциал системы для всех экспериментов равен $\phi = 250$. В рассматриваемой системе глобальный минимум соответствует значению потенциала $\phi = 70$.

При численном шаге интегрирования $\tau = 1 \times 10^{-4}$ молекулярно-динамический метод позволяет построить оптимальную геометрию узлов сетки за $KI \approx 1000$ итераций (рис. 3, а). Увеличение шага итерации в 10 раз не позволяет решить задачу в численном виде (рис. 3, б). Применение энергетического метода (рис. 3, в) позволяет уже на 20 шаге итерации достичь приемлемой точности решения.

3.2. Расстановка узлов сетки на сложной поверхности

Перейдем к описанию алгоритма локализации частиц на поверхности внутри расчетной области. При генерации внутренних узлов требуется следить за размером и формой будущих ячеек, а также контролировать границы сетки.

Для удобства в параметрическом пространстве равномерно распределим N узлов. Вокруг произвольной частицы q , находящейся в точке O , выделим область максимального радиуса взаимодействия R_{MAX} , содержащую m частиц-соседей. Будем считать, что частица q вступает во взаимодействие только с этими частицами. Взаимодействие

между частицами, находящимися друг от друга на расстоянии больше, чем радиус R_{MAX} , не учитываем.

Задача согласованной расстановки узлов сетки свелась к задаче минимизации энергии, т.е. к построению такой последовательности точек $\{r_i\}$, что $r_i \rightarrow r_{i \min}$, где $r_{i \min}$ – точка, в которой достигается минимум потенциальной энергии частицы q_i [6].

Для нахождения локального минимума используем метод градиентного спуска [7]. Он прост в реализации, и решение гарантированно сходится к минимуму для выпуклых и невыпуклых функций. Зададим начальное положение частицы q_i радиусом-вектором \mathbf{r}_O^k , где k – номер итерации. На каждом итерационном слое потенциал поля, созданного частицами области максимального радиуса взаимодействия, в точке O равен

$$\phi_O = \sum_{j=1}^m C \frac{q_j}{|\mathbf{r}_j|}. \quad (13)$$

В этот момент направление равнодействующей силы взаимодействия между частицей q_i и ее ближайшими соседями может быть представлена в следующем виде:

$$\mathbf{F}_O = \sum_{j=1}^m F_j = - \sum_{j=1}^m C \frac{q_i q_j}{|\mathbf{r}_j|^3} \mathbf{r}_j = f \mathbf{p}, \quad (14)$$

где \mathbf{p} – орт вектора \mathbf{F}_O . В этом направлении происходит уменьшение минимизируемой функции потенциальной энергии. В направлении \mathbf{p} осуществим перемещение с шагом итерации:

$$\mathbf{d} = \beta \cdot L_{MIN} \cdot \mathbf{p}, \quad (15)$$

где L_{MIN} – расстояние до ближайшего соседа. Коэффициент β изменяется в пределах $0 < \beta < 1$. При $\beta = 0$ частица не перемещается, при $\beta = 1$ частица может выйти за пределы потенциальной ямы. В процессе численного эксперимента в качестве начального шага спуска был подобран коэффициент $\beta = \beta_1 = 0.125$. Новое возможное положение частицы (точка A) характеризуется радиусом-вектором

$$\mathbf{r}_A = \mathbf{r}_O^k + \mathbf{d} \quad (16)$$

и потенциалом ϕ_A . Если $\phi_A < \phi_O$, то новое положение частицы q характеризуется радиусом-вектором $\mathbf{r}_O^{k+1} = \mathbf{r}_A$ (рис. 4 а). В случае, если $\phi > \phi$, определим потенциал ϕ близлежащей точки B , радиус-вектор которой

$$\mathbf{r}_B = \mathbf{r}_O^k + \mathbf{s}, \quad (17)$$

где $\mathbf{s} = \beta_2 \cdot L_{MIN} \cdot \mathbf{p}$, $\beta_2 < \beta_1$. По результатам численного эксперимента был выбран коэффициент $\beta_2 = 0.01$.

Если $\phi_B \geq \phi_O$, то частица занимает новое положение, определяемое радиусом-вектором $\mathbf{r}_O^{k+1} = \mathbf{r}_O^k$ (рис. 4, б). В противном случае ($\phi_B < \phi_O$) составим

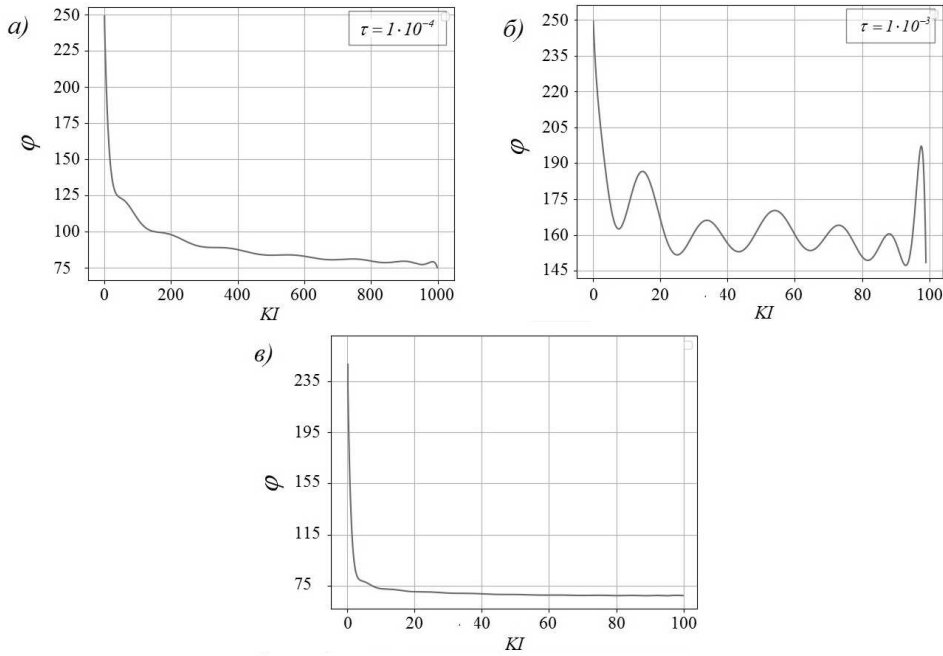


Рис. 3. Работа молекулярно-динамического и энергетического методов на границе поверхности: зависимость потенциала системы от количества итераций KI : *a* — динамический метод (явная схема), $\tau = 1 \cdot 10^{-4}$; *б* — динамический метод (явная схема), $\tau = 1 \cdot 10^{-3}$; *в* — энергетический метод

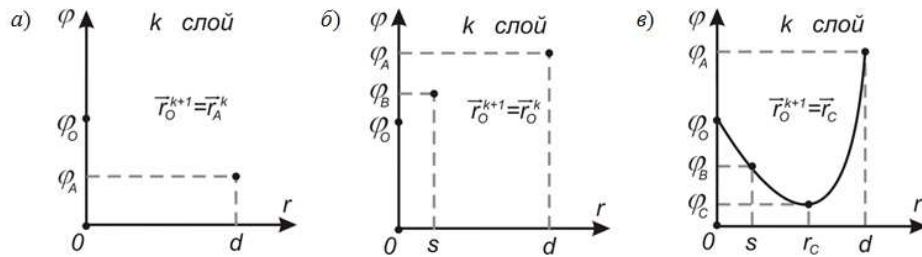


Рис. 4. Алгоритм градиентного спуска: *a* — $\phi_A < \phi_O$, *б* — $\phi_A > \phi_O$, $\phi_B \geq \phi_O$, *в* — $\phi_A > \phi_O$, $\phi_B < \phi_O$

уравнение для потенциала по трем точкам (\mathbf{r}_O^k, ϕ_O) , (\mathbf{r}_A, ϕ_A) , (\mathbf{r}_B, ϕ_B) . В качестве аппроксимирующей функции используется парабола (рис. 4, в). Функция $\phi(\mathbf{r})$ достигает минимума в точке *C*. Эта точка и выбирается в качестве точки очередного положения частицы $\mathbf{r}_O^{k+1} = \mathbf{r}_C$ (рис. 4, в).

Алгоритм минимизации выполняется для N частиц поверхности. Если для всех частиц

$$\max_i |\mathbf{r}_O^{k+1} - \mathbf{r}_O^k| \leq \varepsilon, \quad i = 1, \dots, N, \quad (18)$$

то поиск точки минимума $r_{i \min}$ заканчивается, иначе переходим на следующий шаг итерации: $k = k + 1$. В результате применения рассмотренного алгоритма получается установившееся распределение узлов будущей сетки.

Для моделирования процесса взаимодействия подвижной частицы с границей сетки введем дополнительные «мнимые» положительные заряды Q . Если частица q пытается выйти за границу сетки, т.е. граница сетки попадает в область максимального радиуса взаимодействия R_{MAX} , то напротив рассматри-

ваемой частицы q на границе сетки поставим заряд Q . Величина заряда Q определяется из условия построения качественной сетки. На рис. 5 отражена такая ситуация.

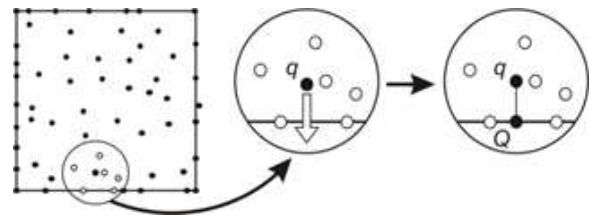


Рис. 5. Задание мнимых зарядов на границе поверхности

Благодаря отталкивающему характеру взаимодействия частицы q как с зарядами расчетной области, так и с мнимыми зарядами Q , также исключается возможность образования пустот и локальных скоплений вершин будущих треугольников.

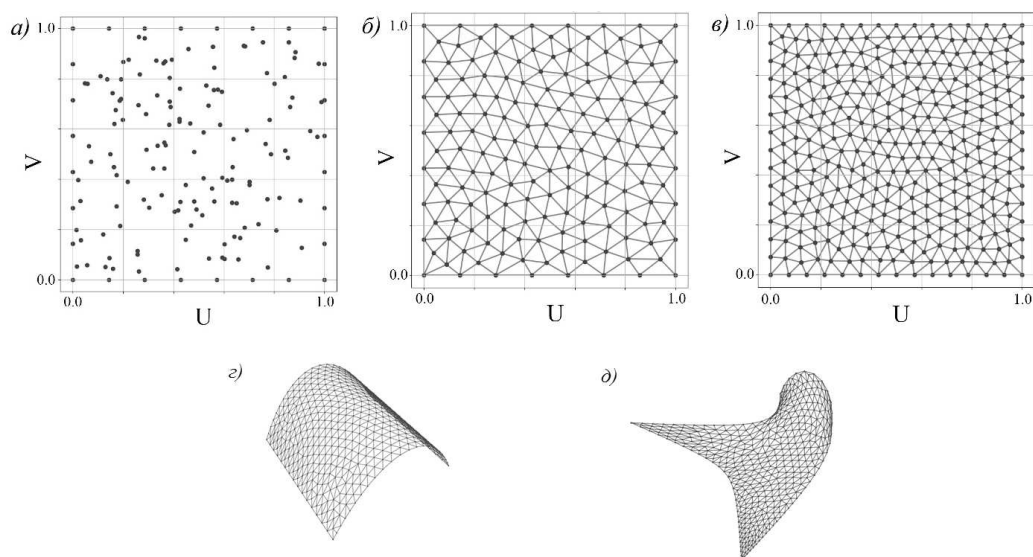


Рис. 6. Примеры неструктурированных сеток в тестовых расчетах: *a* — исходная область, 160 узлов; *б* — 160 узлов, *в* — 325 узлов; *г*, *д* — неструктурированная сетка на криволинейных поверхностях, построенная энергетическим методом

4. РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАНИЯ

Рассмотрим результаты тестовых расчетов, проведенных с использованием описанного метода. Сначала применим процедуру локализации узлов на плоском квадрате. Примеры неструктурированных сеток для различного количества узлов, построенных в этой области, показаны на рис. 6, *a*, *б*, *в*. За начальное расположение узлов принимается их случайное распределение. На основе полученного распределения узлов, с использованием триангуляции Делоне [8] создана треугольная сетка.

Как при малом, так и при большом количестве узлов энергетический метод позволяет получить сетки с элементами, форма которых близка к форме правильных треугольников. На рис. 6, *г*, *д* показаны результаты работы алгоритма для криволинейных NURBS-поверхностей.

На рис. 7 представлены результаты численного эксперимента с применением энергетического метода, в ходе которого определен потенциал системы ϕ на каждом шаге итерации KI . Для сравнения на том же рисунке изобразим результаты вычисления $\phi(KI)$ с использованием динамического метода с явной и полуаналитической схемами решения.

Применение полуаналитической схемы позволяет существенно увеличить скорость расчетов. Однако и у полуаналитической схемы существует критический шаг интегрирования, рост которого приводит к неустойчивости системы. Преимущество энергетического метода по сравнению с динамическим состоит в том, что здесь отсутствует необходимость выбора шага интегрирования. К тому же при энергетическом методе не нужно тратить время на подбор коэффициента трения K . Наконец, энергетический метод позволяет на порядок сократить время

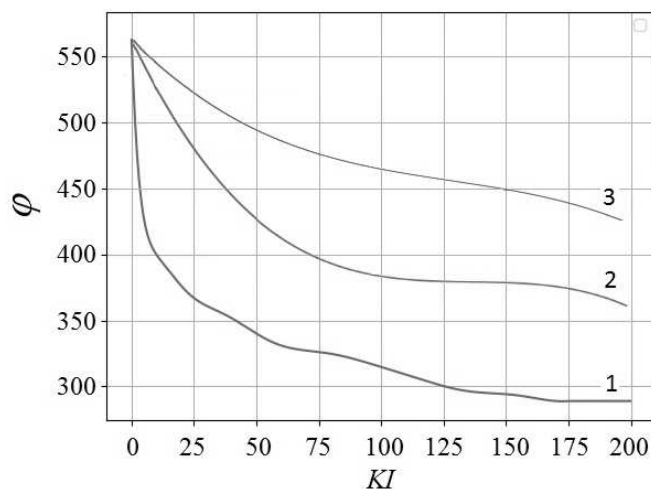


Рис. 7. Работа методов расстановки узлов на поверхности: 1 — энергетический метод; 2 — динамический метод, полуаналитическая схема решения; 3 — динамический метод, явная схема решения

расчета без потери качества неструктурированной сетки.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Для модификации молекулярно-динамического метода с явной схемой решения предложен полуаналитический алгоритм расположения узлов при построении неструктурированных треугольных сеток. Такой подход к решению позволил повысить устойчивость системы при увеличении шага интегрирования и сократить машинное время расчета. Однако осталась проблема подбора коэффициентов

в уравнениях движения частиц и чувствительность решения к временному шагу расчетов.

В работе представлен новый метод оптимального распределения узлов сетки, основанный на минимизации энергии взаимодействия системы, который позволил на порядок сократить время построения сетки и исключить подбор коэффициентов.

Для демонстрации возможностей подхода приведены примеры расчетных сеток плоских и криволинейных поверхностей. В дальнейшем планируется включить в процесс дискретизации локальное сгущение сетки и выполнить триангуляцию трехмерных объектов.

-
- [1] Белкин А.А. // Журнал прикладной и промышленной математики. **9**, № 4. 27 (2006).
- [2] Железнякова, А.Л. // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. **13**, Вып. 4. (2012). <http://chemphys.edu.ru/issues/2012-13-4/articles/368>
- [3] Железнякова А.Л., Суржиков С. Т. // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. **15**, Вып. 1. (2014). <http://chemphys.edu.ru/issues/2014-15-1/articles/108>
- [4] Минкин А.С. Применение технологии NURBS к созданию трехмерных компьютерных моделей для численного анализа начально-краевых задач. Автореферат дисс... канд. физ.-мат. наук / Минкин Александр Сергеевич. Институт математического моделирования РАН. М., 2007. 20 с.
- [5] Verlet L. // Phys. Rev. **165**. 201 (1968).
- [6] Аминова Р.М. Поверхности потенциальной энергии молекулярных систем. Квантово-химические методы анализа ППЭ. Учеб. пособие / Р.М. Аминова. Казань: Казан. ун-т, 2015. 109 с.
- [7] Плетнев Н.В., Дзуреченский П.Е., Гасников А.В. // Компьютерные исследования и моделирование. **14**, № 2. 417 (2022).
- [8] Скворцов А.В. // Вычислительные методы и программирование. № 3. 14 (2002).

Triangle Meshes Generation Using Potential Energy Minimization Method

К.А. Novikov^{1,a}, Д.А. Кonyaev^{1,b}, Т.А. Novikova^{2,c}

¹Department of Mathematics, Faculty of Physics, Lomonosov Moscow State University, Moscow 119991, Russia

²Department of General Physics, Udmurt State University, Russia, 426034, Izhevsk

E-mail: ^anovikov.ka23@physics.msu.ru, ^bkonyaev@physics.msu.ru, ^cnovikovata72@mail.ru

An analysis of the molecular dynamic method of node placement at the construction of unstructured grids is presented. The method of its improvement is considered. An energy approach to the problem of placing knots of a triangular grid on a surface is proposed, which is based on the idea of finding minimum of potential energy of a system of charges by the gradient descent method.

PACS: 02.70.-c.

Keywords: unstructured grids, energy method.

Received 08 November 2024.

English version: *Moscow University Physics Bulletin*. 2024. **80**, No. 2. Pp. .

Сведения об авторах

- Новиков Клим Андреевич — студент; e-mail: novikov.ka23@physics.msu.ru.
- Кonyaев Денис Алексеевич — канд. физ.-мат. наук, ст. науч. сотрудник; тел.: (495) 939-13-51, e-mail: konyaev@physics.msu.ru.
- Новикова Татьяна Алевтиновна — канд. пед. наук, доцент; (3412) 91-61-39, e-mail: novikovata72@mail.ru.