

УДК 534.1

DOI 10.18698/0536-1044-2017-2-50-60

Моделирование процесса нагрева металлического бруска с помощью макромолекул

С.В. Аринчев

МГТУ им. Н.Э. Баумана, 105005, Москва, Российская Федерация, 2-я Бауманская ул., д. 5, стр. 1

Simulation of the Metal Bar Heating Process Using the Macromolecule Approach

S.V. ArinchevBMSTU, 105005, Moscow, Russian Federation, 2nd Baumanskaya St., Bldg. 5, Block 1 e-mail: arinchev@inbox.ru

i Много лет назад в рассмотрение введено понятие теплового потока, установлена прямая пропорциональная зависимость между средней кинетической энергией частиц и температурой в точке. Это позволило перейти от крайне громоздких дискретных моделей к сравнительно простым задачам анализа сплошной среды. В настоящее время в связи с совершенствованием компьютерной техники началось бурное развитие метода частиц. Однако развитию этого направления препятствует использование в расчетах гипотезы «непрерывности». Очевидно, настало время вернуться назад, и в качестве степени нагретости частицы снова использовать не температуру, а ее кинетическую энергию. В настоящей работе показано, что задачу теплопроводности твердого тела можно рассматривать как задачу о вынужденных колебаниях системы макромолекул, расположенных в узлах расчетной решетки. Макромолекулярный подход представляет собой вариант метода частиц, преимуществом которого является сравнительно небольшое потребное число элементов. Рассмотрена задача теплопроводности алюминиевого бруска. Выполнено сравнение результатов решения этой задачи, полученных с помощью макромолекул в программном пакете MSC.Adams и методом конечных элементов в пакете MSC.Nastran.Thermal. Показано, что силовую характеристику макромолекулы можно подобрать так, что результаты обоих решений будут достаточно близки.

Ключевые слова: твердое тело, степень нагретости макромолекулы, кинетическая энергия макромолекулы.

i The concept of heat flow and the direct proportional relation between the average kinetic energy of particles and the point temperature were established a long time ago. This made it possible to move from bulky discrete models to fairly simple analysis of continuous medium. Now we see rapid development of the particle approach facilitated by effective computer technologies. However, the development process is hampered by the use of the continuity hypothesis in the calculations. It is evident that it is time to go back and take the kinetic energy of the particle, rather than the temperature, as its hotness degree. It is shown that the solid body heat conduction problem can be solved as a problem of forced vibration of the system of macromolecules arranged in the nodes of the design lattice. The macromolecular approach is essentially a particle method. The advantage of this approach lies in the relatively small required number of elements. The heat conduction problem for an aluminum bar is considered. The macromolecule solution obtained using the MSC.Adams software is compared with the reference finite-element solution using the MSC.Nastran.Thermal

software. It is shown that the force characteristic of the macromolecule can be selected so that the results obtained through both methods are sufficiently close.

Keywords: solid body, macromolecule hotness, macromolecule kinetic energy.

Макромолекулы — это материальные точки. Взаимодействие макромолекул определяется их силовой характеристикой. Право на существование макромолекулярных моделей твердого тела, состоящего из различных материалов (стали, фторопласта, алюминиевых сплавов), подтверждено лабораторным путем для интенсивного растяжения, сжатия и кручения [1, 2]. Количество макромолекул требующееся для решения указанных задач, оказалось сравнительно небольшим (сотни), и необходимости использовать суперкомпьютер не возникло. Возможность применения макромолекулярного подхода на наноуровне рассмотрена в работах [3, 4].

Метод частиц противоречив. С одной стороны, частицы дискретны, с другой — для описания модели используются гипотеза непрерывности и дифференциальные соотношения. Так, в работе [5] при рассмотрении процесса механической обработки заготовки методом частиц применено понятие напряжения в точке, а в научных трудах [6, 7] при описании процесса нагрева системы дискретных частиц — понятие температуры в точке. Сделана попытка применить уравнение теплопроводности второго порядка в частных производных. В работе [8] разработаны теоретические основы использования гипотезы непрерывности в методе частиц. В данной статье рассмотрен другой подход.

Цель работы — показать, что задачу теплопроводности твердого тела можно решать как стандартную задачу о вынужденных колебаниях системы материальных точек (макромолекул), расположенных в узлах расчетной решетки, для чего вместо понятия температуры в точке следует использовать понятие степени нагретости макромолекулы.

Предлагается степень нагретости макромолекулярной системы оценивать не температурой, а кинетической энергией отдельных макромолекул. В соответствии с известным законом

$$\bar{E} = \frac{3}{2}kT$$

будем считать, что между средней кинетической энергией макромолекулы \bar{E} и температурой T существует прямо пропорциональная зависимость. Чтобы исключить размерность

константы Больцмана k , введем в рассмотрение следующие относительные величины:

$$\frac{T_j}{T_{\max}} = \frac{\bar{E}_j}{\bar{E}_{\max}} \approx \frac{H_j}{H_{\max}}, \quad (1)$$

где T_j и \bar{E}_j — температура и средняя кинетическая энергия j -й макромолекулы, $j = 1, \dots, n$; H_j — степень нагретости j -й макромолекулы.

Степень нагретости макромолекулы получим путем осреднения ее кинетической энергии в течение времени интегрирования t :

$$H_j = \frac{\int_0^t E_j(\tau) d\tau}{t}. \quad (2)$$

Исследуемый изотропный алюминиевый брусок представляет собой параллелепипед размерами $0,01 \times 0,01 \times 0,03$ м (рис. 1). Рассмотрим задачу его теплопроводности в предположении, что температуры трех вершин параллелепипеда заданы: две вершины на нижней грани имеют температуру 0 К (заморожены), а вершина на передней верхней кромке — 500 К (максимальная температура тела). Во всех других точках наружной поверхности бруска теплообмен с окружающей средой отсутствует. На рис. 1 приведено точное решение рассматриваемой стационарной задачи теплопроводности, полученное методом конечных элементов в программном пакете MSC.Nastran.Thermal.

Отметим две важные особенности точного конечно-элементного решения:

- *равномерность полученного поля температуры.* На рис. 1 видно изменение цвета раскраски температурного поля, но это не скачок температуры, а ее переход через уровень 167 К в масштабной цветовой шкале. За исключением окрестностей трех вышеуказанных точек, температура бруска варьирует в пределах 10 К. Поэтому температурное поле точного конечно-элементного решения и распределение степени нагретости макромолекул сравнивались вдоль передней верхней кромки, имеющей вершину с максимальной температурой, и вдоль нижней задней кромки, содержащей «замороженную» вершину. Примерное отношение температуры объема к максимальной температуре составляет 1/3. Расчеты показывают, что это значение не

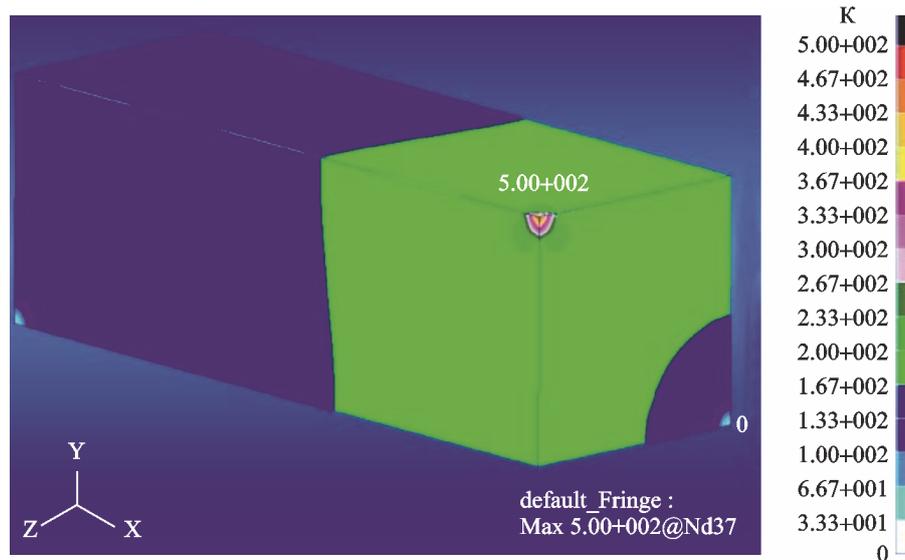


Рис. 1. Точное решение задачи теплопроводности алюминиевого бруска, полученное методом конечных элементов в пакете MSC.Nastran.Thermal

зависит от максимальной температуры системы и является характеристическим;

- *независимость полученного температурного поля от тепловых свойств материала (теплоемкости, плотности, теплопроводности).* Суть этого явления заключается в следующем. Рассматриваемая задача теплопроводности является стационарной, материал — изотропным, внутренние источники тепла отсутствуют, поэтому соответствующее уравнение теплопроводности [6] — это однородное уравнение Лапласа, в котором коэффициент температуропроводности сокращается. Аналогично данное температурное поле не зависит от механических свойств (например, модуля упругости) материала. Таким образом, при расчете указанные свойства материала можно выбирать произвольно с учетом особенностей вычислительной процедуры.

Макромолекулярная модель бруска, содержащая $3 \times 3 \times 7 = 63$ макромолекулы, разработан-

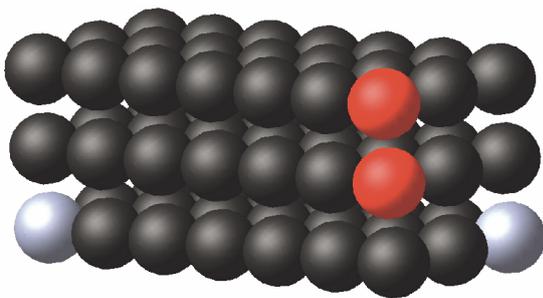


Рис. 2. Макромолекулярная модель бруска, содержащая 63 ($3 \times 3 \times 7$) макромолекулы

ная в программном пакете MSC.Adams, приведена на рис. 2. Макромолекулы расположены в узлах расчетной решетки. Их взаимодействие определяется так называемой силовой характеристикой макромолекулы, которая будет рассмотрена ниже. Если макромолекула нагрета, то она совершает колебания в окрестности положения статического равновесия. «Замороженные» макромолекулы, показанные на рис. 2 голубым цветом, неподвижны. Тепловая нагрузка приложена путем кинематического возбуждения двух красных макромолекул, которые движутся относительно друг друга с заданной интенсивностью. Такое возбуждение не обязательно должно быть шумовым. Расчеты показывают, что оно может быть моногармоническим. В результате приложения тепловой нагрузки в теле возникает трехмерный переходный процесс (нестационарная теплопроводность), который сходится к некоторому стационарному распределению степени нагретости по объему. Далее распределение степени нагретости по макромолекулярной модели сравним с распределением температуры по точной конечно-элементной модели.

Представляется целесообразным оценить сходимость полученного решения по числу макромолекул модели. Соотношение длин кромок бруска равно 1:1:3, поэтому при анализе сходимости рассмотрены три варианта: $2 \times 2 \times 4 = 16$ макромолекул (рис. 3); $3 \times 3 \times 7 = 63$ макромолекулы (см. рис. 2); $4 \times 4 \times 10 = 160$ макромолекул (рис. 4).

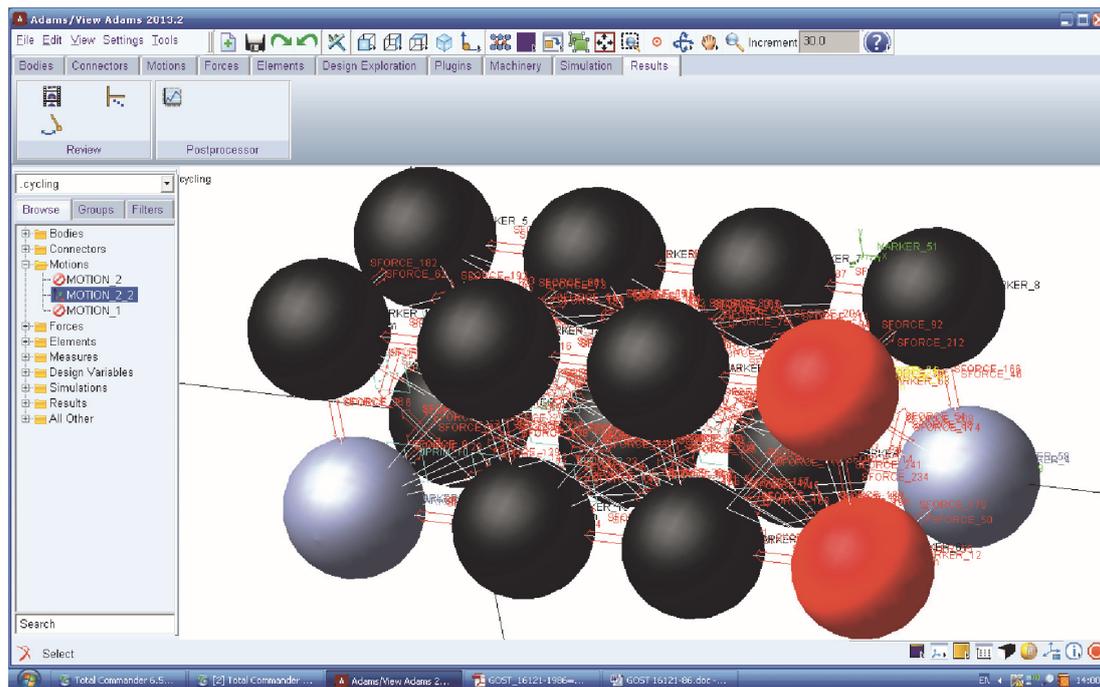


Рис. 3. Макромолекулярная модель, содержащая 16 (2×2×4) макромолекул, представленная в интерфейсе пакета MSC.Adams

Главная особенность точного конечно-элементного решения — равномерность распределения температуры. Ее причина объяснима, если частицы сталкиваются друг с другом и обмениваются импульсами. Однако макромолекулы не сталкиваются, они лишь совершают колебания в окрестности узлов расчетной решетки. Для объяснения этой особенности рассмотрим формы собственных колебаний простейшей консольной балки.

Из рис. 5, на котором приведены формы № 2 и 100 колебаний консольной балки, видно, что чем выше номер формы колебаний, тем более равномерно она распределена. Следовательно, в отклике на тепловое воздействие должны присутствовать только верхние гармоники. Нижние гармоники (изгибные, крутильные, растяжения–сжатия) должны отсутствовать. На рис. 6 показана нижняя изгибная гармоника, а на рис. 4 — верхняя тепловая гармоника.

Верхние тепловые гармоники имеют частоты, равные десяткам тысяч герц, что затрудняет численное интегрирование рассматриваемого переходного процесса. Однако благодаря второй вышеуказанной особенности решения задачи — независимости температурного поля от параметров материала — можно значительно уменьшить коэффициент жесткости A силовой характеристики макромолекулы, изменить ча-

стотные характеристики отклика и создать комфортные условия для численного интегрирования. Отметим, что такое допущение имеет недостаток: оно затрудняет решение связанной задачи термоупругости тела, когда вместе с распределением температур твердого тела определяется его напряженно-деформированное состояние. В статье принято, что верхний частотный порог равен 50 Гц.

Межмолекулярное взаимодействие модели, содержащей 16 (2×2×4) макромолекул, построенной в пакете MSC.Adams, приведено на рис. 3. Макромолекулы взаимодействуют по принципу «каждая с каждой». Общее количество взаимодействий значительно, поэтому для

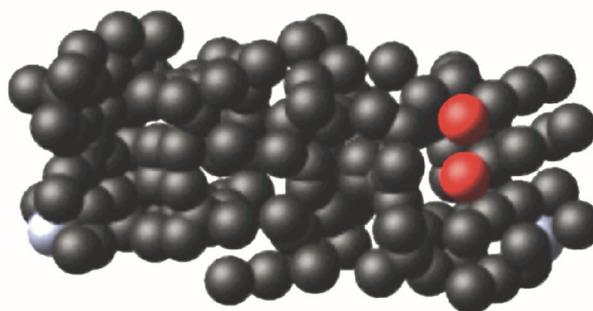
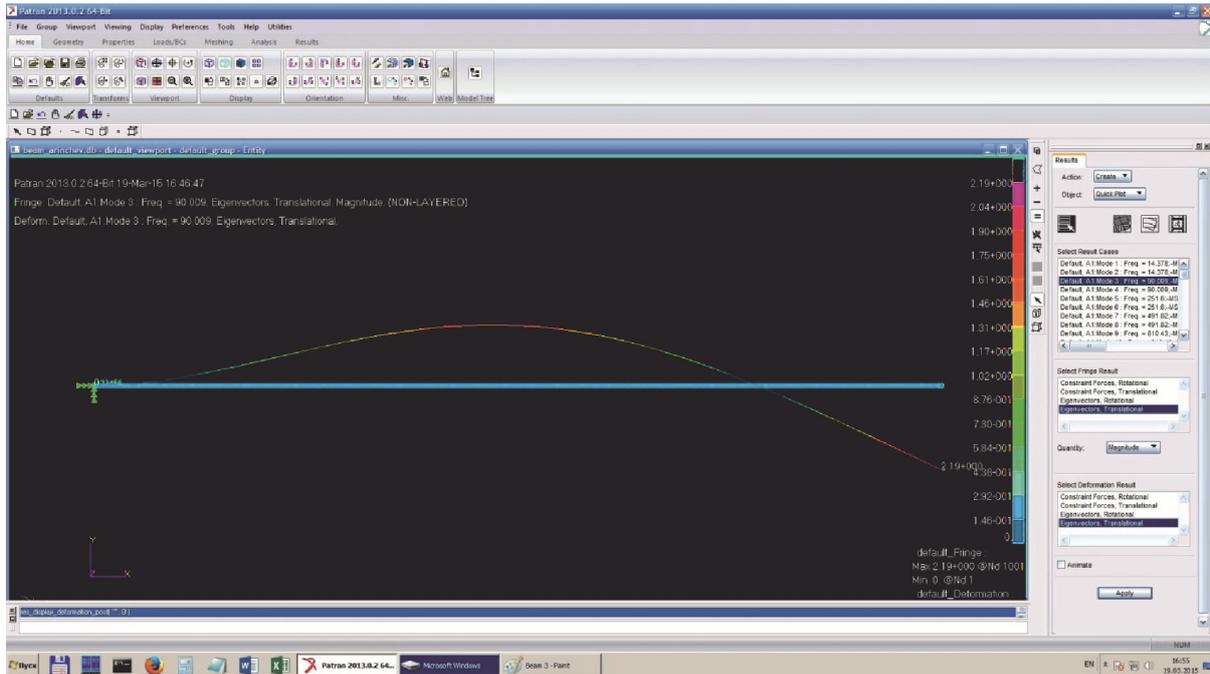
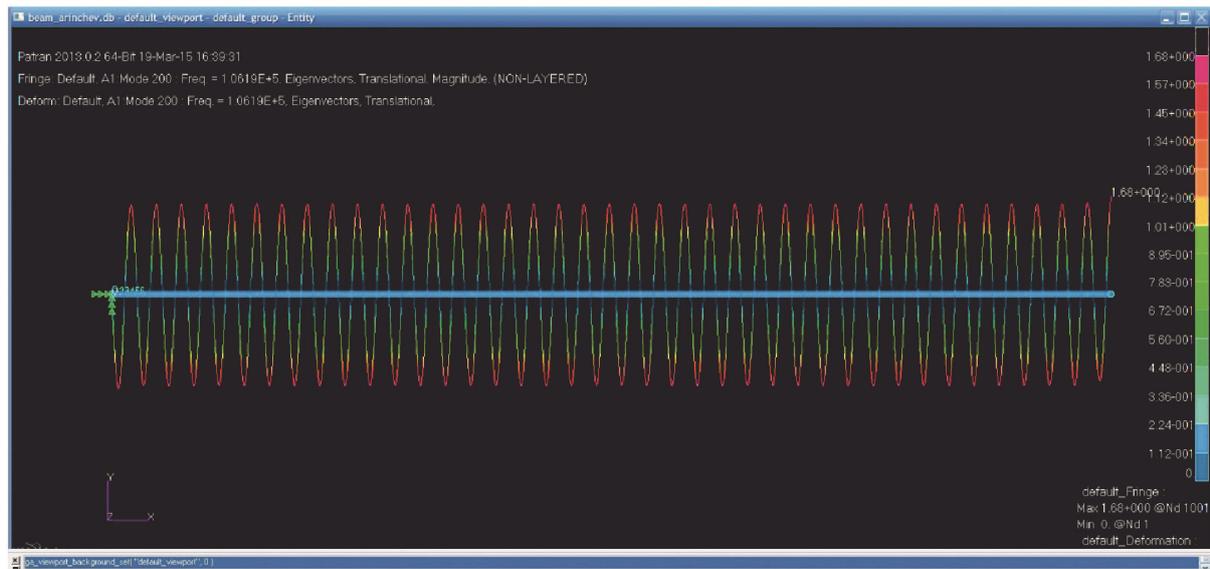


Рис. 4. Тепловая форма высокочастотных колебаний модели, содержащей 160 (4×4×10) макромолекул (вид спереди)



а



б

Рис. 5. Формы № 2 (а) и 100 (б) колебаний консольной балки

построения модели необходимо использовать специальную встроенную программу VCL пакета MSC.Adams.

Взаимодействие макромолекулы определяется ее силовой характеристикой. Макромолекулы расположены в узлах расчетной решетки. Материал изотропный, поэтому трехмерная силовая характеристика имеет центральную симметрию. Каждое положение статического равновесия. Таких положений

много. Стандартный силовой потенциал метода частиц (потенциал Леннарда–Джонса) [5] определяет только одно положение статического равновесия и в рассматриваемой задаче он неприменим.

В работах [1, 2] предложено использовать многокорневую силовую характеристику, для которой кривая типа Леннарда–Джонса является только огибающей. Потребное число корней силовой характеристики определяется числом

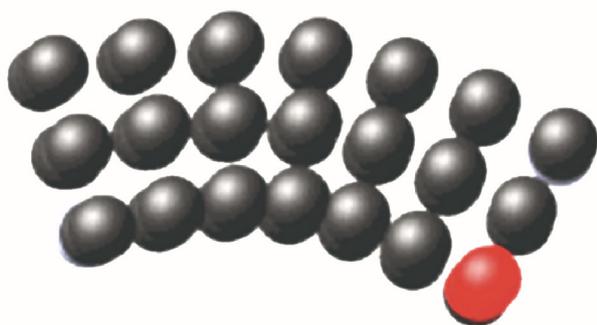


Рис. 6. Изгибная форма низкочастотных колебаний модели, содержащей 63 (3×3×7) макромолекулы (вид сверху)

так называемых представительных соседей. Пусть красный шар на рис. 7 — рассматриваемая макромолекула, четыре желтых шара — ее представительные соседи. Сила взаимодействия между ними обнуляется, если расстояние между ними превышает $2a$, где a — шаг решетки. Такое взаимодействие является простейшим и называется «коротким».

В этом случае все соседние макромолекулы, взаимодействующие с данной макромолекулой, можно разбить на четыре группы. В пределах каждой группы расстояние от макромолекулы до соседа неизменно, поэтому вся группа соседних макромолекул может быть представлена только одной из них, которая и называется представительной. На рис. 7 показано, что для

«короткого» взаимодействия число представительных макромолекул составило четыре, поэтому силовая характеристика должна иметь по крайней мере четыре корня.

Кроме того, существующие положения статического равновесия должны быть устойчивыми, т. е. производные кривой силовой характеристики должны быть положительными в точке равновесия. Для получения положительных производных кривой в двух соседних корнях необходимо иметь еще один корень между ними. Поэтому для рассмотрения «короткого» взаимодействия макромолекул следует использовать семикорневую силовую характеристику [1, 2]

$$F_{jk}(r_{jk}, \dot{r}_{jk}) = A(r_{jk} - a_1)^p \left[\prod_{i=1}^7 (r_{jk} - a_i) \right] \times \text{step}(r_{jk}, 2sa, 1, 0, 2a, 0, 0) + \delta \dot{r}_{jk}, \quad (3)$$

где F_{jk} и r_{jk} — сила взаимодействия и расстояние между j -й и k -й макромолекулами; \dot{r}_{jk} — радиальная составляющая относительной скорости j -й и k -й макромолекул; A — коэффициент жесткости силовой характеристики; a_i — корень i -й силовой характеристики, $i = 1, \dots, 7$; p — показатель экспоненты огибающей силовой характеристики (нарастающая компонента огибающей); $\text{step}(\cdot)$ — стандартная функция (кубичная парабола) встроенного языка пакета MSC.Adams (убывающая компонента огибающей); s — коэффициент убывающей компонен-

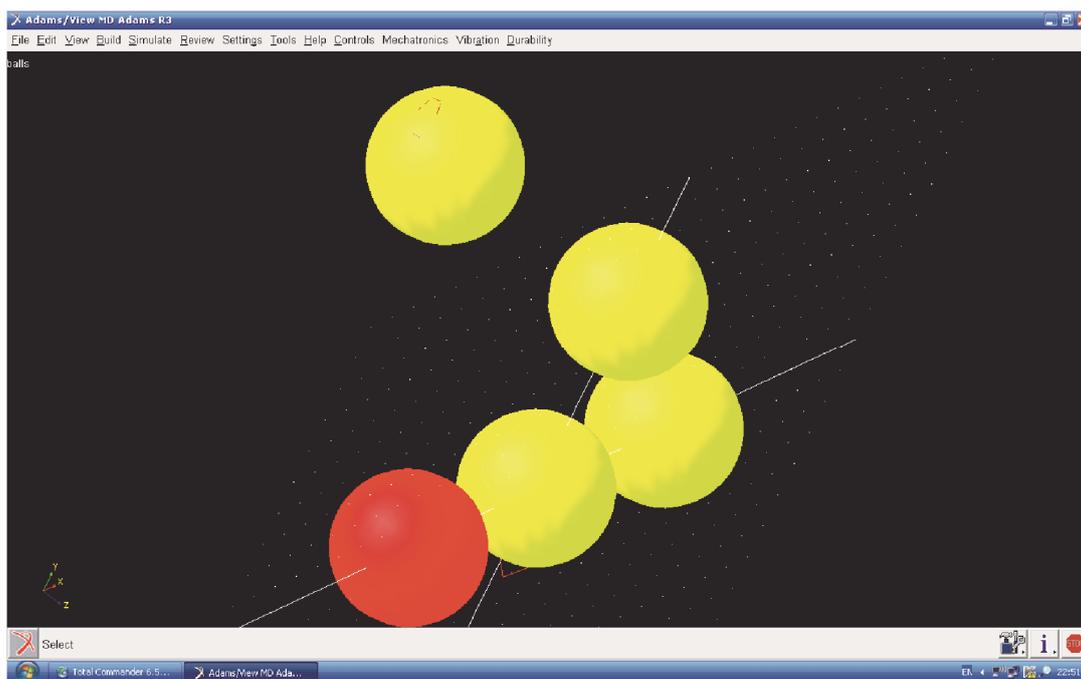


Рис. 7. Макромолекула и ее четыре желтых представительных соседа

ты огибающей; a — шаг расчетной решетки; δ — коэффициент демпфирования. Рекомендации по выбору значений коэффициентов силовой характеристики (3) приведены в работе [1].

Формула (3) имеет две составляющие — позиционную с коэффициентом жесткости A и скоростную с коэффициентом демпфирования δ . Как показано выше, коэффициент A может быть значительно уменьшен для обеспечения верхнего частотного порога переходного процесса и создания комфортных условий его численного интегрирования. Коэффициент демпфирования δ также способствует устойчивости численного интегрирования и оказывает влияние на решение поставленной задачи теплопроводности.

Уравнения термодинамики рассматриваемой макромолекулярной модели, в отличие от традиционных представлений [9], являются уравнениями динамики системы точечных масс m_j :

$$-m_j \ddot{\mathbf{x}}_j - \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq j}}^n \mathbf{F}_{jk} = 0, \quad j = 1, \dots, n.$$

Эти уравнения содержат силы инерции и силы взаимодействия между макромолекулами,

определенные семикорневой силовой характеристикой (3). Макромолекулы движутся поступательно, вращение запрещено. Особенности учета эллиптичности частицы и ее вращения рассмотрены в работах [10, 11]. В начальный момент времени при $\tau = 0$ модель неподвижна (заморожена). Две макромолекулы в нижней грани модели (см. рис. 2, 4) остаются неподвижными в течение всего времени интегрирования в соответствии с наложенными условиями «замораживания»

$$\mathbf{r}_i = \mathbf{r}_{i0}; \quad \mathbf{r}_l = \mathbf{r}_{l0},$$

согласно которым векторы \mathbf{r}_i и \mathbf{r}_l сохраняют соответствующие исходные значения \mathbf{r}_{i0} и \mathbf{r}_{l0} .

Две красные макромолекулы (см. рис. 2) движутся относительно друг друга в вертикальном направлении в соответствии с наложенными условиями нагрева:

$$(\mathbf{r}_m - \mathbf{r}_q) \mathbf{e}_2 = a + D \sin(2\pi f \tau), \quad (4)$$

где \mathbf{r}_m и \mathbf{r}_q — радиус-вектор m -й и q -й макромолекулы; \mathbf{e}_2 — единичный вектор координатной оси Y ; D — интенсивность нагрева ($D \leq 0,1a$); f — частота моногармонического нагрева (выбирается в окрестности 50 Гц).

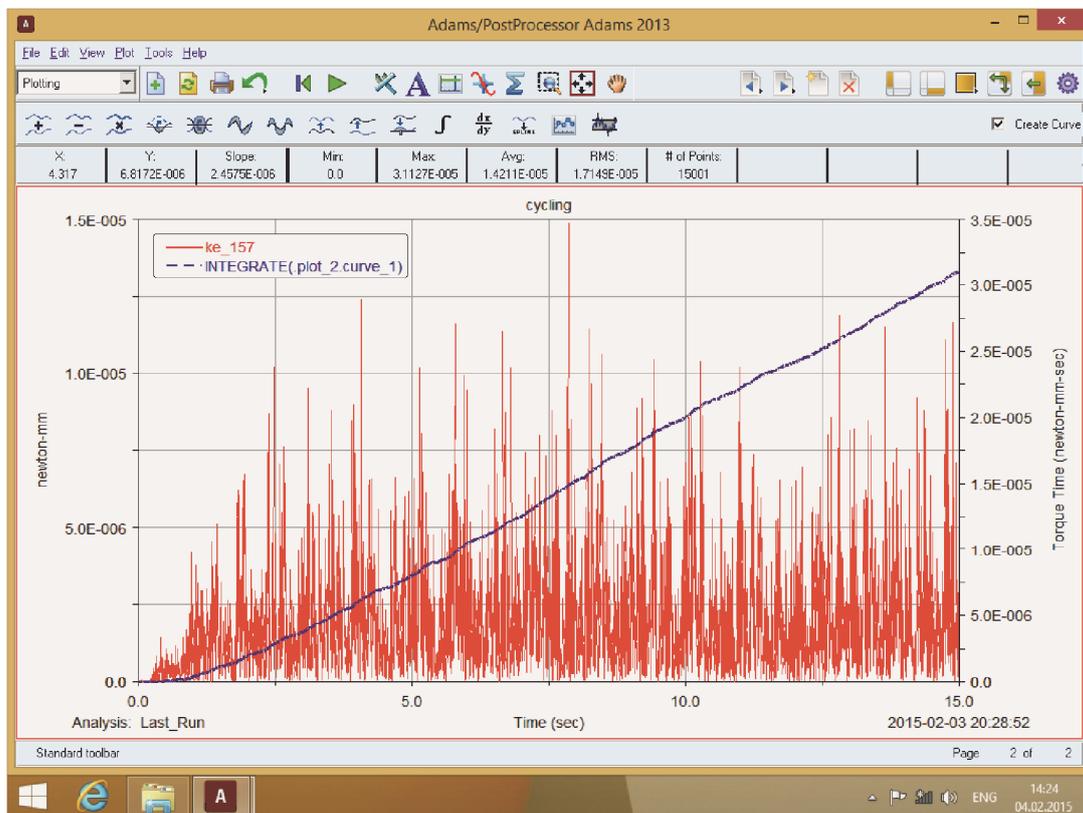


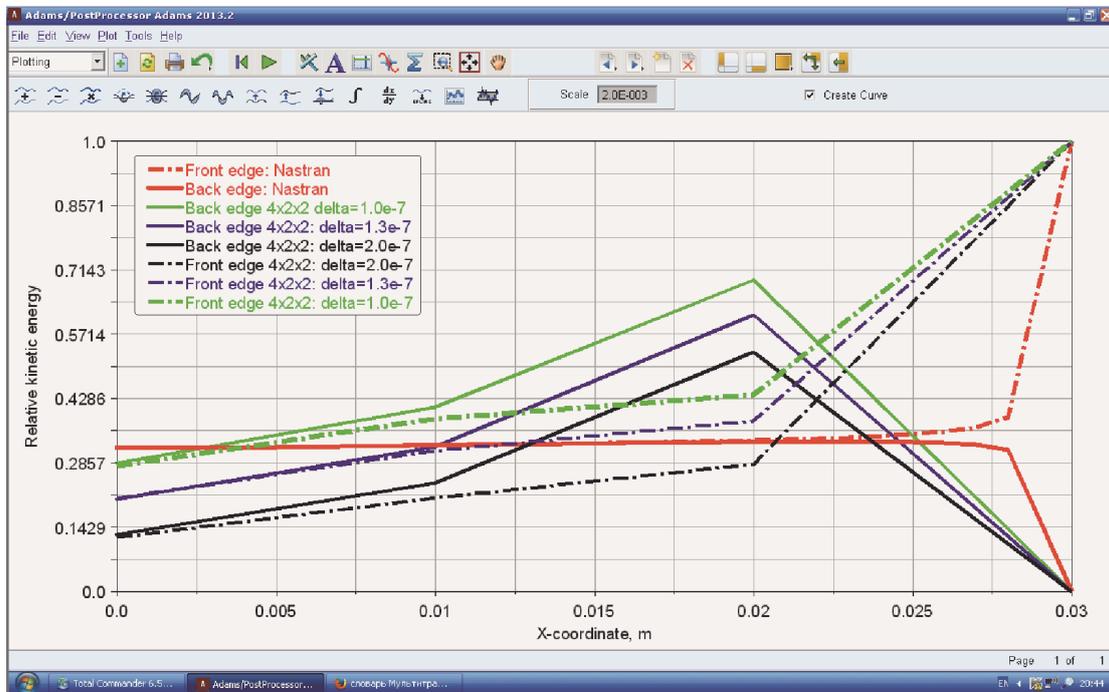
Рис. 8. Вычисление степени нагретости макромолекулы № 157

Таким образом, задача теплопроводности тела сведена к задаче о вынужденных колебаниях его макромолекулярной модели с учетом переходного процесса. В такой постановке понятие температуры заменено понятием степени нагретости макромолекулы.

Процедура вычисления степени нагретости макромолекулы в соответствии с формулой (2) приведена на рис. 8. Красная кривая соответствует зависимости кинетической энергии (Н·м) макромолекулы № 157 от времени τ (с). Тепловое нагружение модели является моногармоническим (формула (4)), а отклик — полигармоническим вследствие высокой плотности частотного спектра. Время интегрирования $t = 15$ с. Оно достаточно велико для завершения переходного процесса и получения стационарного решения. Монотонная синяя кривая на рис. 8 — текущее значение интеграла в числителе дроби формулы (2) — близка к прямой линии, что указывает на стационарность полученного решения.

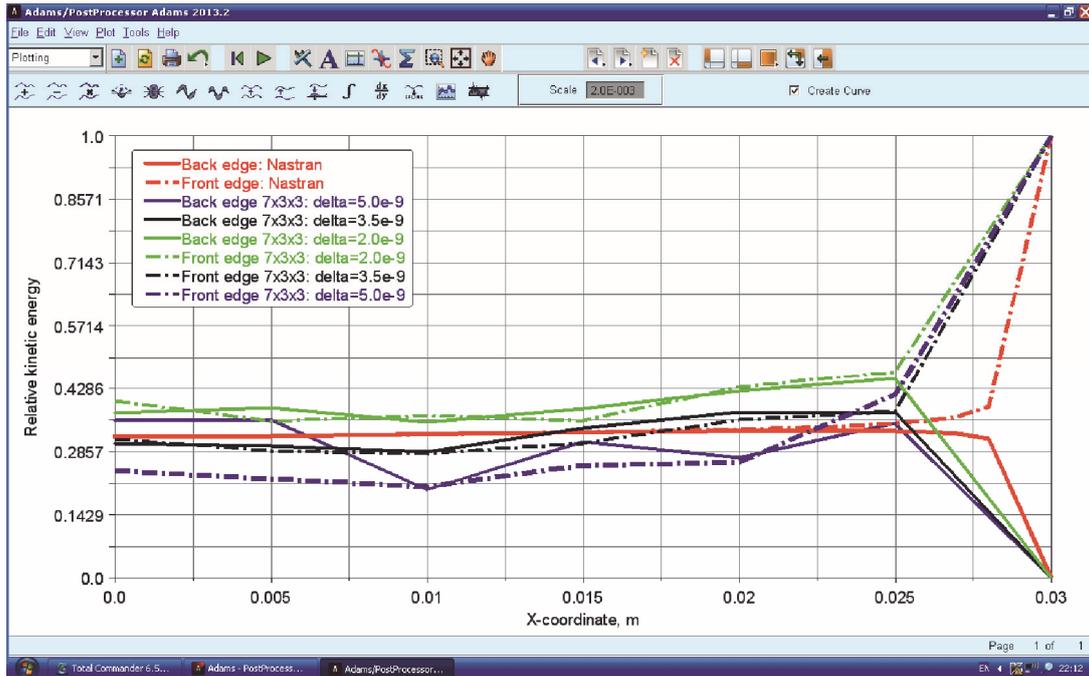
На рис. 9 приведены результаты расчета, характеризующие распределение степени нагретости макромолекул по объему рассматриваемого алюминиевого бруска. Полученное распределение близко к равномерному, поэтому

результатирующие кривые построены только для передней верхней кромки бруска, содержащей нагреваемую макромолекулу (штрих-пунктирные линии), и для его нижней задней кромки, содержащей замороженную макромолекулу (сплошные линии). Для определения сходимости решения по числу макромолекул рассмотрены три варианта модели, содержащей 16 (рис. 9, а), 63 (рис. 9, б) и 160 (рис. 9, в) макромолекул. Коэффициент демпфирования δ изменяется в 2 раза в окрестности полученного решения. Красные гладкие линии соответствуют точному конечно-элементному решению, полученному в пакете MSC.Nastran.Thermal и характеризующему изменение относительной температуры (формула (2)) вдоль указанных кромок (см. рис. 1). Ломаные — макромолекулярная аппроксимация с использованием относительной степени нагретости (формула (2)). На рис. 9, а каждая из ломаных имеет четыре узла по числу макромолекул на кромке модели. Зеленые линии соответствуют коэффициенту демпфирования $\delta = 1,0 \cdot 10^{-7}$, синие — $\delta = 1,3 \cdot 10^{-7}$, черные — $\delta = 2,0 \cdot 10^{-7}$. На рис. 9, б ломаные имеют по семь узлов, зеленые линии соответствуют $\delta = 2,0 \cdot 10^{-9}$, черные — $\delta = 3,5 \cdot 10^{-9}$, синие — $\delta = 5,0 \cdot 10^{-9}$. На рис. 9, в ломаные имеют

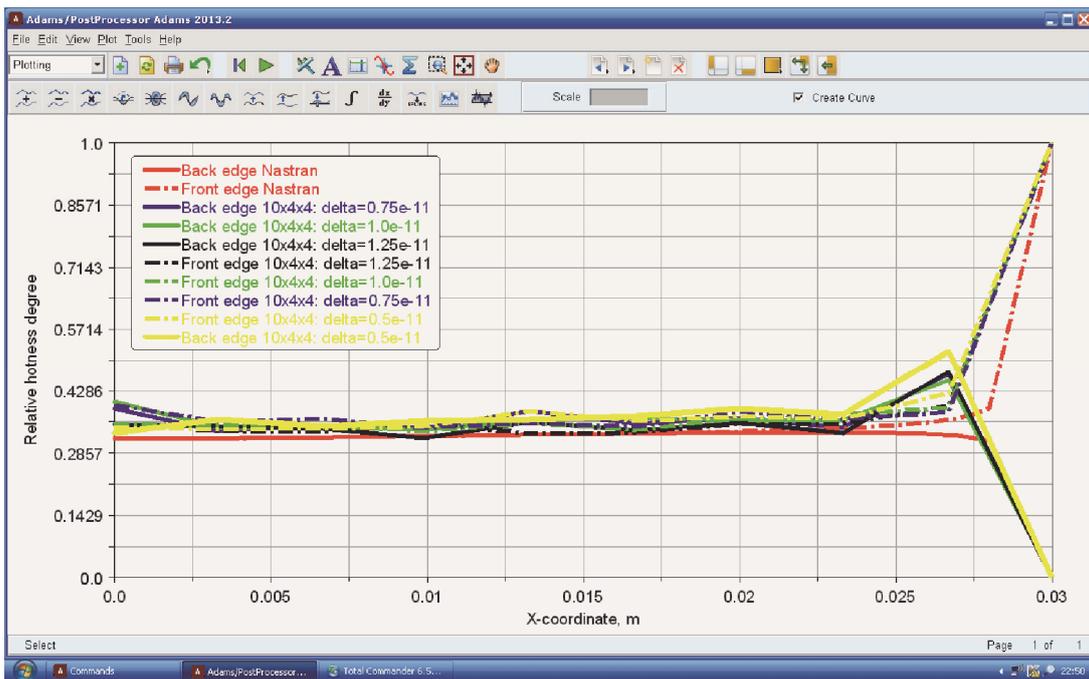


a

Рис. 9 (начало). Распределение относительной степени нагретости вдоль двух кромок, имеющих по четыре (а), по семь (б) и по десять (в) макромолекул



6



6

Рис. 9 (окончание). Распределение относительной степени нагретости вдоль двух кромок, имеющих по четыре (а), по семь (б) и по десять (в) макромолекул

по десять узлов, желтые линии соответствуют $\delta = 0,50 \cdot 10^{-11}$, синие — $\delta = 0,75 \cdot 10^{-11}$, зеленые — $\delta = 1,00 \cdot 10^{-11}$, а черные — $\delta = 1,25 \cdot 10^{-11}$. Из рис. 9 видно, что точное конечно-элементное решение и его макромолекулярная аппрокси-

мация достаточно близки. Чем выше число макромолекул модели, тем более гладкой становится ломаная и тем меньше влияние коэффициента демпфирования.

Выводы

1. Задача теплопроводности твердого тела может быть сведена к задаче о вынужденных колебаниях его макромолекулярной модели. При этом понятие температуры заменяется понятием степени нагретости макромолекулы.

2. Предложенный подход имеет недостаток. Он требует доработки для решения связанной задачи термоупругости, т. е. совместного анализа степени нагретости тела и его напряженно-деформированного состояния.

Литература

- [1] Arinchev S.V. Simulation of high-ratio compression of a parallelepipedal duralumin bar using the particle-based method and MSC.Adams software. *Proceedings of the III International Conference on Particle-Based Methods. Fundamentals and Applications*. Stuttgart, Germany, 18–20 September 2013, University of Stuttgart, Barcelona, Spain, International Center for Numerical Methods in Engineering (CIMNE), 2013, pp. 670–680.
- [2] Arinchev S.V. Back from the solid temperature to kinetic energy of its macromolecules. *Proceedings of the IV International Conference on Particle-Based Methods. Fundamentals and Applications*. Barcelona, Spain, 28–30 September 2015, Polytechnic University of Catalonia, Barcelona, CIMNE, 2015, pp. 909–920. URL: http://congress.cimne.com/particles2015/frontal/doc/E-book_PARTICLES_2015.pdf (дата обращения 29 сентября 2016).
- [3] Kammara K.K., Kumar R., Donbosco F.S. Reconsideration of metal surface sputtering due to bombardment of high-energy argon ion particles: a molecular dynamics study. *Computational Particle Mechanics*, 2016, no. 3, pp. 3–13, doi: 10.1007/s40571-015-0070-7.
- [4] Dmitriev A.I., Nikonov A.Yu. Molecular-dynamics modeling of boundary migration in bicrystals under nano-burnishing. *Proceedings of the IV International Conference on Particle-Based Methods. Fundamentals and Applications*, Barcelona, Spain, 28–30 September 2015, Polytechnic University of Catalonia, Barcelona, CIMNE, 2015, pp. 248–254. URL: http://congress.cimne.com/particles2015/frontal/doc/E-book_PARTICLES_2015.pdf (дата обращения 29 сентября 2016).
- [5] Spreng F., Mueller A., Eberhard P. The introduction of a bi-adaptive smoothed particle hydrodynamics formulation beneficial for machining process simulation. *Proceedings of the III International Conference on Particle-based methods. Fundamentals and Applications*. Stuttgart, Germany, 18–20 September 2013, University of Stuttgart, 2013, Barcelona, Spain, CIMNE, 2013, pp. 602–613.
- [6] Patrick H. Peacock, David W. Holmes Development and verification of a particle number density variant of SPH to robustly incorporate energy and heat transfer. *Proceedings of the III International Conference on Particle-Based Methods. Fundamentals and Applications*. Stuttgart, Germany, 18–20 September 2013, University of Stuttgart, Barcelona, Spain, CIMNE, 2013, pp. 949–960.
- [7] Radl S., Forgberg T., Aigner A., Kloss C. ParScale – An Open-Source Library for the Simulation of Intra-Particle Heat and Mass Transport Processes in Coupled Simulations. *CIMNE, Proceedings of the IV International Conference on Particle-Based Methods. Fundamentals and Applications*. Barcelona, Spain, 28–30 September 2015, Polytechnic University of Catalonia, E-book_PARTICLES_2015, pp. 117–127. URL: http://congress.cimne.com/particles2015/frontal/doc/E-book_PARTICLES_2015.pdf (дата обращения 29 сентября 2016).
- [8] Tunuguntla D.R., Thornton A.R., Weinhart T. From discrete elements to continuum fields: Extension to bidisperse systems. *Computational Particle Mechanics*, 2016, no. 3, pp. 349–365, doi: 10.1007/s40571-015-0087-y.
- [9] Новиков И.И. *Термодинамика*. Москва, Машиностроение, 1984. 592 с.
- [10] Campello E.M.B. A description of rotations for DEM models of particle systems. *Computational Particle Mechanics*, 2015, no. 2, pp. 109–125, doi: 10.1007/s40571-015-0041-z.
- [11] Rubio-Largo S.M., Lind P.G., Maza D., Hidalgo R.C. Granular gas of ellipsoids: analytical collision detection implemented on GPUs. *Computational Particle Mechanics*, 2015, no. 2, pp. 127–138, doi: 10.1007/s40571-015-0042-y.

References

- [1] Arinchev S.V. Simulation of high-ratio compression of a parallelepipedal duralumin bar using the particle-based method and MSC.Adams software. *Proceedings of the 3 International Conference on Particle-Based Methods. Fundamentals and Applications*. Stuttgart, Germany, 18–20 September 2013, University of Stuttgart, Barcelona, Spain, International Center for Numerical Methods in Engineering (CIMNE), 2013, pp. 670–680.
- [2] Arinchev S.V. Back from the solid temperature to kinetic energy of its macromolecules. *Proceedings of the 4 International Conference on Particle-Based Methods. Fundamentals and Applications*. Barcelona, Spain, 28–30 September 2015, Polytechnic University of Catalonia, Barcelona, CIMNE, 2015, pp. 909–920. Available at: http://congress.cimne.com/particles2015/frontal/doc/E-book_PARTICLES_2015.pdf (accessed 29 September 2016).
- [3] Kammara K.K., Kumar R., Donbosco F.S. Reconsideration of metal surface sputtering due to bombardment of high-energy argon ion particles: a molecular dynamics study. *Computational Particle Mechanics*, 2016, no. 3, pp. 3–13, doi: 10.1007/s40571-015-0070-7.
- [4] Dmitriev A.I., Nikonov A.Yu. Molecular-dynamics modeling of boundary migration in bi-crystals under nano-burnishing. *Proceedings of the 4 International Conference on Particle-Based Methods. Fundamentals and Applications*, Barcelona, Spain, 28–30 September 2015, Polytechnic University of Catalonia, Barcelona, CIMNE, 2015, pp. 248–254. Available at: http://congress.cimne.com/particles2015/frontal/doc/E-book_PARTICLES_2015.pdf (accessed 29 September 2016).
- [5] Spreng F., Mueller A., Eberhard P. The introduction of a bi-adaptive smoothed particle hydrodynamics formulation beneficial for machining process simulation. *Proceedings of the 4 International Conference on Particle-based methods. Fundamentals and Applications*. Stuttgart, Germany, 18–20 September 2013, University of Stuttgart, 2013, Barcelona, Spain, CIMNE, 2013, pp. 602–613.
- [6] Patrick H. Peacock, David W. Holmes Development and verification of a particle number density variant of SPH to robustly incorporate energy and heat transfer. *Proceedings of the 3 International Conference on Particle-Based Methods. Fundamentals and Applications*. Stuttgart, Germany, 18–20 September 2013, University of Stuttgart, Barcelona, Spain, CIMNE, 2013, pp. 949–960.
- [7] Radl S., Forberg T., Aigner A., Kloss C. ParScale – An Open-Source Library for the Simulation of Intra-Particle Heat and Mass Transport Processes in Coupled Simulations. *CIMNE, Proceedings of the 4 International Conference on Particle-Based Methods. Fundamentals and Applications*. Barcelona, Spain, 28–30 September 2015, Polytechnic University of Catalonia, E-book_PARTICLES_2015, pp. 117–127. Available at: http://congress.cimne.com/particles2015/frontal/doc/E-book_PARTICLES_2015.pdf (accessed 29 September 2016).
- [8] Tunuguntla D.R., Thornton A.R., Weinhart T. From discrete elements to continuum fields: Extension to bidisperse systems. *Computational Particle Mechanics*, 2016, no. 3, pp. 349–365, doi: 10.1007/s40571-015-0087-y.
- [9] Novikov I.I. *Termodinamika* [Thermodynamics]. Moscow, Mashinostroenie publ., 1984. 592 p.
- [10] Campello E.M.B. A description of rotations for DEM models of particle systems. *Computational Particle Mechanics*, 2015, no. 2, pp. 109–125, doi: 10.1007/s40571-015-0041-z.
- [11] Rubio-Largo S.M., Lind P.G., Maza D., Hidalgo R.C. Granular gas of ellipsoids: analytical collision detection implemented on GPUs. *Computational Particle Mechanics*, 2015, no. 2, pp. 127–138, doi: 10.1007/s40571-015-0042-y.

Статья поступила в редакцию 24.10.2016

Информация об авторе

АРИНЧЕВ Сергей Васильевич (Москва) — доктор технических наук, профессор кафедры «Аэрокосмические системы». МГТУ им. Н.Э. Баумана (105005, Москва, Российская Федерация, 2-я Бауманская ул., д. 5, стр. 1, e-mail: arinchev@inbox.ru).

Information about the author

ARINCHEV Sergey Vasilyevich (Moscow) — Doctor of Science (Eng.), Professor, Department of Aerospace Systems. Bauman Moscow State Technical University (105005, Moscow, Russian Federation, 2nd Baumanskaya St., Bldg. 5, Block 1, e-mail: arinchev@inbox.ru).