

A Molecular Dynamics-Based Method for Automated Creation of Quadrilateral and Hexahedral Grids

A.L. Zheleznyakova

Institute for Problems in Mechanics Russian Academy of Sciences, Russia, Moscow, 119526
a.zheleznyakova@mail.ru

An automated technique for the generation of unstructured quadrilateral, hexahedral and hybrid grids with a predominance of hexahedral elements is developed. The technology combines the advantages of unstructured and block-structured approaches. The method, presented in this paper, is slightly behind structured technique in quality of resolution of the near-wall region. Fully automated algorithm allows creating high-quality quadrilateral and hexahedral meshes for arbitrary domains. The transition from two-dimensional to three-dimensional case almost does not increase the algorithm complexity. The proposed method is versatile and can be used for creation of quadrilateral and hexahedral grids as well as for triangular, tetrahedral or hybrid mesh generation. The presented technology provides the orthogonality of local grid lines near the domain boundary and allows condensing mesh nodes.

Keywords: molecular dynamics method, hexahedral grid, unstructured mesh, grid generation methods, computational aerodynamics.

УДК 533.6.01+519.6+519.688+004.94

Технология автоматизированного создания неструктурированных четырехугольных и гексаэдральных сеток с использованием молекулярно-динамического моделирования

А.Л. Железнякова

*Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского Российской академии наук, Москва,
a.zheleznyakova@mail.ru*

Аннотация

Разработан молекулярно-динамический метод автоматического создания неструктурированных гексаэдральных и гибридных сеток с преобладанием шестигранных элементов. Технология, совмещает достоинства нерегулярного и блочно-структурированного подходов, лишь незначительно уступая последнему по качеству разрешения пристеночной области. Полностью автоматизированный алгоритм позволяет создавать двумерные четырехугольные и пространственные гексаэдральные сетки высокого качества для областей произвольной формы. Сложность алгоритма практически не возрастает при переходе к трехмерному случаю. Предложенный метод является универсальным, и может использоваться для построения тетраэдральных (треугольных), шестигранных (четырёхугольных), а также гибридных сеток с любым желаемым соотношением между элементами указанных типов. Созданная технология обеспечивает ортогональность координатных линий сетки вблизи поверхностей, ограничивающих расчетную область, и имеет возможность сгущения узлов к произвольной границе.

Ключевые слова: метод молекулярной динамики, гексаэдральная сетка, неструктурированная сетка, метод генерации сеток, вычислительная аэродинамика.

Введение

За последнее десятилетие удалось добиться значительных успехов в области разработки и применения компьютерных технологий в различных отраслях науки и промышленности, адаптации математических моделей и вычислительных методов к решению конкретных теоретических проблем и прикладных задач проектирования изделий сложной геометрической формы. На сегодняшний день широкое распространение в инженерной практике получили сеточные методы решения дифференциальных уравнений в частных производных, среди которых наиболее известны: метод конечных разностей, метод конечных (контрольных) объемов, метод конечных элементов. Развитие современных подходов к построению расчетных сеток, создание новых эффективных алгоритмов, снижение цен на вычислительные мощности, а также разработка удобных пользовательских интерфейсов сделали компьютерные технологии, основанные на сеточных методах, неотъемлемой частью любого цикла проектирования. Сеточные подходы успешно применяются для решения практических задач физической газовой динамики, аэродинамики, теплообмена, механики деформируемого твердого тела (в том числе комплексных сопряженных задач). Методы существенно отличаются по масштабам решаемых проблем (от микроэлектроники до астрофизики), способам алгоритмической реализации. Каждая технология описывает свой

комплекс физических процессов и явлений. Объединяет методы необходимости создания расчетной сетки, то есть разбиения области численного моделирования на элементарные непересекающиеся ячейки, например, тетраэдры или гексаэдры.

Каждый тип сеток имеет свои преимущества и недостатки. Применение гексаэдральных элементов считается более предпочтительным по ряду причин. Преимуществом использования гексаэдральных ячеек является непревзойденная точность, которая сохраняется при увеличении размера ячейки (вытягивании) в направлении, вдоль которого параметры моделируемой среды меняются слабее, что особенно важно при моделировании пристеночных течений. При разрешении пограничного слоя, в котором изменения скорости существенны в поперечном направлении, в то время как вдоль обтекаемой поверхности скорость меняется незначительно. Технология позволяет уменьшить число расчетных элементов по сравнению с тетраэдральной сеткой, размерность которой должна быть в 4 – 10 раз больше для достижения той же степени точности.

Еще не так давно шестигранные ячейки применялись только в рамках блочно-структурированного подхода, обеспечивающего получение численных результатов с высокой точностью и достоверностью ценой неприемлемо больших трудозатрат. Кроме этого автоматически построить структурированную сетку для реалистичных конфигураций в настоящее время просто невозможно. В связи с постоянно возрастающей сложностью геометрических моделей и необходимостью в максимально сжатые сроки рассматривать множество вариантов компоновок и конструкций изделия в широком диапазоне условий эксплуатации, использование структурированных сеток становится нецелесообразным. Проблема автоматического построения сеточных моделей может быть решена при использовании нерегулярных тетраэдральных сеток. Они, по сравнению со структурированными сетками, относительно легко создаются для геометрии любой сложности практически без участия пользователя, с минимальными затратами расчетного времени и вычислительных ресурсов, однако точность и достоверность результатов, полученных на тетраэдральных сетках, значительно ниже. По этой причине, весьма заманчивым представляется разработка методов автоматического создания неструктурированных гексаэдральных и гибридных сеток совмещающих достоинства блочно-структурированного и нерегулярного подходов и лишенных их недостатков. При использовании сеточных методов, трудоемкость процесса дискретизации области решения для реалистичных 3D-моделей промышленных изделий составляет около двух третей от общего времени численного моделирования, а точность и надежность результатов инженерных расчетов, в первую очередь, зависит от качества сеток. Поэтому совершенствование методов построения сеточных моделей может привести к значительной экономии вычислительных ресурсов, сокращению временных издержек и трудозатрат на генерацию сеток.

1. Современные методы создания четырехугольных и гексаэдральных расчетных сеток

В отличие от тетраэдрального разбиения, автоматическое создание гексаэдральных сеток чрезвычайно сложная задача. Вопреки ожиданиям, большинство разработанных эффективных и надежных методик построения тетраэдральных сеточных моделей оказались неприменимыми для шестигранных элементов. За два десятилетия разработано лишь небольшое число алгоритмов. И хотя удалось достичь автоматизации процесса генерации сеток, предложенные методы не обладают универсальностью, достаточной надежностью, а также применимы к ограниченному классу задач и определенному виду расчетных областей невысокой геометрической сложности. Для преодоления указанных трудностей приходится ограничиваться созданием гибридных сеток с преобладанием тетраэдральных элементов над шестигранными или увеличивать степень участия пользователя в процессе построения. Таким образом, проблема создания универсальных автоматических алгоритмов генерации

качественных гексаэдральных и гибридных сеток с преобладанием шестигранных ячеек остается актуальной по сей день.

В настоящее время для решения задач комплексного автоматизированного инженерного анализа разработан ряд специализированных подходов построения неструктурированных четырехугольных и гексаэдральных сеток. Подробный анализ и классификация этих методов проведены в обзорах [1–4]. Среди данных методов создания четырехугольных и шестигранных элементов можно выделить прямые и непрямые алгоритмы. Непрямые методы строятся на основе предварительного треугольного или тетраэдрального разбиения расчетной области с последующим преобразованием элементов в четырехугольники и шестигранники.

Один из самых простых непрямых подходов [1,4] основывается на следующем свойстве: каждый треугольник может быть разбит на три четырехугольных элемента посредством добавления дополнительных точек в центре треугольника и на серединах его сторон (рис. 1, *а*). Аналогично может быть проведено преобразование каждой тетраэдральной ячейки путем ее разбиения на четыре шестигранных элемента (рис. 1, *б*) с использованием алгоритма Эпштейна [5]. Казалось бы, что с использованием этого очевидного приема можно автоматически создавать неструктурированные четырехугольные или шестигранные сетки из 2D или 3D триангуляции, но, к сожалению, качество таких сеточных моделей очень низкое. Кроме этого число элементов результирующей сетки возрастает в 3 или 4 раза в зависимости от размерности.

Альтернативный подход, разработанный для двумерного случая, предлагает формировать четырехугольные ячейки путем попарного объединения соседних треугольников. Качество элементов возрастает (по сравнению с предыдущим методом), но в результирующей сетке может оставаться большое число остаточных треугольников. Количество последних можно свести к минимуму, если объединять ячейки в определенном порядке [6,7]. Позже, алгоритм, предложенный в работе [6] был усовершенствован за счет локального разбиения треугольников [8]. Кроме этого в процессе построения использовалась фронтальная технология, которая заключается в пошаговой трансформации треугольников, начиная с элементов, стороны которых образуют фронт (набор ребер, отделяющих созданные четырехугольные ячейки от непреобразованных треугольных элементов).

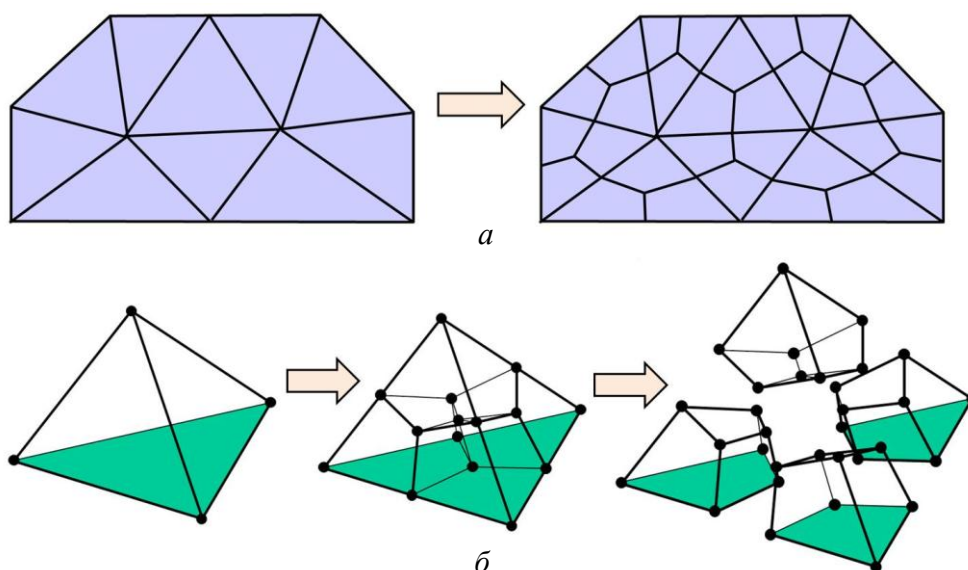


Рис.1. Создание четырехугольной сетки посредством дробления треугольных элементов (*а*). Разбиение тетраэдра на четыре гексаэдральных элемента (*б*)

В процессе работы алгоритма фронт продвигается от ребер, задающих границы, вглубь расчетной области. Главным преимуществом непрямых алгоритмов является высо-

кая скорость работы. Однако, четырехугольные элементы, построенные на основе иррегулярных узлов исходной треугольной сетки, обладает невысоким качеством.

Среди фронтальных непрямых подходов также необходимо выделить алгоритмы Q–Morph [9] и H–Morph [10], разработанные для построения четырехугольных и шестиугольных расчетных сеток соответственно. Предложенная в [9] технология использует метод распространяющегося фронта для преобразования элементов и локальное переключение ребер исходных треугольников. Кроме этого, уменьшение количества нерегулярных и добавление дополнительных узлов помогает выровнять линии сетки вблизи границ и обеспечить ортогональность. В трехмерном случае [10] метод имеет высокую сложность реализации и требует значительных затрат вычислительных ресурсов.

Прямые автоматизированные подходы к созданию четырехугольных и гексагональных сеток не требуют предварительной дискретизации расчетной области и чаще всего используют фронтальный алгоритм. Построение начинается от граничной четырехугольной сетки или фронта граничных ребер. На каждом шаге проводится размещение новых узлов и формирование слоя расчетных ячеек. Один из первых, так называемых алгоритмов “замощения” (*paving*) предложен в работе [11] для двумерного случая. Начиная с исходного распределения узлов на границе, формирование элементов проводится посредством проецирования ребер внутрь расчетной области. С использованием классического метода распространяющегося фронта строятся два треугольных элемента, которые объединяются в четырехугольник.

В работе [2] предложена технология, позволяющая строить за один проход полный ряд ячеек. Дальнейшее развитие метод получил в [12], и применялся для дискретизации пространственных поверхностей.

Попытка обобщения метода замощения на трехмерный случай была предпринята в работах [13,14]. С помощью данного подхода фронт образования шестигранных элементов формируется из четырехугольных граней, начиная от границы расчетной области, и распространяется к ее центру. Отдельный четырехугольник проецируется внутрь расчетной области, создавая гексаэдральный элемент. Существенным недостатком прямых фронтальных методов является то, что в процессе генерации сетки необходимо отслеживать пересечение поверхностей движущихся навстречу друг другу фронтов и проводить их сшивку. Кроме того на завершающей стадии замощения могут возникать сложные по конфигурации пустоты, которые просто невозможно заполнить шестигранными элементами. Данный алгоритм не обеспечивает достаточной надежности при решении широкого класса задач. Тем не менее, данную методику успешно используют для создания нескольких слоев гексаэдральных элементов, прилегающих к границе области.

Одним из широко используемых прямых методов разбиения на четырехугольные и гексаэдральные элементы является технология построения сеток со структурой элементов типа квадратичное или восьмеричное дерево (соответственно для двумерного и трехмерного случаев) [15,16]. Представление расчетной области квадрато- или октодеревом позволяет строить сетки, иерархически сгущающиеся к границам за счет разбиения приграничных ячеек. Недостатком метода является низкая точность описания криволинейных поверхностей [17–20].

В настоящей работе предложен молекулярно-динамический метод построения неструктурированных гексаэдральных и гибридных сеток с преобладанием шестигранных элементов. Полностью автоматизированный алгоритм позволяет создавать двумерные четырехугольные и пространственные гексаэдральные сетки высокого качества для областей произвольной формы (сложность алгоритма возрастает лишь незначительно при переходе к трехмерному случаю). Предложенный метод является универсальным, и может использоваться для построения сеток как тетраэдральных (треугольных), так и шестигранных (четыреугольных), а также гибридных с любым желаемым соотношением между элементами указанных типов. Кроме этого предложенный алгоритм имеет высокую скорость работы и

простоту реализации, свойственную непрямим методам, а также лишен специфических недостатков прямых подходов – обеспечивает высокое качество элементов.

2. Реализация молекулярно-динамического метода генерации четырехугольных расчетных сеток

В предшествующих работах [21–23] был предложен принципиально новый численный метод построения объемных и поверхностных неструктурированных сеток с использованием молекулярно-динамического моделирования. Алгоритм позволяет создавать качественные однородные и адаптивные как треугольные, так и тетраэдральные сетки для сложных многосвязных областей в автоматическом режиме. В качестве исходных данных используются составные NURBS-поверхности и ограничивающие кривые [24–26]. NURBS-подход основан на специальной кусочно-полиномиальной форме представления – неоднородных рациональных B-сплайнах [24–26] и способен обеспечить любую требуемую точность задания поверхности модели.

Разработанная технология создания расчетных сеток основана на иерархическом применении и последовательно используется для разбиения сначала NURBS-кривых, затем NURBS-поверхностей. Сетка в объеме расчетной области строится на основе уже полученного оптимального распределения узлов на сложных ограничивающих поверхностях. Метод позволяет автоматизировать процесс перехода между геометрической и сеточной моделями и сохранить высокую точность, заложенную в исходной геометрии объекта.

Динамическая природа разработанного метода генерации расчетных сеток дает возможность локально перестраивать сеточную модель, что позволяет рассматривать большое число различных вариантов конструкции промышленных изделий в кратчайшие сроки, а также проводить динамическую адаптацию расчетной сетки в процессе решения уравнений механики сплошной среды. Кроме этого, технология допускает обобщение на случай четырехугольных, гексагональных и гибридных сеток, что будет продемонстрировано ниже.

Главная идея предложенного подхода к созданию неструктурированных четырехугольных и гексаэдральных сеток, как и метода представленного и развитого в предыдущих публикациях [21, 22], состоит в том, что узлы будущей сетки – это подвижные одноименно заряженные, взаимодействующие между собой частицы, с зарядами q_i и массами m_i . Отталкивающая сила, действующая на каждую частицу со стороны остальных частиц системы, имеет электрическую природу. На рис. 2 показана схема, иллюстрирующая процесс взаимодействия между парами частиц, которые перемещаются в объеме расчетной области. Кроме силы взаимодействия на частицы действуют силы сопротивления $\vec{F}_{fr,i}$, которые определяются модулем вектора скорости и имеют противоположное ему направление. Благодаря действию диссипативных сил, для определения которых используются различные степенные зависимости от скорости [21], система через достаточно короткий промежуток времени приходит к квазиравновесному состоянию. Частицы совершают лишь незначительные колебания около устойчивых положений равновесия, при этом распределение частиц становится в высокой степени упорядоченным (рис. 3).

На основе полученного оптимального распределения, с использованием триангуляции Делоне, может быть построена качественная поверхностная или объемная сетка [27, 28]. Триангуляция строится один раз на завершающем этапе распределения подвижных узлов и для трехмерного случая, показанного на рис. 3, внизу, выполняется для нескольких временных шагов лишь с целью более наглядного представления.

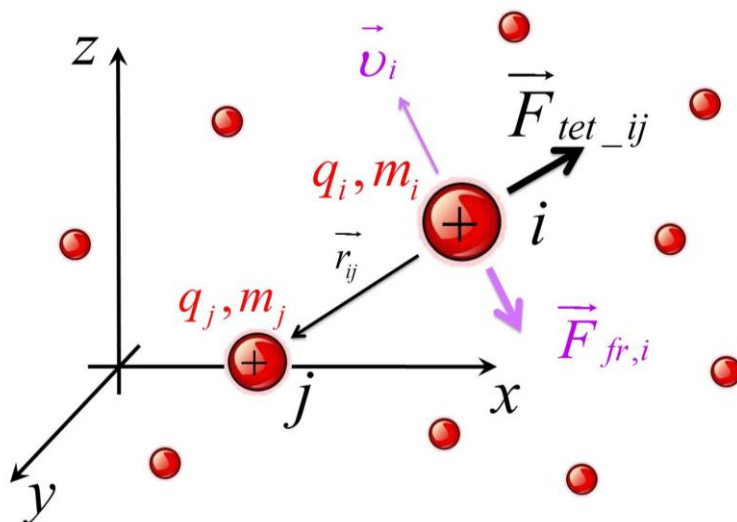


Рис.2. Схема взаимодействия подвижных частиц в трехмерной расчетной области

Частицы считаются материальными точками. Моделирование динамики системы парно взаимодействующих частиц (узлов), проводится с использованием уравнений движения Ньютона для каждой i -й частицы. Численное интегрирование уравнений движения проводится по известному алгоритму Верле [29, 30]. Вычислительные аспекты молекулярно-динамического метода подробно изложены в [21].

Расположение узлов идеальной треугольной (на плоскости) или тетраэдральной (в пространстве) сетки будет соответствовать максимально плотной упаковке частиц (рис. 3, вверху).

Для образования такой структуры достаточно описывать механизм взаимодействия между подвижными узлами с использованием центральных ненаправленных сил отталкивания [21]. При этом абсолютная величина отталкивающей силы \vec{F}_{tet_ij} , действующей на i -ю частицу со стороны j -й частицы обратно пропорциональна a -й степени расстояния между зарядами, а ее вектор направлен противоположно радиус-вектору \vec{r}_{ij} [1]:

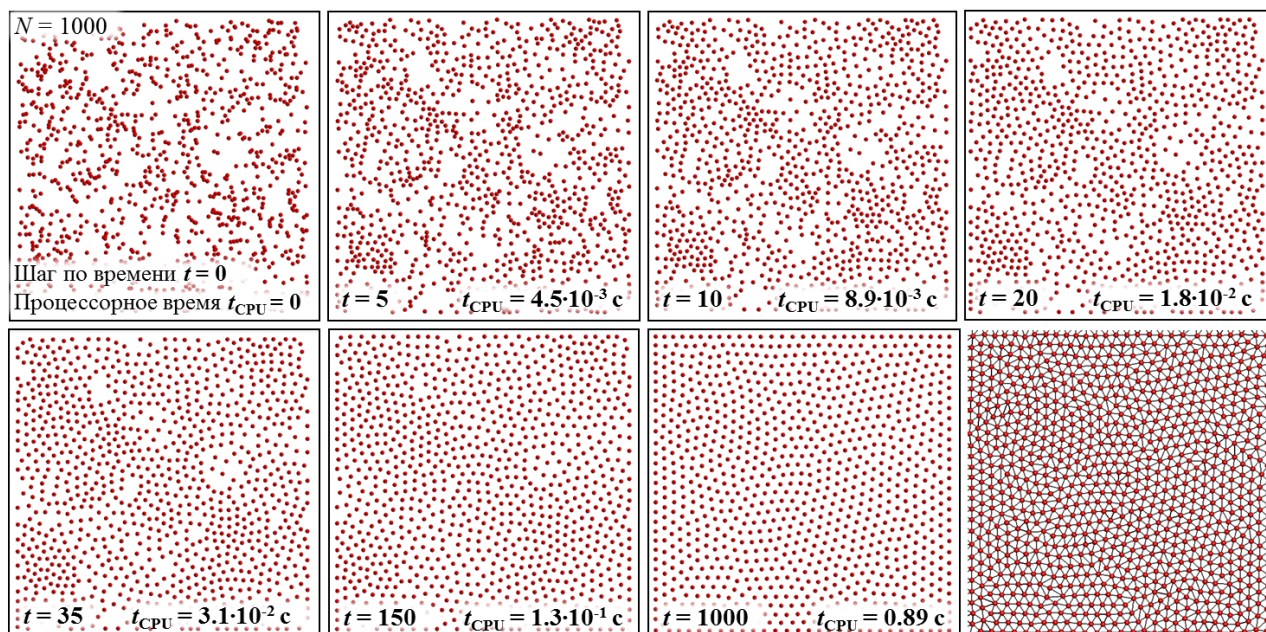
$$\vec{F}_{tet_ij} = -C \frac{q_i q_j}{|\vec{r}_{ij}|^a} \cdot \frac{\vec{r}_{ij}}{|\vec{r}_{ij}|}, a \geq 1, |\vec{r}_{ij}| = h, \quad (1)$$

здесь h – расстояние между зарядами.

Равнодействующая сил межчастичного взаимодействия, действующая на i -ю частицу может быть представлена в векторной форме:

$$\vec{F}_{tet_i} = \sum_{j=1}^M \vec{F}_{tet_ij}, \quad (2)$$

где M – число частиц в системе.



$N = 2000$

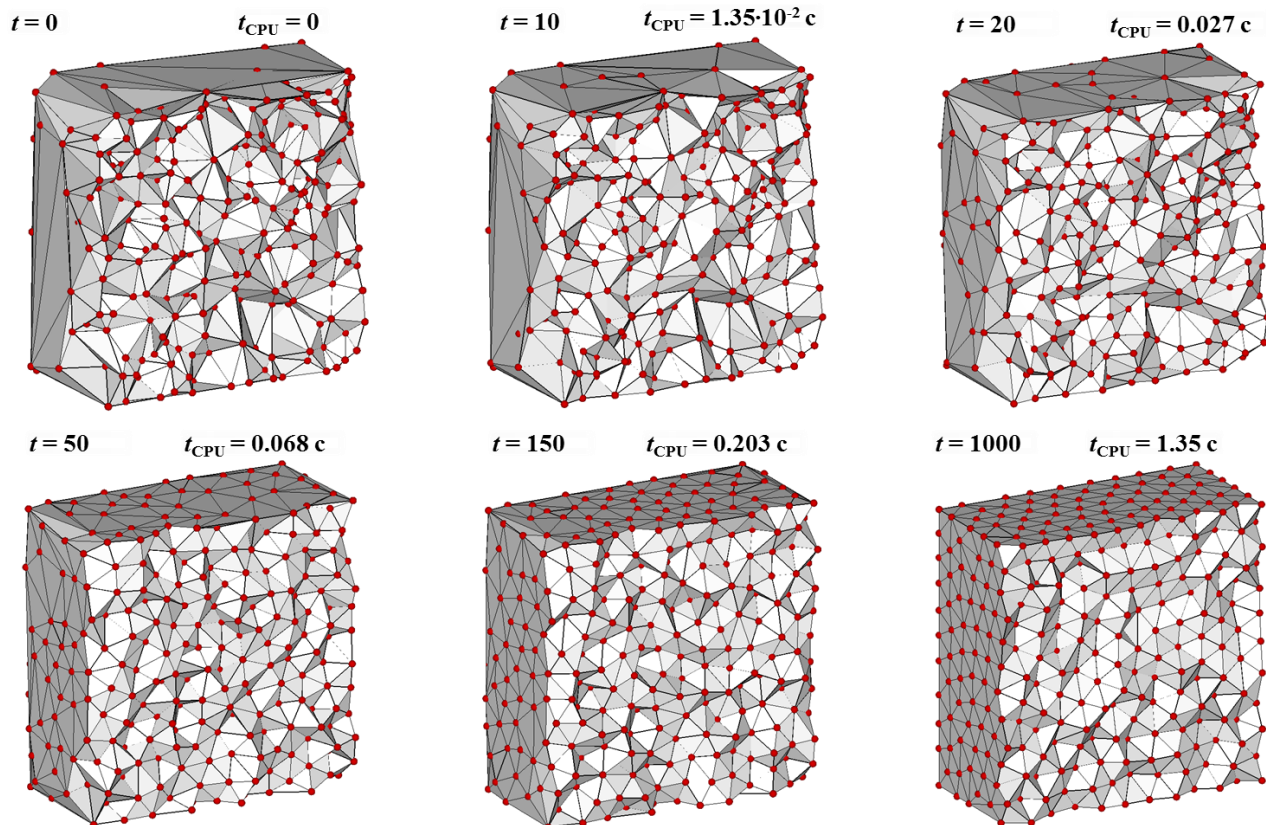


Рис.3. Развитие процесса взаимодействия частиц в 2D (вверху) и 3D пространстве (внизу)

Построение “идеальной” структуры узлов с менее плотной упаковкой, свойственной для четырехугольных и гексаэдральных сеток требует создания более сложной модели взаимодействия между частицами. Ранее отмечалось, что для образования плотноупакованной структуры узлов треугольных и тетраэдральных сеток достаточно действия центральных сил взаимодействия, т.е. сил направленных по линии, соединяющей взаимодействующие частицы и зависящих только от расстояния между ними. Очевидно, что ориентация ра-

диус-вектора j -й частицы \vec{r}_{ij} в пространстве никак не влияет на модуль силы взаимодействия, вследствие свойства изотропности (рис 4).

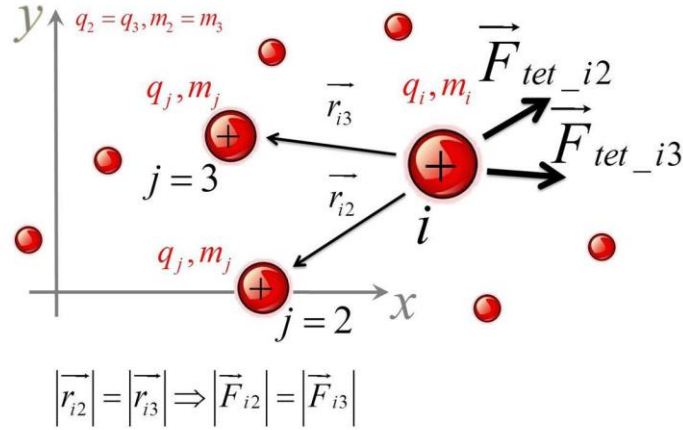


Рис.4. Модель взаимодействия между подвижными частицами, использующаяся для оптимального распределения плотноупакованных узлов треугольной сетки

С целью получения равновесного распределения узлов четырехугольной сетки на плоскости разработана следующая модель. Для каждого узла, как показано на рис. 5, выделяется четыре направления (показаны голубыми стрелками) вдоль локальных координатных линий (штриховые прямые линии). На каждую i -ю частицу со стороны любой другой j -й частицы системы действует отталкивающая сила \vec{F}_{quad_ij} , модуль которой определяется не только расстоянием между взаимодействующими узлами, но и величиной углового сдвига φ_{ij} (минимальный угол между радиус-вектором \vec{r}_{ij} и одним из четырех направлений).

$$\vec{F}_{quad_ij} = -C_1 \cdot d_i^a \cdot \frac{q_i q_j}{|\vec{r}_{ij}|^a} \cdot \frac{\vec{r}_{ij}}{|\vec{r}_{ij}|} (1 - C_2 \cdot \cos[2 \cdot \varphi_{ij}]), \quad a \geq 1, |\vec{r}_{ij}| = h, 0 \leq \varphi_{ij} \leq 45^\circ, 0 < C_2 < 1 \quad (3)$$

здесь φ_{ij} – угловой сдвиг, h – расстояние между взаимодействующими частицами, d_i – параметр, определяющий шаг сетки (расстояние между соседними частицами результирующего распределения). Для однородной сетки $d_i = const$. Благодаря дополнительному слагаемому, как видно из (3), модуль вектора силы отталкивания изменяется в зависимости от φ_{ij} и принимает свое минимальное значение при $\varphi_{ij} = 0$ (рис. 5). Из рис. 5, б можно получить представление о том, как изменяется сила отталкивания при вариации угла φ_{ij} ($h = const$).

Ближайшее направление, с которым радиус-вектор j -й частицы $\vec{r}_{ij}(r_x, r_y, r_z)$ образует минимальный угол φ_{ij} (рис. 5) определяется по величине проекции \vec{r}_{ij} на единичные вектора $\vec{D1}(D1_x, D1_y)$, $\vec{D2}(D2_x, D2_y)$, $\vec{D3}(D3_x, D3_y)$ и $\vec{D4}(D4_x, D4_y)$, соответствующие направлениям 1, 2, 3 и 4:

$$\begin{aligned} 1: & (D1_x \cdot r_x + D1_y \cdot r_y) \\ 2: & (D2_x \cdot r_x + D2_y \cdot r_y) \\ 3: & (D3_x \cdot r_x + D3_y \cdot r_y) \\ 4: & (D4_x \cdot r_x + D4_y \cdot r_y) \end{aligned} \quad (4)$$

Проекция радиус-вектора на искомое направление будет иметь максимальное значение.

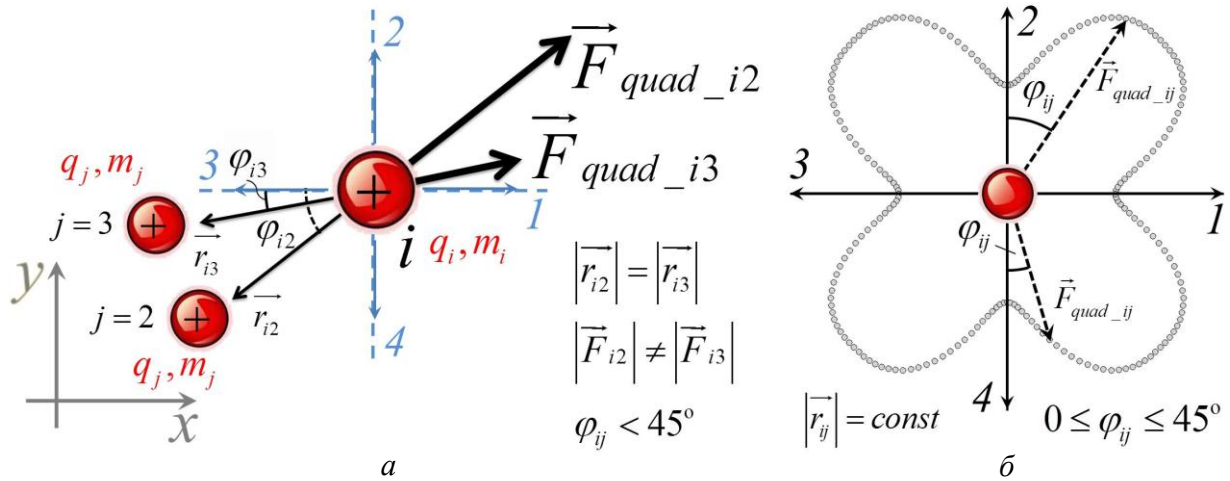


Рис.5. Схема взаимодействия между подвижными частицами, применяющаяся при распределении узлов четырехугольной неструктурированной расчетной сетки (а). Характер изменения сил отталкивания для различных значений минимального угла φ_{ij} между радиус-вектором r_{ij} и одним из четырех выделенных направлений при неизменном расстоянии между взаимодействующими частицами (б)

После вычисления проекций и нахождения ближайшего направления, соответствующего максимальному значению (4), рассчитывается φ_{ij} .

$$\varphi_{ij} = \arcsin\left(\left[DN_x \cdot r_x + DN_y \cdot r_y\right] / \sqrt{r_x^2 + r_y^2}\right), \quad N = 1 \vee 2 \vee 3 \vee 4, \quad 0 \leq \varphi_{ij} \leq 45^\circ \quad (5)$$

В примере, приведенном на рис. 5, локальные координатные линии частиц (штриховые прямые линии) направлены вдоль координатных осей ($D1_x = 1, D1_y = 0$). В общем случае они могут быть повернуты на произвольный угол α_i (рис. 6), но остаются перпендикулярными друг другу. Очевидно, что для узлов четырехугольной сетки будет справедливо:

$$\begin{aligned} D2_x &= -D1_y, D2_y = D1_x \\ D3_x &= -D1_x, D3_y = -D1_y \\ D4_x &= -D2_x, D4_y = -D2_y \end{aligned} \quad (6)$$

Таким образом, в предложенной модели взаимодействия частицы получают дополнительную третью степень свободы – вращение вокруг центра масс (рис. 6). Это позволит ориентировать подвижную частицу таким образом, чтобы одна из локальных координатных линий совпадала с нормалью к границе расчетной области (более подробно проблема взаимодействия подвижных частиц с границей расчетной области будет обсуждаться ниже).

На рис. 7 показан процесс распределения подвижных узлов на плоскости в ходе создания четырехугольной неструктурированной расчетной сетки (локальные координатные линии частиц направлены вдоль координатных осей, т.е. $D1_x = 1, D1_y = 0$).

При повороте на угол $\alpha_i \neq 0$ используются соотношения:

$$D1_x = \cos(\alpha_i), D1_y = \sin(\alpha_i) \quad (7)$$

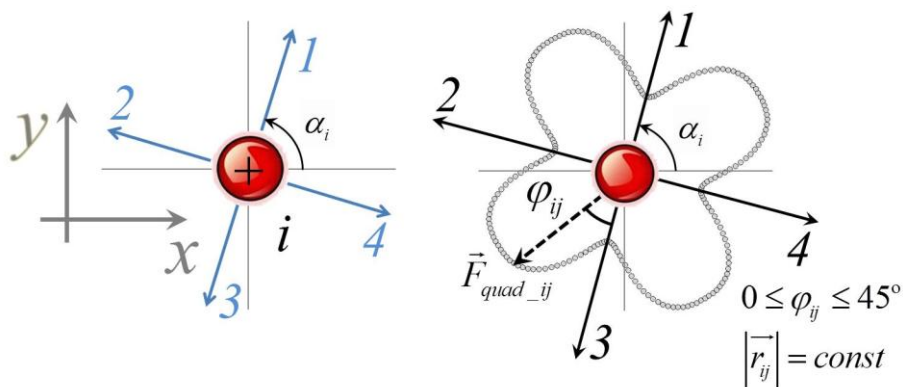


Рис.6. Поворот локальной системы координат подвижной частицы на угол α_i (слева) и характер изменения сил отталкивания при вариации φ_{ij} (справа)

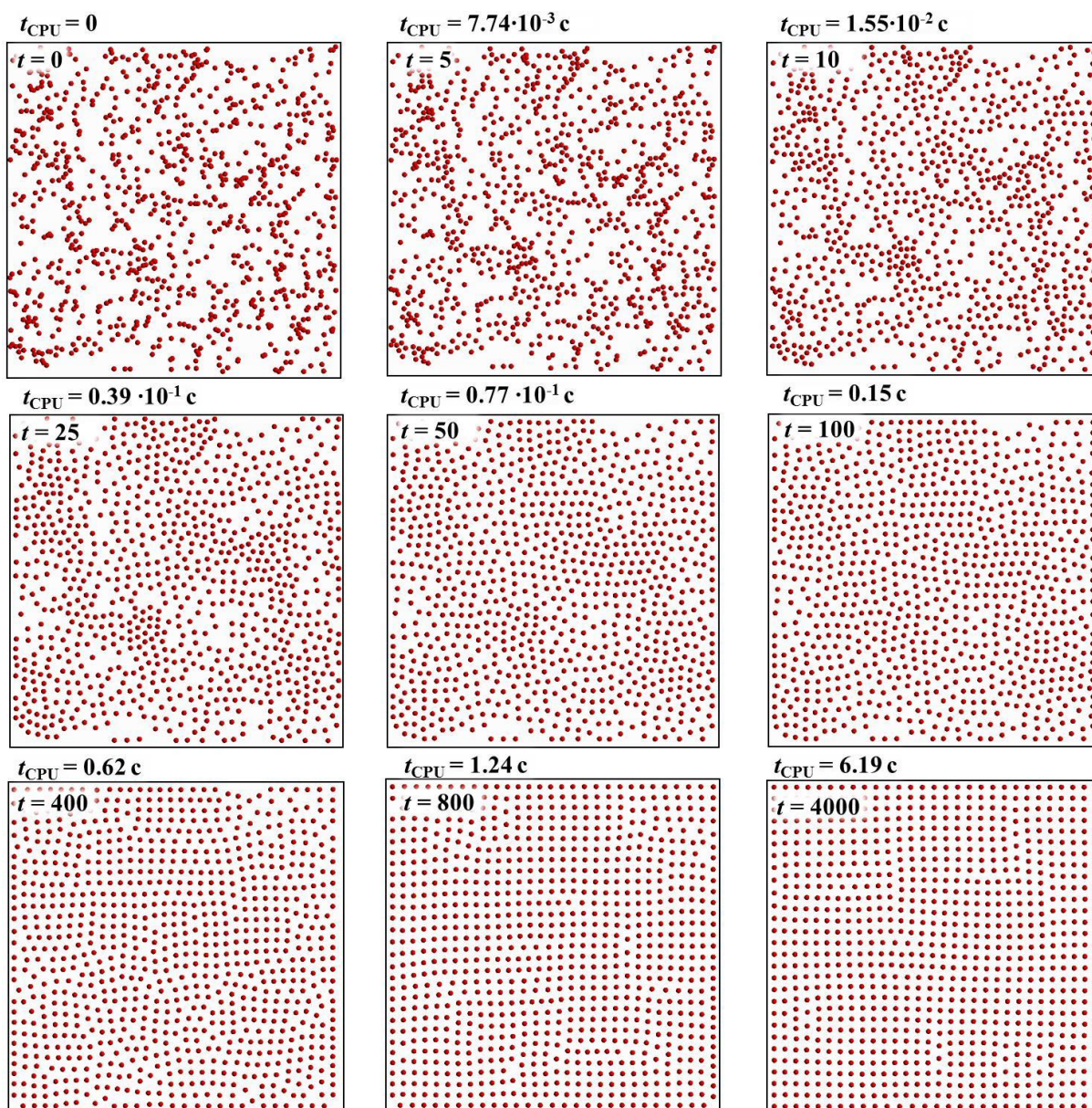


Рис.7. Распределение взаимодействующих частиц в двумерной расчетной области с целью создания четырехугольной неструктурированной расчетной сетки при $\alpha_i = 0$. Здесь и далее процессорное время t_{CPU} указано для процессора Intel Core i7-3770, 3.40 ГГц

Рис. 8 демонстрирует равновесные распределения взаимодействующих по закону (3) частиц для различных значений угла поворота α_i (в данном случае α_i одинаково для всех частиц).

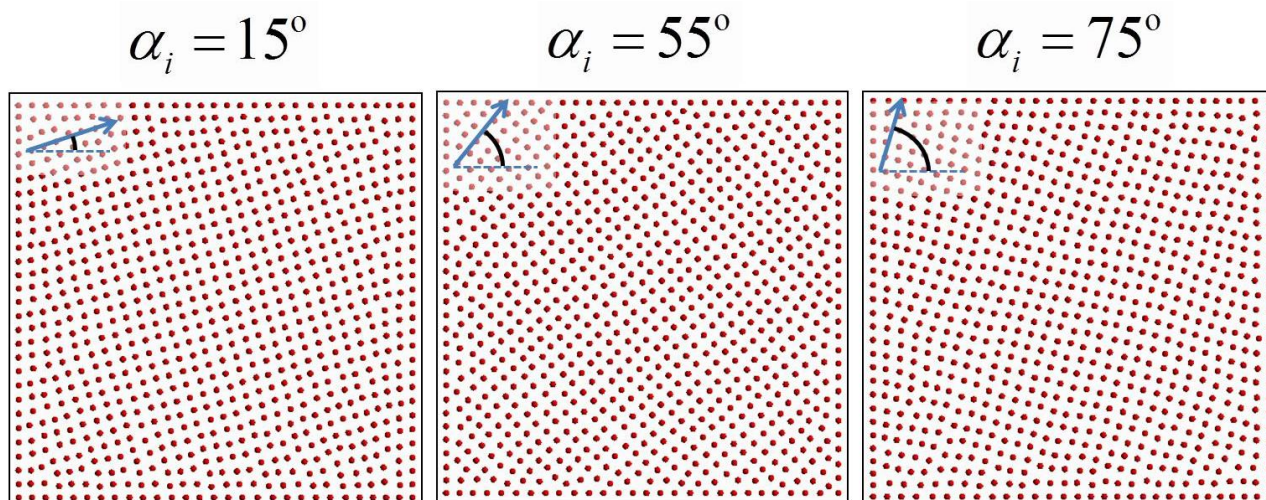


Рис.8. Изменение структуры равновесного расположения узлов расчетной сетки при различных значениях α_i

3. Модель взаимодействия подвижных частиц с границей расчетной области

Подход к построению расчетных сеток для решения современных задач механики сплошной среды со сложной геометрией расчетной области должен удовлетворять определенным требованиям. Наиболее важные из них – обеспечение возможности сгущения узлов к произвольной границе и сохранение ортогональности координатных линий сетки вблизи поверхностей, ограничивающих расчетную область.

Концепция молекулярно-динамического метода, подробно изложенная в предшествующих работах [21–23], предполагает использование иерархического подхода – сетка в пространстве расчетной области строится на основе уже полученного оптимального распределения узлов на ограничивающих поверхностях. При динамическом распределении частиц узлы на границах области рассматриваются как неподвижные частицы. В рамках разработанного подхода условие ортогональности легко выполняется благодаря возможности ориентировать подвижные частицы, так, чтобы одна из локальных координатных линий совпала с нормалью к ближайшей границе расчетной области (рис. 9). Так как граница области определяется с помощью неподвижных узлов, нормаль к границе, в свою очередь, задается направлением одной из локальных координатных линий фиксированных частиц. Реализация описанной технологии на простом примере распределения $N = 2500$ частиц, перемещающихся в двумерной расчетной области, представлена на рис. 10. Отметим, что с введением дополнительной степени свободы (вращение подвижной частицы вокруг центра масс) вычислительная сложность задачи моделирования возрастает очень незначительно.

Добиться сгущения узлов сетки к границе расчетной области можно, если принять параметр d_i в выражении (3), который отвечает за шаг будущей сетки, за переменную величину, зависящую от расстояния до стенки.

$$d_{i_var} = d_i + f(l_{min_b}), \quad (8)$$

здесь d_i – константа, задающая расстояние от стенки до первого слоя элементов, l_{min_b} – дистанция между подвижной частицей и ближайшим из фиксированных узлов, определяющих границу области. Таким образом, предложенная технология позволяет задавать практически любой закон сгущения узлов $f(l_{min_b})$, например линейный или квадратичный, по которому будет от слоя к слою изменяться шаг сетки.

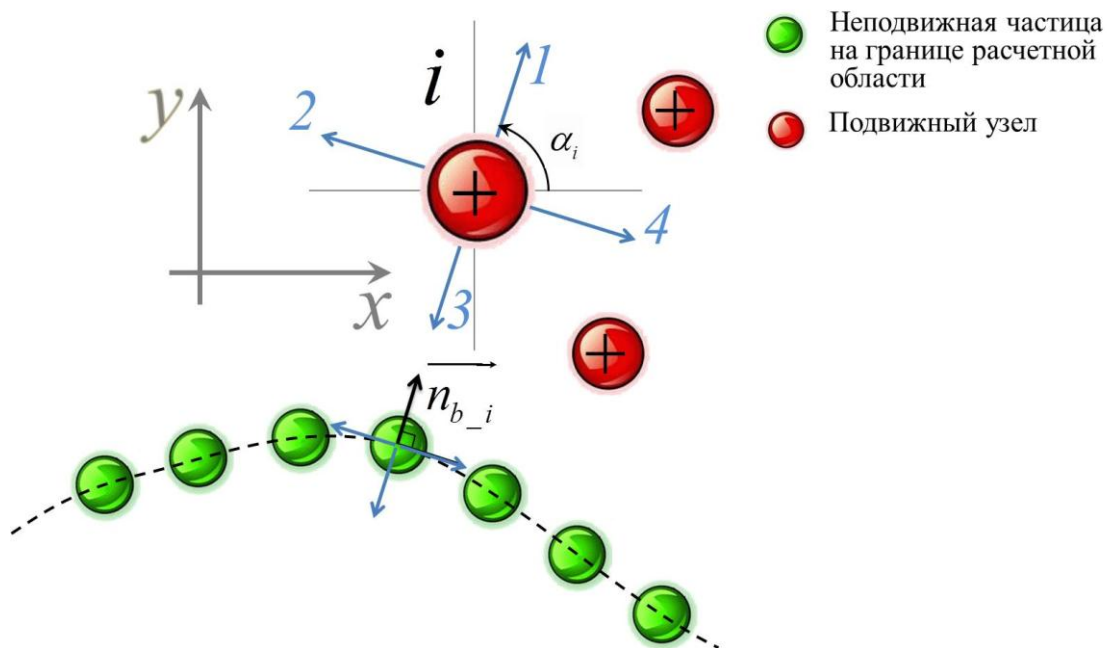


Рис.9. Ориентация локальных координатных линий подвижных частиц по нормали к границе расчетной области при моделировании взаимодействия с границей

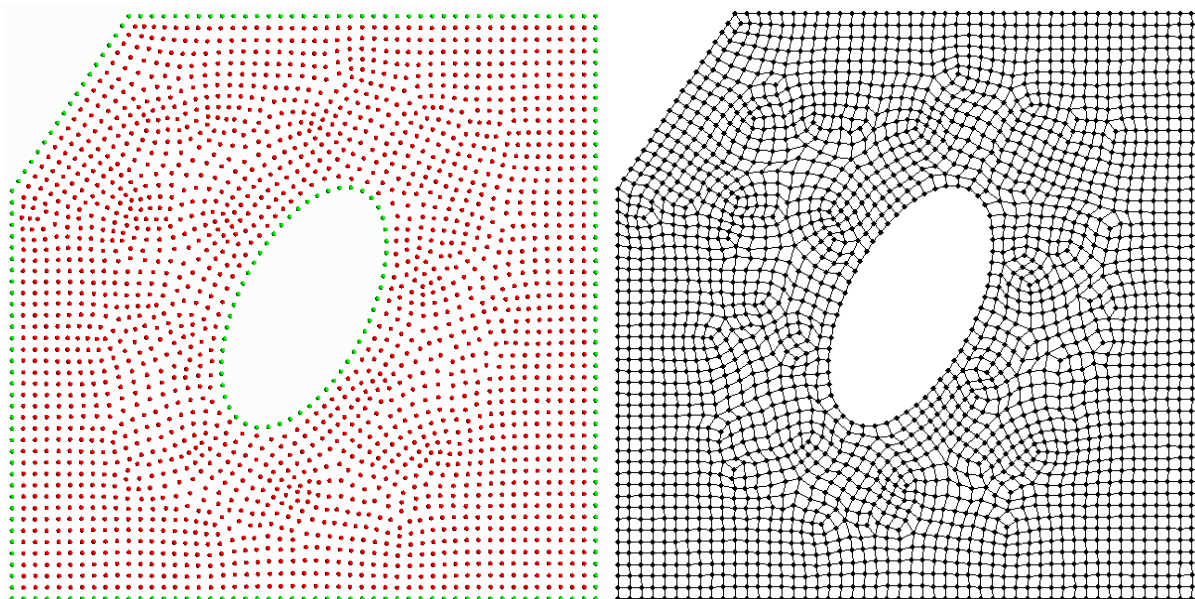


Рис.10. Результирующее распределение узлов ($N = 2300$) однородной неструктурированной четырехугольной сетки в двумерной расчетной области, границы которой заданы множеством неподвижных частиц (слева) и соответствующая этому распределению четырехугольная расчетная сетка (справа). Процессорное время $t_{CPU} = 31$ с

Благодаря вариации параметра d_i по линейному закону получается структура, представленная на рис. 11. Здесь показан процесс распределения узлов адаптивной четырехугольной сетки на плоскости для фрагмента двумерной расчетной области.

Метод может применяться для адаптации сеток к границам произвольной формы, что продемонстрировано ниже (рис. 12, 13). На рис. 12 (слева) показано результирующее распределение частиц ($N = 10000$) в расчетной области, рассмотренной в предыдущем примере.

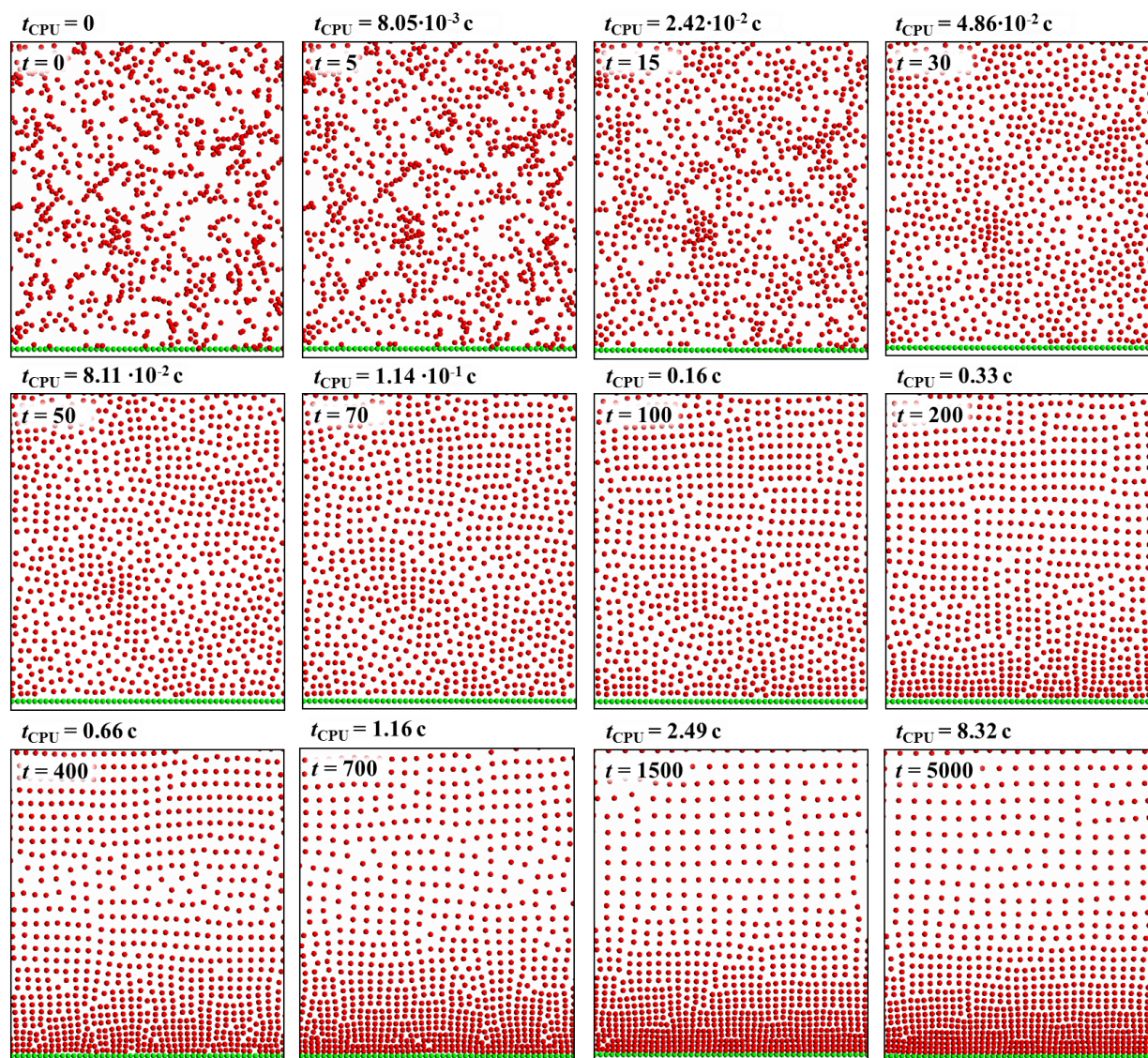


Рис.11. Процесс распределения узлов адаптивной четырехугольной сетки со сгущением к границе (фрагмент двумерной расчетной области)

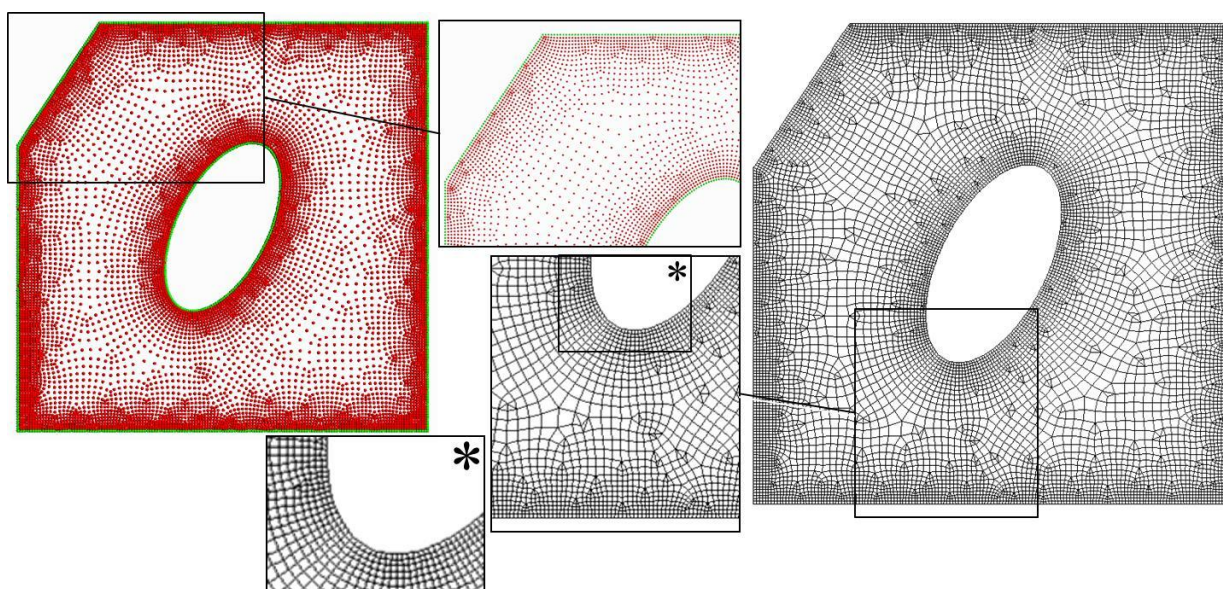


Рис.12. Результирующее распределение узлов в двумерной расчетной области и соответствующая ему адаптивная неструктурированная сетка. Процессорное время $t_{CPU} = 263$ с

Выбор узлов для формирования четырехугольных элементов проводится на основе так называемого “списка ближайших соседей”, который формируется для каждой подвижной частицы в ходе молекулярно-динамического моделирования (метод “ближайших соседей” широко применяется при решении самых различных задач методами молекулярной динамики [21–23]). Из соседних узлов выбираются такие, с которыми данный узел образует четырехугольный элемент требуемого качества – обладающий минимальной скошенностью (все углы четырехугольника близки к 90°). Благодаря оптимальному распределению узлов удается получить результирующую сетку с достаточно качественными четырехугольными элементами. При сложной конфигурации границы расчетной области, а также необходимости сильного сгущения узлов возможно возникновение незначительного числа сильно скошенных элементов. В этом случае вместо четырехугольного элемента формируется два треугольника. На рис. 12, справа показана гибридная сетка с существенным преобладанием четырехугольных элементов (порядка 95%). Сетка построена на основе результирующего распределения узлов, представленного на том же рисунке слева. Особо нужно отметить, что вблизи границ расчетной области генерируются очень качественные четырехугольные элементы.

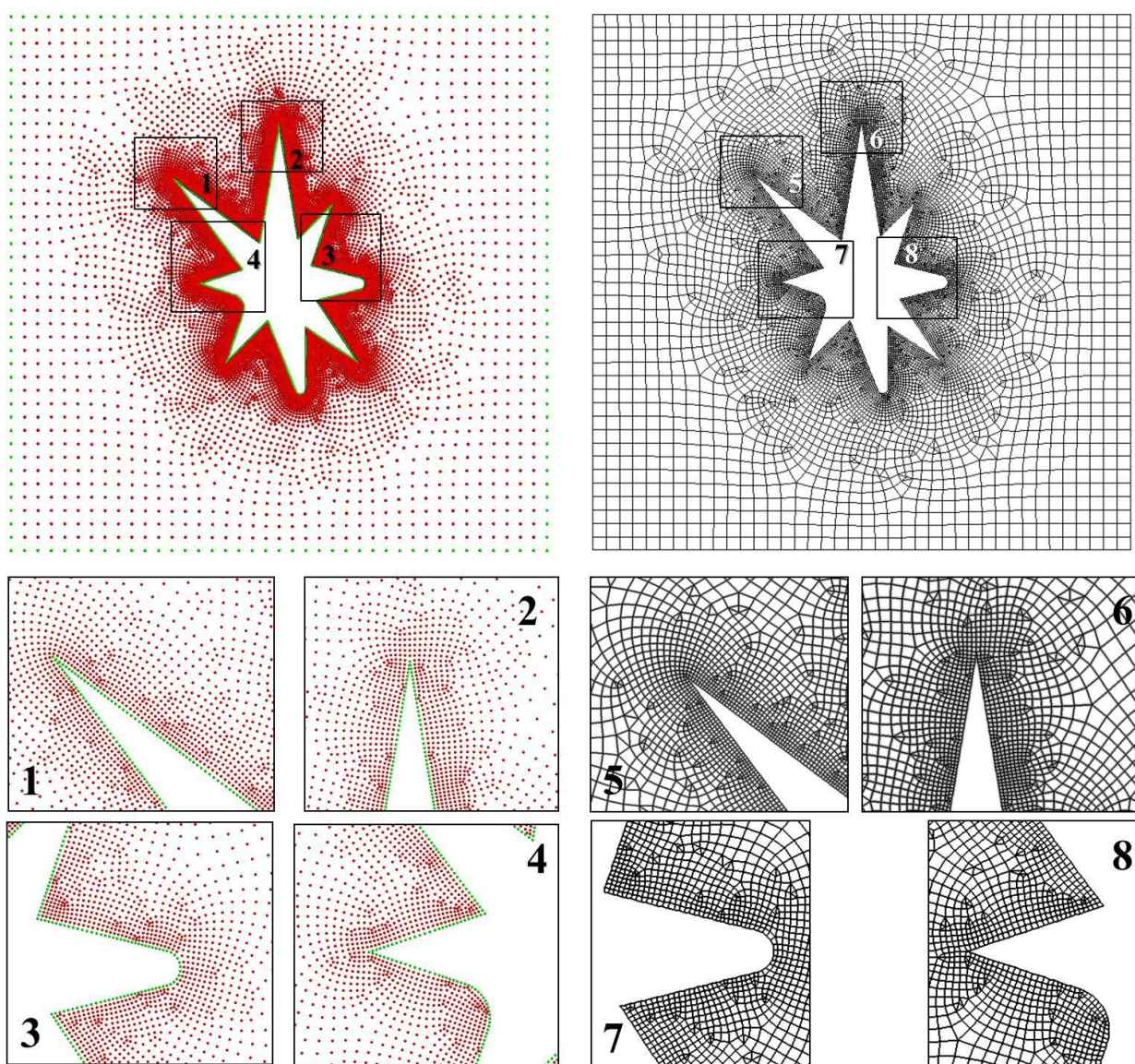


Рис.13. Узлы адаптивной расчетной сетки со сгущением к произвольной границе с особенностями, и гибридная расчетная сетка, соответствующая полученному распределению. Процессорное время $t_{CPU} = 289$ с.

Отдельно необходимо рассмотреть вопрос качества молекулярно-динамических сеток вблизи остроугольных элементов границы расчетной области. Рис. 13 демонстрирует возможности метода описывать не только гладкие выпуклые и вогнутые участки границы, но и разрешать особенности геометрии в виде острых углов.

На рисунке (слева) представлено результирующее распределение частиц ($N = 10000$) в сложной расчетной области и ее увеличенные фрагменты вблизи границ произвольной конфигурации. Справа помещена соответствующая гибридная сетка, включающая преимущественно четырехугольные элементы (последние составляют приблизительно 94% от общего числа ячеек). Рядом в более крупном масштабе показана структура сетки около различных особенностей геометрии.

4. Молекулярно-динамический метод построения гексаэдральных расчетных сеток

Сложность реализации предложенного подхода для распределения узлов гексаэдральных элементов возрастает незначительно. При переходе к трехмерному пространству число степеней свободы подвижной частицы достигает шести: три координаты центра масс, задающие положение и три угла, описывающие ориентацию узла. Число выделенных направлений узла гексаэдральной сетки будет равно шести (рис. 14, а).

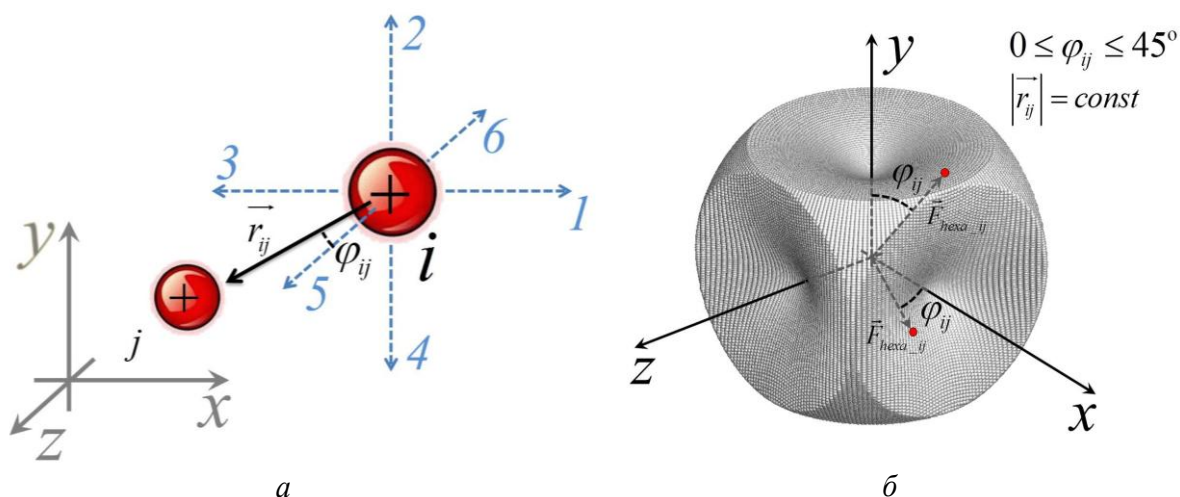


Рис.14. Схема взаимодействия между подвижными частицами при распределении узлов гексаэдральной неструктурированной сетки в трехмерном пространстве расчетной области (а). Характер изменения сил отталкивания при вариации зенитного угла φ_{ij} – минимального угла между радиус-вектором r_{ij} и одним из шести выделенных направлений (б)

Для расчета силы взаимодействия между i -й и j -й частицами, как и в двумерном случае, определяется направление (одно из шести), образующее с радиус-вектором j -й частицы \vec{r}_{ij} минимальный угол φ_{ij} (рис. 14, а). Вновь воспользуемся тем, что проекция радиус-вектора на искомое направление будет иметь максимальное значение. В трехмерном случае соотношения для проекций $\vec{r}_{ij}(r_x, r_y, r_z)$ на единичные вектора шести направлений $\vec{D1}(D1_x, D1_y, D1_z), \vec{D2}(D2_x, D2_y, D2_z), \dots, \vec{D6}(D6_x, D6_y, D6_z)$ по аналогии с (4), могут быть записаны в следующем виде:

$$\begin{aligned}
 1: & (D1_x \cdot r_x + D1_y \cdot r_y + D1_z \cdot r_z) \\
 2: & (D2_x \cdot r_x + D2_y \cdot r_y + D2_z \cdot r_z) \\
 3: & (D3_x \cdot r_x + D3_y \cdot r_y + D3_z \cdot r_z) \\
 4: & (D4_x \cdot r_x + D4_y \cdot r_y + D4_z \cdot r_z) \\
 5: & (D5_x \cdot r_x + D5_y \cdot r_y + D5_z \cdot r_z) \\
 6: & (D6_x \cdot r_x + D6_y \cdot r_y + D6_z \cdot r_z)
 \end{aligned} \tag{9}$$

В дальнейшем задача сводится к определению минимального угла φ_{ij} между радиус-вектором и ближайшим направлением.

$$\begin{aligned}
 \varphi_{ij} &= \arcsin \left(\left[DN_x \cdot r_x + DN_y \cdot r_y + DN_z \cdot r_z \right] / \sqrt{r_x^2 + r_y^2 + r_z^2} \right), \\
 N &= 1 \vee 2 \vee \dots \vee 6, \quad 0 \leq \varphi_{ij} \leq 45^\circ
 \end{aligned} \tag{10}$$

В трехмерном пространстве, как и в двумерном случае, угол сдвига φ_{ij} будет задавать силы взаимодействия между частицами:

$$\begin{aligned}
 \vec{F}_{hexa_{ij}} &= -C_1 \cdot d_i^a \cdot \frac{q_i q_j}{|\vec{r}_{ij}|^a} \cdot \frac{\vec{r}_{ij}}{|\vec{r}_{ij}|} (1 - C_2 \cdot \cos[2 \cdot \varphi_{ij}]), \\
 a &\geq 1, |\vec{r}_{ij}| = h, 0 \leq \varphi_{ij} \leq 45^\circ, 0 < C_2 < 1
 \end{aligned} \tag{11}$$

Как изменяется модуль силы отталкивания $\vec{F}_{quad_{ij}}$ в зависимости от угла φ_{ij} наглядно показано на рис. 14, б. Чем больше расстояние от начала координат до поверхности, тем больше сила отталкивания (расстояние между взаимодействующими частицами i и j фиксировано).

Процесс упорядочивания частиц в трехмерной расчетной области и их результирующее распределение показаны на рис. 15, 16. Как видно из рисунков в ходе молекулярно-динамического моделирования удается получить геометрически правильное расположение узлов в пространстве. В рассмотренном примере узлы ориентированы таким образом, что их локальные координатные линии совпадают с осями x, y и z . В общем случае узлы могут быть повернуты произвольным образом.

Для единичных взаимно ортогональных векторов, которые соответствуют шести выделенным направлениям узла гексаэдральной сетки (рис. 14, а), справедливы следующие соотношения:

$$\begin{aligned}
 D1_x D2_x + D1_y D2_y + D1_z D2_z &= 0 \\
 D3_x &= -D1_x, \quad D3_y = -D1_y, \quad D3_z = -D1_z \\
 D4_x &= -D2_x, \quad D4_y = -D2_y, \quad D4_z = -D2_z \\
 D5_x &= D1_y D2_z - D1_z D2_y, \quad D5_y = D1_z D2_x - D1_x D2_z, \quad D5_z = D1_x D2_y - D1_y D2_x \\
 D6_x &= -D5_x, \quad D6_y = -D5_y, \quad D6_z = -D5_z
 \end{aligned} \tag{12}$$

Таким образом, задание координат двух векторов $\overline{D1}(D1_x, D1_y, D1_z)$ и $\overline{D2}(D2_x, D2_y, D2_z)$ однозначно определяют ориентацию частицы в трехмерном пространстве.

Одно из преимуществ разработанного метода заключается том, что задача моделирования взаимодействия подвижных частиц со сложной границей расчетной области решается идентично двумерному случаю, рассмотренному выше.

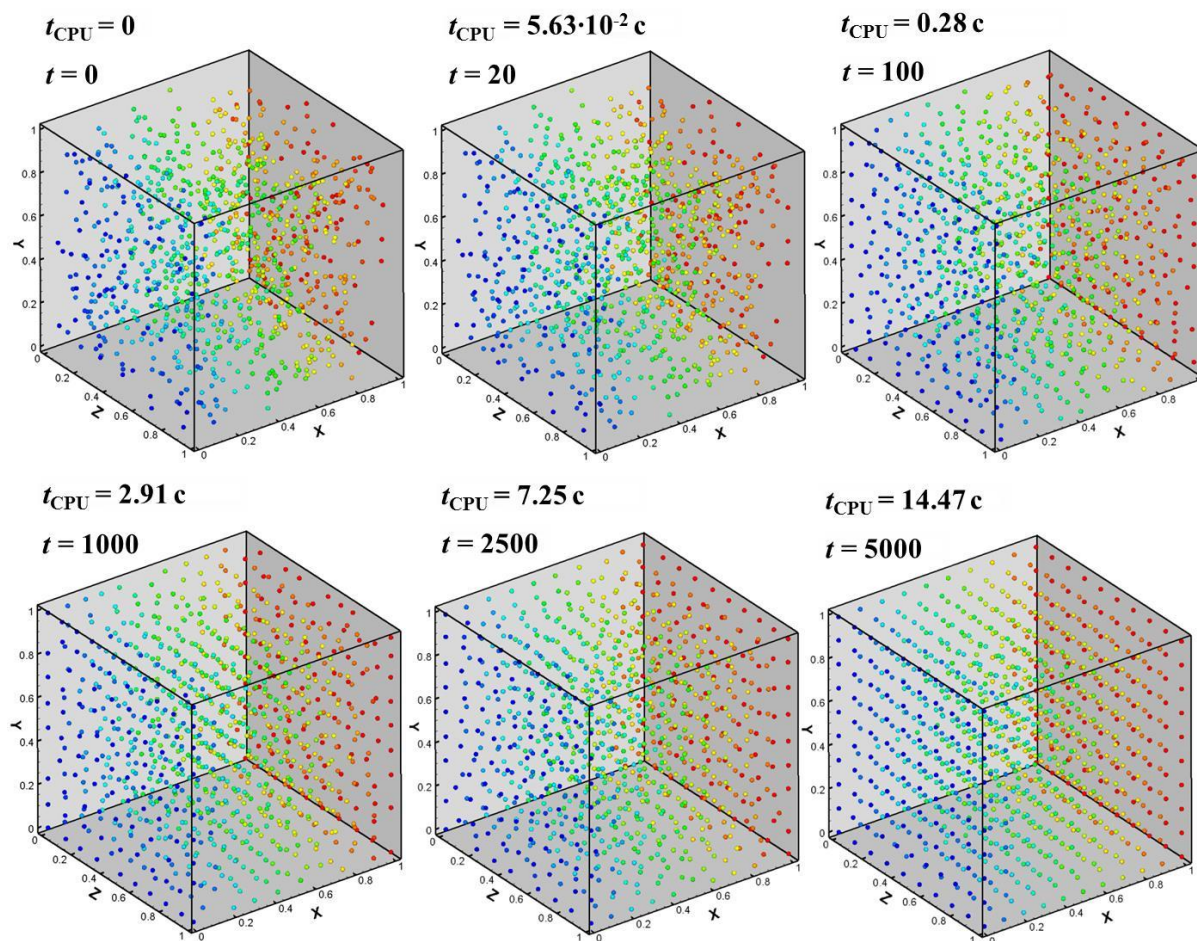


Рис.15. Процесс распределения узлов однородной гексаэдральной расчетной сетки в трехмерном пространстве (фрагмент расчетной области)

Следуя иерархическому принципу, сетка в объеме расчетной области строится на основе оптимального распределения узлов на ограничивающих поверхностях, полученного предварительно. Задача распределения узлов неструктурированной сетки по произвольным поверхностям, заданным параметрически, с использованием молекулярно-динамического моделирования решена в [22]. Частицы, задающие границы расчетной области рассматриваются как неподвижные (рис. 17). По аналогии с двумерным случаем, подвижные узлы ориентируют так, чтобы один из шести векторов (например $\overline{D1}$) был направлен по нормали к ограничивающей поверхности, а другой (например $\overline{D2}$) параллелен одной из локальных координатных линий ближайшей фиксированной частицы на границе (рис. 17).

Технология сгущения узлов расчетной сетки к произвольной границе в трехмерном пространстве концептуально не отличается от метода адаптации, разработанного для двумерного случая.

По аналогии с (8) расстояние между каждым последующим слоем узлов по мере отдаления от границы может меняться по произвольному закону посредством вариации d_i в формуле (11).

$$d_{i_var} = d_i + f(l_{min_b}), \quad (13)$$

здесь, как и в соотношении (8), d_i – константа, задающая расстояние от стенки до первого слоя элементов, l_{min_b} – дистанция между подвижной частицей и ближайшим из фиксированных узлов, определяющих границу расчетной области.

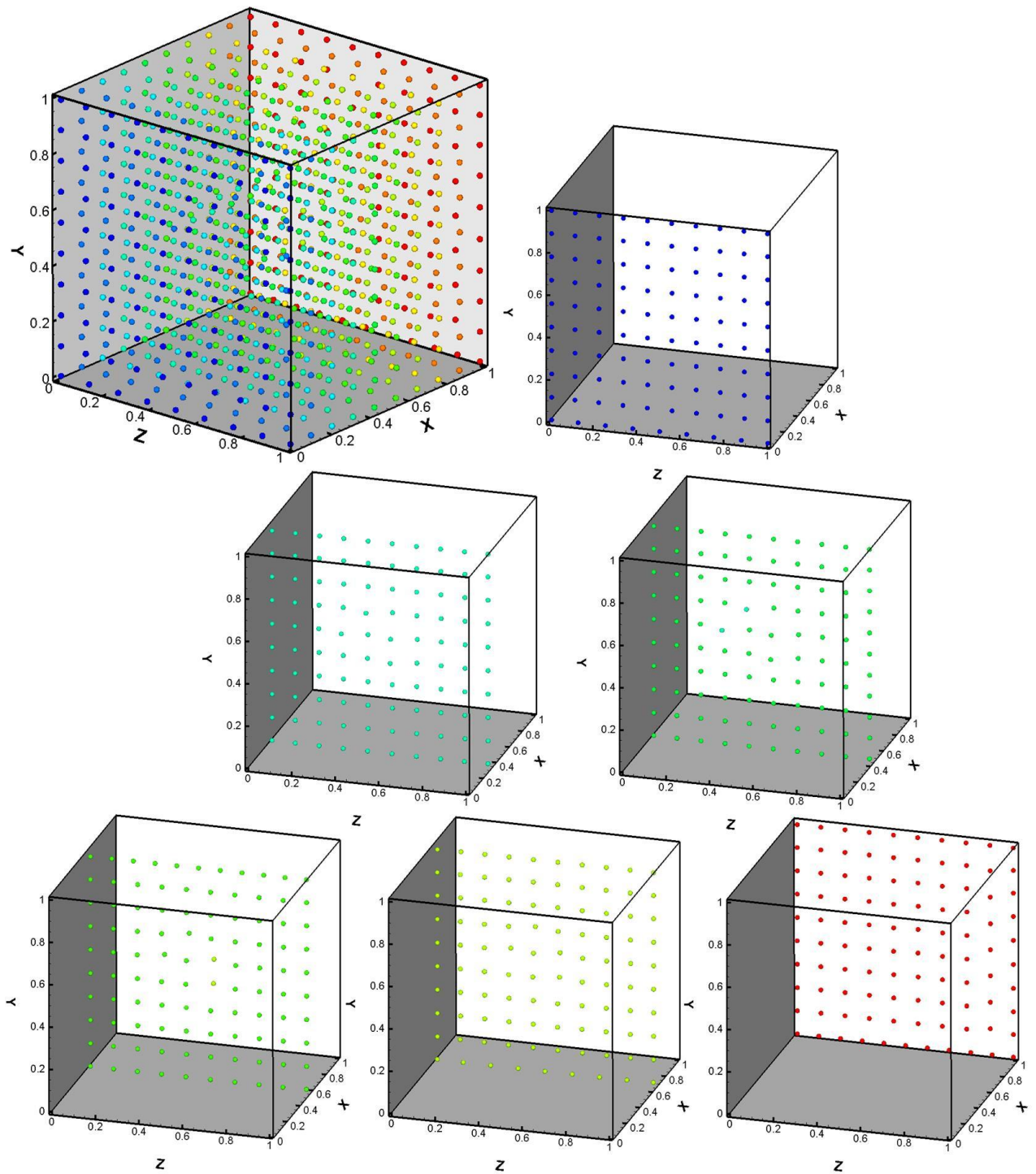


Рис.16. Результирующее упорядоченное распределение частиц в пространстве расчетной области и его структура в различных плоскостях.

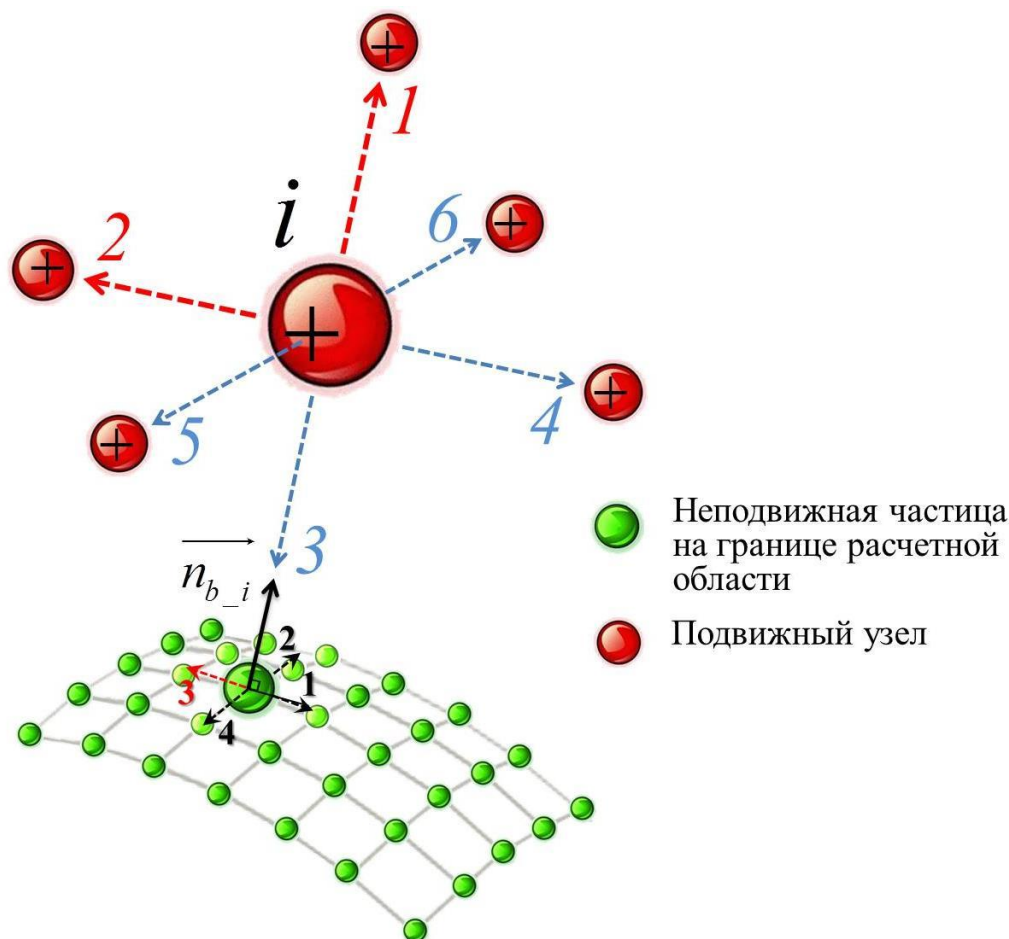


Рис.17. Ориентация одной из локальных координатных линий подвижной частицы по нормали к ограничивающей поверхности, а другой вдоль координатной линии, соответствующей направлению “3” ближайшего фиксированного узла, при моделировании взаимодействия с границей трехмерной расчетной области

Возможности метода иллюстрируют рис. 18, 19, на которых показаны фрагменты трехмерной адаптивной смешанной сетки, построенной для CAD-модели гиперзвукового летательного аппарата X-33 [22, 31] с использованием рассмотренной методики. Рисунки дают представление о структуре сетки около затупленной носовой части X-33, а также вблизи стабилизатора с заостренными кромками. Расчетная сетка составлена из тетраэдральных и гексаэдральных элементов с принципиальным преобладанием последних. При переходе от двумерного к трехмерному пространству технология наследует все преимущества двумерного подхода. В пристеночной области подвижные частицы выстраиваются в строгом порядке, свойственном расположению атомов в кристаллических телах. Благодаря согласованной ориентации локальных координатных линий каждого узла, вблизи границ появляются выраженные “сеточные направления”, характерные для структурированных сеток.

Формирование гексаэдральных элементов на основе результирующего распределения частиц проводится в соответствии с принципами, сформулированными для плоского случая. Для отдельного узла из списка его ближайших соседей выбираются такие, с которыми данный узел образует ячейку с минимальной скошенностью (мерой скошенности ячеек выступает отклонение угла между гранями от 90°). В рассмотренном на рис. 18, 19 примере максимально допустимое значение данного параметра принималось равным 25° . Если элемент не удовлетворял заданным показателям качества, вместо него формировались тетраэдры. С использованием настоящей методики удастся построить гексаэдральные элементы очень высокого качества в пристеночной области и достичь удовлетворительных результатов в отдалении от границ (число тетраэдральных элементов сетки не превышает 0.5%

вблизи границ, и 5% в остальной области). Представление о структуре результирующей сетки дает рис. 19, на котором, справа, изображено несколько слоев расчетных ячеек.

Таким образом, разработанный подход позволяет генерировать сетки, лишь незначительно уступающие по качеству разрешения пристеночной области ортогональным структурированным гексаэдральным сеткам.

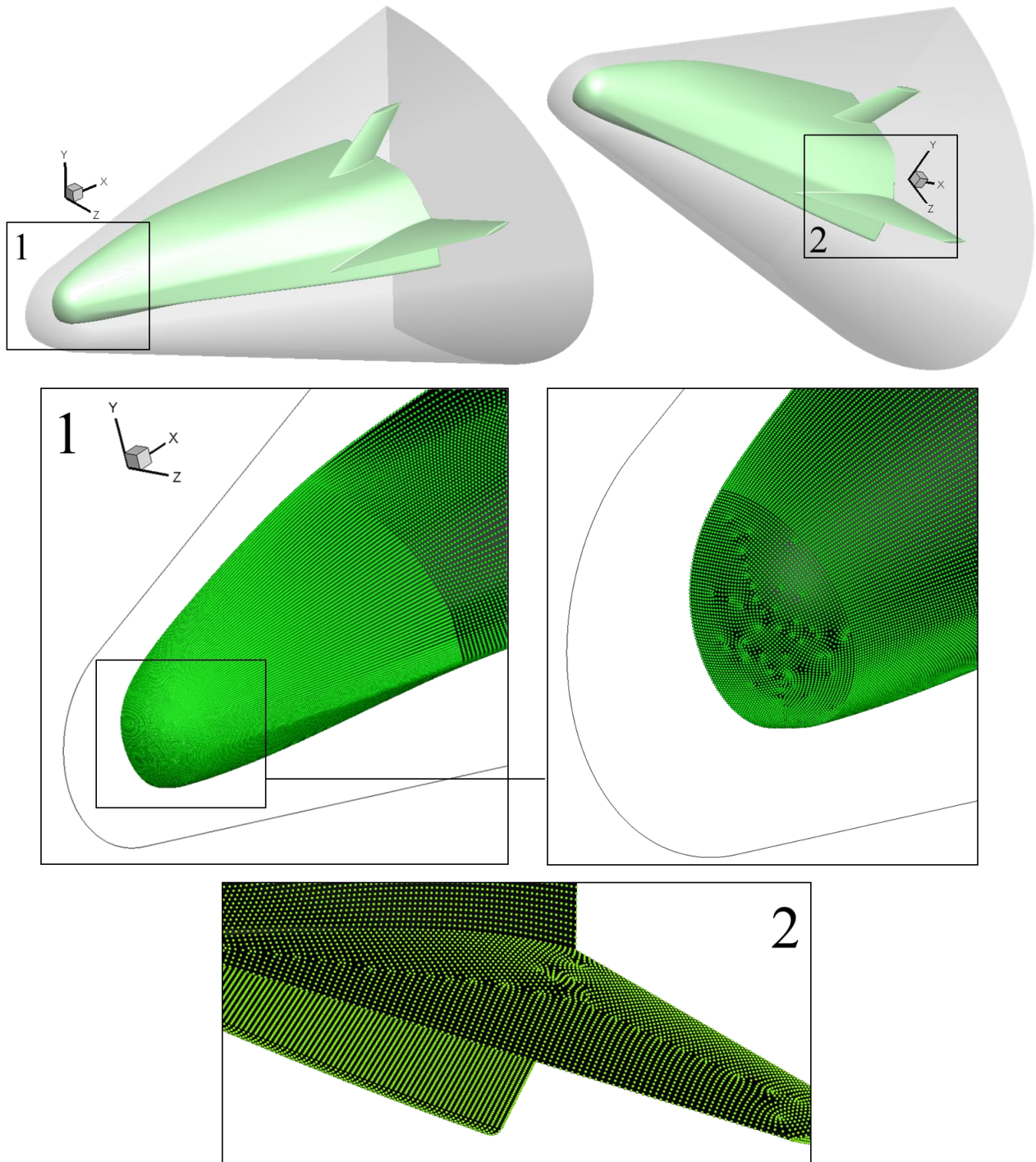


Рис.18. Геометрическая модель гиперзвукового летательного аппарата X-33 (вверху) и результирующее распределение фиксированных частиц по ее за-
тупленной носовой части (в центре), а также задней поверхности со стаби-
лизатором (внизу)

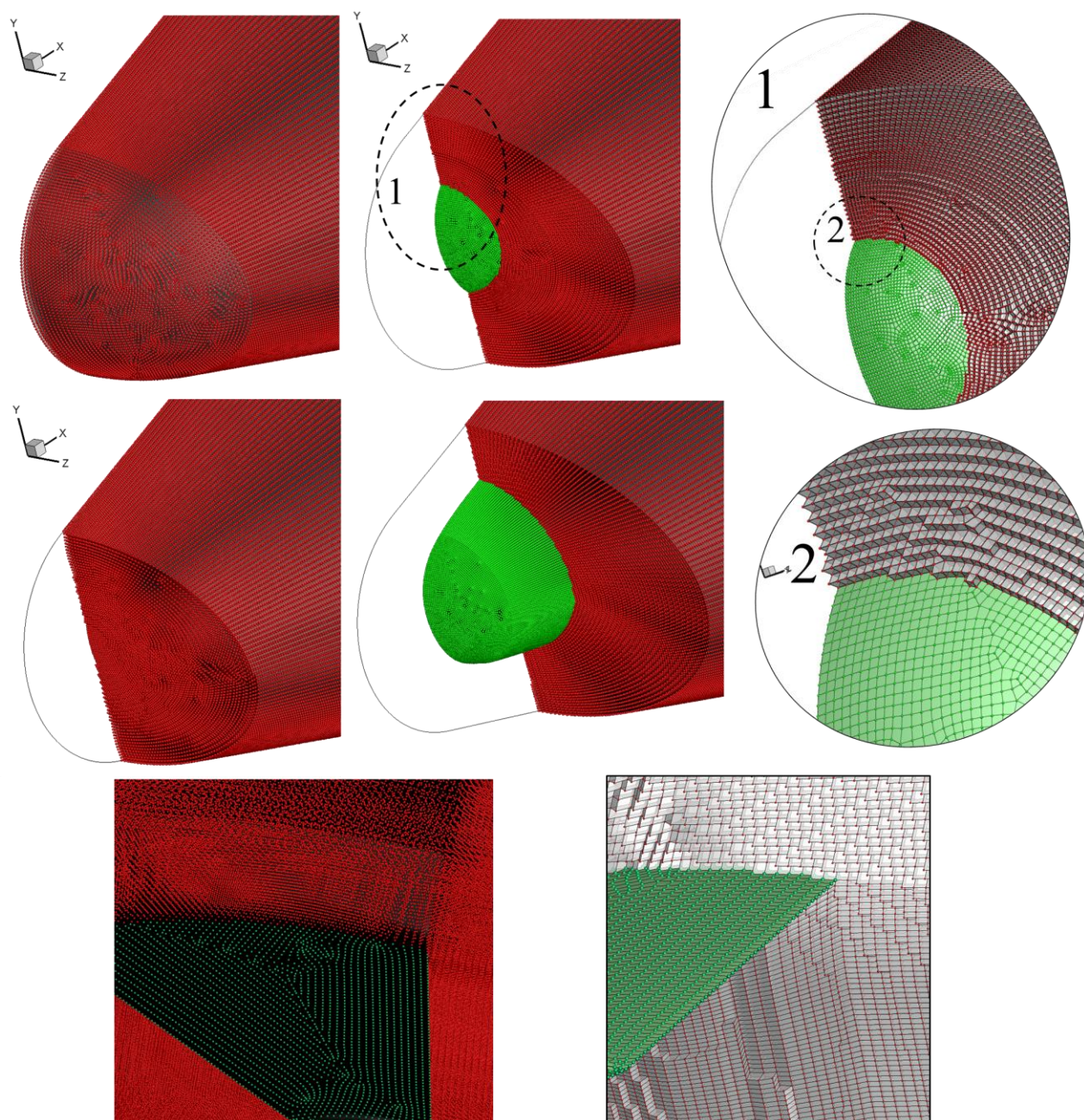


Рис.19. Структура упорядоченного распределения подвижных частиц ($N=500000$) в трехмерной расчетной области вблизи закругленной носовой части модели ГЛА X-33 и стабилизатора с острыми кромками в различных сечениях. Фрагменты расчетной сетки, соответствующей данному распределению узлов. Процессорное время $t_{CPU} = 18017$ с (около 5 часов)

Заключение

Предложен подход к полностью автоматическому построению неструктурированных четырехугольных, гексаэдральных, а также гибридных сеток. Созданная технология построения сеточных моделей для решения современных задач механики сплошной среды со сложной геометрией расчетной области основана на использовании методов молекулярной динамики. Алгоритм позволяет генерировать двумерные четырехугольные и пространственные гексаэдральные сетки высокого качества для областей произвольной формы. При переходе от двумерного пространства к трехмерному сложность реализации алгоритма возрастает лишь незначительно. Метод является универсальным, и может использоваться

для построения сеток как тетраэдральных (треугольных), так и шестигранных (четырёхугольных), а также гибридных с любым желаемым соотношением между элементами указанных типов.

Предложенный метод характеризуется высокой скоростью работы и простотой реализации, свойственной непрямому подходу, при этом, в отличие от последних, обеспечивает высокое качество элементов. В пристеночной области подвижные частицы выстраиваются в строгом порядке, свойственном расположению атомов в кристаллических телах. Благодаря согласованной ориентации локальных координатных линий каждого узла, вблизи границ появляются выраженные “сеточные направления”, характерные для структурированных сеток. Разработанный подход позволяет генерировать сетки, лишь незначительно уступающие по качеству разрешения пристеночной области ортогональным структурированным гексаэдральным сеткам и достичь удовлетворительных результатов в отдалении от границ.

В рамках предложенного подхода разработана технология локального сгущения узлов к произвольным границам. При этом задача адаптации сеточных моделей решается идентично для двумерного и пространственного случаев. В работе приводятся различные примеры применения метода, иллюстрирующие его возможности.

Автор выражает благодарность своему научному руководителю, чл.-корр. РАН, проф. С.Т. Суржикову за идеи, положенные в основу данной работы.

Работа проведена в Лаборатории радиационной газовой динамики ИПМех РАН в рамках Программы фундаментальных исследований Отделения энергетики, машиностроения, механики и процессов управления (ОЭММПУ) РАН «Аэротермомеханика и навигация гиперзвуковых летательных аппаратов» (руководитель проекта академик Д.М.Климов), а также в рамках грантов РФФИ №№ 07–01–0133, 10–01–00544, 13–01–00537, 13–08–12033–ОФИМ, 11–08–12072–ОФИМ, гранта Президента РФ № МК–5324.2014.1 для государственной поддержки молодых российских ученых – кандидатов наук и программы сотрудничества ИПМех РАН и ВНИИА им. Н.Л.Духова.

Литература

1. Owen S.J. A survey of unstructured mesh generation technology // 14th International Meshing Roundtable. 1998. P. 239–267.
2. Blacker T.D., Stephenson M.B. Paving: A new approach to automated quadrilateral mesh generation // International Journal for Numerical Methods in Engineering. Vol. 32, №4, 1991. P. 811–847.
3. Tautges T.J. The generation of hexahedral meshes for assembly geometry: survey and progress // International Journal for Numerical Methods in Engineering. Vol. 50, №12, 2001. P. 2617–2642
4. Baker T.J. Mesh generation: Art or science? // Progress in Aerospace Sciences. Vol. 41, №1, 2005. P. 29–63.
5. Eppstein D. Linear complexity hexahedral mesh generation // In Symposium on Computational Geometry. 1996. P. 58–67.
6. Lo S.H. Generating Quadrilateral Elements on Plane and Over Curved Surfaces // Computers and Structures. Vol. 31, №3, 1989. P. 421–426.
7. Johnston B.P., Sullivan J.M., Kwasnik A. Automatic Conversion of Triangular Finite Element Meshes to Quadrilateral Elements // International Journal for Numerical Methods in Engineering, Vol.31, 1991. P. 67–84.
8. Lee C.K., Lo S.H. A New Scheme for the Generation of a Graded Quadrilateral Mesh // Computers and Structures. Vol. 52, 1994. P. 847–857.
9. Owen S.J., Staten M.L., Canann S.A., Saigal S. Advancing Front Quad Meshing Using Local Triangle Transformations // Proceedings 7th International Meshing Roundtable, 1998.
10. Owen S.J., Saigal S. H-Morph: An Indirect Approach to Advancing Front Hex Meshing // International Journal for Numerical Methods in Engineering. 2000. P.289–312.

11. Zhu J.Z., Zienkiewicz O.C., Hinton E., Wu J. A new approach to the development of automatic quadrilateral mesh generation // *International Journal for Numerical Methods in Engineering*. Vol. 32, 1991. P. 849–866.
12. Cass R.J., Benzley S.E., Meyers R.J., Blacker T.D. Generalized 3-D Paving: An Automated Quadrilateral Surface Mesh Generation Algorithm // *International Journal for Numerical Methods in Engineering*. Vol. 39, 1996. P.1475–1489.
13. Canann S.A. Plastering and Optsmoothing: New Approaches to Automated, 3D Hexahedral Mesh Generation and Mesh Smoothing / Ph.D. Dissertation, Brigham Young University, Provo, UT. 1991.
14. Blacker T.D., Myers R.J. Seams and Wedges in Plastering: A 3D Hexahedral Mesh Generation Algorithm // *Engineering With Computers*. Vol.2, 1993. P.83–93.
15. Yerry M.A., Shephard M.S. A modified-quadtrees approach to finite element mesh generation // *IEEE Computer Graphics Appl*. Vol. 3, 1983. P.39–46.
16. Shephard M.S., Georges M.K. Automatic three-dimensional mesh generation by the finite octree technique // *Int. J. Numer. Methods Eng*. Vol. 32, 1991. P.709–749.
17. Schneiders R., Schindler R., Weiler F. Octree-based Generation of Hexahedral Element Meshes // *Proc. 5th International Meshing Roundtable, Sandia National Laboratories*. P.205–216.
18. Schneiders R., Oberschelp W., Weiler F., Kopp R., Bunten R., Franzke M. Automatic generation of hexahedral element meshes for the simulation of metal forming processes // *Proceedings of the fourth international conference on Num. Grid Gen. Comp. Fluid. Dyn.*, 1994. P.223–233.
19. Schneiders, R., Bunten, R. Automatic generation of hexahedral finite element meshes // *Computer Aided Geometric Design*. Vol. 12, 1995. P.693–707.
20. Schneiders R. Octree-based hexahedral mesh generation // *Int. J. of Comp. Geom. and Applications*. Vol. 10, №4, 2000. P. 383–398.
21. Zheleznyakova A.L., Surzhikov S.T. Molecular dynamic-based unstructured grid generation method for aerodynamic application // *Computer Physics Communication*, v.184, (2013) P.2711–2727.
22. Zheleznyakova A.L. Molecular dynamics-based triangulation algorithm of free-form parametric surfaces for computer-aided engineering // *Computer Physics Communication*. 2015. <http://dx.doi.org/10.1016/j.cpc.2014.12.018>.
23. Железнякова А.Л. Молекулярно-динамический метод построения неструктурированных сеток в сложных пространственных областях и на криволинейных поверхностях // *Физико-химическая кинетика в газовой динамике*. 2012. Том 13, вып. 4. 6с. <http://chemphys.edu.ru/issues/2012-13-4/articles/368/>
24. Rogers D.F. An Introduction to NURBS with Historical Perspective. Morgan Kaufman Publishers, San Fransisco, 2001. 324 p.
25. Piegl L.A., Tiller W. The NURBS Book. Springer, 1997. 646 p.
26. Lee K. Principles of CAD/CAM/CAE Systems. Addison-Wesley, California, 1999. 582 p.
27. Скворцов А.В. Алгоритмы построения триангуляции с ограничениями // *Вычислительные методы и программирование*. №3, 2002. С. 82–92.
28. Скворцов А.В. Обзор алгоритмов построения триангуляции Делоне // *Вычислительные методы и программирование*. №3, 2002, С. 14–39.
29. Verlet L. Computer experiments on classical fluids. I. Thermodynamic properties of Lennard-Jones molecules // *Phys. Rev*. Vol. 159, 1967. P. 98–103.
30. Verlet L. Computer experiments on classical fluids. II. Equilibrium correlation functions // *Phys. Rev*. Vol 165, 1968. P. 201–214.
31. Cook S.A. X-33 Reusable Launch Vehicle Structural Technologies // *AIAA Paper 97-10873*, Nov. 1996.

Статья поступила в редакцию 11 сентября 2015 г.