

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКИЙ МЕТОД ПОСТРОЕНИЯ НЕСТРУКТУРИРОВАННЫХ СЕТОК В СЛОЖНЫХ ПРОСТРАНСТВЕННЫХ ОБЛАСТЯХ И НА КРИВОЛИНЕЙНЫХ ПОВЕРХНОСТЯХ

А.Л. Железнякова

*Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского Российской академии наук,
Москва, 119526, проспект Вернадского, д.101-1*

Аннотация

Развит численный метод построения двумерных и трехмерных неструктурированных расчетных сеток с использованием молекулярно-динамического моделирования. Предложен метод адаптации сеток, создаваемых по данной технологии, к криволинейным границам сложной формы. Разработан алгоритм построения треугольных сеток на криволинейных поверхностях с использованием молекулярно-динамического метода. На основе разработанного метода создан генератор неструктурированных расчетных сеток.

Возможности предлагаемого подхода исследуются на примерах построения неструктурированных сеток для простых и многосвязных расчетных областей сложной формы.

Разработанный сеточный генератор, основанный на методах молекулярной динамики, был применен для построения двумерных треугольных и трехмерных тетраэдральных неструктурированных сеток около моделей гиперзвуковых летательных аппаратов сложной конфигурации. Расчетные сетки, построенные с использованием разработанного метода, применялись для моделирования внешнего обтекания этих моделей летательных аппаратов.

TRIANGULAR MESH GENERATION BY MOLECULAR DYNAMICS METHOD FOR CURVED SURFACES AND COMPLEX THREE-DIMENSIONAL DOMAINS

Alexandra L. Zheleznyakova

Institute for Problems in Mechanics Russian Academy of Sciences, Russia, Moscow, 119526

A new approach to triangular mesh generation based on the molecular dynamics method is proposed. Mesh nodes are considered as interacting particles. After the node placement by molecular dynamics simulation, well-shaped triangles or tetrahedra can be created after connecting the nodes by Delaunay triangulation or tetrahedrization. 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 в значительной степени зависит от расчетной сетки.

В настоящей работе предложен метод построения неструктурированных двумерных треугольных и трехмерных тетраэдральных расчетных сеток с использованием молекулярно-динамического подхода.

Опуская перечисление достоинств и недостатков структурированных сеток, которые широко и успешно применяются в механике сплошной среды, отметим ряд положительных свойств неструктурированных сеток:

- для большинства задач, представляющих практический интерес в механике сплошной среды, форма расчетной области очень сложна, и построение структурированной расчетной сетки в этом случае становится чрезвычайно трудоемким даже при использовании многоблочного подхода. Неструктурированные сетки создаются относительно проще практически для любой требуемой геометрии;

- процесс построения неструктурированных сеток может быть автоматизирован, что существенно сокращает временные затраты на генерацию сеток и, тем самым, уменьшает его трудоемкость.

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.

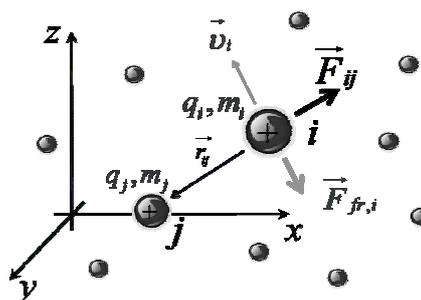


Рис. 1. Схема взаимодействия частиц между собой

С физической точки зрения, взаимодействующие частицы это материальные точки, не имеющие радиуса, и на рисунке показаны в виде шаров для наглядности.

Пусть отталкивающая сила \vec{F}_{ij} действует на i -ю частицу со стороны j -й частицы. В общем виде абсолютная величина этой силы обратно пропорциональна k -й степени расстояния между зарядами, а ее вектор направлен противоположно радиус-вектору \vec{r}_{ij} . Равнодействующую сил межчастичного взаимодействия, действующих на i -ю частицу представим в виде:

$$\vec{F}_i = \sum_{j=1}^N \vec{F}_{ij}, \text{ где} \quad (1)$$

$$\vec{F}_{ij} = -C \frac{q_i q_j}{|\vec{r}_{ij}|^k} \cdot \frac{\vec{r}_{ij}}{|\vec{r}_{ij}|}, \quad k \geq 1, |\vec{r}_{ij}| = l, \quad (2)$$

здесь l – длина радиус-вектора или расстояние между зарядами; C – постоянная нормировки.

3. СИЛА СОПРОТИВЛЕНИЯ

Для предлагаемого метода важно, что кроме силы кулоновского взаимодействия на частицы действуют силы сопротивления $\vec{F}_{fr,i}$, которые определяются их скоростью и имеют направление противоположное вектору скорости (рис. 1):

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

Если моделировать поведение частиц в отсутствие силы трения, то они будут безостановочно перемещаться в расчетной области под действием результирующих внешних сил, имеющих стохастический характер. В отсутствие силы сопротивления взаимодействующим частицам не удастся найти устойчивое положение равновесия (рис. 2). Для большей наглядности на рисунке представлен двумерный случай.

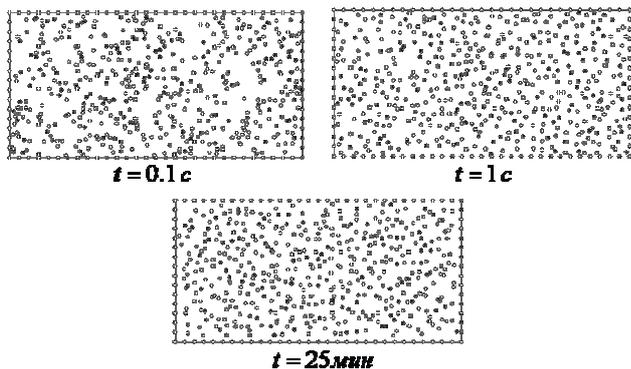


Рис. 2. Процесс взаимодействия частиц в прямоугольной расчетной области. $\vec{F}_{fr,i} = 0, N = 560$

Если добавить силу сопротивления, 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).

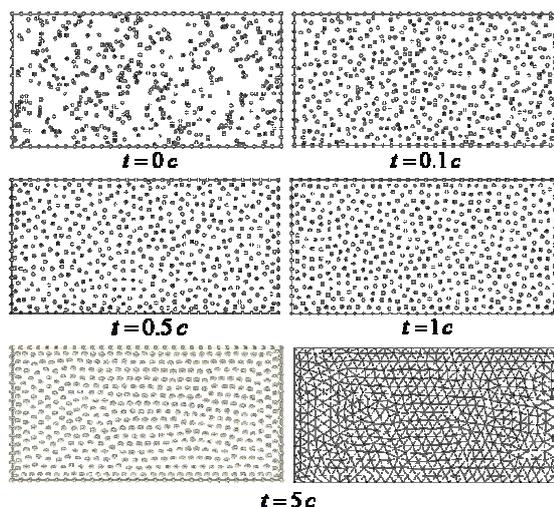


Рис. 3. Процесс взаимодействия частиц в прямоугольной расчетной области. $\vec{F}_{fr,i} \neq 0, N = 560$

В трехмерном случае рассмотренные процессы развиваются аналогичным образом. В отсутствие силы трения частицы движутся беспорядочно. Если добавить силу сопротивления, каждая частица занимает свое устойчивое положение.

4. ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ЧАСТИЦ С ГРАНИЦАМИ РАСЧЕТНОЙ ОБЛАСТИ

Для моделирования процесса взаимодействия подвижных частиц с границей расчетной области применялся следующий прием.

Если ограничивающая поверхность может быть задана аналитически, то в процессе молекулярно-динамического моделирования, на каждом шаге, проверяется условие того, что подвижная частица не пересекла ограничивающую поверхность. Если частица вылетает за границу расчетной области, то тут же проецируется на ограничивающую поверхность. Частицы, попавшие на границу, становятся внешними узлами расчетной сетки, следовательно, распределение узлов по ограничивающей поверхности происходит одновременно с распределением узлов в объеме расчетной области.

В самом общем случае, когда поверхность задающая границу расчетной области имеет сложную форму и не может быть задана аналитически, применяется подход, разработанный для взаимодействия подвижных частиц между собой.

Для этого по ограничивающей поверхности, произвольной формы, предварительно распределяются неподвижные заряженные частицы q_{wj} (их перемещение по ограничивающей поверхности и в расчетной области 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 вида (2) (рис. 4):

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

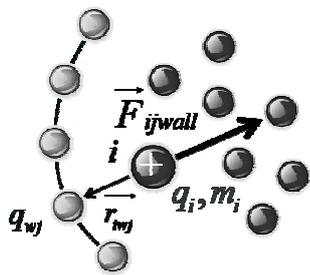


Рис. 4. Схема взаимодействия между подвижной частицей и частицей стенки

5. РАСПРЕДЕЛЕНИЕ УЗЛОВ НА СЛОЖНЫХ КРИВОЛИНЕЙНЫХ ПОВЕРХНОСТЯХ

Распределение заряженных частиц по ограничивающей поверхности произвольной формы является отдельной задачей, и также проводится с использованием молекулярно-динамического метода.

В самом общем случае, когда поверхности задающие границу расчетной области имеют очень сложную форму и не могут быть заданы аналитически, например поверхности летательных аппаратов применяется следующий подход. Сложная поверхность разрабатывается с использованием CAD системы SolidWorks, там же переводится в так называемый STL формат, в котором модель представляется в виде списка треугольных граней (рис. 5).

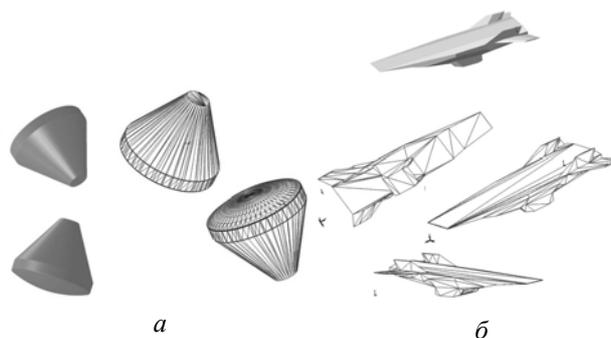


Рис. 5. Модели поверхностей, разработанные с использованием SolidWorks и их представление в формате STL:

a – модель спускаемого аппарата Fire II;
б – модель гиперзвукового летательного аппарата X-43

На основании этого списка, с помощью специально-созданной программы, сложная поверхность летательного аппарата покрывается заданным числом равномерно распределенных случайных точек (“опорных точек”). Число точек и плотность распределения можно варьировать (рис. 6, 7).

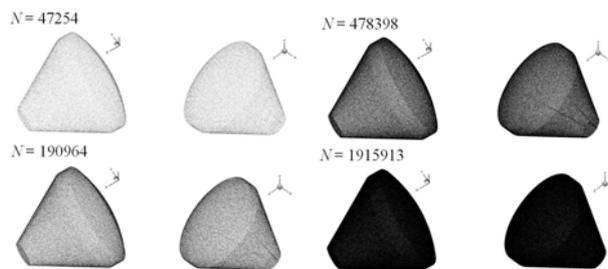


Рис. 6. Однородное распределение *N* случайных точек по поверхности Fire II

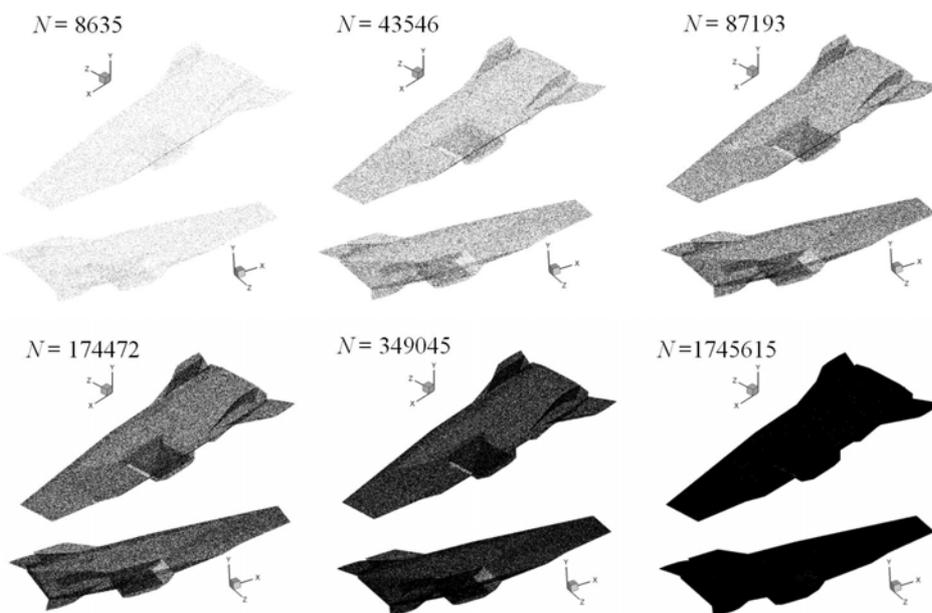


Рис. 7. Однородное распределение *N* случайных точек по поверхности ГЛА X-43

Число опорных точек должно, как минимум, на три порядка превышать количество подвижных частиц распределяемых по поверхности в процессе молекулярно-динамического моделирования (рис. 8).

Чтобы покрыть поверхности моделей Fire II и X-43 потребовалось около 2 млн. точек (рис. 6, 7).

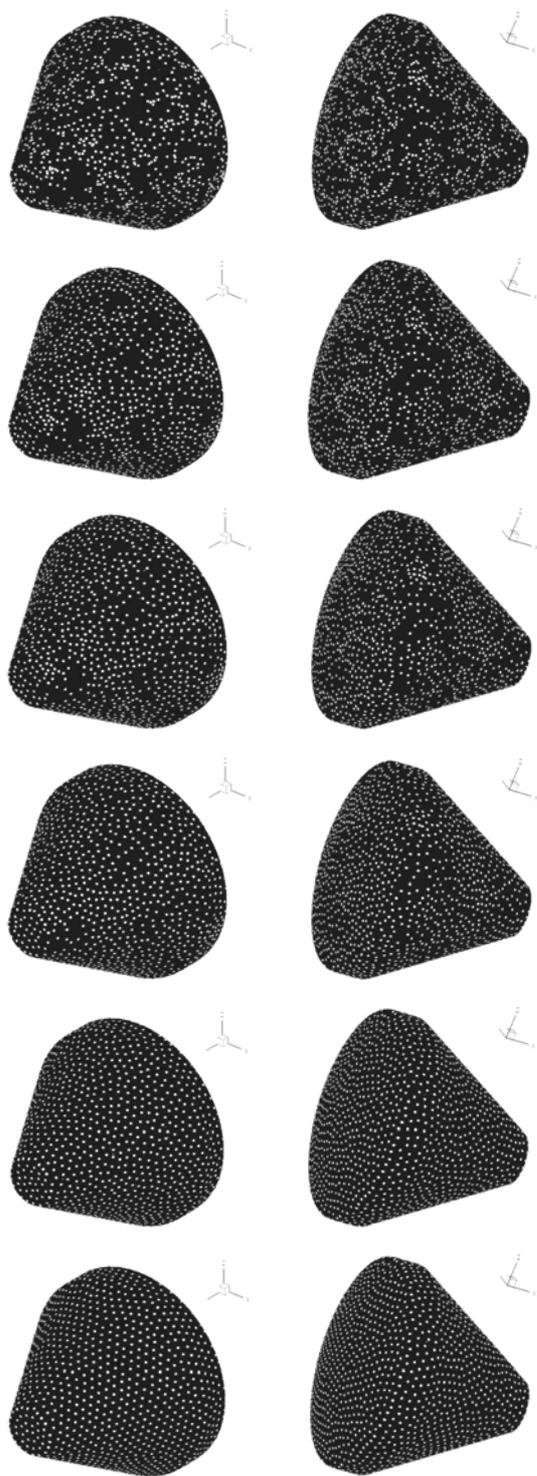


Рис. 8. Процесс распределения подвижных частиц по лобовой и задней поверхностям спускаемого аппарата Fire II

Из полученного массива “опорных точек”, равномерно-покрывающих всю поверхность летательного аппарата, случайным образом выбирается 2–3 тысячи подвижных точек, будущих узлов поверхности, остальные точки фиксированные.

Далее узлы распределяются по поверхности в процессе молекулярно-динамического моделирования. В начальный момент времени частицы распределены по поверхности случайным образом. Взаимодействие подвижных частиц описывается законом отталкивания (2), определенным выше, только в рассматриваемом случае подвижные частицы “привязаны” к поверхности – частицы перемещаются по “опорным точкам”.

После того как подвижная частица на очередном временном шаге совершит перемещение под действием сил взаимодействия, она совмещается с ближайшей к ней опорной точкой (см. рис. 8).

6. ИНТЕГРИРОВАНИЕ УРАВНЕНИЙ ДВИЖЕНИЯ

При использовании молекулярно-динамического метода на каждом временном шаге проводится интегрирование системы уравнений движения. Уравнения движения для каждой из N частиц внутри расчетной области в проекции на координатные оси формулируются в следующем виде:

$$\begin{cases} m_i \frac{dv_{\alpha i}}{dt} = F_{\alpha i} + F_{fr,\alpha i} + \bar{F}_{\alpha i wall}, \\ v_{\alpha i} = \frac{dr_{\alpha i}}{dt}, \end{cases} \quad i = M + 1, \dots, N, \quad \alpha = x, y, z, \quad (5)$$

где

$$\bar{F}_i = \sum_{j=M+1}^N \bar{F}_{ij} \quad (6)$$

– равнодействующая сил, действующих на i -ю частицу со стороны остальных подвижных частиц;

$$\bar{F}_{i wall} = \sum_{j=1}^M \bar{F}_{ij wall}, \quad (7)$$

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

$\bar{F}_{fr,i}$ – сила сопротивления, определена соотношением (3); N – общее число всех частиц, M – число неподвижных частиц на границах расчетной области, с которых начинается общая нумерация всех частиц.

Численное интегрирование уравнений движения проводится по алгоритму Верле [1].

7. АДАПТАЦИЯ СЕТКИ К ГРАНИЦЕ РАСЧЕТНОЙ ОБЛАСТИ

Для адаптации моделируемых сеток к криволинейным граничным областям применялся следующий прием. Если требуется сгустить сетку к заданному участку границы расчетной области, то вдоль этой границы, как и в предыдущем случае, размещаются неподвижные частицы. Однако в этом случае применяется иная модель взаимодействия между подвижными и неподвижными частицами: на близком расстоянии сила взаимодействия полагалась отталкивающей, на большом расстоянии – притягивающей (рис. 9). Сила взаимодействия задавалась подобно силе, действующей, между молекулами в веществе, также имеющей электростатическую природу:

$$\bar{F}_{i wall} = -A \frac{q_{wj} \cdot q_i}{|r_{iwj}|^m \cdot |r_{iwj}|} + B \frac{q_{wj} \cdot q_i}{|r_{iwj}|^a \cdot |r_{iwj}|}, \quad (8)$$

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

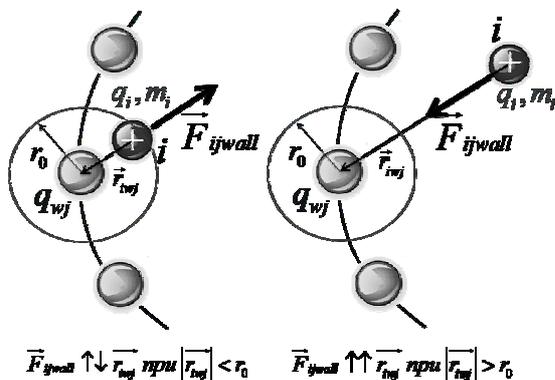


Рис. 9. Схема взаимодействия подвижной частицы с частицей границы области при адаптации сетки к этой границе

8. ПОСТРОЕНИЕ ТРИАНГУЛЯЦИИ НА ЗАДАННОМ НАБОРЕ ТОЧЕК

Для построения сеток по полученному методом молекулярно-динамического моделирования набору подвижных точек (узлов) применялась триангуляция Делоне [2, 3].

Треугольная сетка на плоскости удовлетворяет критерию Делоне (или является триангуляцией Делоне), если внутри окружности, описанной вокруг любого треугольника, не попадают никакие другие узлы этой сетки (рис. 10).

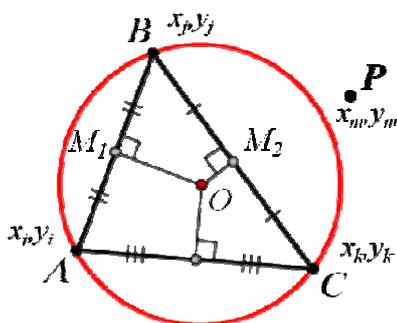


Рис. 10. Построение триангуляции Делоне на заданном наборе узлов на плоскости

В трехмерном случае триангуляция Делоне определяется аналогично, только вместо треугольников строятся тетраэдры, а сферы, описанные вокруг каждого тетраэдра, не должны содержать внутри себя точек из триангулируемого множества (рис. 11).

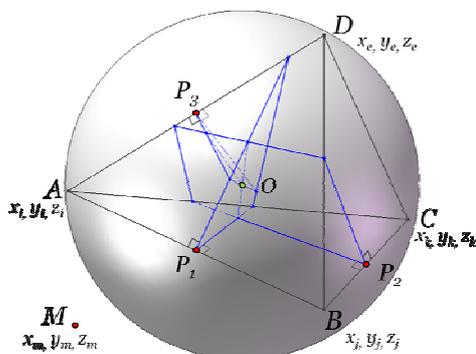


Рис. 11. Построение триангуляции на заданном наборе узлов в трехмерном случае

Практические рекомендации по триангуляции Делоне расчетной области даны в [2–5].

9. ВОЗМОЖНОСТИ МЕТОДА

С помощью генератора сеток, реализующего рассмотренный алгоритм, можно получать подробные неструктурированные расчетные сетки, адаптированные к границам расчетных областей сложной формы.

На рис. 12 показан пример использования молекулярно-динамического метода для построения тетраэдральной неструктурированной сетки с целью трехмерного моделирования внешнего обтекания модели гиперзвукового летательного аппарата (ГЛА) X-43 [6]. Из рисунка видно, что сетка имеет сильное сгущение к поверхности гиперзвукового самолета. Модель поверхности ГЛА X-43 была восстановлена с использованием системы автоматизированного проектирования SolidWorks, при этом использовалось схематическое изображение поверхности ГЛА X-43 из работы [6] (рис. 12). На рис. 12, вверху показаны фрагменты расчетной сетки, размерность которой 150000 узлов и 895103 тетраэдральных элементов.

Созданная расчетная сетка тестировалась [8-11] на примере расчета внешнего гиперзвукового обтекания космического аппарата Fire-II и пространственной модели X-43 с использованием метода [7] при следующих исходных данных: число Маха $M = 6$, угол атаки $\alpha = 0^\circ$, условия набегающего потока воздуха соответствуют высоте $H = 30$ км (рис. 12 внизу, слева). Из результатов численного моделирования, приведенных на рис. 12 внизу, справа видно, что расчетная сетка, построенная молекулярно-динамическим методом, позволяет разрешить основные элементы структуры ударных волн, образующихся при обтекании X-43.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе разработан и опробован алгоритм построения двумерных и трехмерных 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.

Разработанный сеточный генератор, основанный на методах молекулярной динамики, был применен для построения двумерных треугольных и трехмерных тетраэдральных неструктурированных сеток около гиперзвуковых летательных аппаратов сложной конфигурации.

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

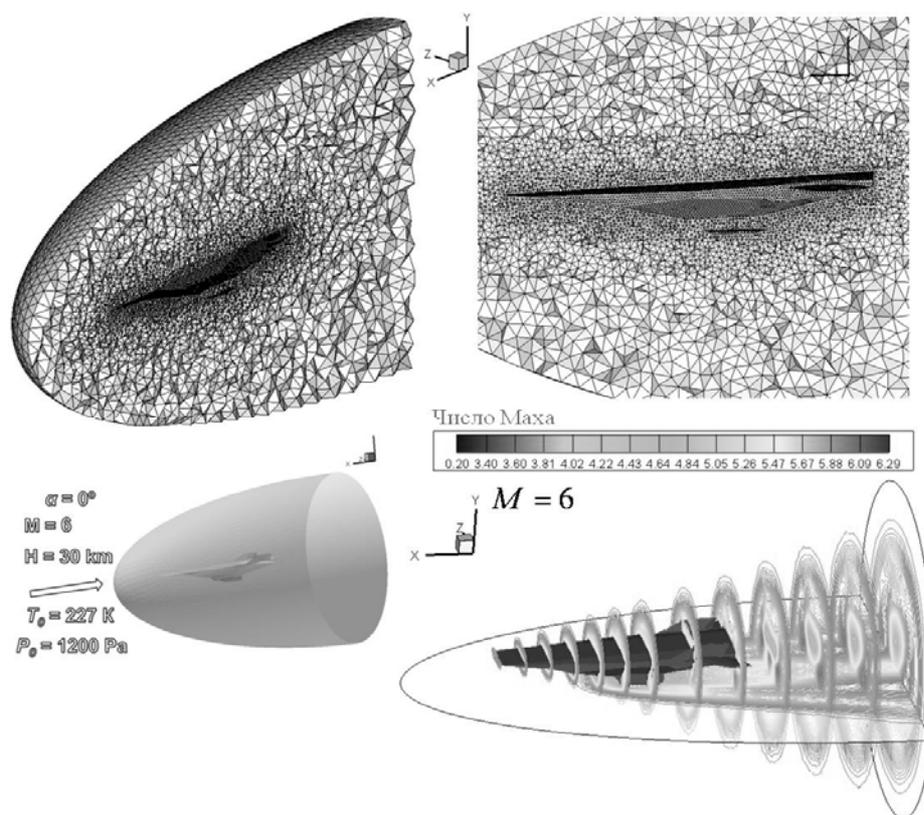


Рис. 12. Трехмерная расчетная сетка около ГЛА X-43, построенная с помощью рассмотренного в данной работе метода. Центральное осевое сечение (вверху). Схема задачи и условия набегающего потока (внизу, слева). Трехмерное поле течения около X-43 (внизу, справа). Поле чисел Маха. $H = 30$, $\alpha = 0^\circ$, $M = 6$

БЛАГОДАРНОСТИ

Работа выполнена в Лаборатории радиационной газовой динамики ИПМех РАН в рамках проекта РФФИ № 10-01-00544 (разработка пространственной модели движения химически реагирующего газа), в рамках международного Российско-Итальянского проекта РФФИ № 09-08-92422-КЭа (разработка компьютерных радиационно-столкновительных моделей) и программы сотрудничества РАН и CNR, 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).

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

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Verlet L. Computer Experiments on Classical Fluids // Phys. Rev. Vol. 159, No. 98, 1967.
- 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.
- Железнякова А.Л., Суржиков С.Т. Построение двумерных неструктурированных сеток методом молекулярной динамики // Препр. ИПМех им. А.Ю. Ишлинского РАН. № 932. 2010. 51 с.
- Железнякова А.Л., Суржиков С.Т. Построение трехмерных неструктурированных сеток методом молекулярной динамики // Препр. ИПМех им. А.Ю. Ишлинского РАН. № 933. 2010. 106 с.
- 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.
- Железнякова А.Л., Суржиков С.Т. Численное моделирование гиперзвукового обтекания модели летательного аппарата X-43 // Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. - Сер. "Машиностроение". 2010. № 1. С. 3–19.
- Котов, М.А., Кузенов, В.В. "Создание сложных поверхностей гиперзвуковых летательных аппаратов системами САПР" // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2010. Т.9. <http://chemphys.edu.ru/pdf/2010-01-12-039.pdf>
- Железнякова А.Л., Суржиков С.Т. "Поле течения около космического аппарата Fire II под углом атаки" // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2010. Т.9. <http://www.chemphys.edu.ru/pdf/2010-01-12-020.pdf>
- Железнякова А.Л., Кузенов В.В., Петрусев А.С., Суржиков С.Т. "Расчет аэротермодинамики двух типов моделей спускаемых космических аппаратов" // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2010. Т.9. <http://www.chemphys.edu.ru/pdf/2010-01-12-025.pdf>
- Железнякова А.Л., Суржиков С.Т. "Численное моделирование гиперзвукового обтекания модели летательного аппарата X-43" // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2011. Т.11. <http://www.chemphys.edu.ru/pdf/2011-02-01-030.pdf>