# ПОСТРОЕНИЕ ДВУМЕРНЫХ НЕСТРУКТУРИРОВАННЫХ СЕТОК МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

## А.Л. Железнякова, С.Т.Суржиков

Институт проблем механики Российской академии наук, Москва, 119526, проспект Вернадского, д.101-1

#### Аннотация

Предложен численный метод построения двумерных неструктурированных расчетных сеток с использованием молекулярно-динамического моделирования. Подробно рассмотрен алгоритм создания треугольных неструктурированных сеток с использованием данной технологии. На различных примерах сеток, построенных для простых расчетных областей и многосвязных областей сложной формы с использованием моделей молекулярной динамики, исследуются возможности предлагаемого подхода. Приведены результаты применения молекулярно-динамического метода для построения треугольных неструктурированных сеток около гиперзвуковых летательных аппаратов сложной конфигурации. Излагается метод адаптации сеток, построенных по предложенной технологии, к криволинейным границам сложной формы.

#### TRIANGULAR MESH GENERATION BY MOLECULAR DYNAMICS METHOD

A new approach to triangular mesh generation based on the molecular dynamics method is proposed. Some examples are considered in order to illustrate the method's ability to generate a mesh for an aircraft with a complicated boundary. Mesh adaptation technology for molecular dynamics simulation is presented.

## 1. ВВЕДЕНИЕ

При решении задач вычислительной аэродинамики процесс построения расчетной сетки обычно весьма трудоемок, требует больших временных затрат и значительных усилий специалистов по численному моделированию. Точность и эффективность используемого численного метода часто существенно зависит от используемой расчетной сетки.

В настоящей работе предложен метод построения неструктурированных треугольных расчетных сеток с использованием молекулярно-динамического подхода. Рассмотрены возможности метода и примеры его применения к построению неструктурированных сеток для различных областей. Исследуются вопросы адаптации сеток к криволинейным границам сложных областей.

Неструктурированные сетки имеют бесспорное преимущество в том, что:

- для большинства задач, представляющих практический интерес, форма расчетной области очень сложна, и построение структурированной расчетной сетки в этом случае становится чрезвычайно трудоемким даже при использовании многоблочного подхода. Неструктурированные сетки могут быть приспособлены к любой желаемой геометрии (сетка имеет большую гибкость, применительно к сложным геометриям);
- процесс построения неструктурированных сеток может быть автоматизирован в высокой степени, что может существенно сократить временные затраты на генерацию сеток. В данной работе показано, что построение качественной неструктурированной сетки занимает максимум несколько часов. Для создания структурированной сетки иногда требуется несколько недель почти "ручной" работы вычислителя;
- неструктурированные сетки проще генерировать.

## 2. МОДЕЛЬ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ЧАСТИЦ МЕЖДУ СОБОЙ

Главная идея рассматриваемого метода состоит в том, что узлы будущей сетки это одноименно заряженные частицы, с зарядами  $q_i$ , имеющие массу  $m_i$ . Заряженные частицы взаимодействуют между собой. Силы взаимодействия имеют электрическую природу. Схема взаимодействия частиц между собой показана на рис. 1. С физической точки зрения, взаимодействующие частицы это материальные точки, не имеющие радиуса, и на рисунке показаны в виде шаров для наглядности.



Рис. 1. Схема взаимодействия частиц между собой

Рассмотрим систему из N таких взаимодействующих одноименно заряженных частиц. На отдельно взятую *i*-ю частицу со стороны каждой другой *j*-й частицы по закону Кулона будет действовать отталкивающая сила  $\vec{F}_{ij}$ . Абсолютная величина действующей силы будет определяться расстоянием между частицами; а ее вектор направлен вдоль прямой, соединяющей заряды, противоположно радиус-вектору  $\vec{r}_{ij}$ . Равнодействующую внутренних сил, действующих на *i*-ю частицу со стороны всех остальных частиц системы можно представить в виде:

$$\vec{F}_i = \sum_{j=1}^N \vec{F}_{ij}.$$
(1)

Сила  $\overline{F}_{ij}$  определяется из закона Кулона для двух взаимодействующих частиц, векторная форма записи которого может быть представлена в следующем виде:

$$\vec{F}_{ij} = -C \frac{q_i q_j}{l^3} \vec{r}_{ij}, \quad \left| \vec{r}_{ij} \right| = l,$$
(2)

здесь *l* длина радиус-вектора или расстояние между зарядами.

Полагается, что кроме силы кулоновского взаимодействия на частицу будет действовать сила сопротивления  $\overline{F}_{fr,i}$  (или сила вязкости), которая определяется скоростью частицы и имеет направление противоположное вектору скорости.

### 3. СИЛА СОПРОТИВЛЕНИЯ

Сила сопротивления играет важную роль в процессе моделирования. Для вычисления этой силы использовались различные степенные законы зависимости от скорости:

$$\overline{F}_{fr,i} = -K \frac{\left| \vec{v}_i \right|^m}{\left| \vec{v}_i \right|} \vec{v}_i, \quad m \ge 2.$$
(3)

Если моделировать поведение частиц в отсутствии силы трения процесс будет развиваться, как показано на рис. 2.



Рис. 2. Процесс взаимодействия частиц в прямоугольной расчетной области.  $\overline{F}_{fr,i} = 0, N = 560$ 

Частицы совершенно свободно перемещаются в заданной прямоугольной области. В отсутствии силы сопротивления взаимодействующим частицам не удается найти устойчивое расположение даже через сколь угодно большой промежуток времени. Картина процесса напоминает беспорядочное броуновское движение.

Если добавить силу сопротивления, картина взаимодействия кардинально изменится (рис. 3). Частицы перестают беспорядочно перемещаться по расчетной области и через достаточно короткий промежуток времени приходят к состоянию равновесия. Каждая частица занимает устойчивое положение (частицы совершают незначительные колебания с очень маленькой амплитудой около положений равновесия), более того, распределение частиц в расчетной области становится в высокой степени упорядоченным.



Рис. 3. Процесс взаимодействия частиц в прямоугольной расчетной области.  $\overline{F}_{jr,i} \neq 0, N = 560$ 

## 4. ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ЧАСТИЦ С ГРАНИЦАМИ РАСЧЕТНОЙ ОБЛАСТИ

Для моделирования процесса взаимодействия подвижных частиц с границей расчетной области применяется подход, разработанный для взаимодействия частиц между собой. Для этого по границе расчетной области, в общем случае произвольной криволинейной формы, также распределяются заряженные частицы  $q_{wj}$ , однако их перемещение в расчетной области и вдоль границы не допускается.

Расположение неподвижных частиц на границе расчетной области отвечает желаемому положению внешних узлов будущей расчетной сетки.

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:

$$\vec{F}_{ij wall} = -C_{wall} \frac{q_{wj} \cdot q_i}{\left| \vec{r}_{iwj} \right|^m \cdot \left| \vec{r}_{iwj} \right|} \vec{r}_{iwj}, \quad m \ge 1.$$
(4)

Схема взаимодействия между подвижной частицей и частицей стенки показана на рис. 4.



Рис. 4. Схема взаимодействия между подвижной частицей и частицей стенки

Чтобы подвижные частицы не покидали расчетную область необходимо располагать неподвижные частицы на границах области на относительно небольшом расстоянии друг от друга. Максимальное допустимое расстояние между частицами на границе области определяется общим количеством подвижных частиц (их плотностью вблизи границы) и, следовательно, средним расстоянием между внутренними близлежащими узлами будущей сетки.

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  $q_{wj}$  равномерно распределить между ними (рис. 5).



Рис. 5. Задание дополнительных узлов на границе расчетной области

## 5. ИНТЕГРИРОВАНИЕ УРАВНЕНИЙ ДВИЖЕНИЯ

Далее будем исходить из того, что все силы, действующие на каждую подвижную частицу расчетной области известны (см. рис. 1, 4). Как обсуждалось выше, эти силы, определяются кулоновским взаимодействием подвижных частиц между собой, а также взаимодействием подвижных частиц с неподвижными частицами на границах расчетной области и действием сил сопротивления. Мы можем вычислить суммарную равнодействующую силу, действующую на каждую подвижную частицу в определенный момент времени *t* как:

$$\vec{F}_{\Sigma i}(t) = \vec{F}_i(t) + \vec{F}_{fr,i}(t) + \vec{F}_{i wall}(t), \quad i = M + 1, ..., N.$$
(5)

$$\vec{F}_i = \sum_{j=M+1}^N \vec{F}_{ij},\tag{6}$$

– равнодействующая сил, действующих на *i*-ую частицу со стороны остальных подвижных частиц (N – общее число всех частиц, M – число неподвижных частиц на границах расчетной области);

$$\vec{F}_{i \text{ wall}} = \sum_{j=1}^{M} \vec{F}_{ij \text{ wall}}, \qquad (7)$$

 – равнодействующая сил, действующих на *i*-ю частицу со стороны неподвижных частиц на границах расчетной области.

– сила сопротивления  $\overline{F}_{f^{r},i}$  определена соотношением (3).

Теперь мы можем применить уравнение движения Ньютона для определения характеристик движения *i*-й частицы: скорости, ускорения, и наконец, координаты в каждый момент времени *t*.

Основной закон динамики для системы из *N* материальных точек можно записать в следующем виде:

$$m_i \frac{d\nu_i}{dt} = \vec{F}_i + \vec{F}_{fr,i} + \vec{F}_{i wall}, \quad i = M + 1, .., N.$$
(8)

Исходную систему из (*N* – *M*) уравнений замыкаем дифференциальными уравнениями для скорости, в результате получаем:

$$\begin{cases} m_i \frac{d\vec{v}_i}{dt} = \vec{F}_i + \vec{F}_{fr,i} + \vec{F}_{i wall}, \\ \vec{v}_i = \frac{d\vec{r}_i}{dt}, \end{cases} \quad i = M + 1, .., N. \tag{9}$$

или, в проекции на оси х и у:

$$\begin{cases}
m_{i} \frac{d\upsilon_{xi}}{dt} = F_{xi} + F_{fr,xi} + \vec{F}_{xi wall}, \\
m_{i} \frac{d\upsilon_{yi}}{dt} = F_{yi} + F_{fr,yi} + \vec{F}_{yi wall}, \\
\upsilon_{xi} = \frac{dr_{xi}}{dt}, \\
\upsilon_{yi} = \frac{dr_{yi}}{dt},
\end{cases}$$
(10)

Численное интегрирование уравнений движения проводилось по следующему алгоритму:

1) В начальный момент времени t = 0 задается число моделируемых частиц N, их массы  $m_i$ , заряды  $q_i$ . Координаты подвижных частиц  $x_i$ ,  $y_i$  в начальный момент времени задаются случайным образом.

2) В момент времени t = 0 частицы покоятся, т.е. начальные проекции скоростей равны 0 ( $v_{xi} = 0$ ,  $v_{yi} = 0$ ).

3) В момент времени  $t \neq 0$  равнодействующая всех сил, действующих на *i*-ю частицу (5) заставляет ее двигаться с ускорением (в проекциях на оси координат):

$$\begin{cases} a_{xi}(t) = \frac{1}{m_i} F_{\Sigma xi}(t), \\ a_{yi}(t) = \frac{1}{m_i} F_{\Sigma yi}(t). \end{cases}$$
(11)

4) Теперь зная ускорение, скорость и положение частицы в текущий момент времени можно вычислить скорость и новое положение частицы в следующий момент времени.

$$\begin{aligned}
\upsilon_{xi}(t+\delta t) &= \upsilon_{xi}(t) + a_{xi}(t)\delta t, \\
\upsilon_{yi}(t+\delta t) &= \upsilon_{yi}(t) + a_{yi}(t)\delta t, \\
x_i(t+\delta t) &= x_i(t) + \upsilon_{xi}(t+\delta t)\delta t, \\
y_i(t+\delta t) &= y_i(t) + \upsilon_{yi}(t+\delta t)\delta t.
\end{aligned}$$
(12)

5) Далее вычисленные значения компонентов скорости и координат частицы в момент времени  $t + \delta t$  используются для определения проекций силы  $F_{xi}(t + \delta t), F_{yi}(t + \delta t)$  и ускорения  $a_{xi}(t + \delta t), a_{yi}(t + \delta t)$  на оси координат.

1

### 6. МАКСИМАЛЬНЫЙ РАДИУС ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

Обратим внимание, что в выражениях (6,7) для учета сил взаимодействия между рассматриваемой ітой частицей и другими частицами суммирование производится по всем (!) частицам. При достаточно большом количестве частиц, учет взаимодействия всех частиц со всеми потребует слишком больших вычислительных ресурсов и расчетного времени. Поэтому для уменьшения расчетного времени вводился максимальный радиус взаимодействия между частицами -R<sub>max</sub>, т.е. *i*-тая частица вступает во взаимодействие только со своими ближайшими соседями (с частицами находящимися не дальше максимального радиуса взаимодействия). В расчетах максимальный радиус взаимодействия R<sub>max</sub> варьировался от величины среднего расстояния между соседними частицами до значений, при которых силами взаимодействия можно вообще пренебречь из-за их малости (радиус действия кулоновских сил взаимодействия). Интересно, что радиус взаимодействия существенно влияет на топологию сетки (рис. 6). Чем меньше радиус взаимодействия между частицами, тем менее упорядочены узлы сетки.



Рис. 6. Распределения узлов и соответствующие им сетки в круглой расчетной области диаметром D = 300 при различных максимальных радиусах взаимодействия ( $R_{\text{max}} = 100$ ;  $R_{\text{max}} = 50$ ;  $R_{\text{max}} = 30$ )

#### 7. ТОПОЛОГИЯ СЕТОК

Все методы триангуляции по принципу построения можно разбить на две большие группы. К первой группе относятся так называемые *прямые* методы, когда сетка строится за один этап, причем ее топология и координаты всех узлов известны изначально. Ко второй группе относятся *итерационные* методы. В итерационных методах сетка строится последовательно, на каждом шаге добавляется один или несколько элементов, причем изначально не известны ни координаты узлов, ни топология сетки. Итерационные методы обладают достаточной универсальностью и поэтому, в отличие от прямых, могут быть использованы для триангуляции областей довольно произвольного вида. Именно поэтому данные методы в основном и используются в автоматических программных комплексах. За эту универсальность приходится расплачиваться: вопервых, сетки, построенные итерационными методами, как правило, очень неоднородны, во-вторых метод менее надежный, чем прямой, т.к. существует риск возникновения незаполненных элементами областей. Неоднородность обусловлена тем, что топология сетки формируется в процессе построения [1, 2].

Например, сеточный генератор Gambit [3] для построения неструктурированных сеток использует итерационный алгоритм распространяющегося фронта (Advancing Front Method) [4 – 7]. На рис. 7 можно сравнить топологии неструктурированных треугольных сеток в простой круглой области, полученных с помощью сеточного генератора Gambit и молекулярно-динамического метода, излагаемого в данной работе. Сравнение проводилось для сеток различной размерности с числом узлов N = 230, N = 450, N = 610.



Рис. 7. Разбиение круглой области треугольной сеткой с помощью сеточного генератора Gambit (справа) и молекулярно-динамического метода (слева). В центре рисунка показано расположение частиц в молекулярно-динамическом методе до триангуляции

# 8. АДАПТАЦИЯ СЕТКИ К ГРАНИЦЕ РАСЧЕТНОЙ ОБЛАСТИ

Для адаптации сеток, построенных молекулярнодинамическим методом, применяется следующий прием.

Если требуется сгустить сетку к заданной границе расчетной области, то вдоль этой границы, также размещаются неподвижные частицы. Однако в этом случае применяется более сложная модель взаимодействия между подвижными частицами и неподвижными частицами на границе расчетной области: на близком расстоянии сила взаимодействия полагается отталкивающей, на большом расстоянии – притягивающей (рис. 8).

Сила взаимодействия задавалась подобно силе, действующей, между молекулами в веществе, также имеющей электростатическую природу.



Рис. 8. Схема взаимодействия подвижной частицы с частицей границы области при адаптации сетки к этой границе

Молекулярное взаимодействие описывается известным потенциалом Леннарда – Джонса:

$$U(r_{iwj}) = c_1 \cdot r_{iwj}^{-\alpha} - c_2 \cdot r_{iwj}^{-\beta}.$$
 (13)

Дифференцируя этот потенциал можно найти силу взаимодействия между частицами:

$$F_{ijwall}(r_{iwj}) = -\alpha c_1 \cdot r_{iwj}^{-\alpha - 1} + \beta c_2 \cdot r_{iwj}^{-\beta - 1}.$$
 (14)

Исходя из выражения для потенциалов, взаимодействие подвижных частиц стенки с неподвижными частицами на границах расчетной области описывалось следующим законом:

$$\vec{F}_{i wall} = -A \frac{q_{wj} \cdot q_i}{\left| \overrightarrow{r_{ivyj}} \right|^m \cdot \left| \overrightarrow{r_{ivyj}} \right|} \overrightarrow{r_{ivyj}} + B \frac{q_{wj} \cdot q_i}{\left| \overrightarrow{r_{ivyj}} \right|^a \cdot \left| \overrightarrow{r_{ivyj}} \right|} \overrightarrow{r_{ivyj}},$$
(15)

причем m > a, т.е. силы отталкивания убывают быстрее сил притяжения и могут играть роль, только при значительном сближении.

При некотором значении расстояния между частицами  $|\overrightarrow{r_{inj}}| = r_0$  силы притяжения и отталкивания взаимно уравновесятся, следовательно, при  $|\overrightarrow{r_{inj}}| > r_0$  будут действовать силы притяжения, при  $|\overrightarrow{r_{inj}}| < r_0$  – силы отталкивания. Это расстояние определит наиболее устойчивое расположение частицы.

Из-за дополнительного действия силы притяжения к границам области, расстояние между подвижными частицами вблизи границы области будет меньше, чем между подвижными частицами в отдалении от границ – частицы будут сгущаться к границам.

При удалении от границ расчетной области, силы притяжения ослабевают с ростом расстояния, кроме этого заряд частиц на границах экранируется частицами, расположенными ближе к границам. Следовательно, расстояние между частицами будет плавно возрастать до значений, характерных для равномерного распределения частиц в остальной области вдалеке от границ.

Толщина слоя сгущения к границе регулируется расстоянием  $l_{\text{max}}$ , на которое действует сила притяжения, причем  $l_{\text{max}}$  определяется либо самим законом взаимодействия  $\vec{F}_{i \text{ wall}}(r_{iwj})$ , в частности вторым слагаемым в выражении (15); либо задается фиксирован-

ной величиной, т.е. при  $|\vec{r}_{ivj}| > l_{max}$  подвижная частица вообще не взаимодействует с частицей на границе области. Минимальное расстояние между первым слоем узлов и границей расчетной области задается расстоянием  $l_{min}$  на котором становится существенным действие сил отталкивания. Также как и в случае  $l_{max}$ ,  $l_{min}$ определяется либо самим законом взаимодействия  $\vec{F}_{i wall}(\vec{r}_{ivj})$ , в частности первым слагаемым в выражении (15); либо задается фиксированной величиной.

Задание фиксированного закона, по которому производится сгущение узлов к границам, например экспоненциального, возможно при использовании различных выражений для силы взаимодействия вида (15).

На рисунках 9, 10 показаны результаты применения описанного метода построения адаптированных неструктурированных сеток для создания двумерных расчетных сеток около спускаемых космических аппаратов, для которых проводились расчеты в [8, 9] (рис.9 – аппарат сферической формы; рис.10 – аппарат Fire II). Из рисунков хорошо видна степень сгущения узлов сетки к поверхностям космических аппаратов.



Рис. 9. Узлы двумерной расчетной сетки около сферического аппарата (a) и сама сетка  $(\delta)$ 



Рис. 10. Узлы двумерной расчетной сетки около спускаемого аппарата Fire II (*a*) и сама сетка (б)

## 9. ВОЗМОЖНОСТИ МЕТОДА

С помощью генератора сеток, реализующего рассмотренный алгоритм, можно получать достаточно подробные неструктурированные адаптированные к границам расчетной области сетки для различных задач газовой динамики.

На рис. 11, 12 показан пример применения молекулярно-динамического метода для построения треугольной неструктурированной сетки для моделирования внешнего обтекания двумерной модели гиперзвукового летательного аппарата (ГЛА) X-43 [10, 11]. Из рисунков видно, что сетка имеет сильное сгущение к поверхности гиперзвукового самолета.

Модель поверхности ГЛА X-43 была восстановлена с использованием системы автоматизированного проектирования SolidWorks в работе [12], при этом использовалось схематическое изображение поверхности ГЛА X-43 из работы [11].

На рис. 12 *а*, б показан фрагмент той же расчетной сетки. Рисунки дают представление о структуре сетки вблизи поверхности. Размерность сетки 37899 узлов и 74934 треугольных элементов.

Созданная расчетная сетка тестировалась на газодинамической задаче внешнего гиперзвукового обтекания двумерной модели X-43. Условия набегающего потока воздуха, соответствовали высоте H = 30 км. Расчеты выполнены для чисел Маха M = 3, 4, 6 и нулевого угла атаки с использованием метода [13].

Результаты численного моделирования приводятся на рис. 13–21. Рисунки дают представление о том, как изменяются поля чисел Маха (рис. 13, 16, 19), температур (рис. 14, 17, 20) и давлений (Па) (рис. 15, 18, 21) с ростом скорости набегающего потока при нулевом угле атаки.

Из рисунков видно, что расчетная сетка, построенная молекулярно-динамическим методом, позволяет неплохо разрешать сложные структуры ударных волн, образующихся при обтекании X-43, в том числе дает возможность изучать общую картину взаимодействия ударных волн в проточном тракте двигательной установки.



Рис. 11. Двумерная расчетная сетка около ГЛА X-43, построенная с помощью рассмотренного в данной работе метода. Размерность сетки 37899 узлов



Рис. 12. Узлы двумерной расчетной сетки около ГЛА X-43 (*a*) и соответствующий фрагмент сетки (*б*)



Рис. 13. Поле чисел Маха.  $H = 30, a = 0^{\circ}, M = 3$ 



Рис. 14. Поле температур.  $H = 30, a = 0^{\circ}, M = 3$ 

#### www.chemphys.edu.ru/pdf/2011-02-01-031.pdf

### Физико-химическая кинетика в газовой динамике



Рис. 15. Поле давлений (Па).  $H = 30, a = 0^0, M = 3$ 



Рис. 16. Поле чисел Маха.  $H = 30, a = 0^0, M = 4$ 



Рис. 17. Поле температур.  $H = 30, a = 0^0, M = 4$ 



Рис. 18. Поле давлений (Па).  $H = 30, a = 0^0, M = 4$ 



Рис. 19. Поле чисел Маха.  $H = 30, a = 0^0, M = 6$ 



Рис. 20. Поле температур.  $H = 30, a = 0^0, M = 6$ 



Рис. 21. Поле давлений (Па).  $H = 30, a = 0^0, M = 6$ 

## 10. ПОСТРОЕНИЕ ТРИАНГУЛЯЦИИ НА ЗАДАННОМ НАБОРЕ ТОЧЕК

Исходными данными алгоритма для построения неструктурированной треугольной сетки является набор двумерных точек, полученных методом молекулярно-динамического моделирования.

Для построения триангуляции по исходному набору точек применялась триангуляция Делоне [14]. По определению, треугольная сетка на плоскости удовлетворяет критерию Делоне (или является триангуляцией Делоне), если внутрь окружности, описанной вокруг любого треугольника, не попадают никакие другие узлы этой сетки [15–17].



Рис. 22. Треугольник, удовлетворяющий условию Делоне

#### 11. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе разработан и опробован алгоритм построения двумерных неструктурированных расчетных сеток с использованием методов молекулярной динамики, а также предложен метод адаптации сеток, созданных по данной технологии, к криволинейным границам сложной формы.

На основе разработанного метода создан генератор неструктурированных расчетных сеток.

Молекулярно-динамический метод, реализованный в программном коде, обладает достаточной универсальностью и надежностью, и может быть использован для триангуляции областей весьма сложного вида. Расчетные сетки, построенные с помощью данной технологии, отличаются высокой однородностью.

Для исследования возможностей данного подхода, сеточный генератор, основанный на методах молекулярной динамики, был применен для построения треугольных неструктурированных сеток около гиперзвуковых летательных аппаратов сложной конфигурации.

Результаты, приведенные в данные работе, показали, что с помощью генератора сеток, реализующего молекулярно-динамический алгоритм, можно получать достаточно подробные однородные и адаптивные сетки для различных задач газовой динамики.

#### БЛАГОДАРНОСТИ

Работа выполнена в рамках проекта РФФИ № 07-01-00133 (разработка пространственной модели движения химически реагирующего газа), а также в рамках Программы фундаментальных исследований РАН (создание моделей физико-химической кинетики высокотемпературных газовых потоков) и Программы министерства образования и науки Российской Федерации РНПВШ 2.1.1/4693 (создание гибридных радиационно-столкновительных моделей аэрофизики).

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Галанин М.П., Щеглов И.А. Разработка и реализация алгоритмов трехмерной триангуляции сложных пространственных областей: прямые методы. Препринт ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, 2006.
- Галанин М.П., Щеглов И.А. Разработка и реализация алгоритмов трехмерной триангуляции сложных пространственных областей: итерационные методы. Препринт ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, 2006.
- 3. Gambit User Manual. Fluent Inc.
- Lohner R. Generation Of Three-Dimensional Unstructured Grids By The Advancing Front Method // Proceedings of the 26th AIAA Aerospace Sciences Meeting, Reno, Nevada, 1988.
- Lo S.H. Volume Discretization into Tetrahedra. 3D Triangulation by Advancing Front Approach // Computers and Structures, Pergamon, Vol. 39, № 5, p.p. 501–511, 1991.
- Rassineux A. Generation and Optimization of Tetrahedral Meshes by Advancing Front Technique // International Journal for Numerical Methods in Engineering, Wiley, Vol. 41, p.p. 651–674, 1998.
- Owen S.J. A Survey of Unstructured Mesh Generation Technology // Proceedings of 7th International Meshing Roundtable, p.p. 239-269, Dearborn, MI, 1998.
- Суржиков С.Т. Метод расчета сверхзвукового обтекания сферы на основе AUSM конечно-разностных схем // Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. "Машино-строение" 2005, №3. С. 7–33.
- Железнякова А.Л., Суржиков С.Т. Численное моделирование поля течения при входе в атмосферу земли спускаемого аппарата с аэродинамическим качеством.// Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. - Сер. "Машиностроение". 2009. №2- с. 3–25.
- Reubush D. E., Nguyen L. T., Rausch V. L. Review of X-43A Return to Flight Activities and Current Status// AIAA 2003-7085. 2003. 12 P.
- Engelund W. C., Holland S. D., E. Cockrell C. E. Propulsion System Airframe Integration Issues and Aerodynamic database development for the Hyper – X flight research vehicle// ISOABE. 1999. 12 P.
- Котов М.А., Кузенов В.В. Создание сложных поверхностей гиперзвуковых летательных аппаратов системами САПР// Труды Всероссийской школы-семинара "Аэрофизика и физическая механика классических и квантовых систем", Москва, 2009. С.271 273.
- Железнякова А.Л., Суржиков С.Т. Численное моделирование гиперзвукового обтекания модели летательного аппарата Х-43 //Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер.: Машиностроение. 2010-№1 (в печати). Дата принятия в печать 26.10.09
- Делоне Б.Н. О пустоте сферы // Изв. АН СССР. ОМЕН. 1934. № 4. С. 793–800.
- Скворцов А.В. Триангуляция Делоне и ее применение. – Томск: Изд-во Том. ун-та, 2002. – 128 с.
- Скворцов А.В. Алгоритмы построения триангуляции с ограничениями // Вычислительные методы и программирование, 2002, №3, с.82-92.
- Скворцов А.В. Обзор алгоритмов построения триангуляции Делоне // Вычислительные методы и программирование, 2002, №3, с. 14–39.