**Построение неструктурированных сеток методом минимизации потенциальной энергии**

***Новиков К.А.***

*Студент*

*Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, физический факультет, кафедра общей физики. Россия,119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр.*

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

Построение расчетной сетки является важным этапом математического моделировании явлений и различных процессов. Надежность полученных результатов напрямую зависит от качества дискретизации сложной поверхности. В данной работе предлагается энергетический подход к задаче размещения узлов треугольной сетки на поверхности, в основе которого лежит идея нахождения минимума потенциальной энергии системы фиктивных зарядов методом градиентного спуска [1].

При выборе параметрического описания геометрических элементов объекта используется NURBS – модель [2]. В параметрическом пространстве равномерно распределим узлов. Вокруг произвольной частицы , находящейся в точке *О*, выделим область максимального радиуса взаимодействия *,* содержащую  частиц-соседей. Задача согласованной расстановки узлов сетки свелась к задаче построения набора точек , в которых достигается минимум потенциальной энергии частицы  [3].

Зададим начальное положение частицы  радиус-вектором , где  – номер итерации. На каждом итерационном слое потенциал поля, созданного частицами области максимального радиуса взаимодействия, в точке *О* равен

|  |  |
| --- | --- |
|  | (1) |

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

|  |  |
| --- | --- |
|  | (2) |

где  – орт вектора . В этом направлении происходит уменьшение минимизируемой функции потенциальной энергии. В направлении  осуществим перемещение с шагом итерации:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (3) |

где  – расстояние до ближайшего соседа. Коэффициент  изменяется в пределах . Новое возможное положение частицы (точка *А*) характеризуется радиус-вектором

|  |  |
| --- | --- |
|  | (4) |

и потенциалом .

Если , то новое положение частицы  характеризуется радиус-вектором  (рис. 1*а*). В случае, если , определим потенциал  близлежащей точки *В*, радиус-вектор которой

|  |  |
| --- | --- |
|  | (5) |

где , .

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| П1.tif    (а) | П2.tif  ,  (б) | П3.tif  ,  (в) |

Рис. 1. Алгоритм градиентного спуска

Если , то частица занимает новое положение, определяемое радиус-вектором (рис. 1*б*). В противном случае () составим уравнение для потенциала по трем точкам , , .

|  |  |
| --- | --- |
| Рис.2. Неструктурированная сетка на криволинейных поверхностях, построенная энергетическим методом | В качестве аппроксимирующей функции используется парабола (рис. 1*в*). Функция достигает минимума в точке *С.* Эта точка и выбирается в качестве точки очередного положения частицы  (рис. 6*в*).  Алгоритм минимизации выполняется для  частиц поверхности. Если для всех частиц  (6)  то поиск точки минимума  заканчивается, иначе переходим на следующий шаг итерации: . В результате применения рассмотренного алгоритма получается установившееся распределение узлов будущей сетки.  На рис. 2 приведен пример сетки, построенной по предлагаемому методу. |

**Литература**

1. Применение градиентных методов оптимизации для решения задачи Коши для уравнения Гельмгольца/ Н. В. Плетнев, П. Е. Двуреченский, А. В. Гасников// Компьютерные исследования и моделирование. -2022. -Т. 14, № 2. - C. 417–444.
2. Железнякова А. Л., Суржиков С. Т. Построение пространственных неструктурированных сеток на NURBS-поверхностях сложных изделий авиационной и ракетно-космической техники методом молекулярной динамики //Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2014. Т.15, Вып. 1. http://chemphys.edu.ru/issues/2014-15-1/articles/108
3. Аминова, Р.М. Поверхности потенциальной энергии молекулярных систем. Квантовохимические методы анализа ППЭ: учеб. пособие/ Р.М. Аминова. – Казань: Казан.ун-т, 2015. – 109 c.