

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ВЫСОКОСКОРОСТНОЙ ДЕФОРМАЦИИ МЕТОДОМ КЛАСТЕРНОЙ ДИНАМИКИ. ОПИСАНИЕ ФИЗИКО-МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ СРЕДЫ, РЕШЕНИЕ ТЕСТОВЫХ И ПРИКЛАДНЫХ ЗАДАЧ

И. А. Давыдов, В. Н. Пискунов, Р. А. Веселов, С. В. Копкин, Д. В. Цаплин

ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», 607188, г. Саров Нижегородской обл.

Рассматриваются примеры практического использования метода кластерной динамики. Представлены результаты тестовых и прикладных расчетов задач о распространении плоской ударной волны в веществе, результаты моделирования процессов высокоскоростного пробития преград ударником, результаты моделирования эффектов пыления и кумулятивного выброса частиц при выходе ударной волны на профилированную поверхность материалов. Дается краткий обзор программных комплексов, в которых в настоящее время реализован метод кластерной динамики.

*Ключевые слова:* кластерная динамика, ударные волны, ударная адиабата, гетерогенные материалы, поликристаллическая упаковка, пластические свойства материалов.

### Введение

В работах [1, 2] рассмотрен подход и сформулированы уравнения, лежащие в основе метода кластерной динамики (КД), предназначенного для моделирования процессов, сопровождающихся большими деформациями вещества и нарушением сплошности материала. В данной статье, которая является логическим продолжением работ [1, 2], мы рассматриваем результаты тестовых расчетов и примеры практического использования метода.

На примере задач о распространении плоской прямой ударной волны (УВ) в веществе показано, что выбранный в качестве основы метода КД способ построения потенциалов взаимодействия кластеров позволяет воспроизводить ударные адиабаты однокомпонентных (гомогенных) материалов. Показано также, что при моделировании ударно-волновых процессов в многокомпонентных (гетерогенных) материалах метод дает результаты, не противоречащие существующим теоретическим моделям механики многокомпонентных сред.

Вместе с тем рассмотренные тестовые задачи о распространении плоской УВ в веществе выяви-

ли две существенные проблемы использования метода КД:

- сложность моделирования упругопластических свойств материалов;
- наличие нефизичного (с точки зрения газодинамики) пыления, возникающего при выходе плоской прямой УВ на гладкую поверхность материала.

В статье изложен один из перспективных способов моделирования пластических свойств материалов методом КД – использование поликристаллической начальной упаковки кластеров. Для поликристаллических упаковок кластеров исследовано поведение тензора напряжений и интенсивности напряжения при ударно-волновом нагружении. Приводятся результаты расчетов тестов Тейлора для модельного материала (алюминия), результаты расчетов сравниваются с экспериментальными данными.

В качестве способа подавления описанного нефизичного счетного эффекта в методе КД может быть использована модификация уравнений движения кластеров путем добавки сил торможения, пропорциональных относительным скоростям частиц [3]. Представленные в статье результаты рас-

четов показывают, что предлагаемый способ выбора сил торможения полностью устраняет побочные эффекты пыления и сохраняет основные физические закономерности процесса ударно-волнового нагружения и движения вещества после выхода УВ на свободную поверхность материала.

Значительная часть данной статьи посвящена практическому использованию метода КД. Представлены результаты моделирования методом КД процессов высокоскоростного пробития различных преград ударником и эффектов пыления и кумулятивного выброса частиц при выходе УВ на профилированную поверхность материалов. Перечислены программные комплексы, в которых в настоящее время реализован метод КД.

## 1. Моделирование процесса распространения ударной волны в веществе

Как показано в работах [1, 2], выбор потенциалов взаимодействия кластеров в методе КД должен осуществляться исходя из реального уравнения состояния (УРС) моделируемого материала. Для случая парного взаимодействия кластеров в плотнейшей упаковке уравнения для расчета зависимости энергии и силы парного взаимодействия кластеров ( $E(r)$  и  $f(r)$ ) от расстояния между кластерами  $r$  имеют вид:

$$E(r) = m_0 \varepsilon_x(\delta) = \frac{\sqrt{2} \rho r_0^3}{12} \varepsilon_x \left( \left( \frac{r_0}{r} \right)^3 \right), \quad (1)$$

$$f(r) = \frac{\sqrt{2}}{4} r^2 P_x \left( \left( \frac{r_0}{r} \right)^3 \right). \quad (2)$$

Здесь  $m_0$  – масса единичного кластера,  $r_0$  – равновесное расстояние между кластерами (размер кластеров),  $\rho$  – начальная плотность материала,  $\varepsilon_x(\delta)$  и  $P_x(\delta)$  – произвольные зависимости энергии и давления холодного вещества от степени сжатия  $\delta$ .

Рассмотрим результаты тестовых расчетов зависимости скорости распространения фронта плоской прямой УВ от массовой скорости вещества и зависимости давления от плотности на ударной адиабате для кластерной среды.

Результаты расчетов будут представлены для двух случаев:

- распространение плоской прямой УВ в гомогенном материале;
- распространение плоской прямой УВ в многокомпонентном (гетерогенном) материале.

В обоих случаях в расчетах использовалась достаточно простая и наглядная постановка задачи: в область, заполненную покоящимся не сжатым материалом, вдоль направления  $x$  с постоянной скоростью  $u$  вдвигается поршень, при этом от поршня начинает распространяться фронт УВ. В КД расчетах определялись: скорость распространения фронта УВ  $D$  и параметры вещества за фронтом УВ (давление и плотность).

### 1.1. Гомогенные материалы

В качестве тестового вещества в данных расчетах выбран алюминий. Параметры взаимодействия ( $E(r)$  и  $f(r)$ ) для кластеров Al рассчитаны с использованием соотношений (1) и (2). В качестве исходной модели уравнения состояния вещества выбрано полуэмпирическое уравнение состояния, предложенное авторами работы [4] (УРС ОСА). Данное уравнение состояния часто используется в газодинамических расчетах и имеет широкий диапазон применимости по температуре и степени сжатия.

В табл. 1 в качестве примера показаны значения  $\varepsilon_x(\delta)$  и  $P_x(\delta)$  (для начальной плотности алюминия  $\rho_0 = 2,71 \text{ г/см}^3$ ) и соответствующие значения  $E(r)$  и  $f(r)$ , рассчитанные по соотношениям (1) и (2) для уравнения состояния [4]. Силы и давления отрицательны в области растяжения ( $\delta < 1$ ).

Таблица 1

Значения  $\varepsilon_x(\delta)$  и  $P_x(\delta)$ ; соответствующие значения  $E(r)$  и  $f(r)$  для кластеров с  $r_0 = 5$  мкм

$r/r_0$	$\delta$	$\rho, \text{г/см}^3$	$\varepsilon_x(\delta), \text{кДж/г}$	$P_x(\delta), \text{ГПа}$	$r, \text{м}$	$E(r), \text{Дж (1)}$	$f(r), \text{Н (2)}$
0,75	2,370	6,423704	20,801	389,39	3,750E-06	8,304E-07	1,936E+00
0,8	1,953	5,292969	10,8512	221,446	4,000E-06	4,332E-07	1,253E+00
0,85	1,628	4,412782	4,93168	106,423	4,250E-06	1,969E-07	6,796E-01
0,9	1,372	3,717421	1,81569	48,0046	4,500E-06	7,249E-08	3,437E-01
0,95	1,166	3,160811	0,3791	16,5038	4,750E-06	1,513E-08	1,317E-01
1	1,000	2,71	0	0	5,000E-06	0	0
1,05	0,864	2,341	0,26366	-7,8793	5,250E-06	1,053E-08	-7,678E-02
1,1	0,751	2,036063	0,89746	-11,425	5,500E-06	3,583E-08	-1,222E-01
1,15	0,658	1,781869	1,76385	-13,079	5,750E-06	7,042E-08	-1,529E-01
1,2	0,579	1,568287	2,79802	-13,878	6,000E-06	1,117E-07	-1,766E-01
1,25	0,512	1,38752	3,96943	-14,275	6,250E-06	1,585E-07	-1,971E-01
1,3	0,455	1,2335	5,26428	-14,478	6,500E-06	2,102E-07	-2,163E-01

Результаты расчетов зависимости давления от плотности на ударной адиабате для кластерной среды и зависимости скорости фронта УВ от массовой скорости вещества показаны на рис. 1 и 2. Для сравнения на рисунках представлены также соответствующие экспериментальные зависимости.

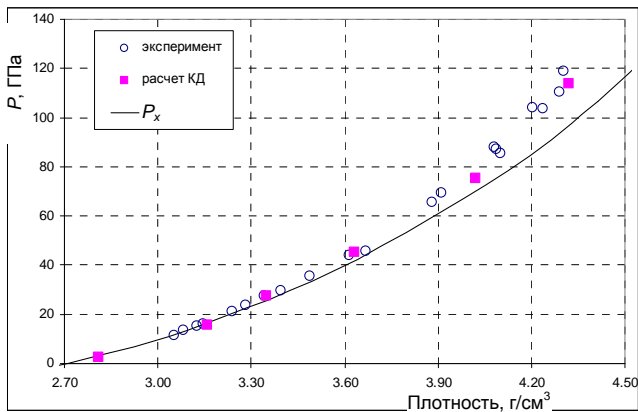


Рис. 1. Ударная адиабата алюминия: экспериментальные точки и результаты расчетов методом КД

На рис. 1, 2 хорошо видно совпадение результатов расчетов методом КД и экспериментальных данных. Расхождение в области массовых скоро-

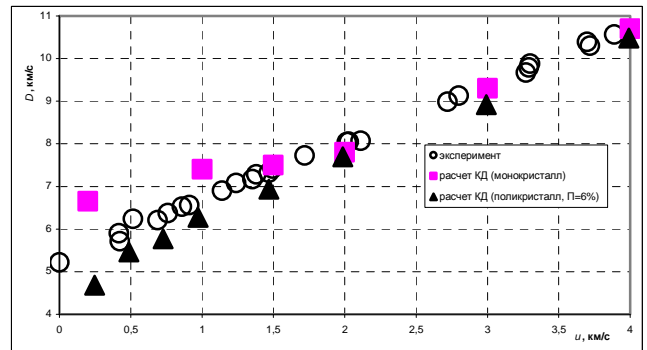


Рис. 2.  $D$ - $u$  диаграмма алюминия. Экспериментальные точки и расчеты методом КД

стей  $u < 1,5$  км/с на рис. 2 обусловлено тем, что в данной постановке задачи в методе КД плотная упаковка кластеров не позволяет воспроизводить свойства пластичности – среда слишком жесткая. Проблемы и способы моделирования упруго-пластических свойств материалов подробно рассмотрены в разделе 2 статьи. На рис. 2 также показаны результаты расчета  $D$ - $u$  диаграммы для поликристаллической кластерной среды с остаточной пористостью  $\Pi = 6\%$  после задания поликристаллической упаковки. Из рисунка видно, что разработка алгоритма создания поликристаллической упаковки кластеров с пористостью, стремящейся

к нулю, позволит правильно воспроизводить ударно-волновые свойства моделируемых материалов в широком диапазоне массовых скоростей.

## 1.2. Гетерогенные материалы

Одно из перспективных направлений применения метода КД – расчет процессов, проходящих при ударно-волновом нагружении гетерогенных материалов – материалов, имеющих зеренную микроструктуру и представляющих собой смесь двух или более фаз (рис. 3).

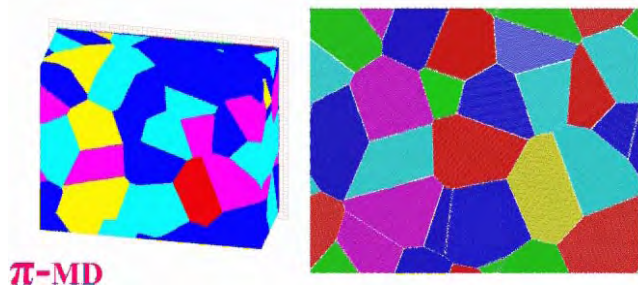


Рис. 3. Модель гетерогенного материала (области, соответствующие различным фазам, выделены разными цветами)

Как показано в подразделе 1.1, при помощи метода КД можно с достаточной степенью достоверности воспроизводить ударные адиабаты индивидуальных веществ. Представляет интерес в качестве следующего шага по развитию метода КД перейти к моделированию свойств гетерогенных (многофазных) материалов.

Рассмотрим задачу о распространении УВ по материалу, имеющему модельную зеренную структуру и представляющему собой смесь фаз карбида бора и нитрида бора (h-BN). Рассматриваемая модель гетерогенного материала показана на рис. 4.

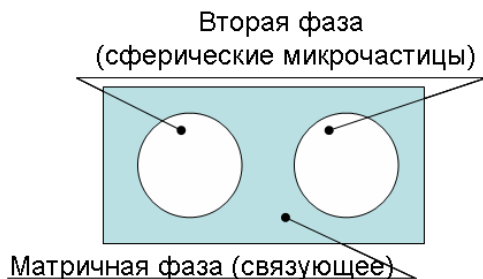


Рис. 4. Исследуемая модель двухфазного материала

В качестве исходных данных для построения потенциала взаимодействия частиц  $B_4C$  использо-

ваны данные работы [5]. Потенциал взаимодействия частиц нитрида бора (гексагональная фаза, h-BN) построен на основании экспериментальных данных работы [6]. Ниже приводятся параметры уравнения состояния Ми – Грюнайзена, полученные в результате аппроксимации данных работ [5, 6]:

$$B_4C - \rho_0 = 2,51 \text{ г/см}^3, C_0 = 9,06 \text{ км/с}, n = 3,13;$$

$$h\text{-BN} - \rho_0 = 2,29 \text{ г/см}^3, C_0 = 3,19 \text{ км/с}, n = 10,41.$$

На рис. 5 показаны соответствующие зависимости  $\epsilon_x(\delta)$  для индивидуальных веществ.

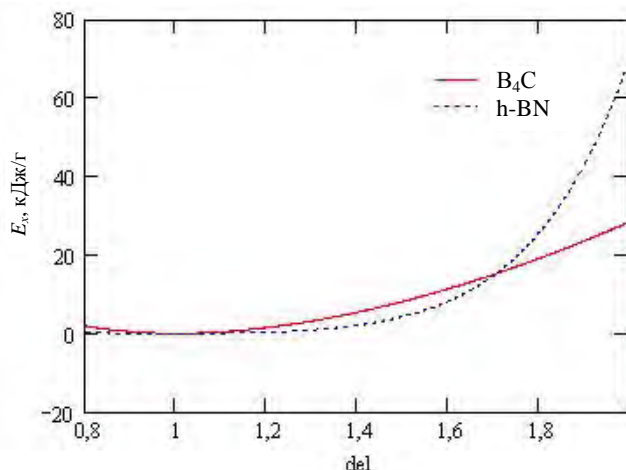


Рис. 5. Зависимости  $E_x(\rho/\rho_0)$ , использованные в расчетах КД

С использованием выбранных уравнений состояния были рассчитаны зависимости  $E(r)$  и  $f(r)$  для кластеров нитрида бора и карбида. Для расчета потенциала взаимодействия между частицами  $B_4C$  и h-BN использовался алгоритм, описанный в статье [2]. Тестовые расчеты процесса распространения плоской прямой УВ проведены для моделей материалов, представляющих собой:

1. Матрицу из нитрида бора (72 % масс. BN) с распределенными в ней сферическими частицами из  $B_4C$  (28 % масс.). Диаметр сферических частиц ~56 мкм (см. рис. 4).

2. Матрицу из карбида бора (75 % масс.  $B_4C$ ) с распределенными в ней сферическими частицами из BN (25 % масс.). Диаметр сферических частиц ~56 мкм.

Результаты расчетов зависимости давления от плотности на ударной адиабате для рассмотренных моделей гетерогенной среды и зависимости скорости фронта УВ от массовой скорости вещества показаны на рис. 6 и 8. На рис. 6 также приведены исходные зависимости  $P_x(\delta)$  и зависимость  $P(\delta)$  для чистого BN.

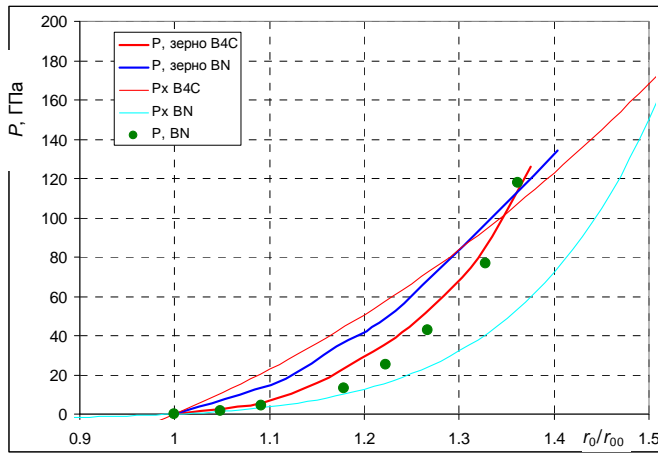


Рис. 6. Зависимости давления от степени сжатия исследованных веществ

Рис. 7 иллюстрирует процесс деформации зерна в УВ для исследованных моделей веществ (УВ распространяется справа налево). Вверху – процесс деформации зерна из нитрида бора в матрице из карбида бора; внизу – процесс деформации зерна из В<sub>4</sub>С в матрице из BN.

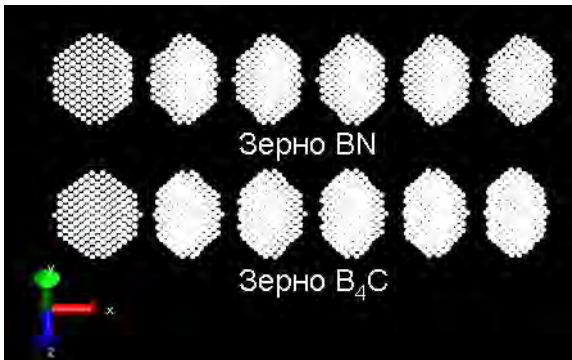


Рис. 7. Изменение формы зерна в УВ для исследованных моделей материала (массовая скорость в УВ 3,0 км/с)

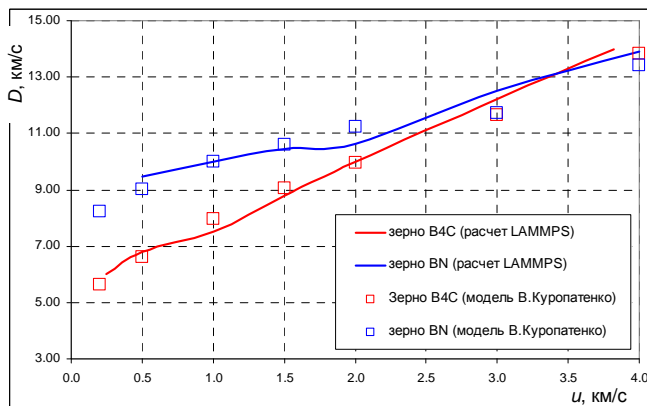


Рис. 8. D-u диаграммы исследованных моделей двухфазных материалов

Таким образом, используя рассмотренную постановку задачи, мы получили в расчетах *D-u* диаграммы двухкомпонентных сред. Представляет интерес сравнение полученных результатов с известными аналитическими моделями процессов распространения УВ в многокомпонентных материалах. Одна из таких моделей рассмотрена в работах В. Ф. Куропатенко [7, 8]. Согласно работам [7, 8] процесс распространения разрыва (скачка характеристик) в многокомпонентных средах должен описываться соотношениями:

$$\frac{1}{C} = \sum_{i=1}^N \frac{\alpha_i}{C_i}$$

(акустическое приближение, бесконечно слабые УВ),

$$\frac{1}{D-u} = \sum_{i=1}^N \frac{\alpha_i}{D_i - u_i}$$

(для ударной волны),

где *C* – скорость звука, *D* – скорость распространения сильного разрыва, *u* – массовая скорость,  $\alpha_i$  – объемная концентрация *i*-го компонента смеси, *N* – количество компонентов в смеси.

На рис. 8 представлены результаты расчета по модели В. Куропатенко *D-u* диаграмм рассмотренных двухкомпонентных сред. Для обоих случаев (зерно В<sub>4</sub>С в среде BN и зерно BN в матрице В<sub>4</sub>С) расчеты методом КД и по модели В. Куропатенко совпадают. Результаты расчетов свойств многокомпонентных материалов методом КД будут сравниваться и с другими аналитическими моделями смесей.

В целом полученные результаты показывают перспективность применения метода КД для изучения механики многокомпонентных (многофазных) сред.

## 2. Моделирование пластических свойств материалов

Воспроизведение пластической деформации материалов – одна из основных проблем в методе КД, без решения которой область применимости метода сильно ограничена. В аналитических расчетах (авторы благодарны В. Н. Софронову за проведенные аналитические исследования) установлено, что кластерная среда с плотной упаковкой является чрезвычайно жестким объектом с коэффициентом Пуассона  $\nu$ , значение которого находится в диапазоне  $0,241 \leq \nu \leq 0,286$  (в зависимости от ориентации упаковки). Как видно из результа-



тов расчетов, представленных в подразделе 1.1 статьи, жесткость кластерной среды наглядно проявляется в задачах о распространении плоской УВ (см. рис. 2). При давлении на фронте, большем, чем предел текучести, волна должна расщепляться на упругий предвестник и основную волну, распространяющиеся с разными скоростями. В методе КД при использовании исходных плотнейших упаковок кластеров этого не происходит и характерна одноволновая структура фронта УВ.

На задаче о распространении плоской прямой УВ была опробована большая серия моделей, которые были предназначены для воспроизведения пластичности в расчетах методом КД, но фактически ни одна из них не дала желаемого результата. Следует отметить, что для больших массовых скоростей на фронте УВ  $u > 1,5 \div 2$  км/с (см. рис. 2) модель кластерной среды не требует модификации, поскольку за счет разогрева на фронте волны происходит хаотизация кластерной среды с нарушением дальнего порядка и коэффициент Пуассона  $\nu$  стремится к гидродинамическому пределу:  $\nu = 0,5$  [9]. Это же имеет место и в действительности: основная волна догоняет упругий предвестник, поглощая его, и скорость распространения УВ соответствует гидродинамическому приближению.

Физической причиной пластичности является снятие сдвиговых деформаций при превышении предела текучести. В реальной кристаллической структуре материалов снятие сдвиговых деформаций происходит путем возникновения полос сдвига,

которое в свою очередь требует наличия дефектов. Масштабы этих неоднородностей различны для реального кристалла и кластерной среды, но ясно, что для воспроизведения пластичности в кластерной среде должны иметься дефекты структуры, причем желательна дополнительная хаотизация начального расположения кластеров. Таким требованиям удовлетворяют модели поликристаллической упаковки. Далее приведены результаты расчетов процесса распространения плоской ударной волны в поликристаллической упаковке кластеров (см. рис. 9) для случая столкновения алюминиевых пластин с относительной скоростью 500 м/с (массовая скорость вещества за фронтом УВ 250 м/с).

### 2.1. Исследование поведения тензора напряжений поликристаллической кластерной среды

Как уже говорилось выше, физической причиной пластичности является снятие сдвиговых деформаций при превышении предела текучести, которое происходит путем возникновения полос сдвига. Идеальная плотнейшая кристаллическая упаковка не обладает пластичностью (что и наблюдается в расчетах плоской УВ с малыми массовыми скоростями  $u$ ), и для ее появления требуется наличие дефектов.

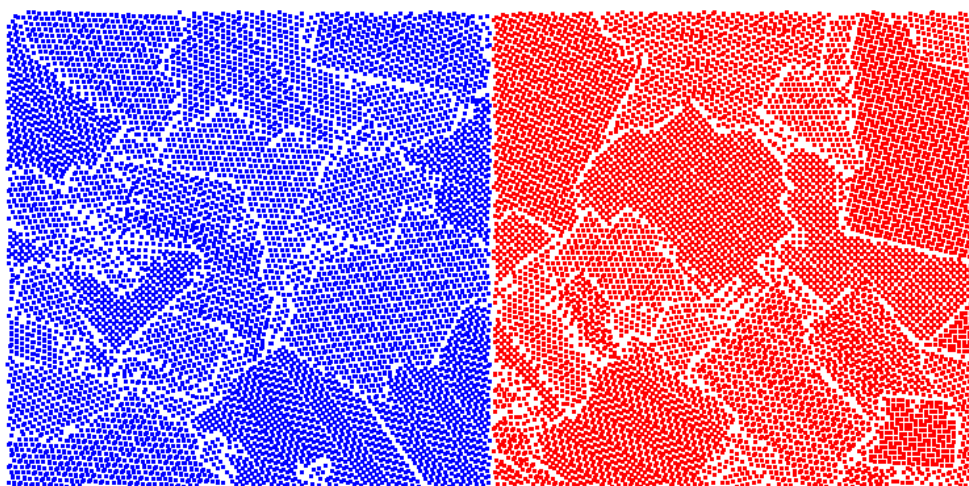


Рис. 9. Фрагмент структуры исследованной поликристаллической упаковки

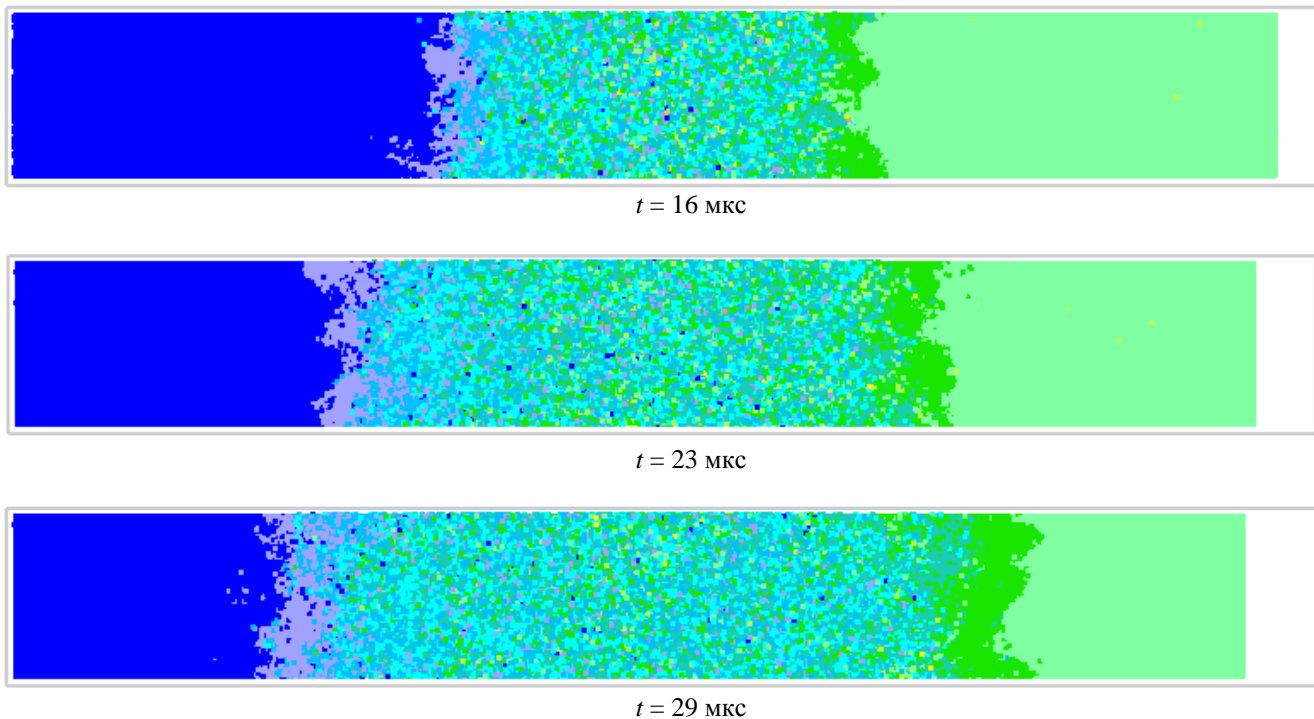


Рис. 10. Поликристаллическая упаковка кластеров. Структура фронта УВ на различные моменты времени

На рис. 10 видно, как меняется структура фронта УВ по мере прохождения УВ по поликристаллической кластерной упаковке. В окрестности фронта УВ формируется упругий предвестник, распространяющийся со скоростью большей, чем основная УВ.

Далее для сравнения будут приведены количественные результаты расчетов величин компонент тензора напряжений для двух видов трехмерных структур: монокристалла (плотнейшая упаковка); поликристаллической упаковки кластеров (пористость за счет наличия границ зерен  $\sim 15\%$ ).

Тензор напряжений  $\sigma_{ij}$  в кластерной среде (так же как в методе молекулярной динамики) может быть вычислен с помощью теоремы вириала как:

$$\sigma_{ij}^{\alpha} = \frac{1}{3V^{\alpha}} \left[ m^{\alpha} v_i^{\alpha} v_j^{\alpha} - \frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} \frac{\partial E}{\partial r^{\alpha\beta}} \frac{r_i^{\alpha\beta} r_j^{\alpha\beta}}{|r^{\alpha\beta}|} \right]. \quad (3)$$

Здесь пространственные переменные обозначены целочисленными индексами  $i, j$ ,  $V^{\alpha}$  – объем,

включающий частицу  $\alpha$  и ее соседей  $\beta$ ;  $v_i^{\alpha}$  – компоненты скорости частицы  $\alpha$ . Основным интересом представляет поведение интенсивности сдвиговых напряжений  $\sigma_u$ , определяемой по формуле:

$$\sigma_u = \sqrt{\frac{1}{2} [(\sigma_{11} - \sigma_{22})^2 + (\sigma_{22} - \sigma_{33})^2 + (\sigma_{33} - \sigma_{11})^2 + 6(\sigma_{12}^2 + \sigma_{23}^2 + \sigma_{31}^2)]}. \quad (4)$$

На рис. 11 показано поведение диагональных компонент тензора напряжений и интенсивности напряжений на момент времени  $t = 10$  мкс для монокристалла.

Пики на кривой обусловлены попаданием целого слоя частиц в объем усреднения и могут не учитываться. Видно, что в монокристалле интенсивность  $\sigma_u$  за фронтом волны составляет около 1 ГПа.

На рис. 12, 13 показано поведение диагональных компонент и интенсивности на моменты времени  $t = 10$  и  $t = 20$  мкс для поликристалла.

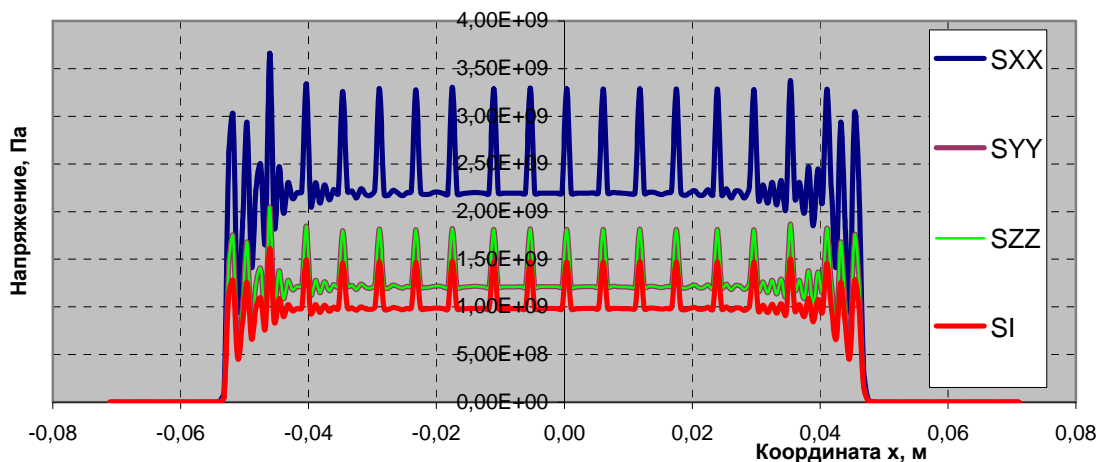


Рис. 11. Поведение диагональных компонент тензора напряжений и интенсивности для монокристалла на момент времени  $t = 10$  мкс

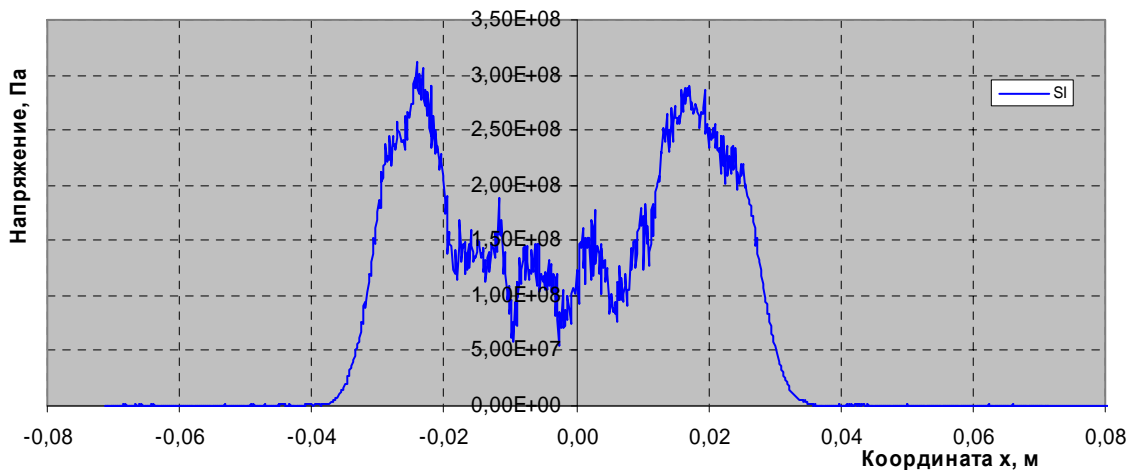
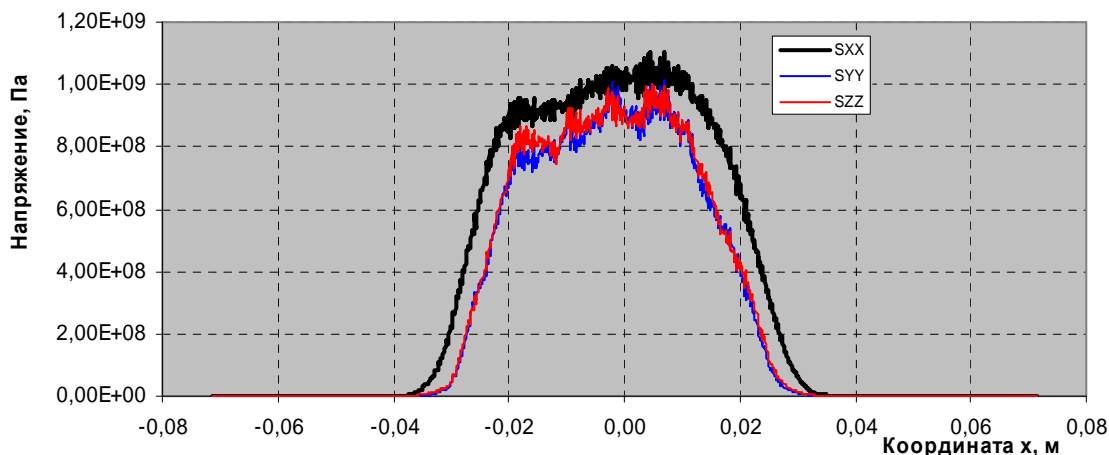


Рис. 12. Поведение диагональных компонент тензора напряжений (вверху) и интенсивности  $\sigma_{II}$  (внизу) для поликристалла на момент времени  $t = 10$  мкс



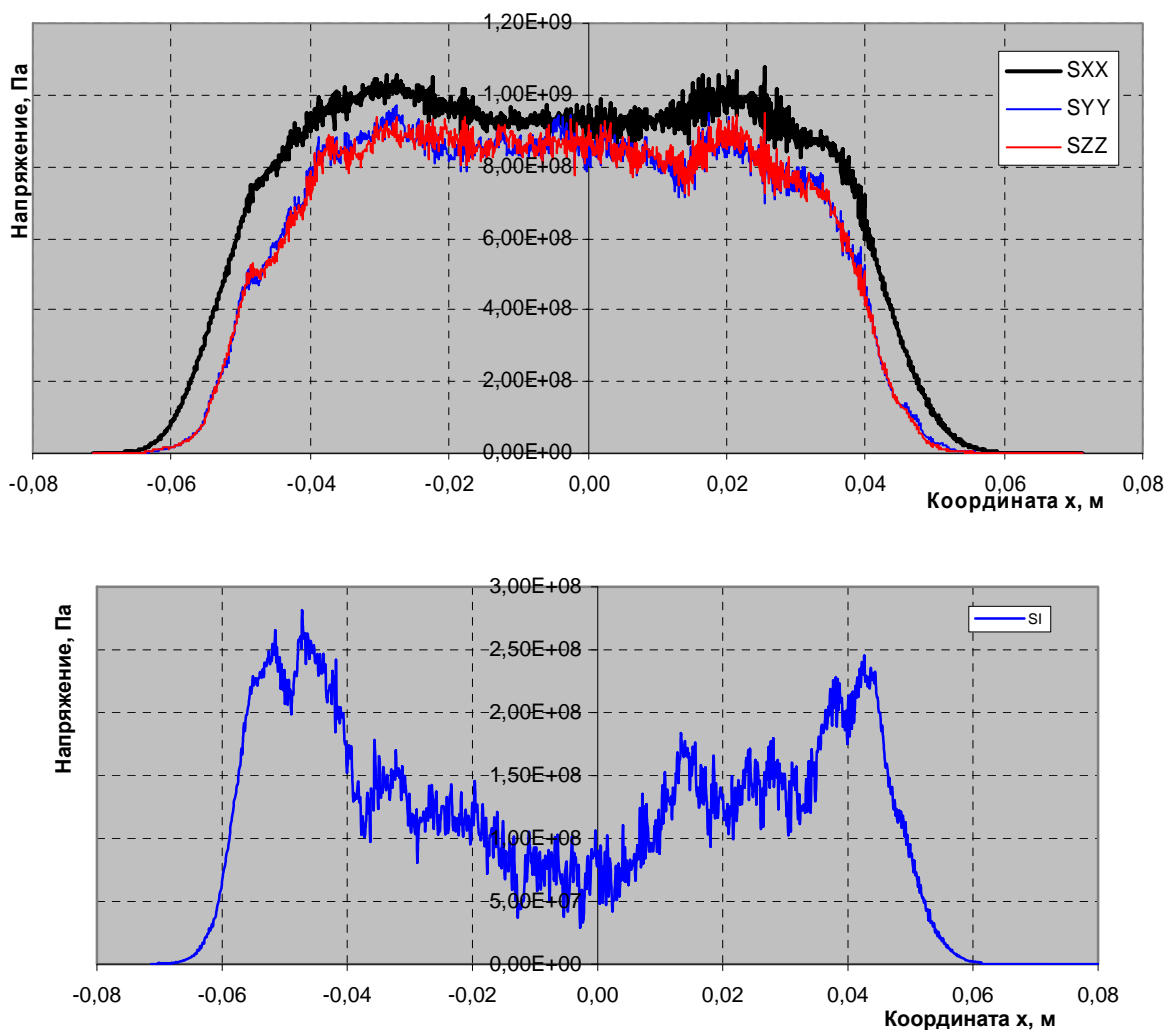


Рис. 13. Поведение диагональных компонент тензора напряжений (вверху) и интенсивности  $\sigma_{ii}$  (внизу) для поликристалла на момент времени  $t = 20$  мкс

Поведение интенсивности сдвиговых напряжений  $\sigma_{ii}$  за фронтом волны для поликристалла имеет характерные особенности. На фронте волны происходит рост  $\sigma_{ii}$  до значений 0,25–0,3 ГПа, а за фронтом она падает до значений  $\sim 0,06$  ГПа (реальный предел текучести алюминия 0,05–0,1 ГПа). Следует отметить, что аналогичная релаксация интенсивности напряжений за фронтом волны реализуется в релаксационных моделях пластичности (например, РИНГ [10]). Модель [10] отражает зависимость интенсивности напряжений от многих параметров – деформации, скорости деформации, давления, температуры, истории нагружения. Она является достаточно гибкой и содержит как частные случаи широко известные модели: Стейнберга и вязко-упругопластическую модель.

Необходимо отметить, что подобная картина поведения компонент тензора напряжений не наблюдается при задании пористой упаковки (без наличия границ зерен).

На данный момент можно констатировать, что задание в качестве начального распределения кластеров трехмерных поликристаллических упаковок дает эффекты, качественно близкие к поведению реальной упругопластической сплошной среды. Аналогичная картина релаксации напряжений за фронтом УВ реализуется в релаксационных моделях пластичности (РИНГ) [10]. Требуются дальнейшие исследования для установления взаимосвязи структурных параметров поликристаллической упаковки (размер зерен, количество кластеров в зерне) с макроскопическими параметрами моделируемой среды – например, пределом текучести.

## 2.2. Моделирование тестов Тейлора

Для подтверждения работоспособности модели упругопластических свойств путем задания поликристаллической упаковки кластеров был выполнен расчет тестовой задачи по моделированию высокоскоростного удара деформируемого стержня о жесткую преграду (тест Тейлора). Расчет проводился в двух постановках (рис. 14), для которых имеются экспериментальные результаты [11].

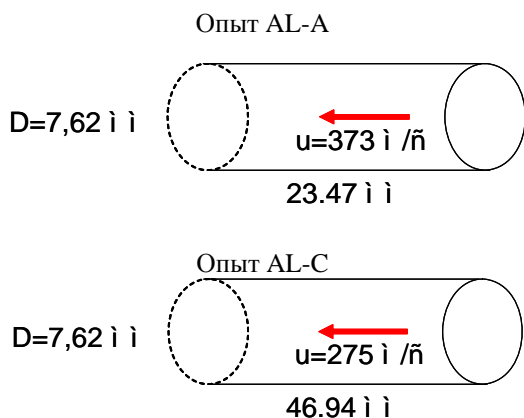


Рис. 14. Геометрия расчетных областей

При моделировании тестов Тейлора вдоль направлений  $x, y, z$  (кроме жесткой стенки) использовались свободные граничные условия.

Результаты расчетов методом КД показаны на рис. 15 и 16. На рисунках показаны результаты расчетов для поликристаллического материала с параметрами: размер кластера – 100 мкм, количество поликристаллов в образце – 1363, плотность образца с учетом поликристаллическости –  $2,32 \text{ г/см}^3$ .

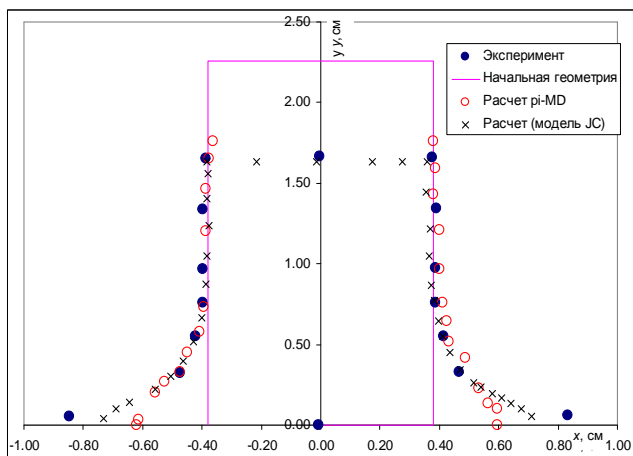


Рис. 15. Начальная и остаточная форма образца. Опыт AL-A

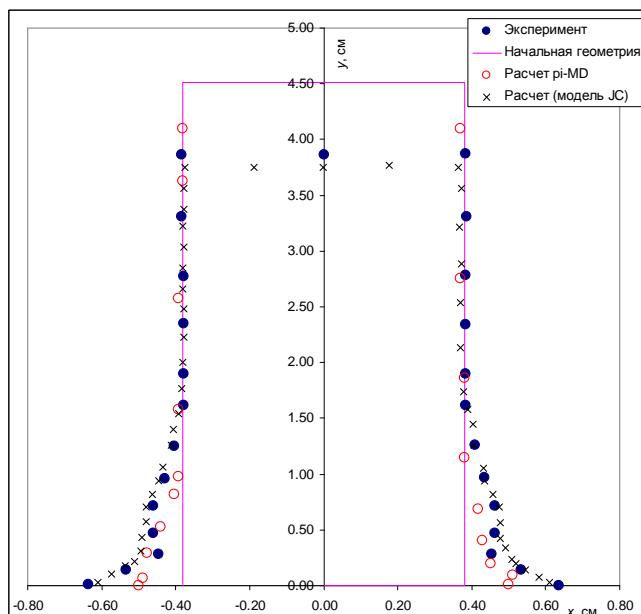


Рис. 16. Начальная и остаточная форма образца. Опыт AL-C

На рис. 15, 16 также показаны результаты расчетов с использованием модели упругопластического деформирования Джонсона – Кука (результаты расчетов взяты из работы [11]). Из рисунков видно, что при использовании поликристаллической упаковки качественно воспроизводится характер упругопластического деформирования материала. Вместе с тем еще раз подтверждается важность для метода КД решения вопроса о влиянии параметров поликристаллической структуры на времена релаксации за фронтом УВ и саму величину предела текучести.

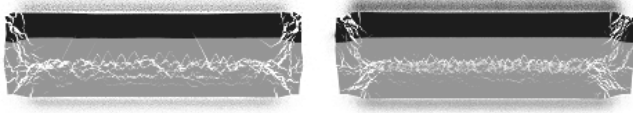
## 3. Исследование процессов пыления при выходе УВ на поверхность материалов

Среди задач разрушения (диспергирования) материала отдельный интерес представляет процесс пыления – выброса мелкодисперсных частиц при выходе УВ на свободную поверхность.

Обычно главной причиной пыления считается шероховатость поверхности, за счет которой образуются локальные отколы и струйки вещества. При упругопластическом описании отколы с гладкой нагружаемой поверхности возникают только при наличии профиля давлений за фронтом УВ, поскольку только в этом случае в волне разгрузки формируются отрицательные давления.

В методе КД разрушение обусловлено разрывами связей между кластерами, поэтому привлекательно его применение для описания процесса пыления, обусловленного неоднородностями внутренней структуры материала, в частности зернами и дефектами структуры. Однако отрыв приграничных частиц от поверхности в методе КД может иметь место из-за нелинейности процесса колебания кластеров, возбужденных УВ. Заранее неясно, насколько велик этот побочный эффект для нагружения однородного материала с гладкой поверхностью плоской УВ (без профиля давлений).

Побочные эффекты пыления были получены нами в расчетах процесса столкновения пластин (рис. 17).



Размер кластера 5 мкм      Размер кластера 2 мкм

Рис. 17. Результаты расчета методом КД процесса столкновения двух разнородных пластин с образованием области отколов [2]. Отчетливо различим счетный эффект пыления с ровной поверхности

По физическому смыслу для плоской УВ пыление однородного материала должно быть пренебрежимо мало, иначе под сомнение ставятся газодинамические критерии разрушения (откола).

### 3.1. Исследование счетных эффектов, возникающих в расчетах с плоской УВ методом КД

В работе [3] выполнено моделирование процесса пыления при выходе плоской УВ на свободную гладкую поверхность однородного материала в рамках метода КД. Исследовался процесс диспергирования при выходе УВ на гладкую свободную границу образца. Серии трехмерных расчетов проведены для различных массовых скоростей  $u$  за фронтом УВ, размер кластеров составлял 10 мкм, в расчетах варьировался радиус отсечки потенциала  $R_c$ . Длина образца вдоль распространения УВ составляла 5 мм, граничные условия в этом направлении были свободными. Размеры в других направлениях, имеющих периодические граничные условия, равнялись двум периодам решетки.

Из результатов расчетов с различными массовыми скоростями за фронтом волны следует, что

процесс диспергирования нерегулярен и носит пороговый характер. Для иллюстрации на рис. 18, 19 показана зависимость числа диспергированных кластеров от скорости  $u$  для радиусов отсечки  $R_c = 1,1$  и  $1,2$ .

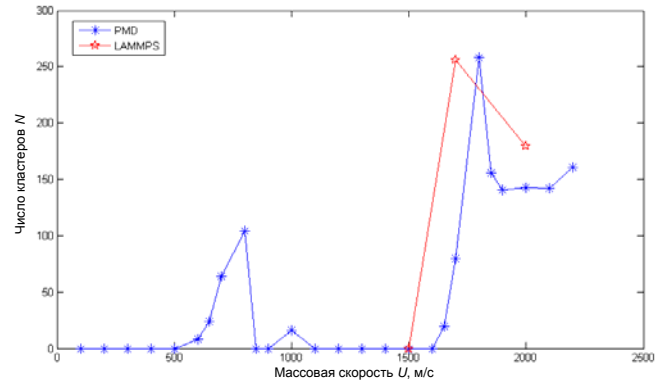


Рис. 18. Зависимость числа диспергированных кластеров для алюминиевого образца от массовой скорости  $u$  за фронтом УВ при  $R_c = 1,1$

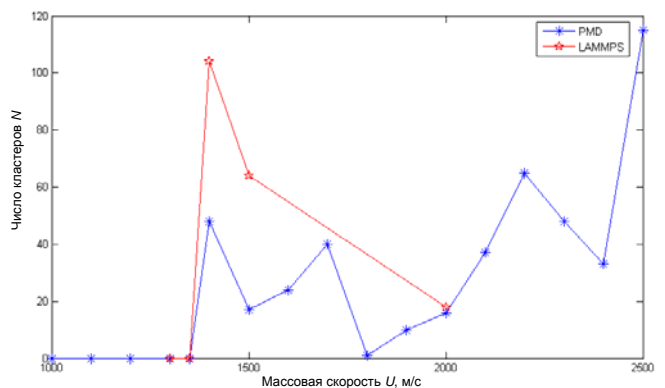


Рис. 19. Зависимость числа диспергированных кластеров для алюминиевого образца от массовой скорости  $u$  за фронтом УВ при  $R_c = 1,2$

Для достаточно сильных УВ унос значительно превышает величины для единичного слоя кластеров, а в целом относительная масса материала в дисперсной фазе составила несколько процентов от полной массы образца. При этом число кластеров пыли ведет себя немонотонно с увеличением массовой скорости за фронтом волны и.

На одномерной модели в работе [3] показано, что при больших скоростях нагружения за счет ангармоничности потенциала взаимодействия возникают высокочастотные моды колебаний и происходит отрыв большого числа поверхностных кластеров, а для гармонического потенциала этот отрыв практически отсутствует.

### 3.2. Подавление счетных эффектов путем модификации уравнений движения

Кардинальным способом подавления описанного счетного эффекта является модификация уравнений движения кластеров путем добавки сил торможения, пропорциональных относительным скоростям частиц [3]. Способы устранения побочных эффектов пыления путем модификации уравнений движения проверены сначала на одномерной модели. Работоспособной оказалась модификация уравнений движения, в которой вводится торможение, зависящее от относительных скоростей:

$$\begin{aligned} \frac{dx_i}{dt} &= v_i; \\ \ddot{x}_i &= \frac{1}{m} [f(x_{i+1} - x_i) - f(x_i - x_{i-1})] - \\ &\quad - \Gamma(v_i - v_{i+1}) - \Gamma(v_i - v_{i-1}). \end{aligned} \quad (5)$$

Постоянная торможения  $\Gamma$ , имеющая размерность обратного времени, следующая:  $\Gamma = c_0/Ja$ , где  $c_0$  – скорость звука,  $a$  – размер базового кластера,  $J = 10 \div 100$  – эмпирическое число, характеризующее паразитные моды, которые нужно подавить. Номинально полагается  $\Gamma = c_0/50a$ . Важно, что уравнение (5) обеспечивает компенсацию дополнительных сил при их сложении вдоль цепочки.

Были проведены подробные методические расчеты, которые показали, что предлагаемый выбор сил торможения полностью устраняет побочные эффекты пыления и сохраняет основные физические закономерности процесса нагружения и дальнейшего движения пластины.

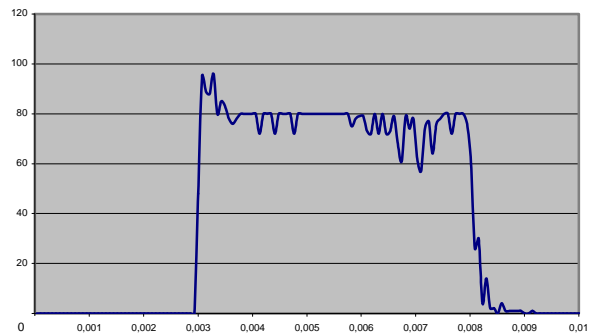
В общем трехмерном случае модифицированные уравнения движения, устраняющие побочное пыление, имеют вид:

$$\begin{aligned} \frac{d\bar{r}_i}{dt} &= \bar{v}_i; \\ \frac{d\bar{v}_i}{dt} &= \frac{1}{m} \sum_{\bar{r}_k \in \Omega_i} \bar{f}(\bar{r}_k - \bar{r}_i) - \Gamma \sum_{\bar{r}_k \in \Omega_i} (\bar{v}_i - \bar{v}_k). \end{aligned} \quad (6)$$

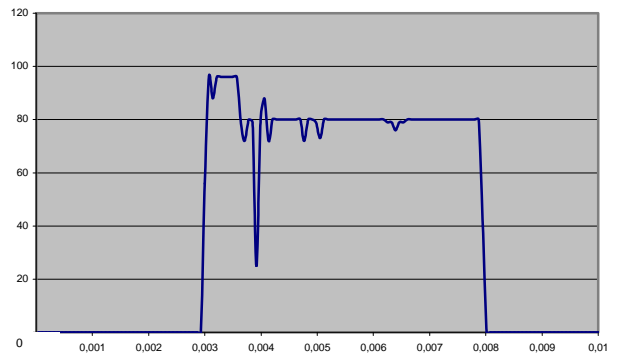
Здесь суммирование ведется по соседям, находящимся в объеме  $\Omega_i$  (в радиусе действия потенциала). Важно, что добавление таких взаимно компенсирующихся сил не меняет баланс энергии-импульса и не приводит к диссипации интегральных величин.

Новые уравнения движения реализованы в комплексе  $\pi$ -MD [18] и их эффективность проверена в серии трехмерных расчетов для случая  $u = 2$  км/с,  $R_c = 1,1$ . Счетный эффект без модификации уравнений движения в данном случае выражен очень отчетливо (рис. 20).

Для того чтобы количественно охарактеризовать процесс диспергирования со свободной границы, рассчитывалось распределение числа кластеров  $N$  по длине образца. На рис. 20 показано сравнительное распределение числа частиц в слое в расчетах без торможения и с торможением  $\Gamma = c_0/50a$  на момент времени 1,5 мкс, когда в слое полностью сформирована волна разгрузки. Видно, что счетный эффект диспергирования снимается полностью.



а



б

Рис. 20. Распределение числа кластеров по координате в расчетах без торможения (а) и с торможением  $\Gamma = c_0/50a$  (б) на момент времени 1,5 мкс

Таким образом, предложенный способ уничтожения счетного эффекта, вызванного ангармоничностью потенциала взаимодействия кластеров, может использоваться в дальнейшем, как при решении практических задач, так и для отделения физических эффектов от побочных, например при исследовании процессов выхода УВ на свободную границу поликристаллического образца.

#### 4. Примеры практического применения метода и внедрения в программные комплексы

Рассмотрим некоторые примеры применения метода КД для решения практических задач:

1. Пробитие толстой алюминиевой пластины алюминиевым ударником с начальной скоростью  $\sim 7$  км/с (рис. 21) [2, 12–15].

2. Пробитие тонкой алюминиевой пластины алюминиевым ударником с начальной скоростью  $\sim 7$  км/с [2, 12–15].

3. Пробитие сложных многокомпонентных преград высокоскоростным ударником [16].

4. Моделирование процесса выхода УВ на профилированную поверхность – исследование эффектов пыления и кумулятивного выброса частиц [2, 13–15].

#### 4.1. Задачи высокоскоростного пробития преград

Задача о высокоскоростном ударе сферического ударника по «тонкой» преграде с образованием сквозного отверстия и облака вторичных осколков часто используется для тестирования упругопластических численных методик. В этом случае в преграде образуется большое сквозное отверстие, основным предметом внимания является формируемое осколочное поле. Экспериментальные данные для тестового расчета взяты из работы [17].

На рис. 22 представлены сравнительные расчеты задачи о высокоскоростном пробивании преграды ударником, проведенные по комплексам  $\pi$ -МД, МД.

МД и  $\pi$ -МД – комплексы параллельных программ [18, 19], разрабатываемые в ИТМФ РФЯЦ-ВНИИЭФ для многопроцессорных ЭВМ. Комплексы развиваются независимо друг от друга, при этом комплекс  $\pi$ -МД развивается как специализированный для применения метода КД программный продукт; МД – комплекс более ориентированный на использование метода классической молекулярной динамики, но в нем также проводятся расчеты многих типов задач методом КД.

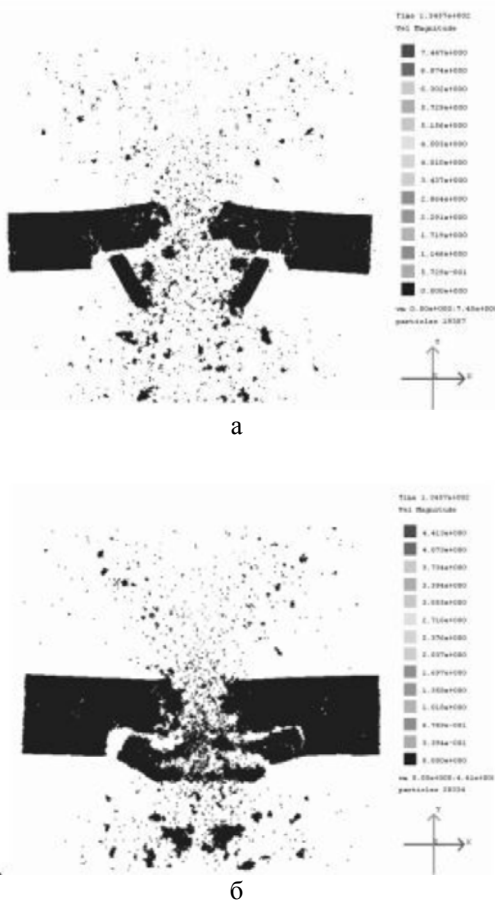


Рис. 21. Результаты расчета методом кластерной динамики задачи пробития толстой алюминиевой пластины: а – толщина образца 10 мм; б – толщина образца 14 мм. Момент времени  $t = 25$  мкс от момента соударения [2]

Ниже приводятся основные результаты расчетов и кратко характеризуются использованные для расчетов программные комплексы.

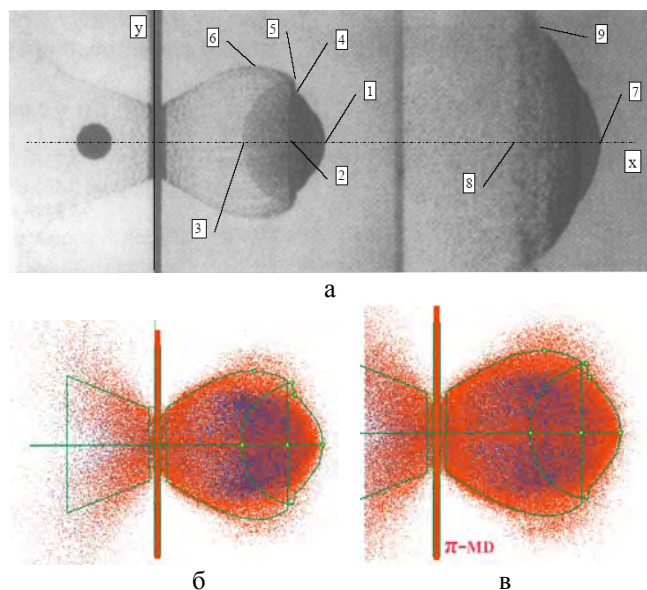


Рис. 22. Задача о высокоскоростном пробивании преграды ударником: а – рентгенограмма опыта [17]; б – расчет МД; в – расчет  $\pi$ -МД. На результаты расчетов нанесены контуры экспериментальной рентгенограммы

Сравнение результатов расчетов методом КД с экспериментальными рентгенограммами показывает, что общая картина процесса воспроизво-



дится с хорошей точностью. Результаты расчетов по методикам SPH [2] и КД отличаются от экспериментальных данных не более чем на ~10 %. Диаметр  $d$  отверстия в преграде воспроизводится несколько лучше в методике КД, чем в методе SPH, но при этом в КД хуже воспроизводится величина  $\theta$  – угол обратного разлета осколков (табл. 2).

Таблица 2

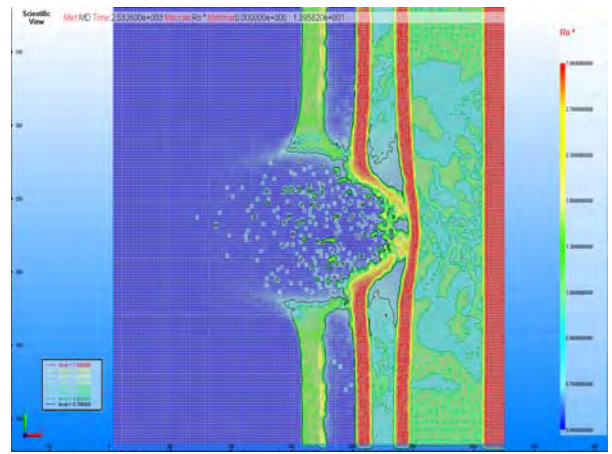
Сравнение результатов расчетов с экспериментом

	$d$ , мм	$\theta$ , град.
Рентгенограмма [17]	17,3	20,67
Расчет SPH [2]	18,0	27,08
Расчет КД [2]	17	39

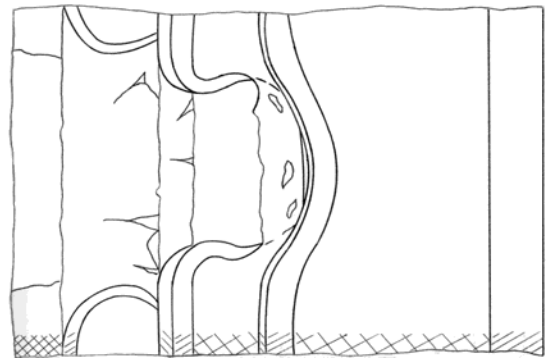
Метод КД тестировался также на более сложных задачах пробивания многослойных преград [16]. Постановка задач пробивания многослойных преград выглядит следующим образом (рис. 23): сферический стальной ударник массой 10 г движется со скоростью ~6–7 км/с под углом 90° к преграде; преграда представляет собой набор плоских пластин размером 300 × 300 мм, разделенных воздушной прослойкой.



Рис. 23. Геометрия задач пробивания многослойной преграды: 1 – железо  $d = 13,5$  мм; 2 – текстолит толщиной 15 мм; 3 – алюминий толщиной 4 мм; 4 – воздушный зазор толщиной 25 мм; 5, 7, 9 – сталь толщиной 10 мм; 6, 8 – парафин толщиной 20 и 60 мм соответственно



а



б

Рис. 24. Сравнение результатов расчетов задачи по пробитию многослойной преграды с экспериментальными данными [16]. Момент времени  $t = 67,6$  мкс: а – расчет; б – рентгенограмма

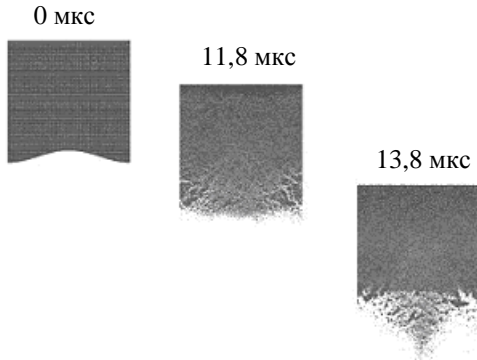
Результаты расчетов данного класса задач показали, что метод КД, реализованный в МД, позволяет проводить моделирование опытов по пробиванию плоских преград и дает не только качественное, но и неплохое количественное согласие с экспериментальными данными и другими расчетными методиками (рис. 24).

#### 4.2. Задачи о кумуляции и пылении

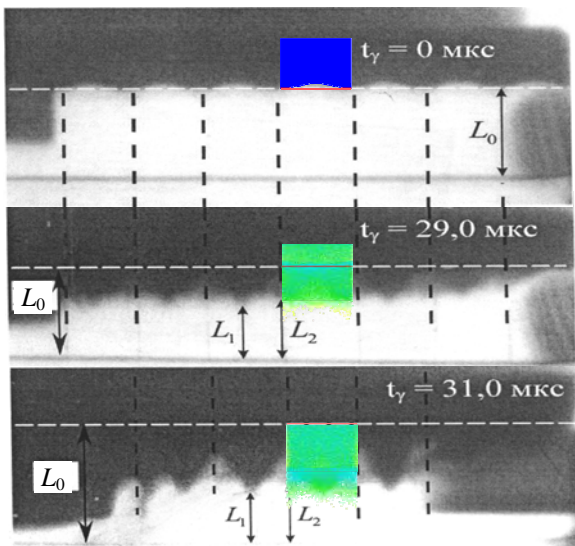
В работе [20] приведены результаты экспериментов по выходу УВ на профилированную свободную поверхность образца из алюминиевого сплава. Образец с профилированной свободной поверхностью подвергался ударно-волновой нагрузке, создаваемой ВВ. В результате формировалась выходящая на свободную поверхность УВ с амплитудой на фронтальной поверхности ~30 ГПа. Для профиля поверхности, характеризующегося амплитудой 1 мм, длиной волны 10 мм и массовой скоростью сплошного материала ~3,2 км/с, возникали струйные течения со скоростью ~3,7 км/с.



Для данной задачи было проведено значительное число двумерных расчетов по комплексам МД и  $\pi$ -МД, основные результаты которых приведены в работах [2, 13, 15]. Расчеты для выделенного фрагмента пластины и для трех характерных моментов времени приведены на рис. 25,а. Они хорошо согласуются с экспериментально зафиксированной картиной процесса: время перепрофилирования поверхности, а также характерные скорости движения материала в объеме образца и кумулятивной струе соответствуют экспериментальным данным [20] (рис. 25,б).



а



б

Рис. 25. Результаты расчета задачи (а). Сравнение результатов расчетов с экспериментальными рентгенограммами (б)

Численная реализация метода КД позволяет получать не только пространственное распределение плотности раздробленного материала, но и распределение раздробленных частиц по размерам. Для метода КД разработан алгоритм восстановления спектров частиц (распределения частиц

по размерам), основанный на перечислении связей между отдельными кластерами [2]. Считается, что кластеры связаны в одну частицу, если расстояние между ними не превышает радиус взаимодействия  $r \leq ba$ . Частицей является набор кластеров, в котором каждый кластер обязательно имеет хотя бы одну связь с другими. Математически такая процедура является построением неориентированного графа. При этом каждой частице соответствует компонента связности графа (дерево, цикл, ребро). Перечислением компонента связности мы можем восстановить спектр частиц, построив зависимость  $N(g)$ , где  $N$  – число частиц в системе, состоящих из  $g$  кластеров.

Калибровка получаемых спектров может осуществляться с использованием современных методов регистрации диспергированных микрочастиц. В настоящее время во ВНИИЭФ разработана методика визуализации микрочастиц в газодинамических течениях с помощью лазерной подсветки [21]. Проводятся эксперименты по визуализации микрочастиц, выбрасываемых с поверхности материалов, различных по свойствам и внутренней микроструктуре (в том числе свинца, меди, алюминия, керамических материалов, жидкостей). Результаты этих экспериментов используются для калибровки метода КД.

Приведем в качестве примера результаты моделирования процесса выброса микрочастиц с поверхности, имеющей 2D возмущения в виде шероховатостей с характеристиками  $Rz80$  и  $Rz20$ . Для случая шероховатости  $Rz80$  моделирование проводилось для фрагмента образца, имеющего размеры  $h = 500$  мкм и  $l = 2,4$  мм, амплитуда возмущений ( $a_0$ ) составляла 80 мкм, длина волны возмущений  $\lambda = 300$  мкм (рис. 26). В случае шероховатости  $Rz20$  размеры области моделирования  $h$  и  $l$  не изменялись, амплитуда возмущений ( $a_0$ ) задавалась равной 20 мкм, длина волны возмущений  $\lambda = 20$  мкм.

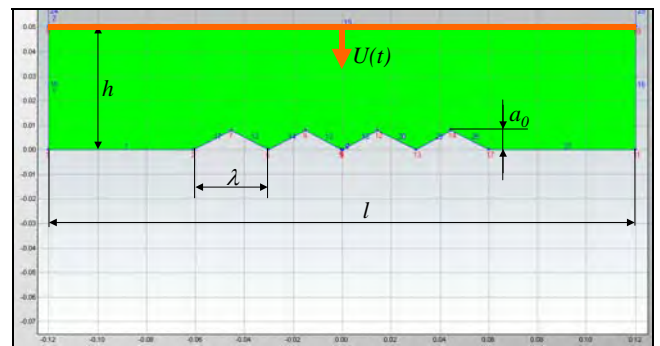


Рис. 26. Геометрия расчетной области (шероховатость  $Rz80$ )

Расчеты проводились для двух условий воздействия: интенсивность УВ  $P \approx 15$  ГПа и  $P \approx 30$  ГПа. Газодинамический расчет условий нагружения (зависимости скорости движения выбранной лагранжевой границы от времени  $U(t)$ ) выполнялся с использованием комплекса MASTER Professional [22] ([www.master-ware.com](http://www.master-ware.com)), полученные зависимости  $U(t)$  передавались в комплекс  $\pi$ -MD [18] в качестве граничных условий. Для описания взаимодействия кластеров свинца в методе КД использовался потенциал в форме Ми – Грюнайзена с параметрами:  $\rho_0 = 11,34$  г/см<sup>3</sup>,  $c_0 = 1,972$  км/с,  $n = 3,0$ .

Общая картина развития процесса кумуляции и пыления, полученная в расчете, показана на рис. 27. На рис. 28 сравниваются результаты расчета для двух шероховатостей  $Rz80$  и  $Rz20$ , условия нагружения одинаковые ( $P \approx 15$  ГПа), размер кластеров в расчетах – 0,5 мкм.

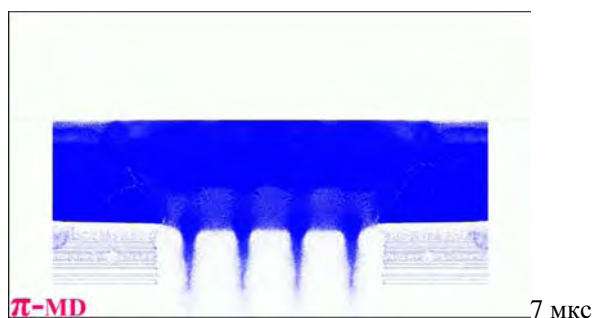
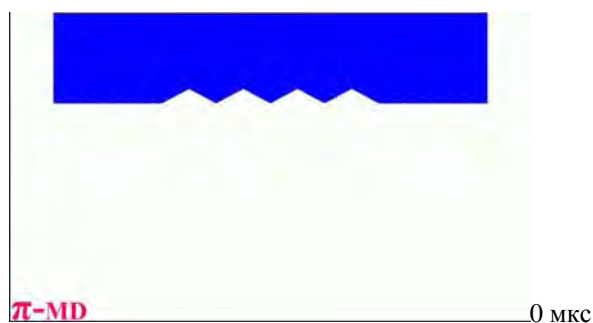


Рис. 27. Результаты расчета на моменты времени 0–7 мкс. Шероховатость  $Rz80$ , амплитуда УВ  $P \approx 15$  ГПа, размер кластеров в расчетах 0,5 мкм

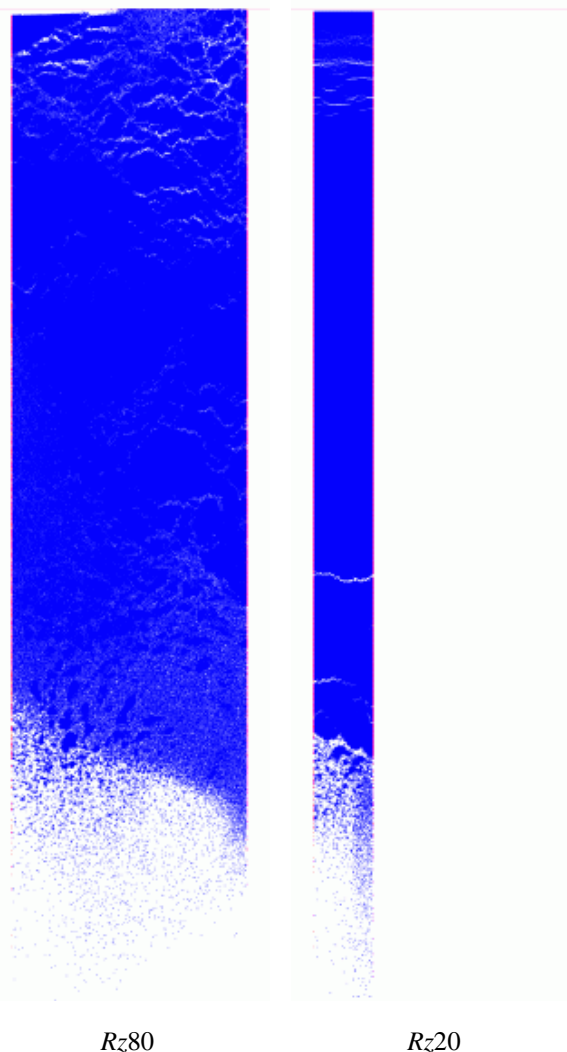


Рис. 28. Фрагменты расчетных областей на момент времени 6 мкс

Важной является проблема определения спектра частиц, выбрасываемых с поверхности материалов. В методе КД нами создан алгоритм, позволяющий находить все компоненты связности ансамбля частиц [2].

Расчетные спектры распределения частиц по размерам, получаемые для данного класса задач, также позволяют обнаружить счетный эффект, выражающийся в интенсивном пылении на идеально гладкой поверхности (см. рис. 27) и приводящий к зависимости спектра от выбранного

в расчете размера кластера. О таком счетном эффекте идет речь в разделе 3 статьи, где предложен способ его устранения.

Сравнение результатов расчетов с экспериментальными данными показывает, что качественные особенности исследуемого в данных экспериментах процесса воспроизводятся правильно. Так, например, в работе [21] отмечается, что с ростом шероховатости свободной поверхности образца увеличивается интенсивность наблюдаемых процессов микрокумуляции и струеобразования из неровностей, а при уменьшении шероховатости преобладают процессы откольного разрушения. Аналогичные особенности проявляются в КД расчетах: для шероховатости  $Rz20$  откольные процессы явно просматриваются; для шероховатости  $Rz80$  отколов вблизи свободной поверхности не наблюдается, просматривается интенсивное образование струйных течений (см. рис. 28).

В целом сравнение экспериментальных данных для процесса пыления с расчетами методом КД позволяет сделать следующие выводы о корректности этого сравнения:

1. Обработка экспериментальных спектров осуществляется по микрофотографиям, полученным хотя и с малыми, но все же весьма ощутимыми по длительности импульсами подсветки – 4 нс. При скоростях частиц 1–1,5 км/с этот фактор может вносить существенную сдвигу в экспериментальном спектре в сторону увеличения размеров частиц (в среднем ~ 5 мкм).

2. Необходимо учитывать в расчетах торможение частиц в газовой среде. В экспериментах проводится регистрация частиц на значительном расстоянии от исходного положения свободной поверхности. Это так же может приводить к изменению первоначального спектра и сдвигу наблюдаемого в экспериментах спектра в сторону увеличения размеров частиц.

На рис. 29 показан оценочный результат учета влияния некоторых перечисленных факторов:

**Ряд 1.** Из спектра, полученного в расчете с размером кластеров 0,5 мкм, произвольно вычтена мелкогабаритная часть спектра (нет частиц с размерами < 10 мкм).

**Ряд 2.** Спектр, соответствующий ряду 1, сдвинут на 5 мкм в сторону увеличения среднего размера.

В целом представленные результаты показывают перспективность метода КД для описания процессов кумуляции и пыления. Важно, что в настоящее время разрабатываются программные комплексы, сочетающие метод КД с газодинами-

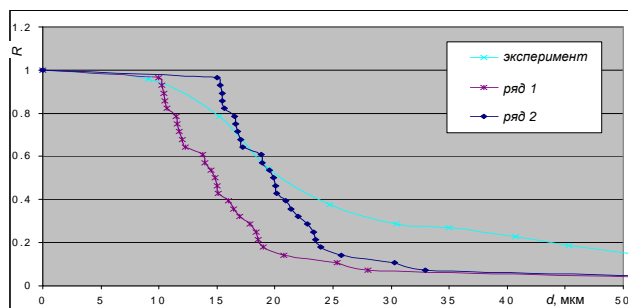


Рис. 29. Сравнение скорректированных расчетных спектров с экспериментальным спектром частиц. Шероховатость  $Rz80$  ( $P \approx 15$  ГПа)

ческими методами моделирования течения многокомпонентных сред. Разработка такого комплекса (сочетающего сеточные и дискретные подходы к моделированию) позволит учесть в расчетах упоминаемый выше эффект изменения спектра частиц за счет их торможения в газовой фазе.

В дополнение к перечисленным выше программным комплексам необходимо отметить комплекс LAMMPS, реализующий метод классической молекулярной динамики и разрабатываемый для эффективной работы на параллельных компьютерах [23, 24].

В самом общем смысле в LAMMPS интегрируются уравнения движения Ньютона для ансамблей атомов, молекул или макроскопических частиц, связанных короткодействующими или далекодействующими силами с разнообразными начальными и граничными условиями. Это позволяет без каких-либо усложнений применять данный комплекс для расчетов методом кластерной динамики КД. Нами комплекс LAMMPS применяется для расчетов практически всех перечисленных выше задач, некоторые результаты приведены в работах [1, 2]. Следует отметить, что в комплексе LAMMPS также реализована аналогичная методу КД методика мезомасштабного моделирования, названная авторами «peridynamic» [24].

## Заключение

В статье рассмотрены результаты расчетов методом кластерной динамики задач высокоскоростной деформации и примеры практического использования метода КД.

Результаты тестовых расчетов распространения плоской УВ показывают, что выбранный в качестве основы метода КД способ построения потенциалов взаимодействия кластеров позволяет

воспроизводить ударные адиабаты однокомпонентных (гомогенных) материалов. Для гетерогенных материалов метод КД дает результаты, не противоречащие существующим теоретическим моделям механики многокомпонентных сред.

Вместе с тем рассмотренные тестовые задачи о распространении плоской ударной волны в веществе выявляют существенные проблемы использования метода КД: сложность моделирования упругопластических свойств материалов; наличие нефизичного пыления, возникающего при выходе плоской прямой УВ на гладкую поверхность материала.

В статье предложен один из перспективных способов моделирования пластических свойств материалов методом КД – использование поликристаллической начальной упаковки кластеров. Поликристаллическая начальная упаковка приводит к результатам качественно близким к поведению сплошной среды в релаксационных моделях пластичности. Требуется дальнейшие исследования для установления взаимосвязи структурных параметров поликристаллической упаковки (размер зерен, количество кластеров в зерне) с макроскопическими параметрами моделируемой среды, например пределом текучести.

В качестве способа подавления описанного счетного эффекта пыления с идеально гладкой поверхности в методе КД может быть использована модификация уравнений движения кластеров путем добавки сил торможения, пропорциональных относительным скоростям частиц. Представленные в статье результаты расчетов показывают, что предлагаемый в работе [3] способ выбора сил торможения устраняет побочные эффекты пыления и сохраняет основные физические закономерности процесса ударно-волнового нагружения и движения вещества после выхода УВ на свободную поверхность материала.

Результаты моделирования процессов высокоскоростного ударного нагружения твердых тел с помощью метода КД и их сравнение с экспериментальными данными показывают, что метод позволяет в одной манере описать результаты существенно различных по постановке динамических экспериментов: формирование кумулятивных струй при выходе УВ на свободную поверхность; формирование осколочного поля в процессах высокоскоростного пробития преград ударником, выброс частиц с поверхности (пыление) при выходе УВ на свободную поверхность. Очевидно, что описание эффектов осколочного воздействия, процессов пыления и кумуляции имеет большое практическое значение.

На данный момент метод КД внедрен и освоен в комплексах LAMMPS, «Мастер», МД и  $\pi$ -МД. Расчеты проводятся как на персональных, так и на высокопроизводительных многопроцессорных компьютерах. Для многопроцессорных систем разработаны методы распараллеливания счета и эффективные методы балансировки загрузки процессоров, в том числе и при решении задач с сильно изменяющейся геометрией и разрушением.

Важно, что в настоящее время разрабатываются программные комплексы, сочетающие метод КД с газодинамическими методами моделирования течения многокомпонентных сред. Разработка таких комплексов позволит значительно сократить время расчетов, учесть ряд эффектов, которые очень трудоемко моделировать методом КД (например, изменения спектра и скоростей частиц за счет их торможения в газовой фазе).

### Список литературы

1. Пискунов В. Н., Давыдов И. А. Метод кластерной динамики и его применение в задачах импульсного нагружения твердых тел // Деформация и разрушение материалов. 2008, № 1. С. 3.
2. Davydov I. A., Piskunov V. N., Veselov R. A. et al. Cluster dynamics method for simulation of dynamics processes of continuum mechanics. Computational materials Science. Vol. 49. 2010. P. 32–36.
3. Пискунов В. Н., Цаплин Д. А., Веселов Р. А. Об эффекте «пыления» в методе кластерной динамики. ВАНТ. Серия: Теоретическая и прикладная физика. 2011. Вып. 1–2. С. 98.
4. Глушак Б. Л., Гударенко Л. Ф., Стяжкин Ю. М., Жеребцов В. А. Полуэмпирическое уравнение состояния металлов с переменной электронной теплоемкостью // ВАНТ. Сер.: Математическое моделирование физических процессов. 1991. Вып. 1. С. 32–37.
5. Павловский М. Н. Ударная сжимаемость шести высокотвердых веществ // Физика твердого тела. 1970. Т. 12. Вып. 7. С. 2175–2178.
6. Kazuhiro Fuchizaki, Takeshi Nakamichi, Hiroyuki Saitoh, Yoshinori Katayama. Equation of state of hexagonal boron nitride // Solid State Communications. 2008. Vol. 148. P. 390–394.
7. Куропатенко В. Ф. Новые модели механики сплошных сред // ИФЖ. 2011. Т. 84, № 1. С. 74.
8. Куропатенко В. Ф. Законы сохранения в моделях многокомпонентных сред // Проблемы и достижения прикладной математики и механики: к

70-летию академика В. М. Фомина: Сб. научн. тр. Новосибирск: Параллель, 2010. С. 76–92.

9. Зельдович Я. Б., Райзер Ю. П. Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. М.: Наука, 1966.

10. Низовцев П. Н., Раевский В. А., Игнатова О. Н. Гетерогенное деформирование металлов в ударной волне (теория, расчеты) / Сб. тез. докл. V Харитоновские тематические научные чтения «Вещества, материалы и конструкции при интенсивных динамических воздействиях». Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2003.

11. Biswajit Banerjee. Taylor impact tests: Detailed report, Department of Mechanical Engineering, University of Utah, Salt Lake City, UT 84112, USA, Report No. C-SAFE-CD-IR-05-001, 2005/

12. Давыдов И. А., Пискунов В. Н., Петров А. М. Метод кластерной динамики и его применение в задачах импульсного нагружения твердых тел // Забыхинские научные чтения: Сб. материалов IX Международной конференции, 10–14 сентября 2007 г. Снежинск: Изд-во РФЯЦ-ВНИИГФ, 2007. С. 247.

13. Давыдов И. А., Пискунов В. Н., Веселов Р. А. и др. Моделирование некоторых процессов кумуляции и разрушения методом кластерной динамики // Там же. С. 248.

14. Давыдов И. А., Пискунов В. Н., Руденко В. В. и др. Метод кластерной динамики для моделирования динамических процессов механики сплошной среды // II Всероссийская конференция «Многомасштабное моделирование процессов и структур в нанотехнологиях»: Сб. тез. докл. М: МИФИ, 2009. С. 124–125.

15. Piskunov V. N., Davydov I. A., Veselov R. A. et al. Cluster dynamics method for simulation of dynamic processes of continuum mechanics, DYMAT 2009. P. 1789–1797.

16. Здорова М. В., Копкин С. В., Ветчинников М. В. и др. Моделирование методом кластерной динамики высокоскоростного осколочного воздействия на многослойные преграды // VII конференция Волжского регионального цен-

тра РАН «Современные методы проектирования и отработки ракетно-артиллерийского вооружения». Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2011.

17. Piekutowski A. J. Characteristics of debris clouds produced by hypervelocity impact of aluminum spheres with thin aluminum plates // Int. J. Impact Engng. 1993. Vol. 14. P. 573.

18. Веселов Р. А. Параллельная программа классической молекулярной динамики  $\pi$ -МД. Основные характеристики и результаты некоторых расчетов // IX международный семинар по супервычислениям и математическому моделированию: Тез. докл. Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 3–7 октября, 2006.

19. Воронин Б. Л., Ерофеев А. М., Копкин С. В. и др. Применение графических арифметических ускорителей для расчета задач молекулярной динамики по программному комплексу МД // ВАНТ. Сер.: Математическое моделирование физических процессов. 2009. Вып. 2. С. 55–61.

20. Огородников В. А., Михайлов А. Л., Романов А. В. и др. Моделирование струйных течений при выходе ударной волны на профилированную свободную поверхность // ПМТФ. 2006. Т. 48, № 1. С. 16.

21. Основные достижения РФЯЦ-ВНИИЭФ-2008. Саров, 2009. С. 16–22.

22. Tchekhounov E., Rudenko V., Chaburov M. Tutorial and Research Package MASTER on Continuum Mechanics. Proc. Second European Conference «Physics Teaching in Engineering Education», Budapest, Hungary, 2000.

23. LAMMPS Users Manual. Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator. <http://lammps.sandia.gov> – Sandia National Laboratories Copyright (2003) Sandia Corporation.

24. Michael L. Parks, Richard B. Lehoucq, Steven J. Plimpton, Stewart A. Silling Implementing peridynamics within a molecular dynamics code, Computer Physics Communications 179 (2008) 777–783.

Статья поступила в редакцию 21.11.2011.