

**МЕТОД КОНЕЧНО-РАЗМЕРНЫХ ЧАСТИЦ В ЯЧЕЙКЕ  
ДЛЯ ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ВЫСОКОЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ  
ИМПУЛЬСНЫХ ВОЗДЕЙСТВИЙ НА ВЕЩЕСТВО**

© 2006 г. В.В. Ким, И.В. Ломоносов, А.В. Острик, В.Е. Форттов

Институт проблем химической физики РАН, Черноголовка

Работа выполнена при финансовой поддержке Программ Президиума РАН «Теплофизика и механика интенсивных энергетических воздействий» и «Математическое моделирование» и РФФИ (грант № 03-07-90197)

Разработан метод конечно-размерных частиц в ячейке предназначенный для трехмерного численного моделирования газодинамических процессов при высоких плотностях энергии. В методе используется совместное эйлера-лагранжево представление среды, что позволяет эффективно отслеживать контактные и свободные границы и рассчитывать течения с большими деформациями. При расчете смешанных ячеек используется предположение о равенстве давлений и температур в пределах ячейки. С использованием параллельной SPMD-реализации предложенного метода проведено численное моделирование процесса высокоскоростного пробивания пластины свинцовым сферическим ударником. Результаты расчета сравниваются с данными, полученными из экспериментальной рентгенографической съемки.

**THE FINITE-SIZE PARTICLE-IN-CELL METHOD FOR NUMERICAL SIMULATION OF  
PULSED HIGH-ENERGY-DENSITY LOADINGS ON MATTER**

*V. V. Kim, I. V. Lomonosov, A. V. Ostrik, V. E. Fortov*

The finite-size particle-in-cell method for numerical modeling of pulsed high-energy density loadings on matter was developed. A mutual Lagrange-Eulerian representation of continuum used allows us to solve the problems with contact- and free-surfaces, as well as flows with strong deformations and strain rates. To calculate mixed cells we proceed from the assumption that pressures and temperatures are equal inside of a cell. Using a parallel SPMD implementation of the method we simulate the hypervelocity impact of lead spherical impactor on lead plate. The results of computer modeling were compared with experimental x-ray photographs.

В настоящее время предложен ряд численных методов решения многомерных задач нестационарной газовой динамики, каждый из которых оказывается эффективным для определенного круга задач. Для моделирования многофазных течений сплошной среды с большими деформациями, приводящими в ряде случаев к изменению топологической структуры расчетной области, как правило, используются методы, основанные на моделировании сплошной среды как множества дискретных частиц [1–8]. При таком подходе каждая расчетная частица является носителем информации о вполне определенном конечном объеме конкретного вещества со сформировавшимся в процессе движения состоянием, достаточно просто и естественно (по сравнению с другими методами) решаются вопросы расчета контактных границ, образования новых фазовых состояний и различных видов разрушения, включая и нарушение сплошности среды.

Первоначально метод «частиц-в-ячейке» («*Particle-In-Cell*») был предложен Харлоу [1]. Для расчета в нем используется система из точечных частиц конечной массы, а их параметры определяются интерполяцией из узлов неподвижной эйлеровой сетки. Большое распространение при решении задач нестационарной газовой динамики получил метод, разработанный Белоцерковским [2]. В нем используются «крупные» частицы, первоначально совпадающие с ячейками эйлеровой сетки, что обеспечивает непрерывность потоков массы через границы ячеек и гладкость получаемых решений [3]. В модернизациях [4, 5, 6] схемы

Харлоу для подавления счетных осцилляций на эйлеровом этапе используются устойчивые неявные схемы и «размазывание» частиц внутри ячейки. Другим предельным случаем является метод свободных частиц [7], в котором неподвижная эйлерова сетка вообще не используется. Метод индивидуальных частиц [8] близок к методу свободных частиц, но решена проблема определения соседства частиц путем «набрасывания» на них сетки и отслеживания движения частиц относительно нее. Однако остаются два других недостатка метода свободных частиц: не гарантировано выполнение закона сохранения энергии, и схема оказывается устойчивой только при использовании искусственной вязкости.

Современные задачи физики экстремальных состояний (такие, как высокоскоростной удар и пробивание, горение и детонация, воздействие на вещество высокоинтенсивных потоков излучения и частиц и т.д.) обладают рядом характерных особенностей, которые выдвигают высокие требования к используемым для их решения численным схемам. Сложная динамичная многомерная структура течения, наличие ударных волн, внутренних контактных и свободных границ, положение которых заранее не известно и также подлежит определению, высокие градиенты параметров и большие деформации делают зачастую использование общепринятых схем проблематичным или вовсе невозможным. Большую роль при исследовании таких процессов начинает играть «безавстность» метода, возможность продолжения расчета даже в исключительных, заранее не прогнозируемых условиях. Также не последнюю роль при выборе того или иного подхода играет возможность и простота модернизации кода, например, добавление в него новых моделей физико-химических свойств многокомпонентных и гетерогенных сред с учетом их неравновесности, механических моделей упруго-пластического течения и разрушения, а также моделей переноса (диффузии, электронной и лучистой теплопроводности и т.д.).

В предлагаемой модификации метода частиц на эйлеровом этапе используется явная условно устойчивая (даже при нулевой искусственной вязкости) консервативная конечно-разностная схема; на лагранжевом этапе перенос среды моделируется движением конечно-размерных частиц. Большое внимание уделяется численным процедурам упаковки и распаковки частиц, их дроблению и объединению. В результате метод позволяет получать достаточно монотонные профили параметров среды и эффективно описывать контактные границы. Ввиду использования частичного подхода естественным образом удается реализовать различные модернизации кода, направленные на уточнения и расширения моделей поведения многокомпонентных и гетерогенных сред. Обладая универсальностью и простотой модификации, метод дает возможность численно решать широкий спектр практически важных задач, подбирая для каждой из них наиболее адекватную физико-математическую модель.

Следуя традиционной схеме метода частиц в ячейке, интегрирование системы уравнений газовой динамики производится в два этапа. На первом этапе предполагается отсутствие конвективных потоков через границы эйлеровых ячеек, и уравнения движения и энергии в декартовой системе координат имеют вид

$$\frac{\partial \rho u}{\partial t} = -\text{grad } p, \quad \frac{\partial p e}{\partial t} = -p \text{ div } u. \quad (1)$$

Так как среда неподвижна, уравнение неразрывности соблюдается автоматически. Для конечно-разностного представления системы уравнений (1) отнесем термодинамические переменные (плотность, давление, удельная внутренняя энергия) к центрам ячеек, а кинематические (компоненты вектора скорости) – к узлам сетки. Тогда явная аппроксимация уравнений движения и энергии записывается в виде (запишем уравнение только для  $x$ -компоненты скорости  $u$ , для  $v$  и  $w$  – аналогично)

$$\begin{aligned} \frac{u_{ijk}^{n+1} - u_{ijk}^n}{\Delta t} &= -\frac{\Delta y \Delta z}{4M_{ijk}} \left[ (p + q^x)_{ijk}^n - (p + q^x)_{i-1,j,k}^n + \right. \\ &\quad + (p + q^x)_{i,j-1,k}^n - (p + q^x)_{i-1,j-1,k}^n + \\ &\quad + (p + q^x)_{i,j,k-1}^n - (p + q^x)_{i-1,j,k-1}^n + \\ &\quad \left. + (p + q^x)_{i,j-1,k-1}^n - (p + q^x)_{i-1,j-1,k-1}^n \right], \\ \frac{e_{ijk}^{n+1} - e_{ijk}^n}{\Delta t} &= -\frac{1}{4m_{ijk}} \left[ (u_{i+1,j,k}^{n+1/2} - u_{ijk}^{n+1/2} + u_{i+1,j+1,k}^{n+1/2} - u_{i,j+1,k}^{n+1/2} + \right. \\ &\quad + u_{i+1,j,k+1}^{n+1/2} - u_{i,j,k+1}^{n+1/2} + u_{i+1,j+1,k+1}^{n+1/2} - u_{i,j+1,k+1}^{n+1/2}) (p + q^x)_{ijk}^n \Delta y \Delta z + \\ &\quad + (v_{i,j+1,k}^{n+1/2} - v_{ijk}^{n+1/2} + v_{i+1,j+1,k}^{n+1/2} - v_{i+1,j,k}^{n+1/2} + \\ &\quad + v_{i,j+1,k+1}^{n+1/2} - v_{i,j,k+1}^{n+1/2} + v_{i+1,j+1,k+1}^{n+1/2} - v_{i+1,j,k+1}^{n+1/2}) (p + q^y)_{ijk}^n \Delta x \Delta z + \\ &\quad + (w_{i,j,k+1}^{n+1/2} - w_{ijk}^{n+1/2} + w_{i+1,j,k+1}^{n+1/2} - w_{i+1,j,k}^{n+1/2} + \\ &\quad \left. + w_{i,j+1,k+1}^{n+1/2} - w_{i,j+1,k}^{n+1/2} + w_{i+1,j+1,k+1}^{n+1/2} - w_{i+1,j+1,k}^{n+1/2}) (p + q^z)_{ijk}^n \Delta x \Delta y \right], \end{aligned}$$

где  $\Delta t, \Delta x, \Delta y, \Delta z$  – шаг интегрирования по времени и пространственным координатам;  $u, v, w$  – компоненты вектора скорости;  $p$  – давление;  $q^x, q^y, q^z$  – компоненты искусственной вязкости;  $m_{ijk}$  – масса, сосредоточенная в ячейке;  $M_{ijk}$  – масса в узле сетки  $ijk$ , которая получается в результате усреднения массы по всем окружающим узлам ячейкам;  $e$  – удельная внутренняя энергия. Верхние индексы относятся к временному слою интегрирования, нижние – к узлам пространственной расчетной сетки. Полуцелыми верхними индексами обозначены средние значения на старом и новом временных слоях. Компоненты вязкого давления  $q^x$  рассчитываются по формулам ( $q^y$  и  $q^z$  – аналогично)

$$\begin{aligned} q_{ijk}^x &= \frac{1}{4} k \cdot \rho_{ijk}^n \cdot c_{ijk}^n \left[ u_{i+1,j,k}^n - u_{ijk}^n + u_{i+1,j+1,k}^n - u_{i,j+1,k}^n + \right. \\ &\quad \left. + u_{i+1,j,k+1}^n - u_{i,j,k+1}^n + u_{i+1,j+1,k+1}^n - u_{i,j+1,k+1}^n \right], \end{aligned}$$

где  $k$  – характеризует ширину размазывания фронта. Для  $q^x$   $k = 0$ , когда выполняется условие

$$\begin{aligned} &\left[ u_{i+1,j,k}^n - u_{ijk}^n + u_{i+1,j+1,k}^n - u_{i,j+1,k}^n + \right. \\ &\quad \left. + u_{i+1,j,k+1}^n - u_{i,j,k+1}^n + u_{i+1,j+1,k+1}^n - u_{i,j+1,k+1}^n \right] > 0. \end{aligned}$$

Здесь  $c_{ijk}^n$  – скорость звука в ячейке.

Перечислим особенности лагранжева этапа, на котором производится расчет конвективного переноса величин через границы эйлеровых ячеек: сплошная среда моделируется системой дискретных прямоугольных частиц, имеющих конечные размеры; масса, импульс и внутренняя энергия каждой частицы равномерно распределены по ее объему; все частицы движутся через эйлерову сетку поступательно без вращения; положение каждой частицы полностью определяется координатами центра масс и линейными размерами; при движении частиц их масса остается постоянной.

После эйлерова этапа имеется новое промежуточное распределение скоростей и внутренней энергии. В предварительной части лагранжева этапа производится упаковка частиц, т.е. характеристики среды переносятся с эйлеровой сетки на лагранжеву систему частиц. В случае чистых ячеек, содержащих частицы одного материала, значения параметров состояния в частице берутся такие же как и в ячейке. Если ячейка смешанная и содержит частицы двух и более материалов, то внутренняя энергия в частицах и их новые плотности определяются исходя из равенства давлений и температур в пределах ячейки, аналогично тому, как это делается для элементарной ячейки гетерогенного материала [9]

$$\sum_{i=1}^N \frac{m_i}{\rho_i^{new}} = \sum_{i=1}^N \frac{m_i}{\rho_i^{old}}, \quad (2)$$

$$\sum_{i=1}^N m_i E_i(\rho_i^{new}, T^{new}) = \sum_{i=1}^N m_i E_i^{old}, \quad (3)$$

$$P_1(\rho_1^{new}, E_1(\rho_1^{new}, T^{new})) = P_2(\rho_2^{new}, E_2(\rho_2^{new}, T^{new})) = \dots \\ \dots = P_N(\rho_N^{new}, E_N(\rho_N^{new}, T^{new})), \quad (4)$$

где  $N$  – число материалов в ячейке; большими буквами обозначаются функции уравнения состояния для соответствующих величин, обозначаемых маленькими буквами;  $m_i$  – масса частицы  $i$ -го вещества в ячейке. Уравнение (2) выражает условие сохранения объема вещества в ячейке, уравнение (3) – условие сохранения внутренней энергии и уравнение (4) – условие равенства давлений внутри ячейки.

Следует отметить, что определяемая из этой системы температура ячейки  $T^{new}$  в рассматриваемой постановке задачи не требуется и вводится лишь для задания физически разумного распределения энергии между различными веществами в пределах ячейки. Такое распределение энергий оказывается удобным и в дальнейшем при введении в постановку задачи переноса энергии теплопроводностью. После решения системы уравнений (2)–(4) внутренняя энергия частиц  $i$ -го вещества смешанной ячейки находится по известным  $T^{new}$  и  $\rho_i^{new}$  из уравнения состояния  $e_i^{new} = E_i(\rho_i^{new}, T^{new})$ .

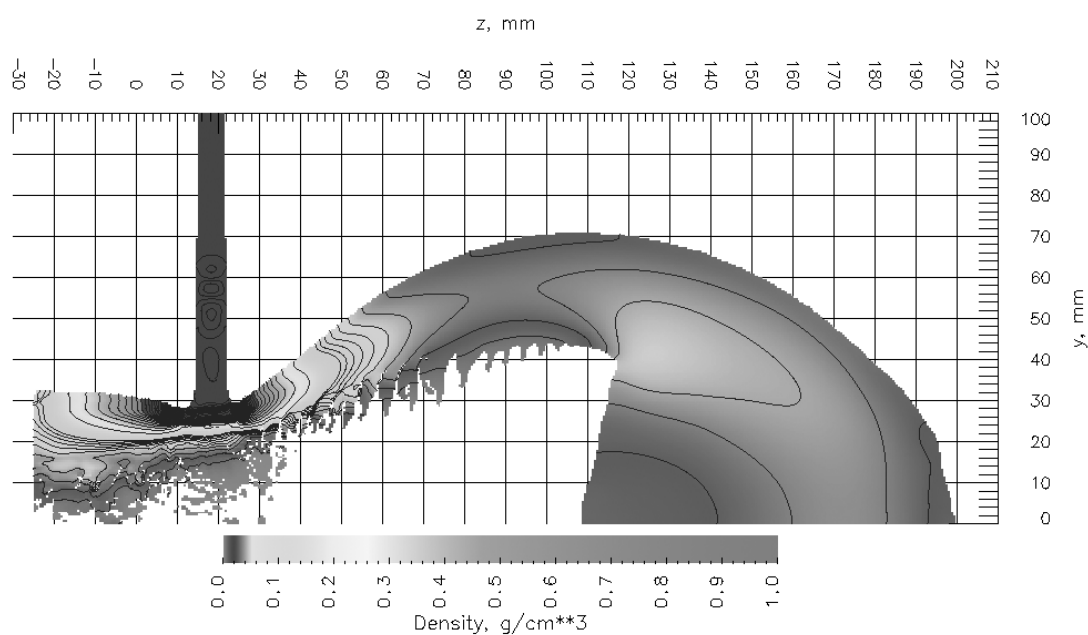
Далее рассчитывается новое положение частиц, которое они заняли в результате перемещения:  $x_N^{n+1} = x_N^n + u_N \Delta t$ ,  $y_N^{n+1} = y_N^n + v_N \Delta t$ ,  $z_N^{n+1} = z_N^n + w_N \Delta t$ . Зная окончательное положение всех частиц, производится распаковка частиц – все основные характеристики среды переносятся с лагранжевой системы частиц на эйлерову сетку ячеек. В целях сохранения однородной упорядоченной структуры частиц – лагранжевой сетки с узлами в центрах частиц – применяется процедура дробления частиц эйлеровой сеткой, с последующим объединением частиц одного и того же материала внутри одной ячейки. Применение этих процедур предотвращает образование пустых ячеек в областях сильного разрежения/расширения и в достаточной мере позволяет сгладить нефизичные осцилляции, связанные с дискретным представлением потоков массы. Кроме того, поскольку число расчетных частиц в каждый момент времени становится пропорциональным количеству занятых ячеек сетки, а не максимальному размеру области за все время счета, как это было в более ранних реализациях метода частиц, удается существенно снизить высокие требования к объему оперативной памяти при реализации алгоритма.

Процедура дробления частиц производится из геометрических соображений: если частица находится более чем в пределах одной ячейки эйлеровой сетки, то она рассекается вдоль координатных плоскостей сетки на соответствующее количество фрагментов, при этом в полученных частицах все физические параметры (плотность, удельная внутренняя энергия, компоненты скорости, маркер тела и уравнения состояния и т.д.) равны параметрам в исходной частице и заново вычисляются только координаты центров новых частиц и линейные размеры. Как можно видеть, объем при этом сохраняется. Объединение частиц

производится попарно с сохранением массы, объема и полной энергии частиц; центр объединенной частицы определяется как центр масс объединяемых частиц, плотность – как отношение суммарной массы к суммарному объему; компоненты скорости определяются из закона сохранения импульса; удельная внутренняя энергия – как разность удельной полной и удельной кинетической энергий. Размеры вновь полученной частицы получаются из суммарного объема, причем отношения длин сторон частиц пропорциональны размерам ячейки эйлеровой сетки.

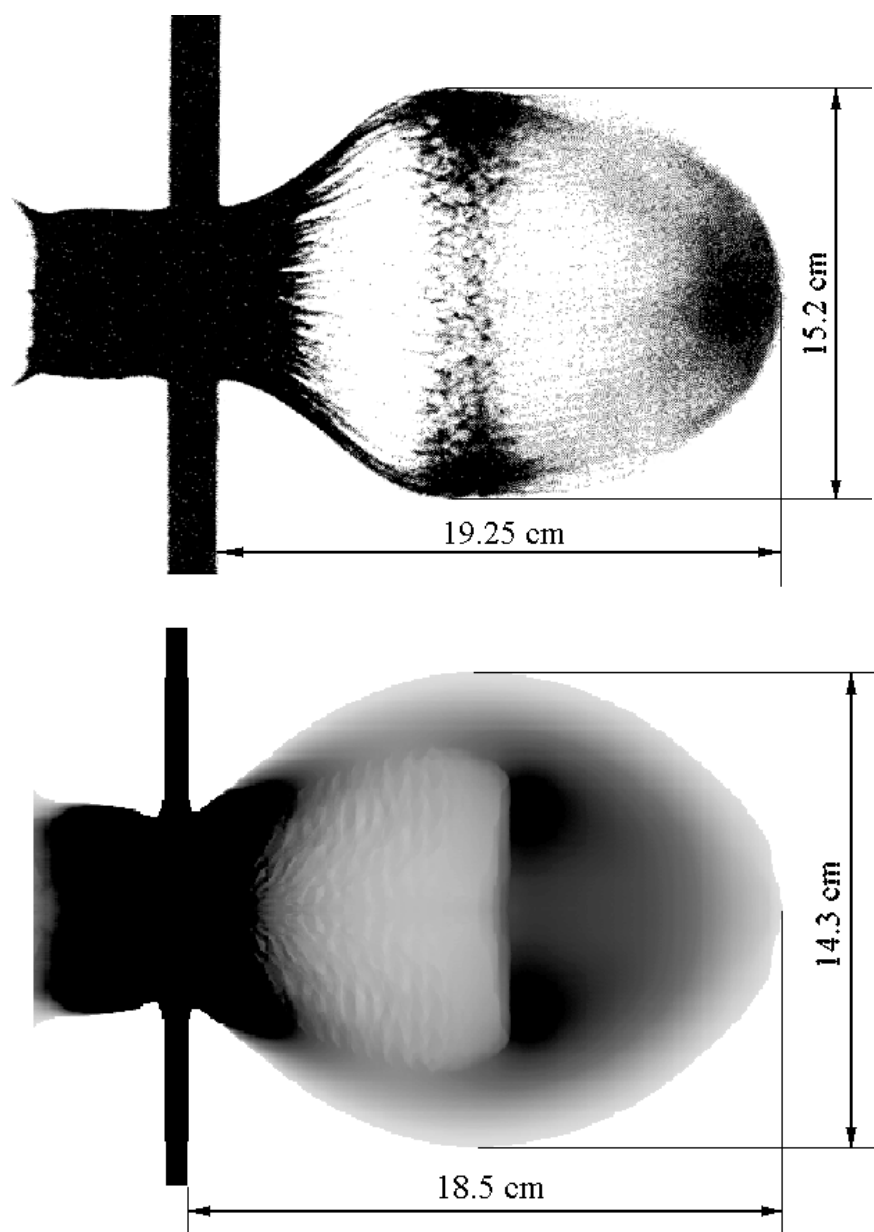
После объединения параметры состояния слившейся частицы совпадают с параметрами в центре ячейки, при этом в частице переносится полная энергия, а внутренняя находится вычитанием из полной ее кинетической части. Если ячейка смешанная, то внутренняя энергия в ячейке находится усреднением по массе частиц, входящих в ячейку. Новые образующиеся после переноса компоненты скоростей в узлах эйлеровой сетки находят массовым усреднением компонент импульсов частиц из ячеек, примыкающих к узлу.

На основе описанного алгоритма разработан трехмерный газодинамический код. Для параллельной реализации метода принята SPMD-модель («*Single Process – Multiple Data*» – один поток команд управления и множество потоков данных) параллельного программирования с использованием крупноблочной декомпозиции данных. Коммуникационные обмены построены на базе интерфейса передачи сообщений MPI («*Message Passing Interface*»). Численное моделирование с помощью этого кода задачи о распаде произвольного разрыва в идеальном газе показало удовлетворительное согласие с аналитическим решением. Фронт ударной волны размывается менее чем на 6 ячеек, положение контактного разрыва воспроизводится практически точно.



**Рис. 1.** Высокоскоростной удар. Распределение плотности на момент времени 30 мкс

В качестве демонстрации возможностей предлагаемого метода рассмотрим практически важную задачу о высокоскоростном ударе, исследования которой связаны, в первую очередь, с разработкой и оценкой эффективности конструктивных средств защиты космических аппаратов от орбитального мусора и микрометеоритов [10]. Ее особенности – большие градиенты, высокие степени и скорости деформаций, наличие внутренних свободных



**Рис. 2.** Экспериментальная рентгенограмма (вверху) и результат численного моделирования (внизу) на момент времени 30 мкс

и контактных границ – выставляют жесткие требования как к самому численному алгоритму, так и к его программной реализации. Моделируется взаимодействие сферического ударника (диаметр 1,5 см, масса 20 г) со свинцовой пластиной (толщина 0,63 см) при нормальной скорости соударения 6,6 км/с. Расчет проводился в трехмерной постановке с пространственным разрешением 2 ячейки на 1 мм вплоть до момента времени 30 мкс. Для описания поведения свинца использовалось полуэмпирическое широкодиапазонное уравнение состояния [11].

Расчетное распределение плотности в сечении вдоль оси симметрии на момент времени 30 мкс показано на рис.1 (различными тонами показаны плотности в диапазоне 0-1 г/см<sup>3</sup>). В эксперименте [12] для аналогичной постановки производилась регистрация

процесса на пленку с использованием обратной подсветки рентгеновским излучением. По полученным таким образом фотографиям можно определить форму и размеры облака разлета и тыльного факела. Кроме того, по интенсивности засветки можно качественно судить о распределении плотности в области течения. Экспериментальная рентгенограмма процесса на момент времени 30 мкс приведена в верхней части рис.2. Для получения аналогичной расчетной картины, было произведено интегрирование трехмерного поля плотности вдоль одной из поперечных направлений удара оси. На полученной таким образом картине процесса «на просвет» более темные участки соответствуют большим значениям интегральной плотности (рис.2). Форма и размеры облака хорошо согласуются с экспериментальными данными. Первоначально материал мишени разлетается в направлении от плоскости мишени, затем происходит равномерный разлет в радиальном направлении с плавным искривлением в носовой части облака. Измерение плотности в облаке разлета показывает, что материал находится в расплавленном состоянии. Выброс с тыльной стороны мишени также происходит вдоль оси удара практически прямолинейно. Расчетный радиус облака составил 14,3 см, положение фронтальной точки облака — 18 см, что демонстрирует удовлетворительное совпадение с экспериментом: 15,2 см и 19,25 см соответственно. Анализ распределения плотности также показал соответствие расчетных и экспериментальных данных.

Таким образом, разработан численный газодинамический код, предназначенный для трехмерного компьютерного моделирования процессов при высоких плотностях энергии. Он позволяет производить расчет нестационарных процессов с высокими уровнями и скоростями деформаций, как это было показано на примере с задачей о высокоскоростном соударении тел. В дальнейшей работе планируется включение в код различных моделей упруго-пластического течения и динамического разрушения среды, а также учет перераспределения энергии теплопроводностью и тепловым излучением.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Ф.Х. Харлоу*. Численный метод частиц в ячейках для задач гидродинамики // Вычислительные методы в гидродинамике. – М.: Мир, 1967, с.316.
2. *О.М. Белоцерковский, Ю.М. Давыдов*. Нестационарный метод «крупных частиц» для газодинамических расчетов // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 1971, т.11, № 1, с.182-207.
3. *R.A. Jentry, R.E. Martin, B.J. Daly*. An Eulerian Differencing Method for Unsteady compressible Flow Problems // J. Comput. Phys., 1966, v.1, № 1, p.87-118.
4. *Р. Морз*. Моделирование многомерной плазмы с помощью метода частиц в ячейках // Вычислительные методы в физике плазмы. – М.: Мир, 1974, с.254.
5. *В.Е. Петренко, Е.В. Ворожцов*. Применение частиц слоев при расчетах по методу частиц в ячейках // Числ. методы механики сплошной среды. 1973, т.4, № 2, с.132-141.
6. *В.Е. Петренко, Г.А. Сапожников*. Об усилении устойчивости метода частиц в ячейках для течений вязкой жидкости // Числ. методы механики сплошной среды. 1976, т.7, № 4, с.130-148.
7. *В.Ф. Дьяченко*. Об новом методе численного решения нестационарных задач газовой динамики // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 1965, т.5, № 4, с.680-688.
8. *В.А. Агурейкин, Б.П. Крюков*. Метод индивидуальных частиц для расчета течений многокомпонентных сред с большими деформациями // Численные методы механики сплошной среды. – Новосибирск: 1986, т.17, № 1, с.17.
9. *А.В. Острик*. Термомеханическое действие рентгеновского излучения на многослойные гетерогенные преграды в воздухе. – М.: НТЦ Информтехника, 2003, с.160.
10. *В.А. Агурейкин, С.И. Анисимов, А.В. Бушман и др.* Теплофизические и газодинамические проблемы противометеоритной защиты космического аппарата «Вега» // Теплофизика высоких температур. 1984, т.22, № 5, с.964-983.
11. *А.В. Бушман, И.В. Ломоносов, В.Е. Фортвов*. Уравнения состояния металлов при высоких плотностях энергии. – Черногловка: 1992.
12. *D.J. Liquornik*. Results by G.W. Pomykal. Digitized data for Delco test 4007, lead-on-lead. Lawrence Livermore Laboratory Report DDV-86-0010, 1986.